

VLAAMS
SUPERCOMPUTER
CENTRUM



Vlaanderen
is supercomputing

JAARVERSLAG 2023

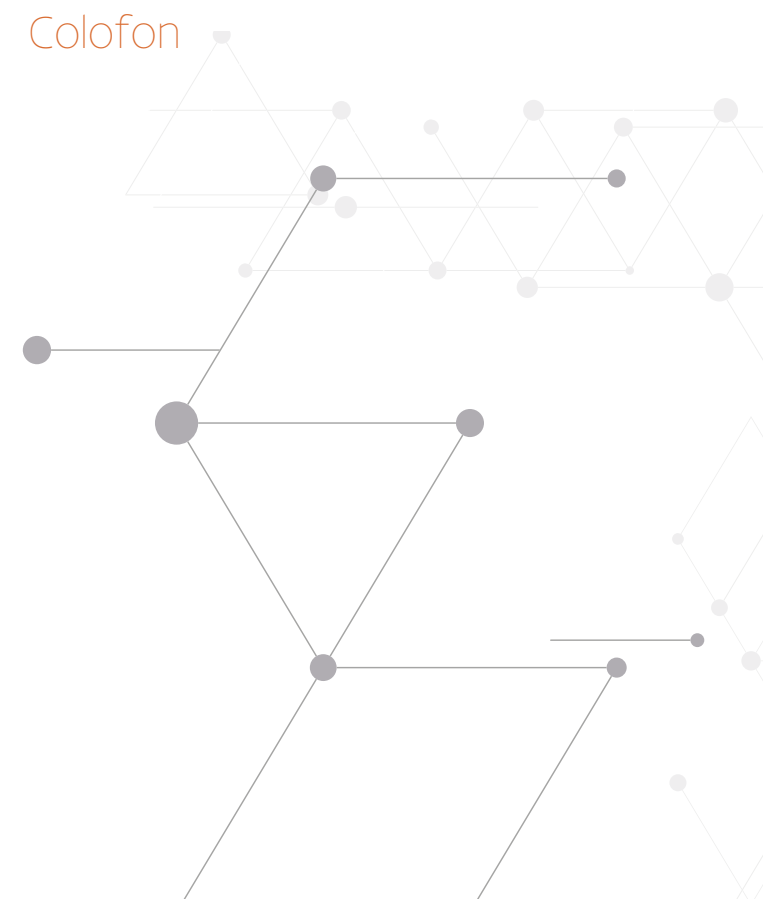
Met steun van



Fonds Wetenschappelijk Onderzoek
Vlaanderen
Opening new horizons

Inhoudsopgave

Voorwoord	4	Evenementen	72
In de kijker	6	VSC Gebruikersdag	72
Het VSC uitgelicht	8	Lunch Session on Quantum Computing	74
Ter inleiding	8	Dag van de Wetenschap	75
Structuur en werking VSC 2.0	9	Outreach	76
Financiering van het VSC	11	VSC in de pers	76
Recurrente financiering	11	Website	78
Impulsfinanciering Tier-1 platform	12	Sociale media en nieuwsbrief	80
VSC gebruikersbevraging	15	Research Showcase	82
Het Tier-1 supercomputerplatform	16	Succesverhalen	84
Tier-1 Compute	16	Internationale samenwerking	92
Tier-1c	16	EuroCC	92
Tier-1d	24	Community building	93
Tier-1 Data	25	PRACE	93
Tier-1 Cloud	32	Bijlagen	94
RDI	35	Colofon	
Tier-2 infrastructuur	38		
Universiteit Antwerpen	38		
Vrije Universiteit Brussel	43		
Universiteit Gent	52		
KU Leuven/UHasselt	60		
Tier-0 ondersteuning	66		
Opleidingen	68		



Innovative Computing for a Smarter Flanders



Voorwoord

Het belang van rekenkracht is sterk toegenomen, en vandaag de dag zelfs onontbeerlijk om als regio competitief te blijven binnen de vele expertisedomeinen in wetenschap en technologie. VSC wil 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 het de aansluiting aan de Europese HPC doelstellingen. Gezien deze recente evoluties dient het VSC mee te groeien in een vernieuwde rol binnen Vlaanderen.

Een nieuw strategisch plan en financiering voor een toekomstgerichte en duurzame uitbouw van het Tier-1-niveau werd vanaf 2023 geïmplementeerd waardoor de gebruikers ondersteund blijven worden in hun nood aan rekenkracht, en Vlaanderen competitief kan blijven in een snel evoluerende, op big data gebaseerde wetenschappelijke en technologische wereld.

In de nieuw uitgetekende structuur waarbij het VSC een virtuele, decentrale organisatie blijft onder toezicht van en in samenwerking met het FWO, worden de operationele taken uitgevoerd door de vijf universitaire associaties, waarvan er vier ook een infrastructuurhub zijn. Ten behoeve van de groeiende groep gebruikers verloopt het contact met de (potentiële) gebruikers via servicepunten die als een single point of contact fungeren, en waarbij elke associatie de verantwoordelijkheid opneemt om een welbepaalde service VSC-breed te organiseren. Zo zal KU Leuven zich toelagen op data storage, zal UAntwerpen zich toelagen op het Europese Tier-0 luik, zal UGent zich toelagen op cloud computing en compute, zal UHasselt zich toelagen op marketing en communicatie en coördinatie van de trainingen, en zal VUB het servicepunt voor gebruikers buiten de kennisinstellingen organiseren.

In de loop van 2023 werd ook de tweede fase van Tier-1 Hortense geïnstalleerd met bijkomende CPU- en GPU-partities en werd na een grondige evaluatie beslist over de locatie van de volgende Tier-1 waarbij VUB verantwoordelijk wordt gesteld voor de aankoop, installatie en uitbating ervan. De aankoopprocedure wordt vanaf januari 2024 opgestart met als doel de aankoop toe te wijzen tegen januari 2025. De nieuwe Tier-1 zou dan operationeel moeten worden tegen november 2025.

Het VSC is dus klaar voor een uitdagende toekomst!



Leen Van Rentergem
Jan Ooghe
Ingrid Barcena



Annie Cuyt
Stefan Becuwe



Johan Van Camp
Ewald Pauwels



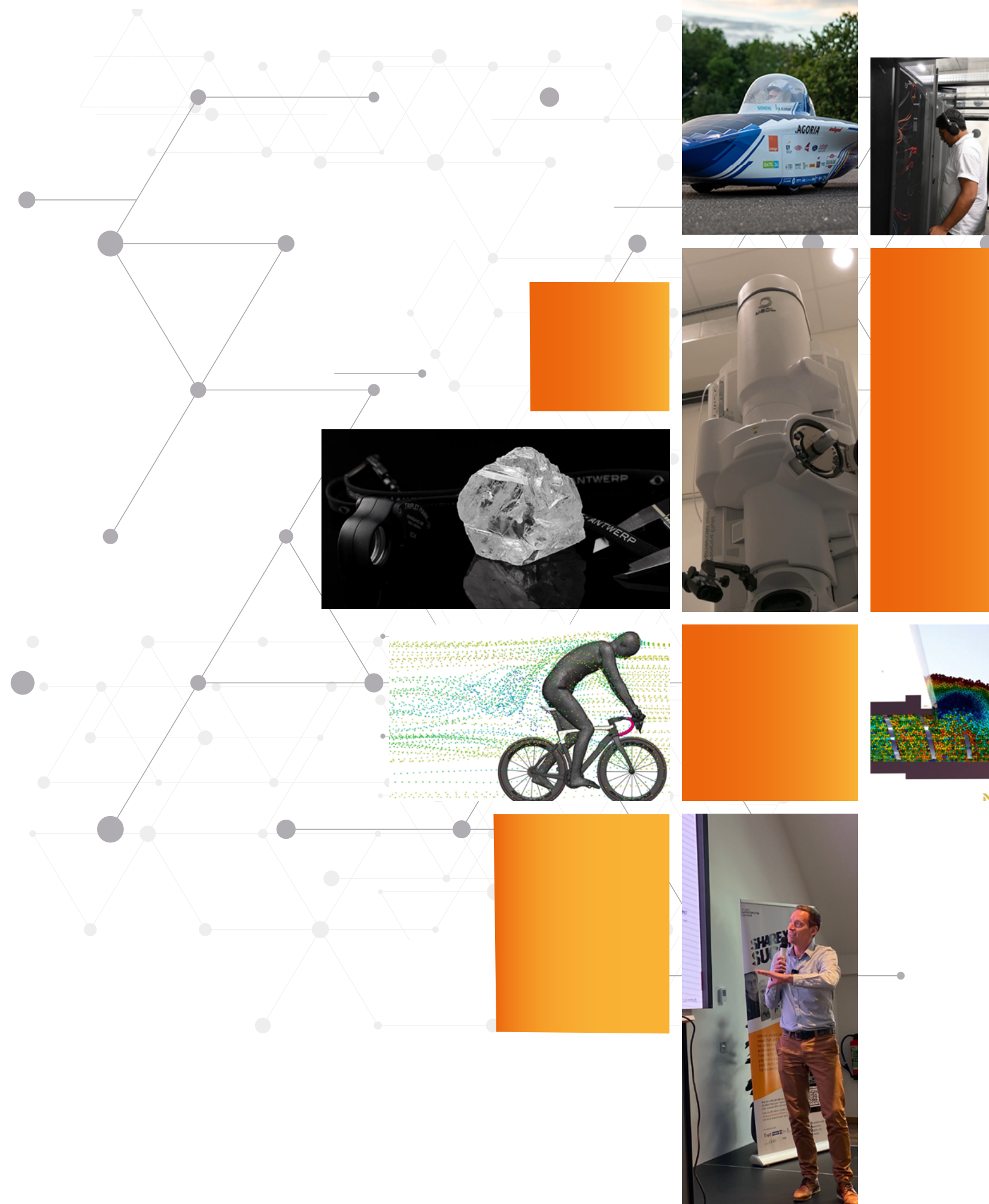
Stefan Weckx
Ward Poelmans



Geert Jan Bex
Rafal Al-Tekreeti

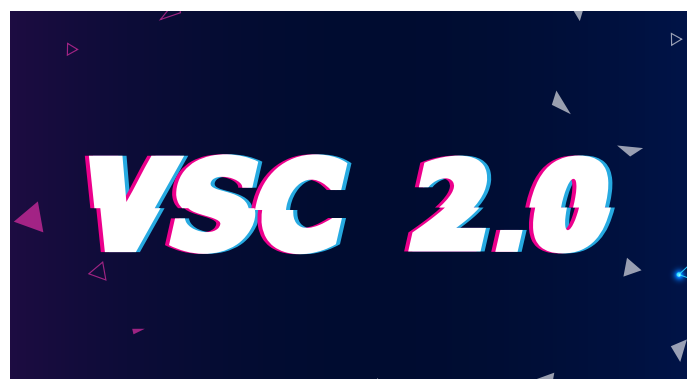


Caroline Volckaert



In de kijker

Hieronder vindt u een samenvatting van de belangrijkste ontwikkelingen en feiten uit het VSC Jaarverslag 2023.



09 STRUCTUUR EN WERKING VSC 2.0

Eind 2022 werd het strategisch plan VSC 2.0 goedgekeurd, gericht op uitbreiding van rekenkracht en een breder gebruikersbestand in Vlaanderen, om zo een volwaardige partner te zijn binnen het Europese (pre-)exascale ecosysteem.

25 TIER-1 DATA

KU Leuven beheert het Tier-1 Data platform voor actieve data verwerking op VSC compute of cloud componenten. Metadata vergemakkelijkt de overgang naar publicatie en lange termijn bewaren. Het platform ging in april 2023 in productie.



72 VSC GEBRUIKERSDAG

De VSC Gebruikersdag op 24 oktober 2023 bij FWO, Brussel, was een groot succes. Met focus op workflowoptimalisatie voor HPC-eficiëntie, bood het diverse lezingen en lightning talks, en bevorderde dit het contact tussen HPC-gebruikers.

82 RESEARCH SHOWCASE

De "Research Showcase" op de VSC-website toont baanbrekend onderzoek, benadrukt VSC's cruciale rol, en inspireert toekomstige samenwerkingen, waardoor VSC's positie als wetenschappelijke hoeksteen wordt versterkt.

84 SUCCESVERHALEN

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



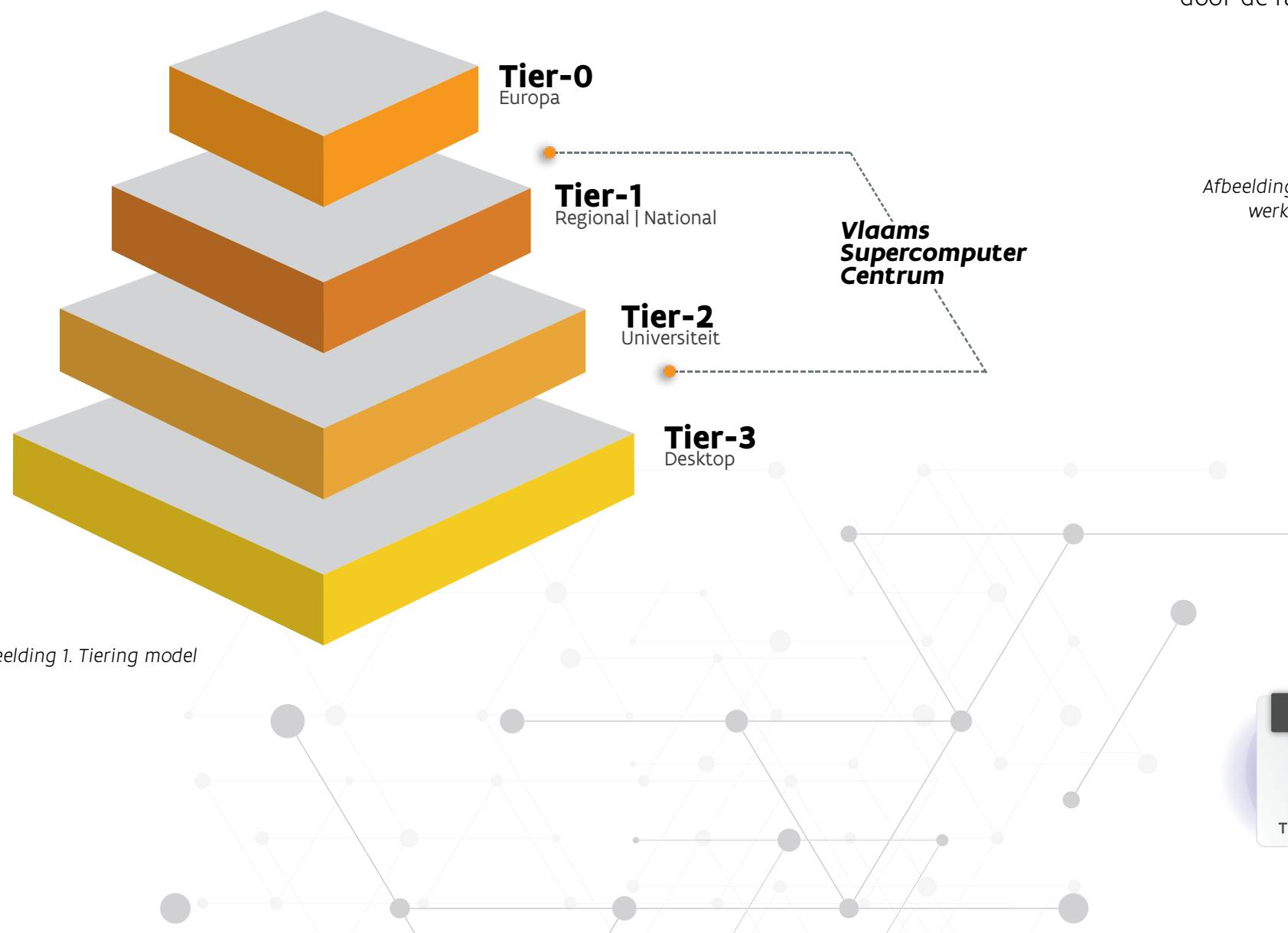
Het VSC uitgelicht

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 vijf Vlaamse associaties de krachten bundelen om HPC-infrastructuur en ondersteuning aan te bieden aan de brede onderzoeksgemeenschap in Vlaanderen, bestaande uit zowel 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 rekencapaciteit waarover onderzoeksinstellingen beschikken (Tier-2), de rekencapaciteit waarvan de noden en de kosten een instelling overstijgen en die op het niveau van een regio of een land voorzien wordt (Tier-1) en de superzware rekeninfrastructuur (Tier-0). 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. Voor de Tier-0 laag biedt het VSC ondersteuning aan zijn gebruikers.



Afbeelding 1. Tiering model

Structuur en werking VSC 2.0

Een nieuw strategisch plan en financiering voor een toekomstgerichte en duurzame uitbouw van het Tier-1-niveau werd eind 2022 goedgekeurd waardoor de gebruikers blijven ondersteund kunnen worden in hun nood aan rekenkracht, en Vlaanderen competitief wordt gehouden 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 het toekomstplan VSC 2.0 en de operationele uitwerking ervan voor VSC goedgekeurd door de raad van bestuur. De krijtlijnen zijn als volgt samen te vatten:



Afbeelding 2. Structuur en werking VSC 2.0

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 infrastructuurhub zijn. Ten behoeve van de groeiende groep gebruikers zal het VSC 2.0 haar operationele taken duidelijker 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 toezetten op data storage, UAntwerpen op het Europese Tier-0 luik, UGent op cloud computing en compute, UHasselt op marketing en communicatie en coördinatie van de trainingen, en zal de VUB het servicepunt voor gebruikers buiten de kennisinstellingen 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 High End Computing Raad (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.

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 financiering van 19.200.000 euro voor de periode 2023-2025 het Tier-1 Supercomputing as a Service platform met de drie componenten compute, cloud en data gerealiseerd.

Recurrente financiering

Sedert 2022 werd het reeds beschikbaar recurrent budget van 6.381.000 vermeerderd met indexatiemiddelen ten bedrage van 120.000 euro. Door de indexatie kunnen de personeelsmiddelen hiermee van 95.000 euro naar 100.000 euro per VTE stijgen.

In 2023 werd de Tier-2 infrastructuur gefinancierd door het FWO verdeeld over 3.721.000 euro investeringen in hardware en werking, 2.700.000 euro in personeel en werd 80.000 euro gereserveerd voor de outreach activiteiten naar niet-academisch gebruik. 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.

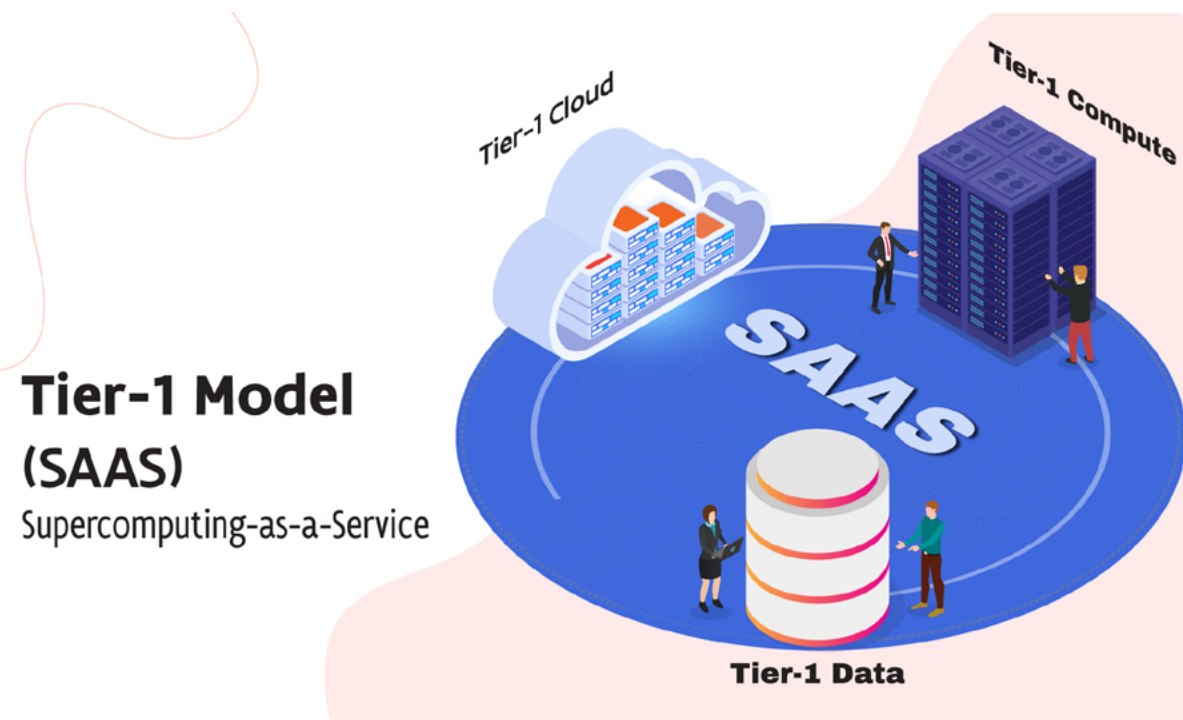
Verdeling recurrent budget 2023 over instellingen						
Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	totaal
Personeel in FTE	8	3	7	5	4	27
Personeel in Euro	€ 800.000	€ 300.000	€ 700.000	€ 500.000	€ 400.000	€ 2.700.000
Totaal personeel	€ 800.000	€ 300.000	€ 700.000	€ 500.000	€ 400.000	€ 2.700.000
Herculesleutel	0,4098	0,04	0,3192	0,1044	0,1266	1
CAPEX en werking Tier-2	€ 1.524.866	€ 148.840	€ 1.187.743	€ 388.472	€ 471.079	€ 3.721.000
Subtotaal	€ 2.324.866	€ 448.840	€ 1.887.743	€ 888.472	€ 871.079	€ 6.421.000
O outreach (IR en GR)						€ 80.000
Totaal						€ 6.501.000

Tabel 1. Verdeling recurrent budget 2023

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.

Impulsfinanciering Tier-1 platform

Het VSC biedt het Tier-1 Supercomputing as a Service (SaaS) model aan. 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:



Afbeelding 3. SaaS

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

Een hedendaags Tier-1 supercomputing platform biedt dus zowel compute, data als cloud technologieën complementair met elkaar aan. Toekomstige investeringen in Tier-1 moeten deze focus dan ook reflecteren. Dit houdt in dat blijvende investeringen worden gedaan in de 'klassieke' Tier-1 compute infrastructuur, doch dat daarnaast ook een centraal beheerde Tier-1 Data omgeving wordt opgebouwd en cloud services worden aangeboden. Dankzij de impulsfinanciering van 2018-2022 kon een volledig model en infrastructuur worden uitgebouwd en het Supercomputing as a Service concept verwezenlijkt worden.

Aangezien de Tier-1 financiering afliep eind 2022, werden er 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.

Na de oplevering van het VSC 2.0-plan werkte de HEC-raad in de tweede helft van 2022 aan het verder operationaliseren van dit plan. Door de Vlaamse Regering werd naast de recurrente middelen een eenmalige investering voor VSC 2.0 van 19,2 miljoen voor de periode 2023-2025 vrijgemaakt of gemiddeld 6,4 miljoen per jaar. Deze financiering is echter geen recurrente financiering. Het FWO zal blijvend inzetten om de VSC-financiering recurrent te krijgen.

	VSC 2.0	2023-2025
		per jaar
Infrastructuur	Tier-1 Compute	3.000.000
	Tier-1 Data	575.000
	Tier-1 Cloud	200.000
Totaal infrastructuur		3.775.000
Werking	Stroomkost	1.200.00
	Belnet	65.000
	Integratie binnen VSC	140.000
	Outreach (IR en GR)	120.000
Totaal werking		1.525.000
Personeel	4 VTEs Data	400.000
	4 VTEs Cloud	400.000
	3 VTEs onderst. Tier-0	300.000
Totaal personeel		1.100.000
Totaal (€)		6.400.000

Tabel 2. Impulsfinanciering Tier-1

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.

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 19,2 miljoen euro aan vastlegingskrediet vrijgemaakt met een jaarlijkse betaalkalender van gemiddeld 6,4 miljoen euro voor de periode 2023-2025.

In totaal is er dus voor de periode 2023-2025 jaarlijks 12,9 miljoen euro beschikbaar. In functie van de noodwendigheden zal dit budgetplan worden bijgesteld.

VSC geïntegreerde begroting 2023	
Rubriek / Jaar	2023
Personeel	
Personeel Tier-1 Compute	€ 400.000
Personeel Tier-1 Data	€ 400.000
Personeel Tier-1 Cloud	€ 400.000
Personeel Tier-2 ondersteuning	€ 2.000.000
Personeel RDI	€ 200.000
Personeel marketing en communicatie	€ 100.000
Personeel Tier-0 ondersteuning	€ 300.000
Totaal personeel	€ 3.800.000
Uitrusting	
Tier-2 CAPEX en werking	€ 3.721.000
Tier-1 Compute	€ 3.000.000
Tier-1 Data	€ 575.000
Tier-1 Cloud	€ 200.000
Totaal uitrusting	€ 7.496.000
Outreach (IR en GR)	
Outreach	€ 200.000
Totaal outreach (IR en GR)	€ 200.000
Werking	
Stroomkost	€ 1.200.000
Belnet	€ 65.000
Integratie binnen VSC	€ 140.000
Totaal werking	€ 1.405.000
TOTAAL	€ 12.901.000

Tabel 3. VSC geïntegreerde begroting 2023

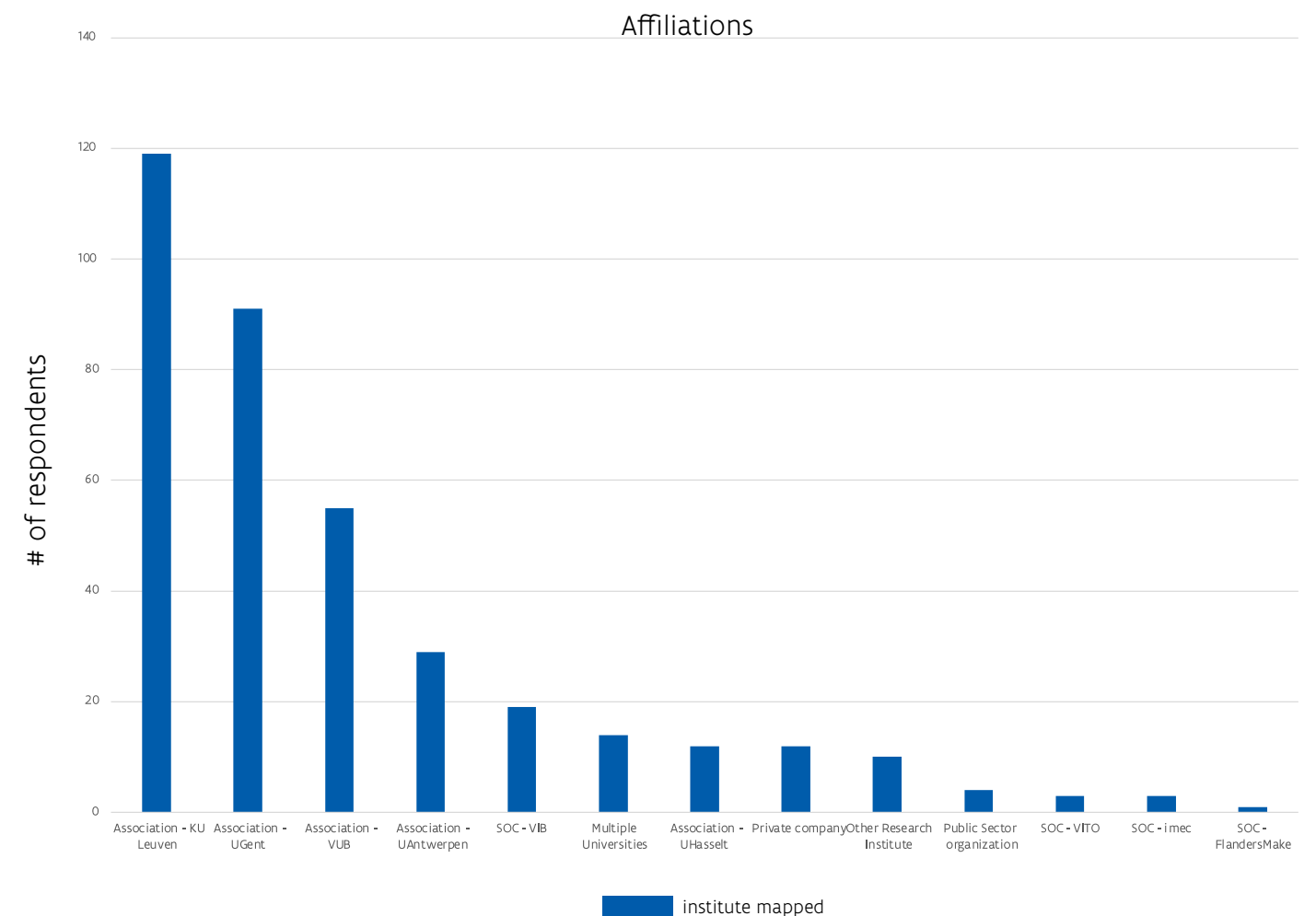
VSC gebruikersbevraging

Om de tevredenheid van de verschillende VSC diensten te meten, werden tussen 7 november en 18 december 2023 alle VSC gebruikers voor de eerste keer uitgenodigd om deel te nemen aan een bevraging. Het Tier-1 platform (compute, data en cloud), het Tier-2 platform op de vier hubs, het trainingsaanbod en de communicatie kwamen hierbij aan bod. Deze bevraging zal jaarlijks herhaald worden zodat we een (hopelijk positieve) evolutie zien in de resultaten.

Van de 467 antwoorden waren er 372 die volledig waren. Zoals in onderstaande grafiek te zien is, was er een mooie spreiding tussen de verschillende instellingen, onderzoeksinstellingen en bedrijven. Een honderdtal respondenten liet hun mailadres achter zodat we hen kunnen contacteren.

Aan sommige antwoorden te zien, leiden we af dat services misschien niet duidelijk genoeg beschreven waren en/of zijn we niet zeker of de respondenten een bepaalde service daadwerkelijk hebben gebruikt. Suggesties tot verbetering zullen we ook niet meer algemeen vragen, maar per service.

Verderop in dit jaarverslag gaan de verschillende hubs dieper in op de resultaten voor de specifieke service(s) waarvoor ze verantwoordelijk zijn. Het management team bekijkt hoe er met de specifieke feedback aan de slag wordt gegaan.



Afbeelding 4. VSC gebruikersbevraging

Het Tier-1 supercomputerplatform

Tier-1 Compute

Tier-1c

In de loop van 2023 werden verscheidene werken uitgevoerd in en rond de Tier-1 Compute opstelling Hortense van het VSC.

Infrastructuur

Aanpassing UGent datacenter t.b.v. Tier-1 Compute Hortense

Teneinde het energieverbruik te optimaliseren werd een extra koelingsinstallatie geplaatst in het UGent datacenter, waar Tier-1 Compute Hortense is gehuisvest.

Extra drycoolers werden geplaatst op het dak van het S10 datacenter van UGent. Doorvoerleidingen door het dak en pompunits werden geïnstalleerd in de HPC ruimte, en elektriciteitswerken werden gefinaliseerd. In de maintenance window van 26-30 juni 2023 werd de nieuwe koeling online gebracht.

Hierna werden enkele stabiliteitsissues van de koeling opgemerkt, niet geholpen door de hogere buitentemperatuur over de zomer. Om deze reden werd de sturing van de koeling verder getweaked, waardoor midden augustus 2023 uiteindelijk alle Milan nodes betrouwbaar online konden worden gebracht. In de loop van Q4 werd nog een mineur lek in het koelcircuit geïdentificeerd en gedicht. Dit komt de stabiliteit van de koeling ten goede.

Fase 2 Tier-1 Compute Hortense

In de loop van 2023 werd ook de tweede fase van Tier-1 Hortense geïnstalleerd. Er werd een tweede partitie van 384 CPU compute nodes toegevoegd, gebaseerd op de AMD 7763 Milan CPU's. Er werd een bijkomende GPU partitie geïnstalleerd, met 20 accelerator compute nodes, elk uitgerust met vier A100-80 acceleratoren (80 in totaal). De capaciteit van het parallele bestandssysteem werd ongeveer verdubbeld, van 3 PB naar 5,4 PB. De netwerkinfrastructuur (incl. InfiniBand) werd aangepast om deze wijzigingen te accommoderen.

Naast de hardware werden deze nieuwe partities getest, geïnstalleerd en geconfigureerd zodat ze bruikbaar zijn voor de eindgebruiker. Op 15 mei werden de login nodes van Tier-1 en de verscheidene partities (incl. nieuwe partities gpu_rome_a100_80 en cpu_milan) gradueel online gebracht.

Alle lopende Tier-1 projecten werd 'free' toegang gegeven tot cpu_milan tot de volgende cut-off ronde (begin juli), teneinde deze nieuwe partitie goed te kunnen stress-testen onder belasting.

Op de kick-off meeting van 26 mei 2023 werd fase 2 van Tier-1 Hortense finaal in productie aangekondigd.



User features en backend ontwikkelingen

Debug wachtrij

Een specifieke 'debug' wachtrij (queue) werd toegevoegd aan de Tier-1 Compute cluster Hortense. De jobs die naar deze wachtrij worden gestuurd, starten onmiddellijk. Deze garantie van snelle start is niet gegarandeerd bij andere wachtrijen, waar de (on)beschikbaarheid van resources kan resulteren in wachttijden vooraleer jobs beginnen te lopen. Deze wachtrij is ideaal voor eindgebruikers om jobs, workflows, etc. te debuggen en testen.

Verdere ontwikkelingen aan de Tier-1 Compute project portal

Tier-1 Compute Hortense gebruikers kunnen hun gebruik, beschikbare resources en looptijd eenvoudig consulteren op de Tier-1 Compute project portal (<https://resapp.hpc.ugent.be>). T.b.v. nieuwe features en bugfixes werd een cyclus van aanpassingen aan deze resource application uitgevoerd: in totaal werden 25 pull requests vervolledigd, inclusief bugs en kleinere features. Een opmerkbare implementatie in de backend is dat VSC staf nu eenvoudig nieuwe Tier-1 Compute projecten kan invoeren en aanmaken via de resapp webportal als single point of information. Automatisatie zorgt er vervolgens voor dat deze projecten worden aangemaakt op Tier-1 Hortense, dat toegang wordt ingesteld voor de aangegeven vsc-ids, en dat er gealloceerde rekentijd en storage ruimte wordt voorzien.

Nieuwe ontwikkelingen aan de VSC accountpage

Alle account- en groepenbeheer binnen het VSC is gecentraliseerd binnen de VSC accountpage (<https://account.vscentrum.be> en admin/API pagina <https://apivsc.ugent.be>). Deze accountpage regelt toegang tot alle Tier-1 en Tier-2 infrastructuur van het VSC. De front- en backend van deze service wordt onderhouden door UGent.

Naast een hele reeks aan bugfixes en ontwikkelingen, werden ook stappen gezet om meer onderzoekinstellingen eenvoudiger toegang te geven tot VSC infrastructuur. Voor verscheidene onderzoekinstellingen werd de identity provider als bron voor de accountpage toegevoegd: Artevelde Hogeschool, HOGent, Hogeschool West-Vlaanderen, ILVO, INBO, RBINS, VIB. Voor sommige van deze onderzoekinstellingen loopt via deze weg authenticatie vlot. Voor andere is het minder eenvoudig, en is een zeer technische dialoog vereist met de IT-afdeling van de betrokken onderzoekinstelling. Maar de haalbaarheid van deze workflow werd goed in kaart gebracht, met het oog op het toevoegen van nog meer onderzoekinstellingen.

Wetenschappelijke projecten

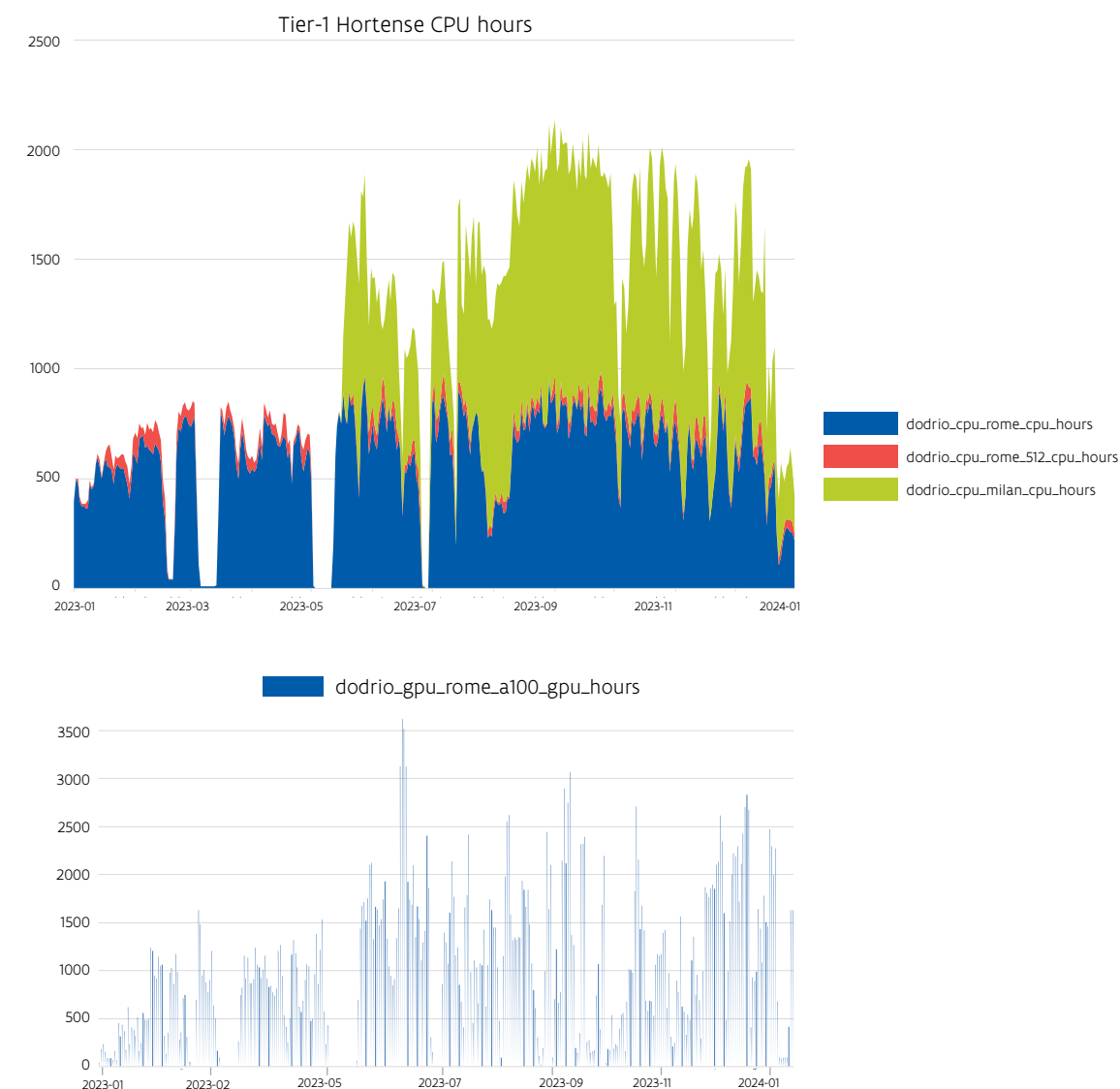
Hieronder staat een overzicht van het aantal academische projecten dat in 2023 liep op Tier-1 Hortense, opgedeeld per categorie en cut-off.

Categorie	#projecten	Gealloceerde rekentijd	
		CPU Hours	GPU Hours
Cut-off 1 (6 februari)	31	112.529.414	254.899
Cut-off 2 (5 juni)	25	70.182.476	278.101
Cut-off 3 (2 oktober)	34	97.542.520	414.541
Starting grants	116	46.500.000	52.100

Tabel 4. Overzicht van academische projecten op Tier-1 Hortense in 2023

Gebruik en beschikbaarheid

Onderstaande grafieken geven een dag-per-dag overzicht van de gebruikte rekentijd op Tier-1 Hortense. De linkerplot geeft het CPU-verbruik weer (in CPU hours), met heel visibel de komst van de tweede fase (dodrio_cpu_milan_cpu_hours). Het gebruik van de twintig high-memory Rome nodes (met 512 GB geheugen per node) is weergegeven in het oranje, en is duidelijk proportioneel geringer. De rechterplot geeft het GPU-verbruik (in GPU hours) weer.



Afbeelding 5. Overzicht CPU- en GPU gebruik Hortense.

De introductie van fase 2 en het nieuwe koelsysteem leidden helaas wel tot verscheidene onbeschikbaarheden, vooral in de eerste jaarhelft. Deze zijn ook duidelijk zichtbaar in bovenstaande grafieken.

- 17-21/2: instabiliteit koelsysteem (ongepland)
- 6-15/3: gepland onderhoud
- 2-15/5: gepland onderhoud
- 6-7/6: instabiliteit koelsysteem (ongepland) – alle Milan nodes onbeschikbaar
- 8-26/6: instabiliteit koelsysteem (ongepland) – deel van de Milan nodes onbeschikbaar
- 26-30/6: gepland onderhoud
- 12-13/7: problemen met koeling (ongepland)

Na de tweaking van de koeling over de zomer, werkt het systeem terug naar behoren in de tweede jaarhelft.

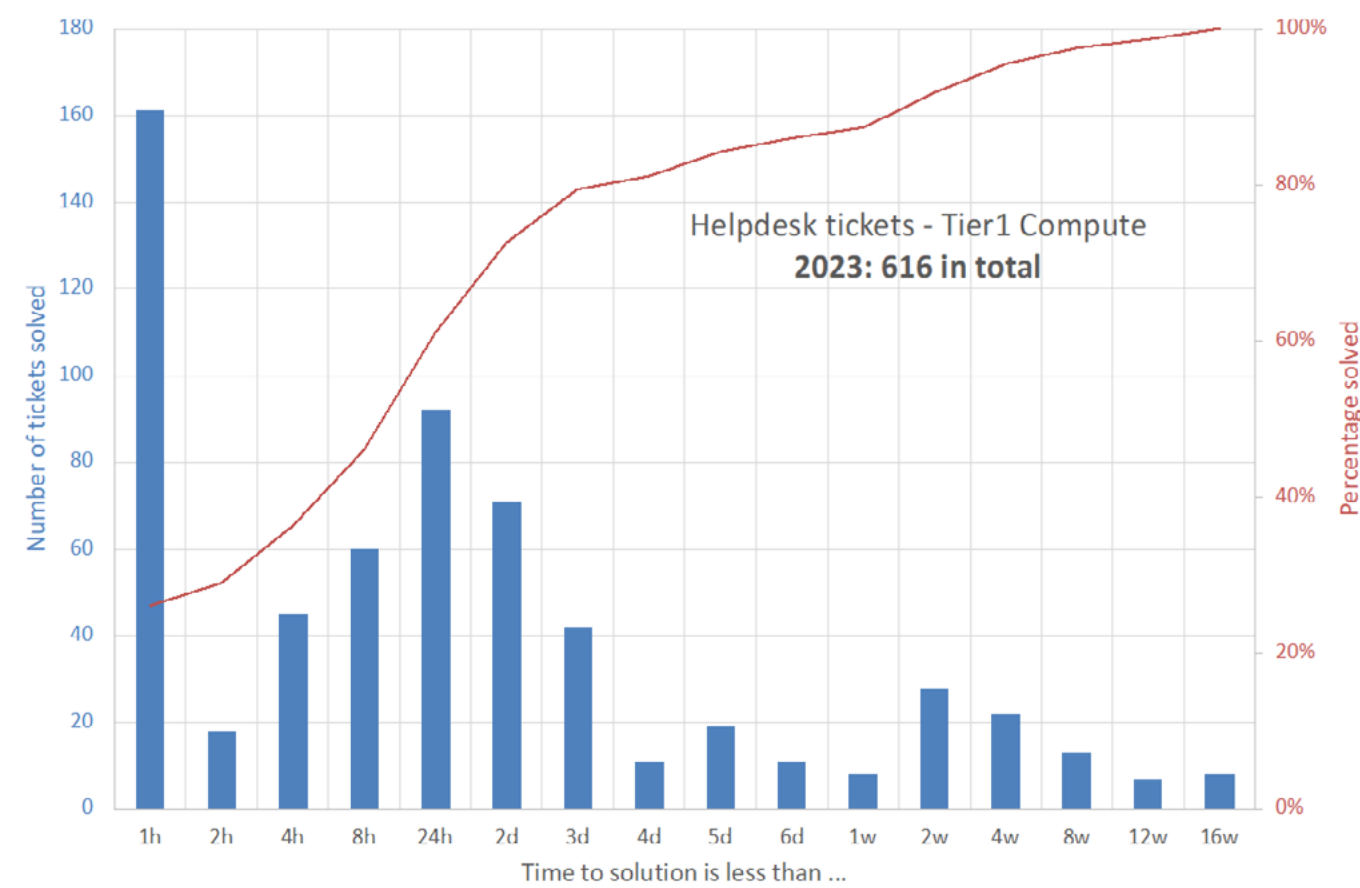
Helpdesk

Verscheidene helpdesk wachtrijen zijn een indicatie van de inspanningen van UGent t.b.v. het Tier-1 Compute platform.

Wachtrij	#behandelde en gesloten tickets
Tier-1 Compute compute@vscentrum.be	616
Software installaties	293
Industrie (UGent partim)	121

Tabel 5. Behandelde tickets bij Tier-1 Compute

Middels de dedicated Tier-1 Compute helpdesk (compute@vscentrum.be) kunnen gebruikers problemen of vragen aanmelden i.v.m. Tier-1 Compute Hortense. Een verdeling van de tijd waarbinnen elke aangemelde vraag werd opgelost, is weergegeven in onderstaande grafiek.



Afbeelding 6. Oplossingstijden voor aangemelde vragen bij de Tier-1 Compute helpdesk

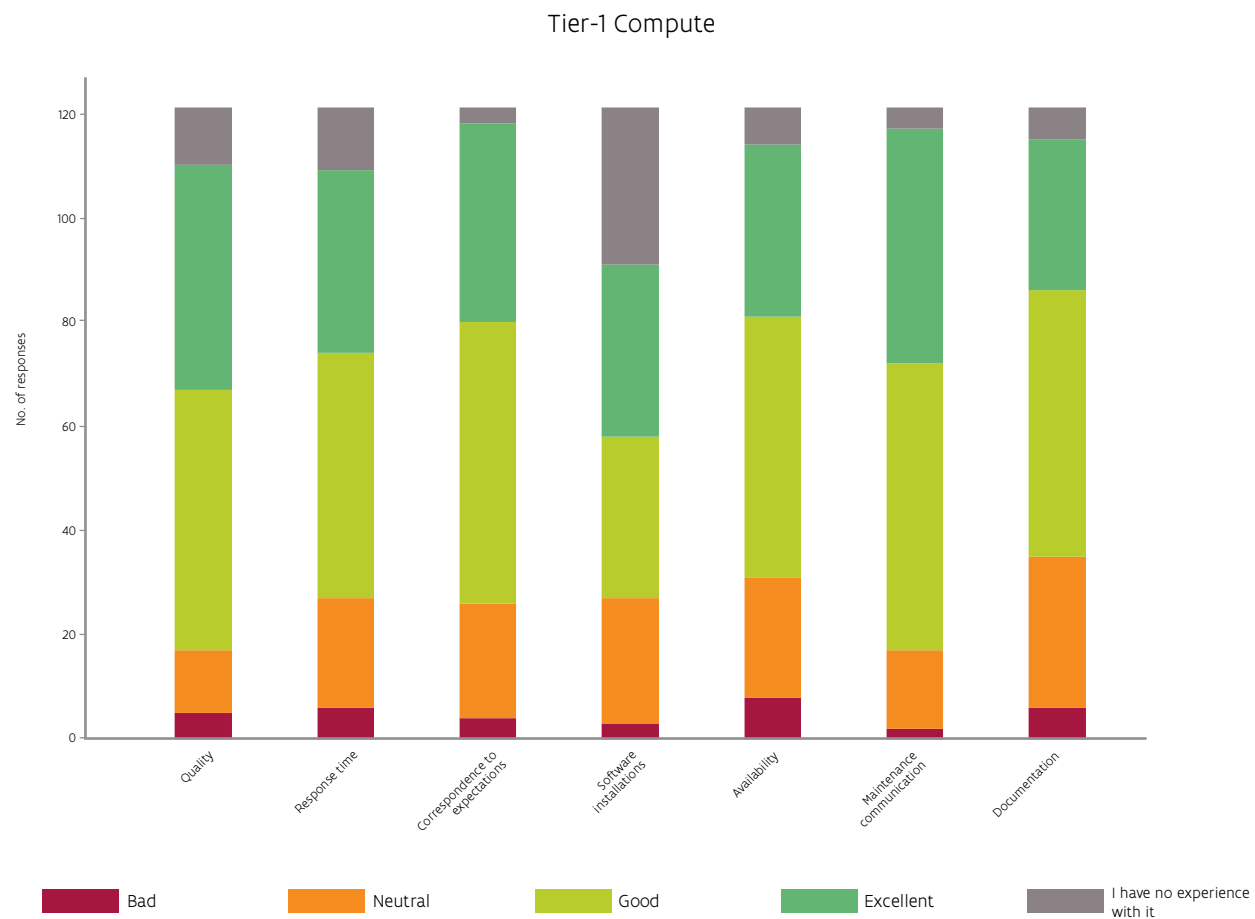
Verder werden in 2023 ook in totaal 293 software installatie aanvragen behandeld door het UGent team. Een strikte opsplitsing tussen vragen voor Tier-1 Compute en de Tier-2 UGent opstelling is niet eenvoudig, vandaar dat ook hier alle tickets worden gerapporteerd. Voortvloeiend uit deze vragen werden 3.514 software packages (inclusief dependencies) geïnstalleerd en/of geüpdatet, waarvan 2.201 t.b.v. Tier-1 en 1.313 t.b.v. Tier-2. De responstijd voor software installaties is merkbaar langer dan voor andere tickets, en wordt meer in detail besproken bij de Tier-2 UGent opstelling.

Tenslotte nam het UGent team ook nog verscheidene tickets t.b.v. industrie gebruikers van Tier-1 Compute op zich, teneinde een optimale opstart van het RDI team (VUB) te faciliteren. Het betreft hier voornamelijk het beheer van 116 vsc-ids voor bedrijven, waarvan het accountmanagement nog steeds grotendeels bij UGent zit.



Gebruikersbevraging

Ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-1 Compute infrastructuur werd bevraagd in de VSC user survey eind 2023. 153 verschillende respondenten gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken van deze VSC service.



Afbeelding 7. Gebruikersbevraging Tier-1 Compute

Onderstaande componenten van de Tier-1 Compute infrastructuur werden door gebruikers als 'goed' of 'excellent' beoordeeld:

- 85% (93/110) - kwaliteit
- 75% (82/109) - responstijd
- 78% (92/118) - overeenstemming met verwachtingen
- 70% (64/91) - software installaties
- 73% (83/114) - beschikbaarheid
- 85% (100/117) - communicatie omtrent onderhoud
- 70% (80/115) - documentatie

Als mogelijke suggesties voor verbeteringen werden vermeld:

Software

- snellere responstijd voor software installaties (2 respondenten)
- documentatie over miniconda (1 respondent)
- info over de compatibiliteit van toolchains (1 respondent)

Infrastructuur

- geen alternatief (voor industrie) wanneer Tier-1 onbeschikbaar (1 respondent)
- meer nodes met meer geheugen (1 respondent)
- verhoogde stabiliteit van de webportal (1 respondent)

Documentatie

- meer ondersteuning voor Slurm (3 respondenten)

Als mogelijke suggestie voor nieuwe ontwikkelingen werd vermeld:

- overweeg de uitbouw van twee redundante Tier-1 Compute opstellingen (2 respondenten)

Tier-1d

Met het VSC 2.0-plan en de bijbehorende impulsfinanciering hebben we de middelen verkregen om een nieuwe Tier-1 supercomputer aan te schaffen. Deze nieuwe machine zal dienen als opvolger van het huidige systeem, Hortense. De eerste stap in de aanschaf van de nieuwe Tier-1 is het bepalen van de locatie.

Verschillende universiteiten toonden interesse om verantwoordelijk te zijn voor de huisvesting van deze nieuwe supercomputer. Na een zorgvuldige evaluatie is een gesloten oproep gelanceerd binnen het VSC, gebaseerd op de criteria die ook werden gebruikt voor de LUMI-supercomputer. Hierbij werden vier evaluatiecriteria gehanteerd, elk met een maximum van 25 punten:

- Ervaring in aankoop, installatie en beheer. Er is gekeken naar de kwaliteit en ervaring van de universiteiten op het gebied van vergelijkbare systemen. Het is essentieel dat de gekozen partij voldoende expertise heeft om de volgende Tier-1 supercomputer effectief te beheren.
- Kwaliteit van faciliteiten voor huisvesting. De infrastructuur, beveiliging en connectiviteit naar Belnet zijn beoordeeld. Daarnaast is gekeken naar de plannen om de locatie klaar te maken voor de Tier-1.
- Geschatte Total Cost of Ownership (TCO). De duidelijkheid en correctheid van de geschatte TCO en de gebruikte methodologie om deze te berekenen zijn geëvalueerd.
- Kwaliteit van dienstverlening aan gebruikers. Hierbij is gekeken naar de kwaliteit van de dienstverlening om een Tier-1 machine effectief te kunnen exploiteren. Ook de procedures voor ondersteuning en de gebruikte tools waren van belang.

Elk criterium vereiste minimaal 13 punten, en in totaal moesten er minstens 60 punten worden behaald. Een onafhankelijk panel van drie experts heeft de beoordeling uitgevoerd. Ze hebben elk dossier individueel beoordeeld en zijn daarna tot een consensus gekomen. Hun advies is voorgelegd aan de HEC-raad van 23 juni 2023 ter goedkeuring.

De KU Leuven en de Vrije Universiteit Brussel hebben elk een dossier ingediend. Het panel heeft de Vrije Universiteit Brussel één punt meer toegekend. De HEC-raad heeft dan beslist om de VUB verantwoordelijk te stellen voor de aankoop, installatie en uitbating van de volgende Tier-1.

In het najaar is gestart met informatieve gesprekken met de leveranciers om te achterhalen wat de mogelijkheden zijn met het gegeven budget. Er is o.a. een delegatie naar de Supercomputing beurs in Denver, CO, USA gegaan. De bedoeling is om de aankoopprocedure vanaf januari 2024 op te starten met als doel de aankoop toe te wijzen tegen januari 2025. De machine zou dan operationeel moeten worden tegen november 2025.

Tier-1 Data

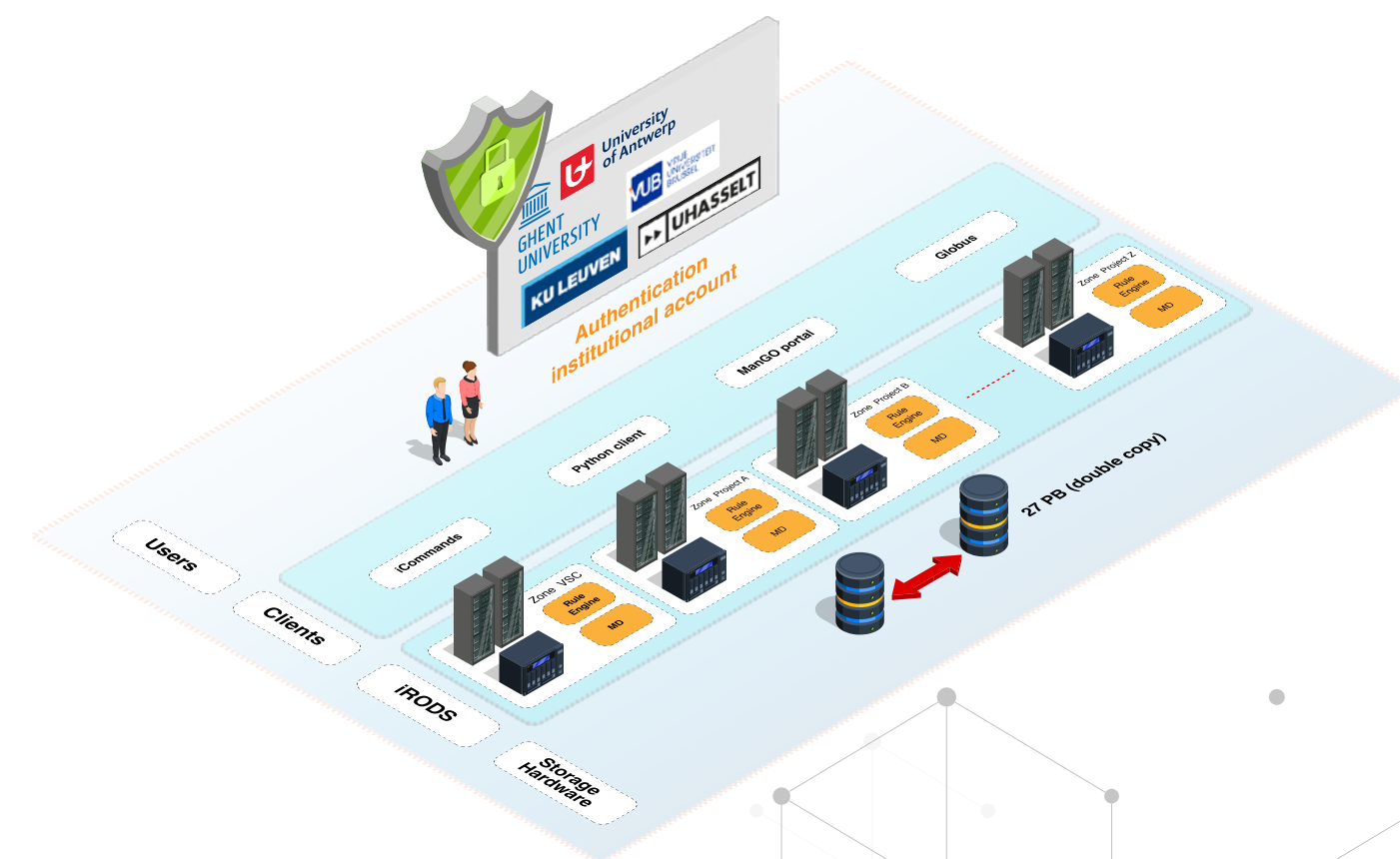
KU Leuven is verantwoordelijk voor de infrastructuur en exploitatie van het Tier-1 Data platform. Het platform is gepositioneerd voor actieve data die verwerkt worden op de VSC compute of cloud componenten. Publicatie en lange termijn bewaren gebeurt op andere platformen, maar de beschikbaarheid van de metadata zal de overgang naar deze fase wel kunnen faciliteren.

In april 2023 is het platform in productie gegaan.

Beschikbare infrastructuur

Het Tier-1 Data platform is opgebouwd uit vier Distributed Storage Solution for Spectrum Scale (DSS-G280) van Lenovo. Het heeft een bruikbare opslagcapaciteit van 27 PB (dubbele kopie), geïnstalleerd in twee verschillende datacenters met een synchrone replicatie (mirroring), zodat de data beschermd is tegen grote ongelukken. Bovendien kan het systeem gebruikmaken van snapshots op filesysteem niveau voor extra databescherming en data wordt geëncrypteerd at rest via software encryptie.

Rond de infrastructuur is er ook een Quality en Test omgeving. Deze wordt gebruikt bij de ontwikkeling van nieuwe features voor de portal en nieuwe iRODS releases.

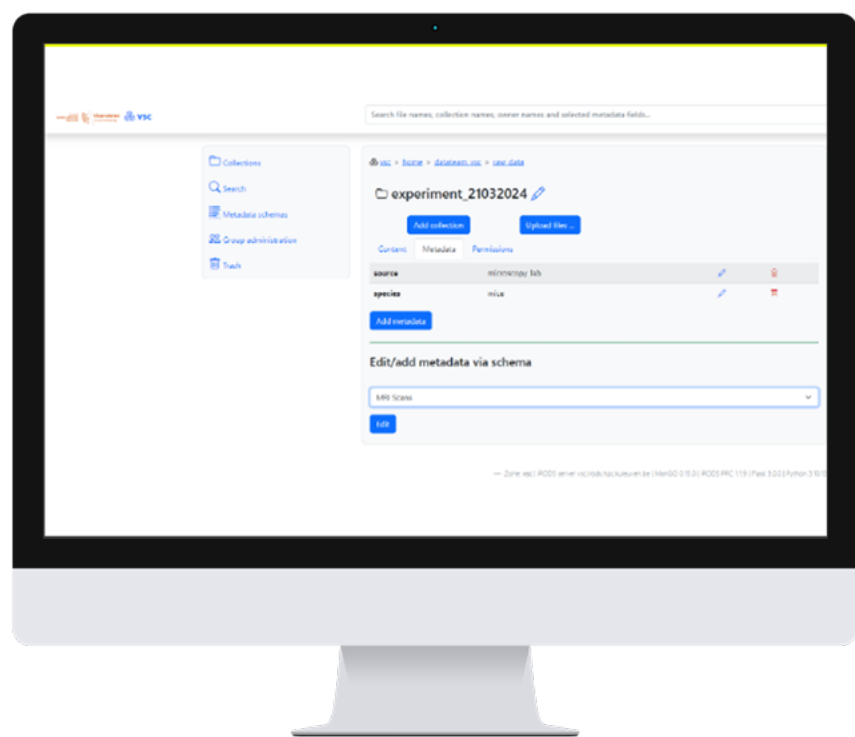


Afbeelding 8. Tier-1 Data platform

Exploitatie en gebruik

iRODS 4.3.1 werd uitgebracht in 2023. Deze technische upgrade omvatte enkele features die nodig waren binnen de context van het VSC. Zo is er nu ondersteuning voor i-commands op Red Hat, welke nodig is voor installatie van de client op Tier-1 Hortense. De upgrade bevat ook ondersteuning voor OpenID authenticatie. Na testen werd de upgrade uitgerold in de productie omgeving. Ook op de verschillende Tier-2s werden de nieuwe clients uitgerold.

Tier-1 Data is echter niet enkel via command line clients toegankelijk. ManGO portal, de GUI omgeving bovenop de iRODS infrastructuur werd door KU Leuven verder ontwikkeld. Belangrijke nieuwe features zijn: basisbeheer van gedelegeerde toegangsrechten, management van metadata met metadata schema's met versiebeheer, editor van de schema's, import/export van metadataschema's in JSON-formaat, inspect & extract van metadata uit datasets met o.a. Apache Tika In 2023 werden zes main versies van de portal gereleased (v0.9, v0.10, v0.11, v0.12, v0.13 en v0.14) plus een aantal extra minor en bugfixes releases. Dit toont de snelle evolutie van de ManGO portal om de noden van de onderzoekers zo goed als mogelijk te kunnen beantwoorden.

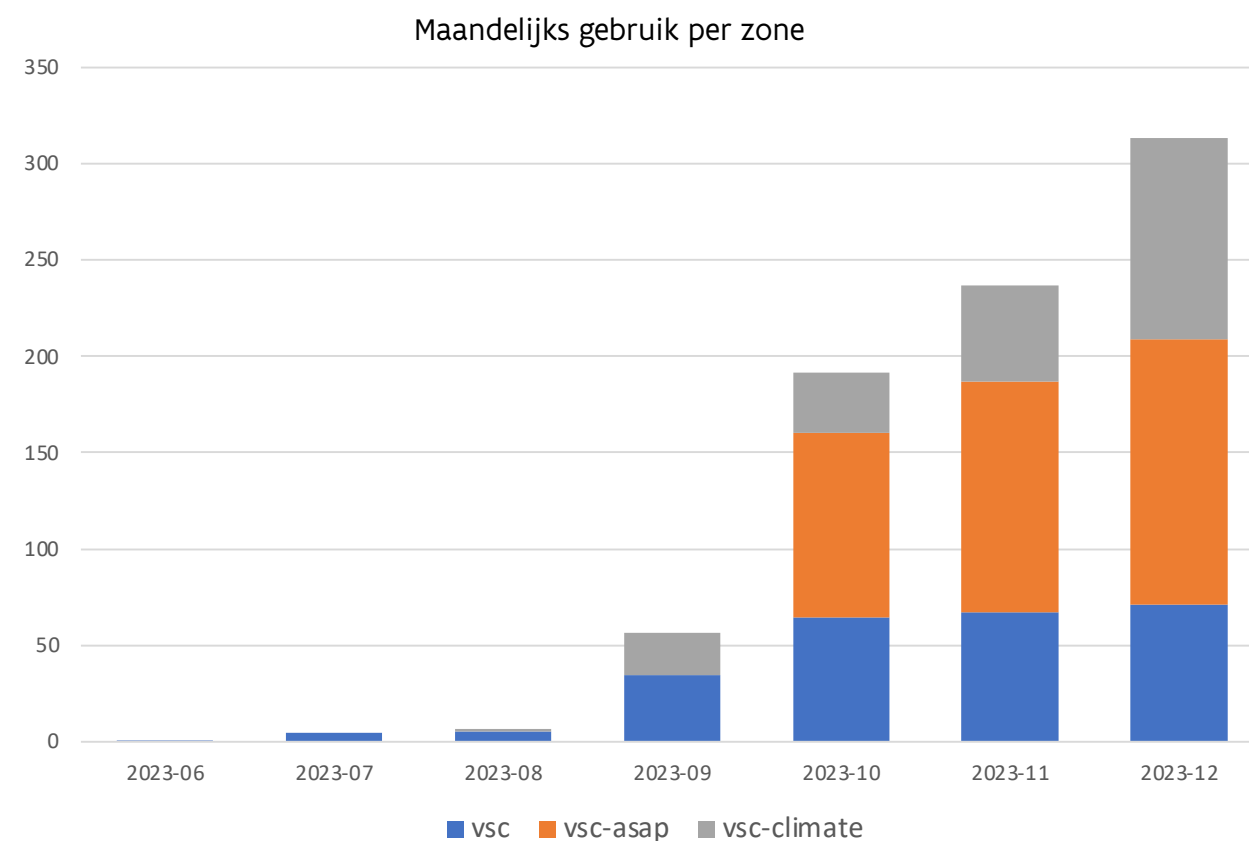


Afbeelding 9. Screenshot VSC Mango portal

Niet enkel de portal, maar ook de volledige service wordt steeds verder ontwikkeld. Er werd een sftp-ingestor tool gemaakt zodat data automatisch naar een ingress zone kan opgeladen worden. Dit is een stap in het mogelijk maken van workflows waarbij bv. datasets van experimenten automatisch kunnen geüpload worden naar Tier-1 Data platform. Deze nieuwe tool helpt ook om data vanuit non-trusted devices zoals GSM of autonomous camera toestellen op een veilige manier direct naar het Tier-1 Data platform te kunnen uploaden.

Tier-1 Data gebruik

De onderstaande grafiek toont de evolutie van de data sinds de productie in de productie omgeving. Voor de klimaatgroep is de migratie van data naar de productie zone nog niet voltooid. In totaal is er 1.3 PB aan data opgeslagen.

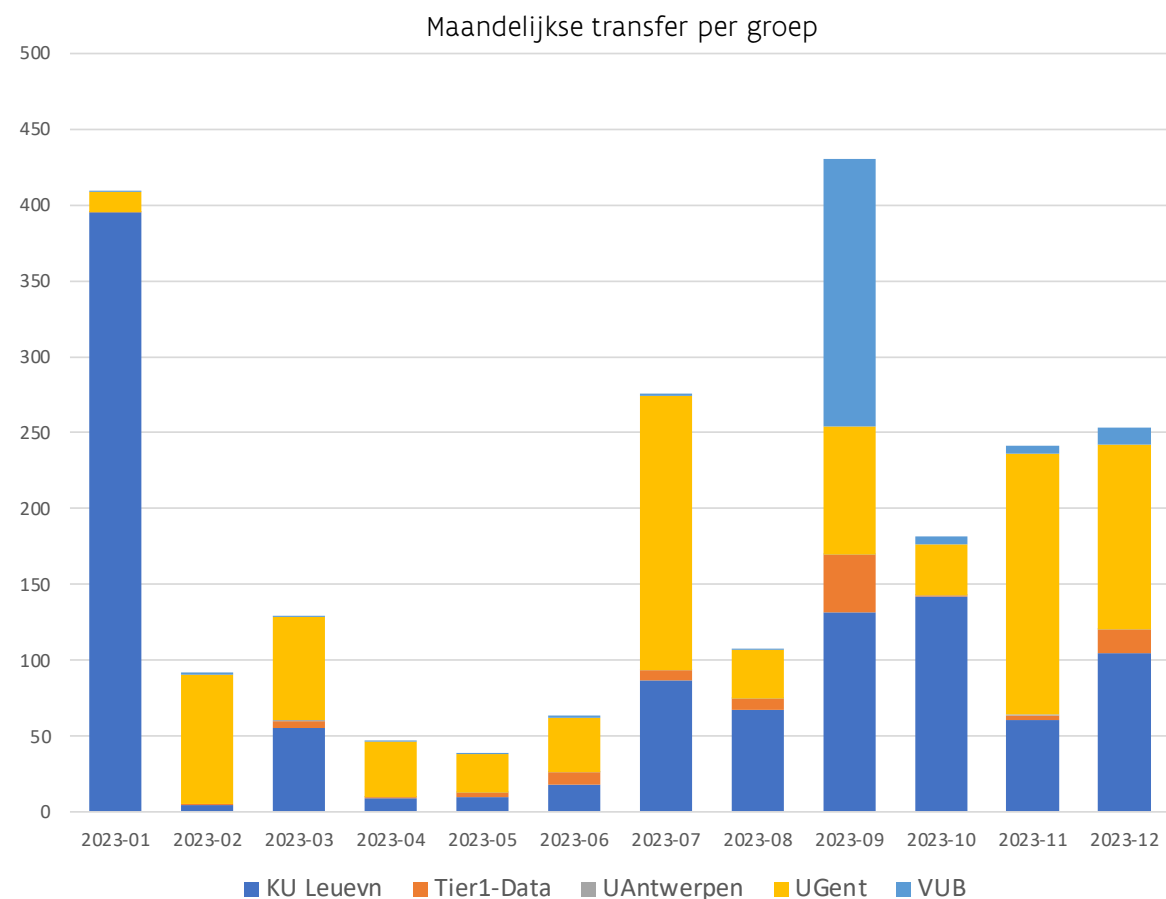


Afbeelding 10. Tier-1 Data gebruik



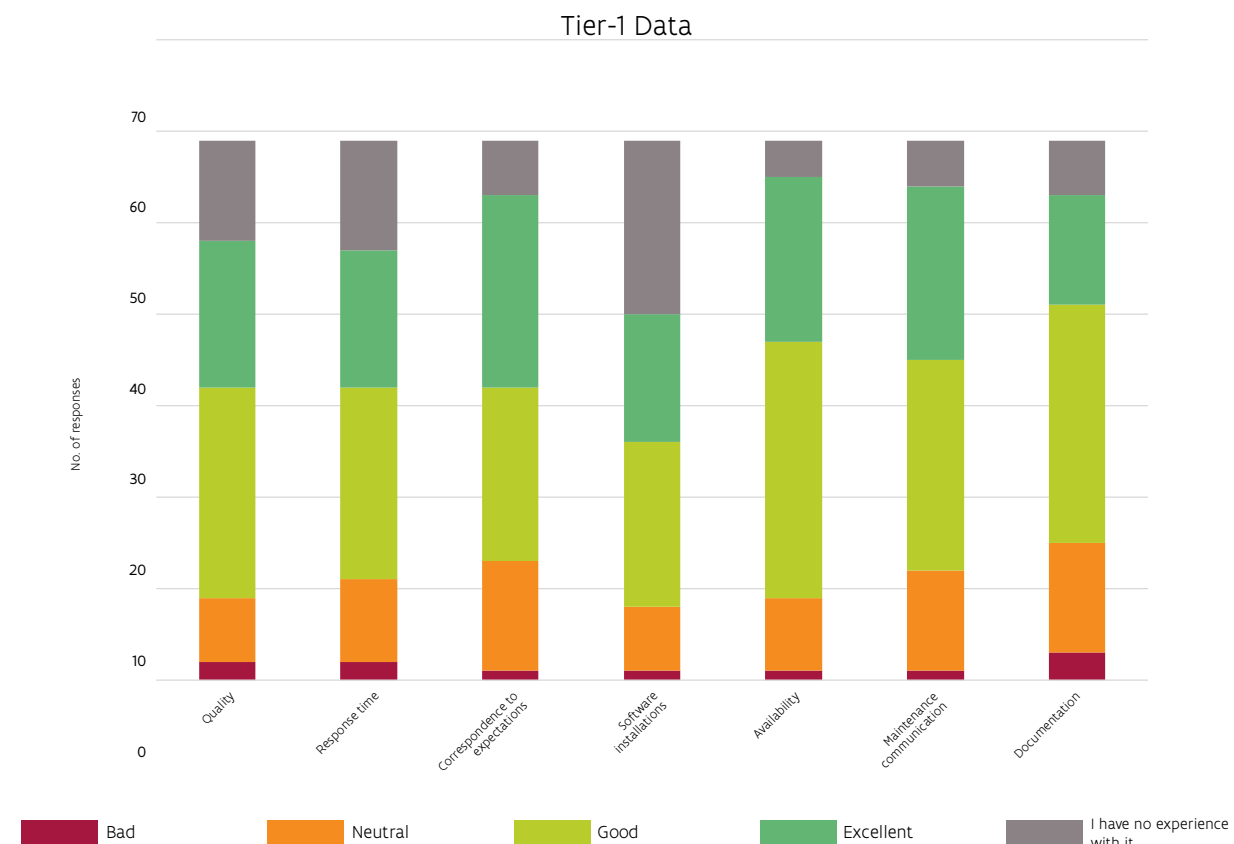
Globus uitrol en gebruik

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 volledig uitgerold naar alle VSC sites. Zoals onderstaande grafiek toont, wordt de oplossing gebruikt om transfers uit te voeren tussen verschillende VSC componenten en een groot aantal endpoints. Een 100-tal gebruikers verplaatsten in totaal meer dan 2 PB aan data met Globus. Naar verwachting zal het gebruik in 2024 steeds verder toenemen.



Afbeelding 11. Globus uitrol en gebruik

De gebruikerstevredenheid werd bevraagd in de VSC user survey eind 2023. Voor Tier-1 Data gaven 79 verschillende respondenten aan in meer of mindere mate gebruik te maken van deze VSC service.



Afbeelding 12. Gebruikerstevredenheid Tier-1 Data

Onderstaande componenten van de Tier-1 Data infrastructuur werden door gebruikers als 'goed' of 'excellent' beoordeeld:

- 83% kwaliteit
- 78% responstijd
- 76% overeenstemming met verwachtingen
- 79% software installaties
- 83% beschikbaarheid
- 79% communicatie omtrent onderhoud
- 72% documentatie

Er zijn zeker enkele lessen te leren voor volgend jaar. De resultaten zijn goed, maar aandacht voor documentatie met voorbeelden is een werkpunt. Volgend jaar zal meer specifiek commentaar gevraagd worden voor de data component. De vraag m.b.t. software installaties zal beter geformuleerd worden naar de bruikbaarheid van de verschillende clients. Ook de vraag naar software installaties zal beter geformuleerd worden naar de bruikbaarheid van de verschillende beschikbare clients.

Toekennen opslagcapaciteit

De toekenning van Tier-1 Data projecten verloopt via projectaanvragen. In 2023 waren er vier projectaanvragen die op een termijn van vier jaar een totaal van 730 TB aan storage zullen gebruiken.

Bovendien werd een nieuwe collaboration grant aangevraagd door de storage4climate groep die reeds 1 PB aan data had opgebouwd tijdens de pilootfase. Er wordt verwacht in deze collaboration grant dat de benodigde opslagcapaciteit tot 6 PB zal groeien in de komende vier jaar.

Gebruikersondersteuning

In 2023 lag de focus op de start van de productiefase van Tier-1 Data. De pilootgebruikers werden aangezet om een aanvraag in te dienen voor reguliere toegang en om data te migreren naar de productie omgeving. De klimaatgroep is hier de grootste gebruiker.

Met de lancering werd ook de documentatie op de VSC website op punt gesteld. Met verschillende onderzoeksgroepen werd een verkennend gesprek gevoerd. Dit heeft geleid tot een aantal starting grants en volledige projectaanvragen.

Specifieke ondersteuning

Op 9 mei werd de productie omgeving officieel gelanceerd via een online launch sessie. Een 90-tal deelnemers volgden de sessie. De technische infrastructuur werd toegelicht, gevolgd door een demonstratie van het gebruik via de online portal en via de Python clients.

Tier-1 Data werd in twee hackathons gebruikt, waaronder één van Digital Humanities. De deelnemers konden de data die nodig was voor de hackathon ophalen uit Tier-1 Data.

Het iRODS consortium

Tijdens de jaarlijkse iRODS UserGroup Meeting (iRODS) werden drie presentaties gegeven door KU Leuven en één Lightning Talk.

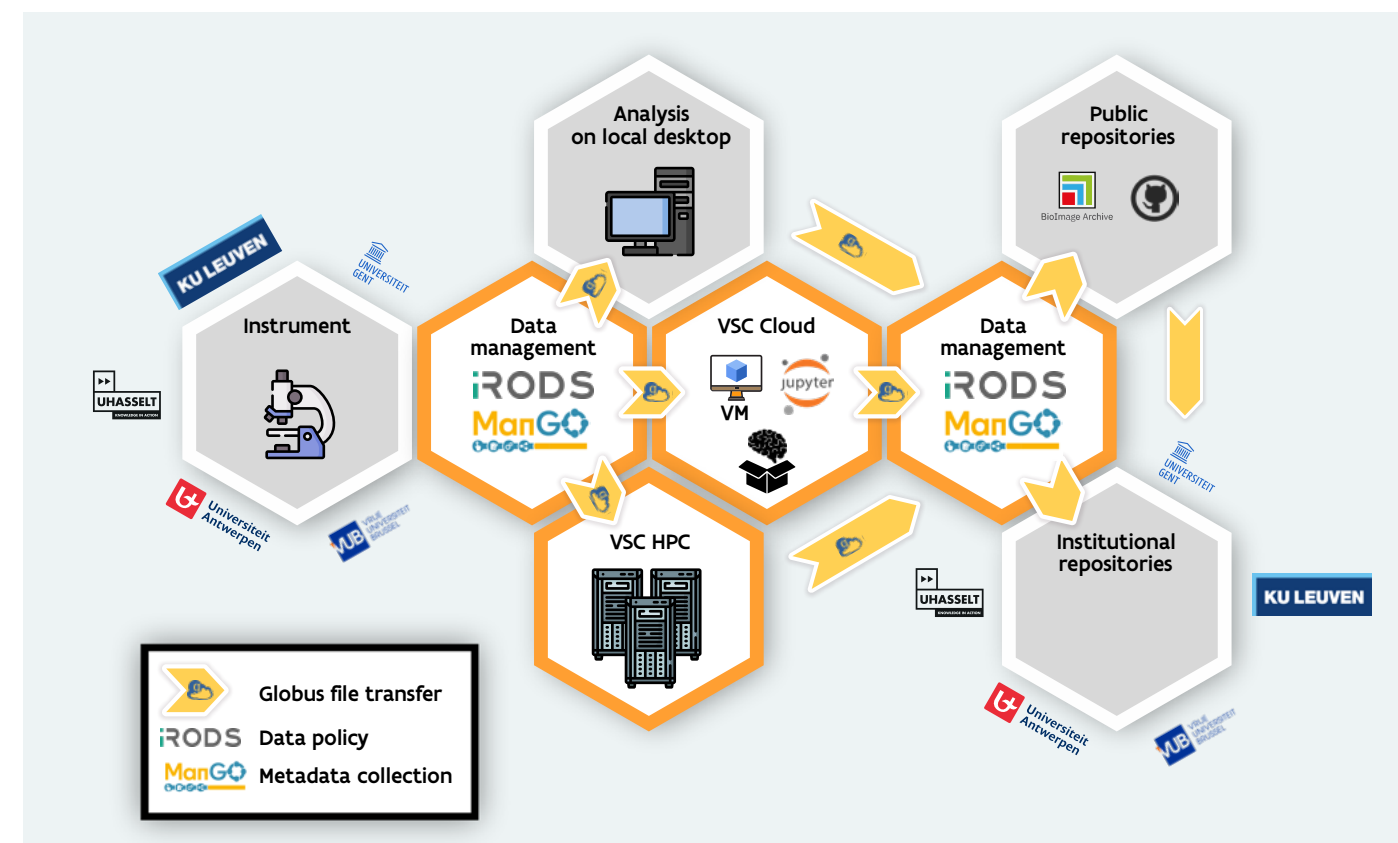
- “ManGO: A web portal and framework built on top of iRODS for active research data management”
- “Towards rich and standardized metadata in iRODS”
- “rirods: An R client for iRODS”
- “Dataverse integration dashboard: pulling data from iRODS”

Door de betrokkenheid bij het consortium zijn de ondersteuners niet alleen goed op de hoogte van de nieuwe ontwikkelingen maar kunnen er ook samenwerkingen gevonden worden om nieuwe ideeën uit te werken.

Showcase

Flanders BioImaging (FBI) is een consortium dat infrastructuur en dienstverlening voor beeldvormingsfaciliteiten verleent, verspreid over de Vlaamse universiteiten. Ze produceren een grote hoeveelheid en een diverse set van beeldvormingsgegevens die gekoppeld zijn aan een groot aantal onderzoeksprojecten. Onderzoeksdatamangement, het delen van Data en samenwerken rond deze data zijn belangrijke aspecten van de dienstverlening. Tier-1 Data kan hier een belangrijke rol vervullen in de workflow. Enerzijds biedt VSC naast Tier-1 Data ook de middelen via de Tier-1 Compute en Tier-1 Cloud, en anderzijds kan het ook integreren met externe compute faciliteiten. Tegelijkertijd biedt het een pad om data te publiceren in externe repositories. Het consortium vroeg in 2023 een starting grant aan om deze workflow te testen. In navolging hiervan werd ook een collaboration grant aangevraagd.

Een [succesverhaal over Tier-1 Data](#) werd gepubliceerd op de VSC-website en zal nog opgevolgd worden met een verslag over het verdere verloop van de collaboration grant.



Afbeelding 13. Flanders BioImaging workflow, referentie (Tatiana Woller)

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.

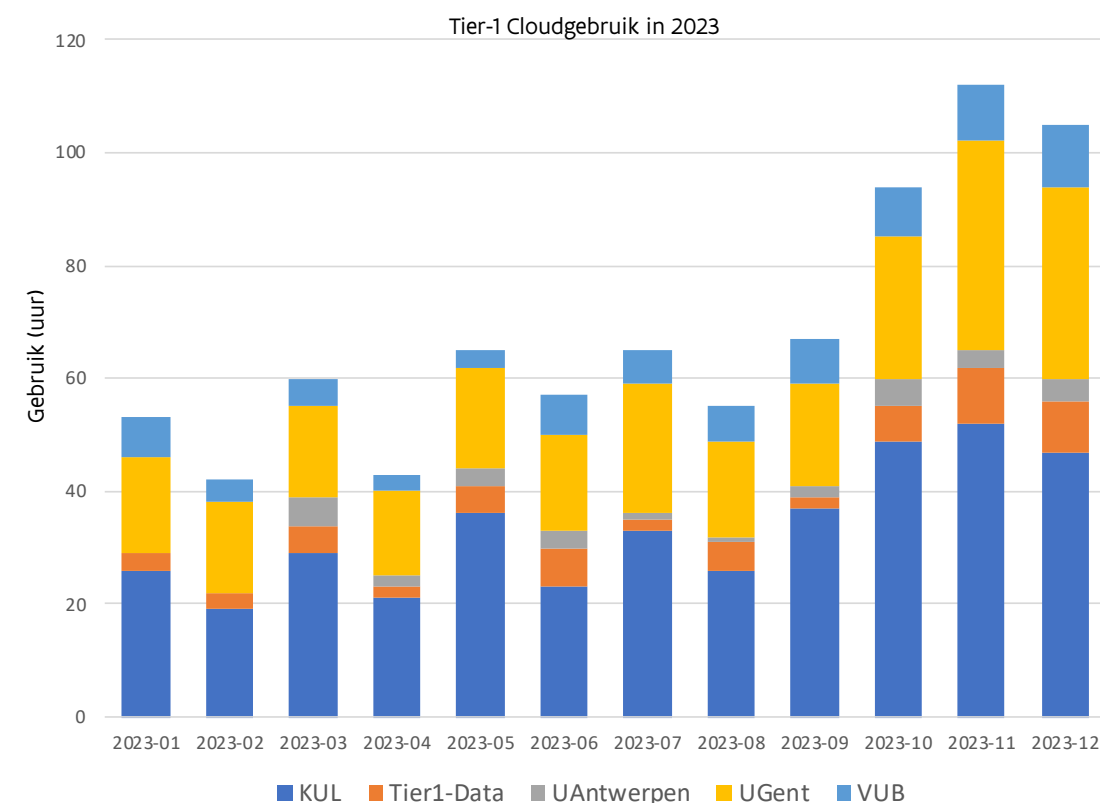
De Tier-1 Cloud infrastructuur lenigt deze nood door een cloud service gebaseerd op OpenStack te implementeren die 'on demand' resources aanbiedt in een meer flexibele en cloud-achtige manier. Dit is een Infrastructure as a Service (IaaS) faciliteit die de capaciteit biedt om resources in te zetten, 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.

De Tier-1 Cloud opstelling voor het VSC draait ondertussen geruime tijd en heeft een select doelpubliek bereikt. In 2023 werd kritisch naar deze VSC service gekeken en werd onderzocht waar verbeteringen en vereenvoudigingen mogelijk zijn. De resultaten van deze review wezen aan dat de onderliggende software oplossing, OpenStack, een krachtig maar ook technisch ingewikkeld cloud platform is. Dit vereist vaak specifieke kennis en geregelde (dure) hulp van de vendor om basistaken te kunnen uitvoeren. Tegelijk blijkt uit een review van de lopende Tier-1 Cloud projecten dat geen bijzondere cloudfaciliteiten nodig zijn en functionaliteiten volstaan. Andere platformen (bv. OpenNebula) bieden gelijkaardige functionaliteiten als OpenStack die zeker volstaan voor een volwaardig Tier-1 Cloud platform. De supportkost van bv. OpenNebula is lager en de configuratie is ook eenvoudiger. Op termijn is een switch naar een ander technisch framework dus opportuun.

Momenteel loopt er een support contract met Red Hat voor Openstack, tot en met midden 2026, en functioneert de huidige Tier-1 Cloud infrastructuur goed en naar behoren. Het is niet wenselijk om daaraan te raken vooraleer de einddatum nader in zicht komt. Als een switch naar OpenNebula (of een ander platform) aan de orde is, kunnen voorbereidingen en inspanningen hiervoor worden ingepland tegen 2025.

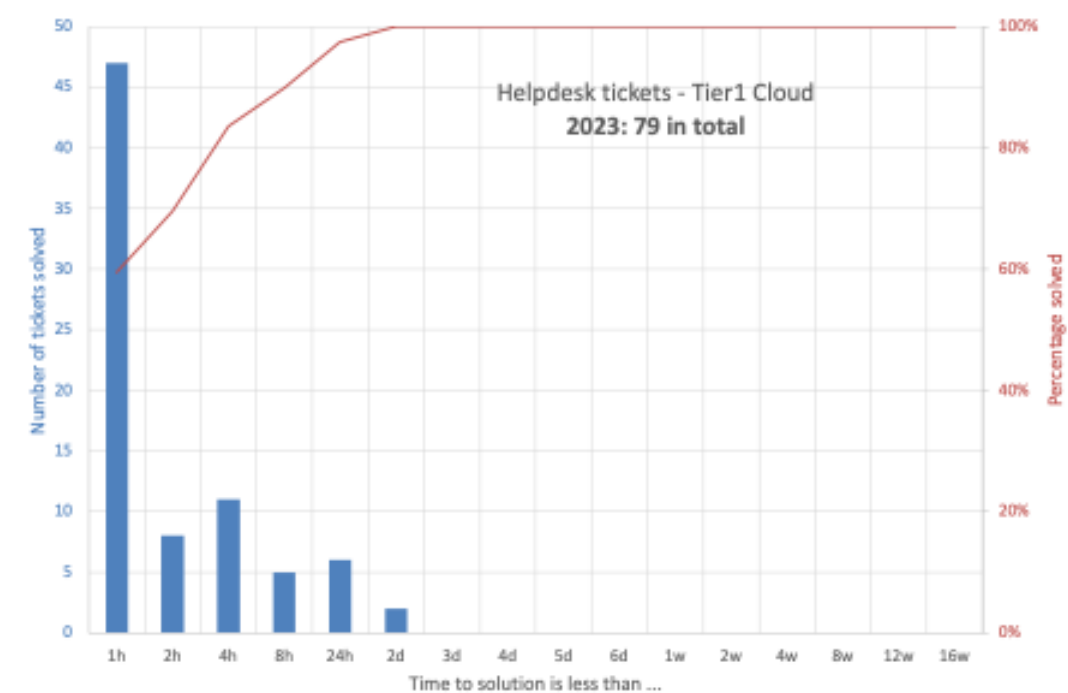
Een belangrijke eerste stap naar een mogelijke platform switch werd reeds genomen door de introductie van HashiCorp Terraform orkestratie. Dit is een infrastructure as code tool, waarmee gebruikers eenvoudig complexe cloud infrastructures kunnen uitbouwen met behulp van templates. Deze tool is bovendien compatibel met meerdere cloud providers (bv. AWS). De introductie van deze orkestratie zorgt voor een meer platform-agnostische beleving door gebruikers van het Tier-1 Cloud platform.

Ook op hardware vlak werd de Tier-1 Cloud opstelling tegen het licht gehouden. Deze opstelling is opgebouwd uit een mix van nieuwe hardware en oudere (ex Tier-1 Compute) hardware. Met de afbouw van BrENIAC in 2023 kwamen nieuwere Skylake nodes beschikbaar binnen het VSC en er werd onderzocht of die oudere Broadwell nodes in de Tier-1 Cloud opstelling konden vervangen/upgraden. Op basis van een kosten-batenanalyse analyse werd beslist om deze vervanging niet uit te voeren. De Tier-1 Cloud CPU hypervisors worden immers eerder beperkt gebruikt, waarbij de beperkte meerwaarde van (iets) recentere CPUs niet opweegt tegen de downtime die deze operatie met zich zou meebrengen.



Afbeelding 14. Overzicht van Tier-1 Cloud in 2023

Een redelijk gestage activiteit is merkbaar voor alle Tier-1 Cloud projecten in 2023. Een sterke stijging in het aantal actieve virtuele machines in november en december kan verbonden worden met één groter cloud project dat dan een burst in activiteit had. Tien nieuwe projecten namen een aanvang in 2023, waarvan zeven starting grant projects en drie full proposals. In totaal werd in 2023 rekestijd ten belope van 4.593.852 CPU-uur verbruikt op het Tier-1 Cloud platform.

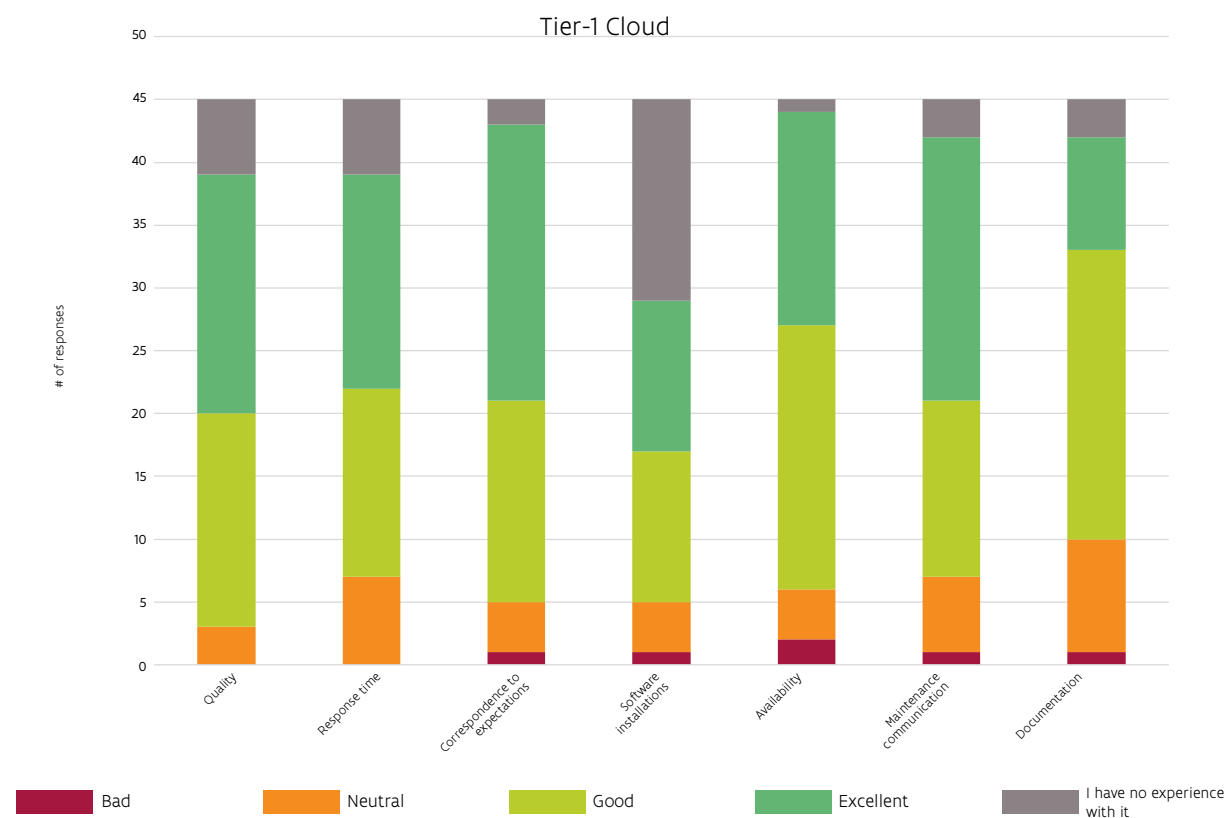


Afbeelding 15. Activiteit en gebruik van Tier-1 Cloud projecten in 2023

De dedicated Tier-1 Cloud helpdesk sloot in 2023 in totaal 79 tickets. De tijd om een ticket op te lossen was zeer laag, met het merendeel van de tickets reeds opgelost binnen één uur.

De gebruikerstevredenheid – zoals bevraagd in de VSC user survey eind 2023 – voor de Tier-1 Cloud infrastructuur is best wel hoog. 82 verschillende respondenten gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken van deze VSC service. Onderstaande componenten van de Tier-1 Cloud infrastructuur werden door gebruikers als ‘goed’ of ‘excellent’ beoordeeld:

- 92% (36/39) - kwaliteit
- 82% (32/39) - responstijd
- 88% (38/43) - overeenstemming met verwachtingen
- 83% (24/29) - software installaties
- 86% (38/44) - beschikbaarheid
- 83% (35/42) - communicatie omtrent onderhoud
- 76% (32/42) - documentatie



Afbeelding 16. Gebruikerstevredenheid Tier-1 Cloud

Als mogelijke suggesties voor nieuwe ontwikkelingen werden vermeld:

- Cloud services voor lesgeven (1 respondent)
- Sandbox servers voor onderzoeksgroepen (1 respondent)

RDI

Met het VSC 2.0 plan werd de Vrije Universiteit Brussel aangewezen als Research, Development & Innovation office van het VSC. In 2023 werd dit office opgestart. Er werd budget voor 2 VTE voorzien in de VSC begroting. De belangrijkste verwezenlijking van 2023 is dan ook het succesvol aantrekken van 2 personen in juni. Er werd iemand met het profiel van een business developer en iemand ter ondersteuning van de RDI-gebruikers aangeworven. Deze mensen zijn zich aan het inwerken.

De taken die voorheen door verschillende VSC hubs werden uitgevoerd (voornamelijk de Tier-1 hosting instelling) werden overgeheveld naar de VUB. De ondersteuning voor RDI-gebruikers werd gesplitst in een eerste en tweede lijn: de eerste lijn wordt afgehandeld voor de VUB, de tweede lijn door de Tier-1 hosting instelling (UGent). Er werden afspraken gemaakt rond de opvolging van vragen en er is een maandelijks overleg om de stand van zaken te overlopen. Voor de RDI-gebruikers is alles transparant: hun enige contactpunt voor ondersteuning is nog steeds (compute@vscentrum.be) en het ticketsysteem van de UGent verwerkt alle vragen. Daarnaast is de bedoeling dat (info@vscentrum.be) als enige contactpunt voor nieuwe RDI-gebruikers zal gebruikt worden.

Het grootste deel van het werk in 2023 ging over de juridische kant van de zaak: er is een nieuwe overeenkomst afgesloten tussen het FWO en de verschillende universitaire associaties die de VUB aanstelt als administratief coördinator voor RDI. Er is ook erg veel tijd gekropen in het opstellen van nieuwe contract templates. Doordat de hosting van de Tier-1 compute cluster vanaf nu afgesplitst is van de administratieve coördinator was een herwerking vereist. De nieuwe contracten worden nu ondertekend door het bedrijf, het FWO, de VUB en de hosting instelling van de Tier-1 (UGent).

Door de uitbreiding van Hortense met de Milan partitie was een aanpassing van de prijs voor het gebruik nodig. Op basis van de kost van de hardware, het gereserveerde vermogen, het elektriciteitsverbruik en de mensmiddelen komt nieuwe kostprijs neer op:

	Prijs
CPU	€ 24 / node / dag
GPU	€ 94 / node / dag
Opslag	€ 16 TB / maand (vanaf > 1 TB)

Tabel 6 Kostprijs voor Tier-1 Compute

Alle prijzen zijn inclusief BTW. De eigenlijke afrekening gebeurt op het niveau van CPU- of GPU-uren. De opslagcapaciteit is op basis van de gevraagde capaciteit, niet wat in gebruik is.

Er is een gratis exploratory grant ter waarde van € 5.000 om nieuwe klanten te laten proeven van onze diensten. Men kan dit bedrag naar keuze verdelen over CPU- en GPU-resources.

Ondanks dat het focus in 2023 lag op het vlot krijgen van de administratieve flow hebben we verschillende opportuniteiten aangegrepen om onze diensten aan de man te brengen. Zo werd er o.a. op de Elixir nationale dag een poster gepresenteerd. Op basis van de resultaten van de Stretch Innovation studie, die besteld is door de industriële raad van het VSC om het HPC potentieel in Vlaanderen te verkennen, werden een groot aantal leads opgevolgd. Daarnaast werd er een partnerschap afgesloten met Make-IT-Fit om Limburgse bedrijven ook te laten proeven van de VSC diensten. Dit gaf al een aantal leads.

Nu de basis van het RDI kantoor er ligt, zal de focus verschuiven naar actieve outreach. Zo zal er werk worden gemaakt van een service catalogus en aangepaste trainingen voor RDI-gebruikers in 2024.

Klantenbestand

In 2023 werden er acht exploratory grants opgestart. Er werden ook vijf exploratory grants omgezet naar een betaald contract in de laatste twee jaar. De bedrijven gebruiken Tier-1 voornamelijk om vloeistofdynamica berekeningen te doen.

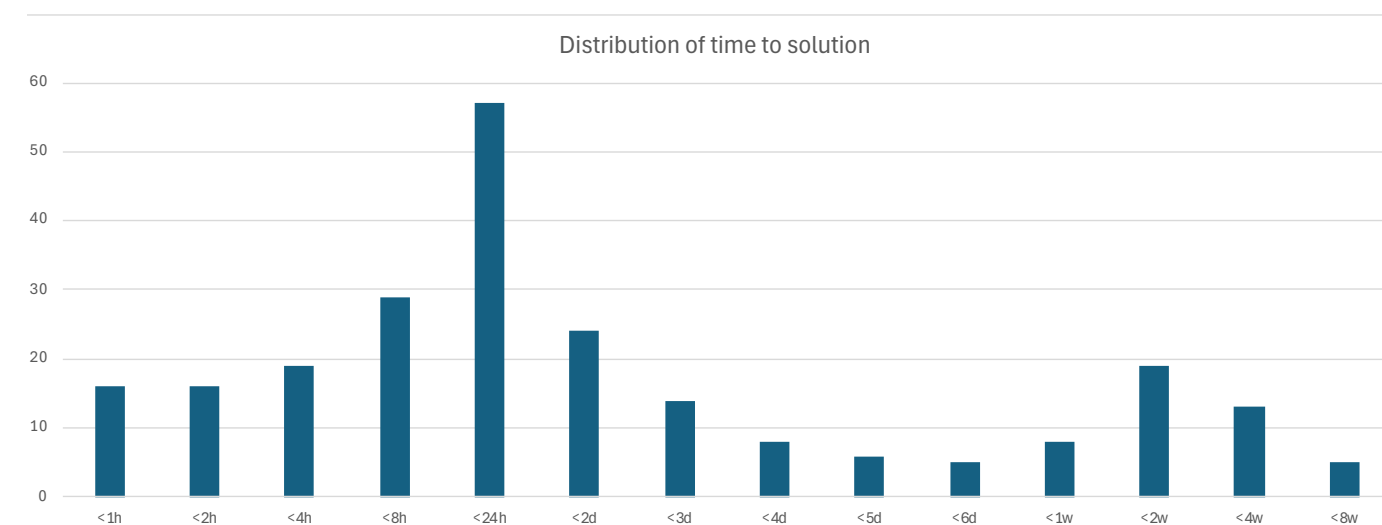
Daarnaast werden er ook tien betaalde contracten afgesloten. Er werd ter waarde van € 718.304,33 aan facturen uitgestuurd. De inkomsten in 2023 lagen abnormaal hoog door het eenmalige zeer extensieve gebruik door één bedrijf.

	Aantal exploratory grants
2020	7
2021	8
2022	13
2023	8

Tabel 7. Tier-2 Overzicht van Exploratory Grants en betaalde contracten voor VSC Tier-1 Compute in 2023

Ondersteuning

Inbegrepen in het gebruik van Tier-1 Hortense door RDI-gebruikers hoort ook een gebruikersondersteuning. Deze is georganiseerd in een eerste en tweede lijn via (compute@vscentrum.be). In 2023 werden in totaal 273 tickets behandeld en opgelost voor RDI-gebruikers.



Afbeelding 17. Oplostijd van support tickets voor Tier-1 Hortense RDI-gebruikers in 2023



Tier-2 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.

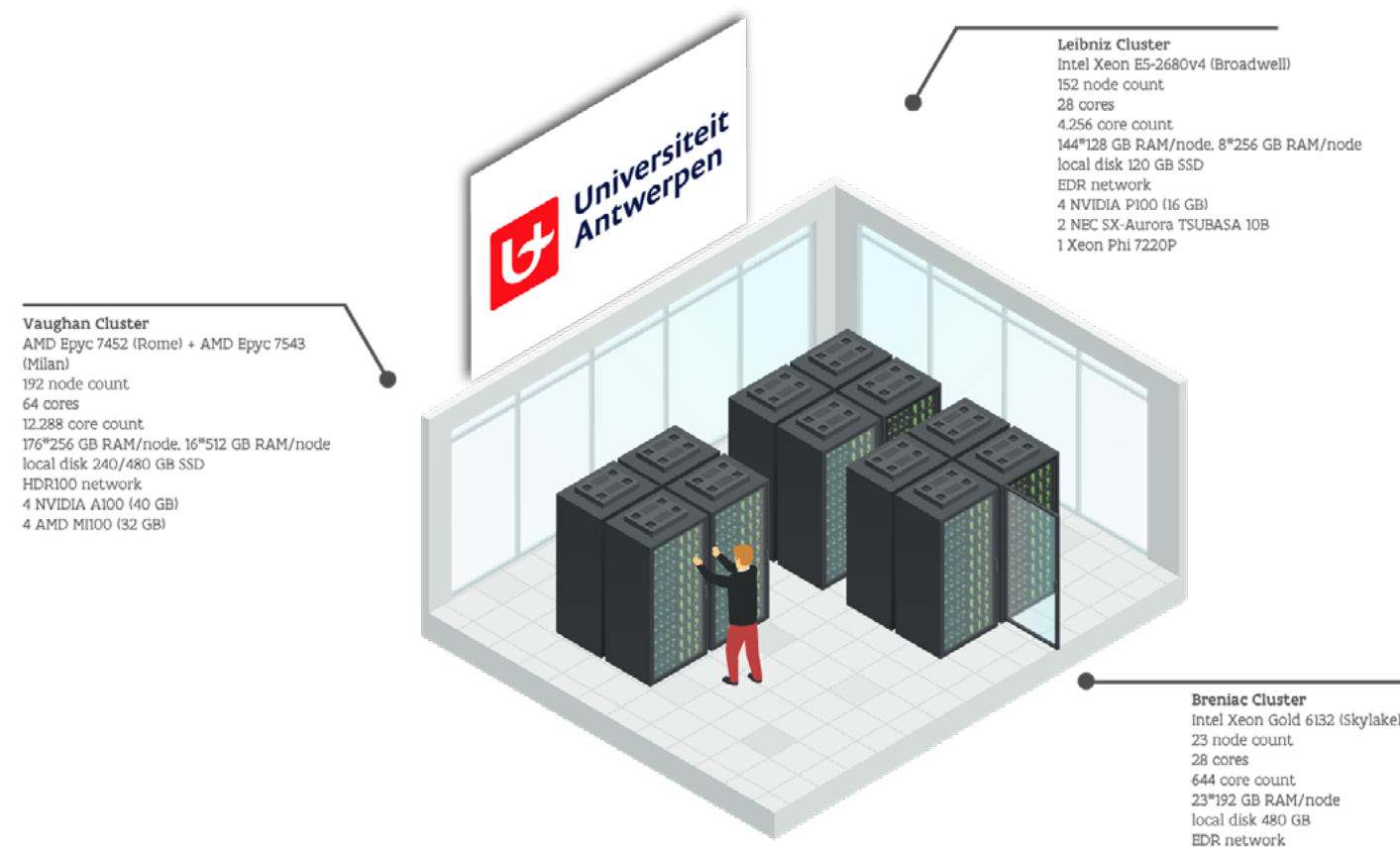
► Universiteit Antwerpen

Beschikbare infrastructuur

In 2023 werd de Vaughan cluster uitgebreid met 40 extra nodes en de capaciteit van het scratch file systeem uitgebreid tot 610 TB. Daarnaast werden de oude "Hopper" nodes verwijderd uit het systeem en vervangen door 24 nodes uit de voormalige Tier-1 BrENIAC.

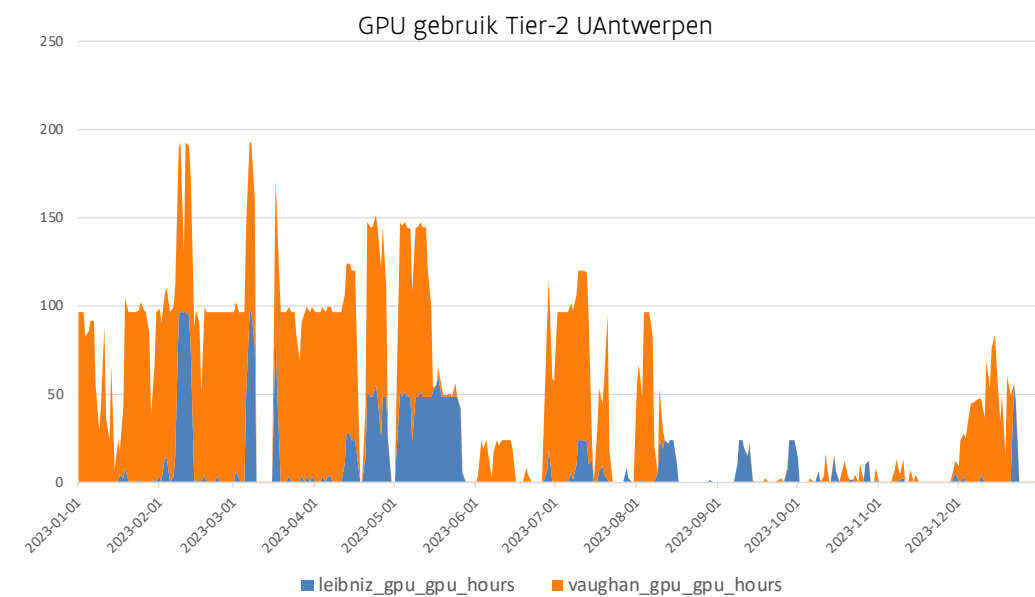
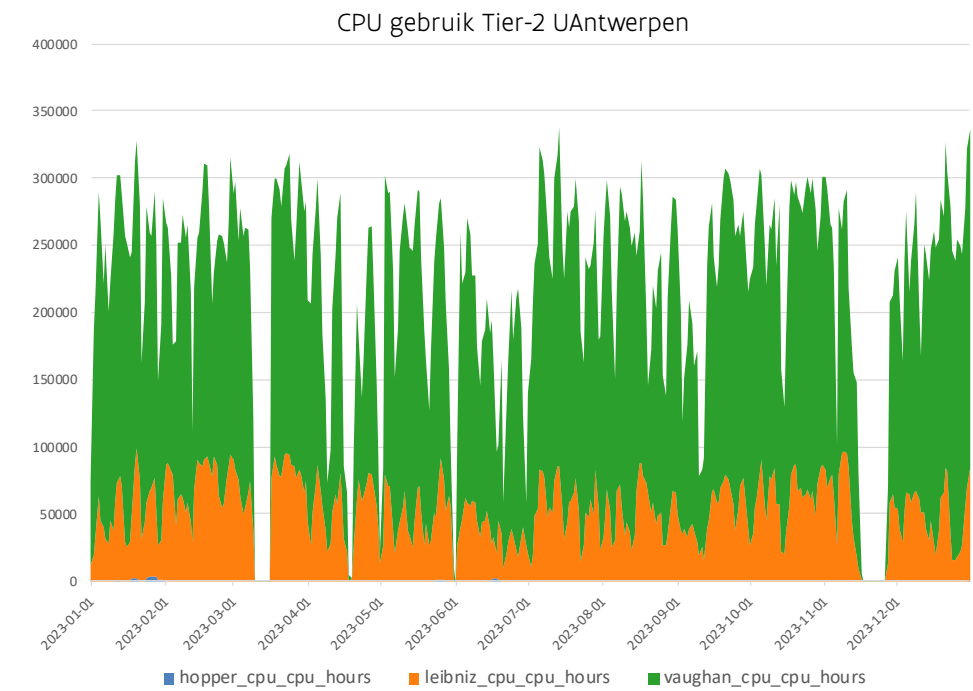
De Tier-2 infrastructuur bestaat uit de clusters Vaughan, Leibniz en Breniac:

- 681 TF CPU, 106 TF GPU
- 17.188 CPU cores
- 78 TB geheugen
- 12 GPU devices / 72704 GPU cores



Afbeelding 18. Tier-2 infrastructuur UAntwerpen

Exploitatie en gebruik



Afbeelding 19. Overzicht CPU- en GPU-gebruik op Tier-2 UAntwerpen



Begin maart: onvoorziene grote stroomonderbreking, volledig systeem down. Bij heropstart waren er problemen met het scratch file systeem. Downtime: 1 week.

Half april: voorziene onderbreking om het koelsysteem uit te breiden in voorbereiding van de installatie van nieuwe nodes. Downtime: 2 dagen.

Eind april: onvoorziene onderbreking door problemen met het Infiniband netwerk. Downtime: 4 dagen

Eind juni: onvoorziene onderbreking door een lek in het koelcircuit. Downtime: 1 dag.

Half november: voorziene onderbreking die we laten samenvallen met werken aan de hoogspanningscabine op campus. Door problemen met de upgrade van het scratch filesystem, heeft de onderbreking langer dan voorzien geduurd (door het kopiëren van files en herinstalleren van het filesystem). Downtime: 2 weken.

Toekennen rekentijd

In 2023 hadden de onderzoekers van UAntwerpen en haar associatie volledig vrije toegang tot de Tier-2 infrastructuur. Op vraag van het Departement Onderzoek, Innovatie & Valorisatie van de UAntwerpen wordt betalend rekenen ingevoerd. Dit zal gebeuren vanaf het voorjaar 2024. Verschillende infosessies werden hierover georganiseerd.



“De VSC-supercomputers stellen ons in staat om de aerodynamica van lucht dragende windenergiesystemen in detail te bestuderen. Met behulp van 392 cores duurt de simulatie ongeveer 8 uur om één dwarswindvluchtlus te voltooien.”

Niels Pynaert
Faculteit Ingenieurwetenschappen en
Architectuur
UGent

Gebruikersondersteuning

Categorie	Tickets
Accounts	89
Software	157
Tier-1	11
Overig	100
Totaal	357

Tabel 8. Tier-2 behandelde tickets

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.

In 2023 werd een nieuwssectie geïntroduceerd op onze website, waar op een snelle en toegankelijke manier kleinere aankondigingen geplaatst worden.

We kijken ook verder naar de integratie met Globus, met mogelijke uitbreidingen naar OneDrive, en iRODS om gebruikers meer opties te bieden qua data-overdracht.

In eerste instantie gebeurt de gebruikersondersteuning via het ticketing systeem.

Daarnaast waren er ook 1-op-1 gesprekken of gesprekken met onderzoeksgroepen om vragen te bespreken.

Belangrijk in het kader van ondersteuning, zijn ook de halfjaarlijkse introcursussen die worden georganiseerd (februari/maart en oktober): “Linux introduction” (2 halve dagen), “Supercomputers for starters” (1 halve dag) en “HPC@UAntwerp introduction” (2 halve dagen).

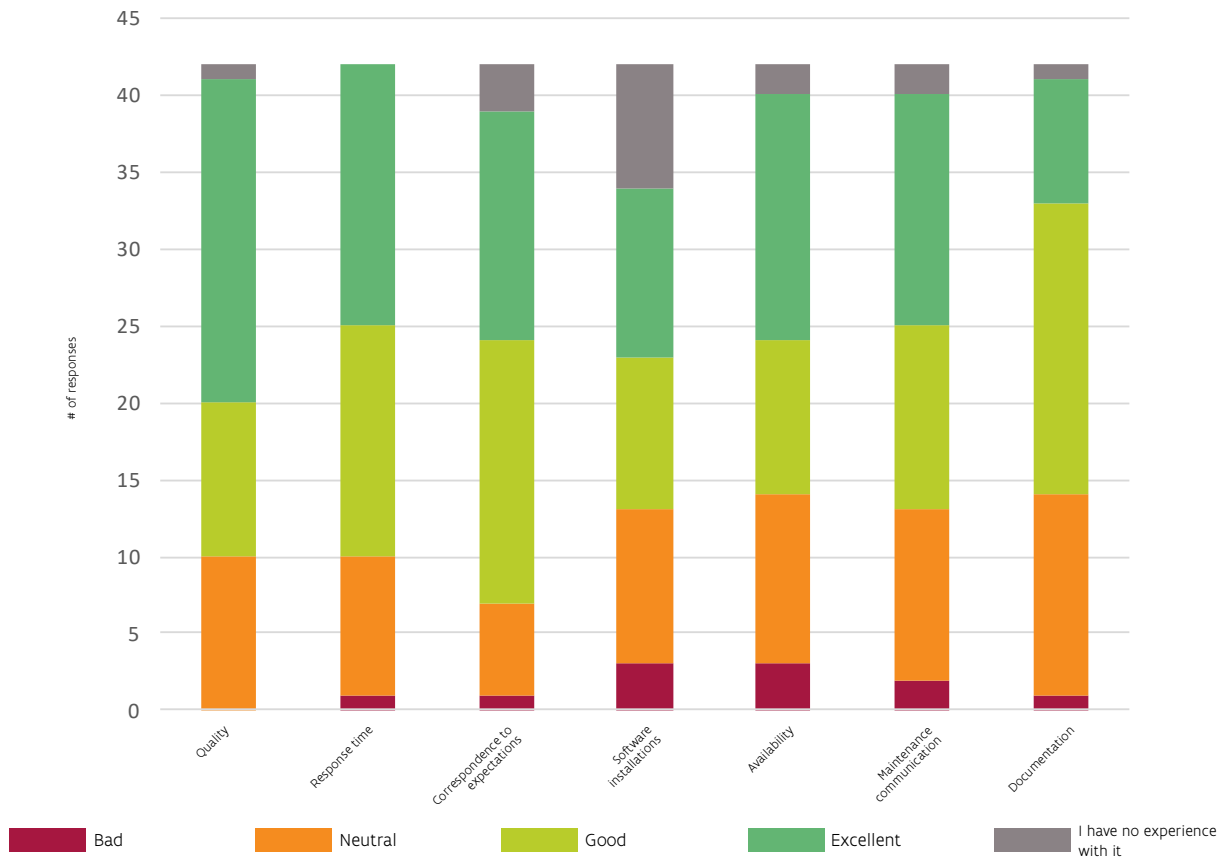
Daarnaast is er de begeleiding van masterstudenten bij het gebruik van de infrastructuur, en ondersteuning bij de aanvragen voor rekentijd op Tier-1 en Tier-0 en bij computationele aspecten van (interuniversitaire) projectaanvragen.

In 2023 werd de software-stack gevoelig uitgebreid en meer up-to-date gebracht.

We schakelden over van eigen aangepaste buildscripts in de Intel omgeving van 2020 naar gedeelde (EasyBuild) buildscripts (die ook in gebruik zijn op de andere VSC hubs). Door die wijziging hebben we, naast recentere versies van veel pakketten die voordien beschikbaar waren, ook nieuwe software sneller kunnen installeren en kunnen we nauwer samenwerken met de andere VSC hubs. Deze recentere versies (en nieuwe software) zijn verspreid over twee omgevingen (Intel en foss) voor de diverse CPU-types in onze clusters, inclusief ook GPU-ondersteunende pakketten.

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

VSC bevraging



Afbeelding 20. Tier-2 bevraging UAntwerpen

Uit de bevraging komen vier werkpunten naar voor: software-installaties, beschikbaarheid, communicatie rond onderbrekingen en documentatie.

Zoals hierboven beschreven, hebben we in de loop van 2023 de manier waarop we software installeren, aangepast. We hopen in de bevraging van 2024 dan ook een positieve evolutie te zien.

Enkele onvoorziene onderbrekingen hebben tot een zekere ontevredenheid i.v.m. beschikbaarheid geleid. We hopen dit natuurlijk steeds tot het minimum te herleiden. Daarmee samenhangend is er de communicatie rond de onbeschikbaarheid. Onvoorziene onderbrekingen kunnen niet vooraf worden aangekondigd, en na een onderbreking geven we de voorkeur aan de nodige testen, waar gebruikers natuurlijk hopen steeds zo snel mogelijk opnieuw te kunnen werken.

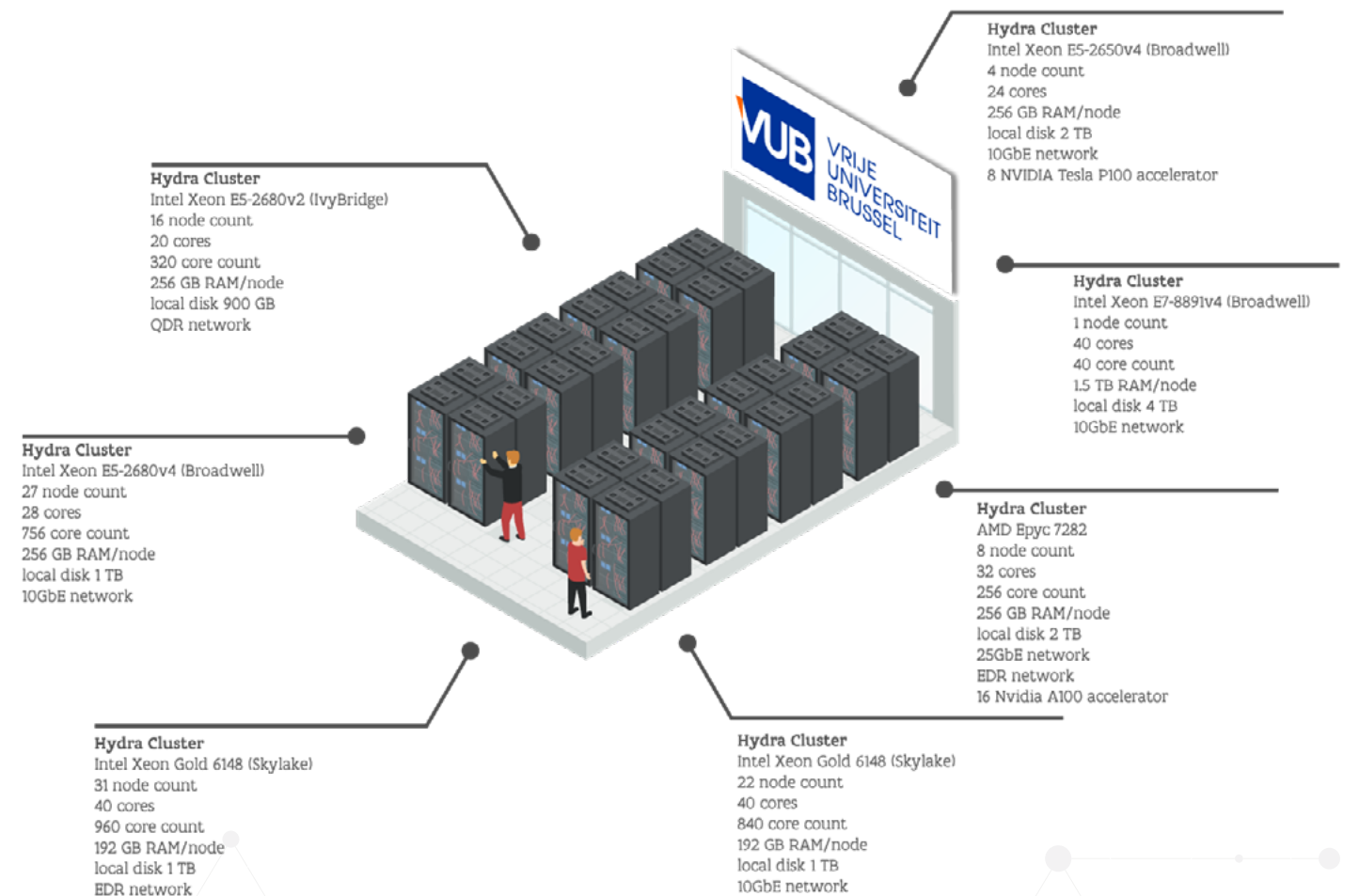
De VSC documentatie, die gedeeld is voor alle VSC gebruikers, is in 2023 gevoelig vernieuwd. Alleen bekijken de gebruikers uit Antwerpen die blijkbaar iets kritischer.

► Vrije Universiteit Brussel

Beschikbare infrastructuur

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

- 1 cluster / 6 partities
- 235 TF CPU, 236 TF GPU
- 3.624 CPU cores / 166.912 GPU cores
- 25 TB geheugen



Afbeelding 21. 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. Binnen de omgeving wordt geprobeerd om deze heterogeniteit zo veel mogelijk te verbergen voor de gebruikers door o.a. identieke software-installaties aan te bieden en jobs standaard naar meerdere partities toe te wijzen.

In 2023 zijn volgende wijzigingen gebeurd aan de Hydra-omgeving:

- De laatste nodes van de Ivy Bridge generatie zijn uit dienst gehaald.
- Er werden twee extra GPU nodes toegevoegd met elk twee NVIDIA A100 GPU's aan boord.
- 16 oude Skylake Breniac nodes werden gerecupereerd en toegevoegd aan Hydra.
- Alle systemen in de cluster kregen een update naar Rocky Linux 8.8. Dit is de grootste wijziging in de software stack in jaren. Bij de voorbereiding van deze operatie werd ongeveer elk stuk van onze stack tegen het licht gehouden.
- Het scratch filesystem werd vervangen door een nieuw hybride systeem met een NVMe en spinning disk pool. We beschikken nu over een 65 TB snelle NVMe storage en 590 TB spinning storage. De migratie tussen beide pools is onzichtbaar voor de gebruiker.
- Een platform op basis van JupyterHub werd gelanceerd op (<https://notebooks.hpc.vub.be>).
- De aanvraagprocedure voor een VSC account werd verder geautomatiseerd. Voor stafleden worden de aanvragen nu binnen de 5 minuten goedgekeurd, voor studenten is er een formulier dat professoren kunnen gebruiken om een account aan te vragen.

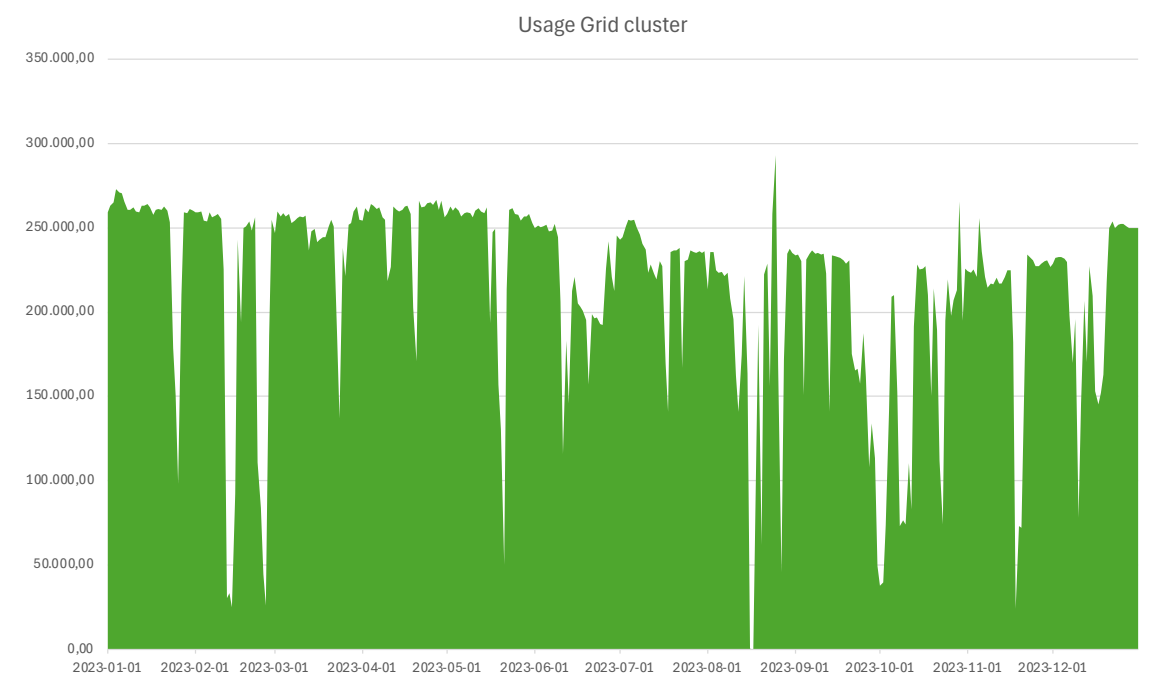
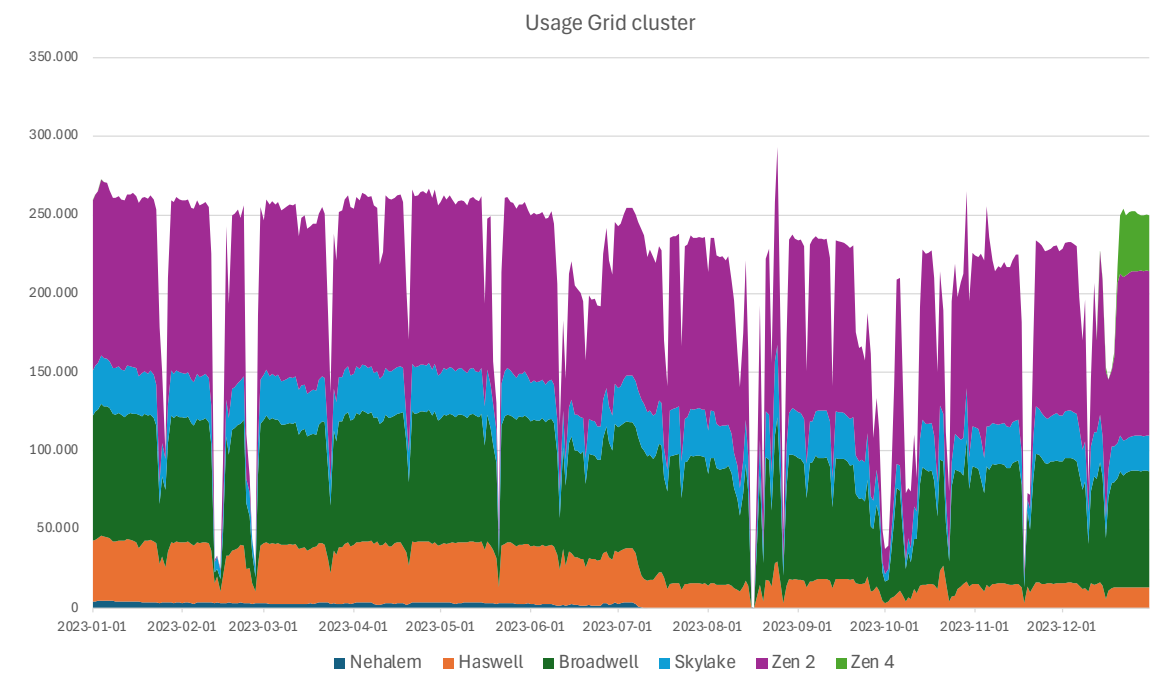
Naast haar eigen Tier-2-infrastructuur beheert de VUB - samen met de ULB - ook de grid-infrastructuur, die onder meer gebruikt wordt voor het verwerken van de gegevens die worden verzameld bij het uitvoeren van experimenten met de Large Hydron Collider (HPC) aan het CERN, maar ook binnen de Vlaamse onderzoeksgemeenschap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

- 1 cluster
- 205 TF
- 6.104 CPU cores
- 51 TB geheugen

Op het einde van 2023 werd de capaciteit van de cluster uitgebreid naar 205 TF door de toevoeging van 16 nieuwe nodes met elk 2x AMD Epyc 9334. Daarnaast werd het dCache systeem uitgebreid naar 11,2 PB.

De grootste wijziging in 2023 was het in productie brengen van een Ceph storage systeem voor de home directories van de gebruikers en als backend voor de lokale OpenNebula cluster. Er is ook erg veel tijd gekropen in het migreren en upgraden van alle bestaande systemen naar deze nieuwe storage cluster.

Exploitatie en gebruik



Afbeelding 22. Overzicht CPU- en GPU-gebruik op Tier-2 VUB.

Het gemiddelde gebruik lag in 2023 op 61% voor het CPU-gedeelte en 66% voor het GPU-gedeelte. Er werden in totaal 19.807.543 CPU uren (2.261 jaren op 1 core) gebruikt en 155.615 GPU uren (17 jaar op 1 GPU). De bulk van de rekestijd (98%) werd verbruikt door 20% van de jobs. Er waren in totaal 349 unieke gebruikers actief op de cluster waarvan 327 unieke op het CPU-gedeelte en 110 unieke op het GPU-gedeelte (dus sommigen op beide). Van deze gebruikers waren er 209 personeel en 140 studenten. Op zowel CPU als GPU waren 10% van de gebruikers verantwoordelijk voor 75% van het gebruik.

Voor het CPU gedeelte zien we dezelfde trend als vorig jaar: een erg grillig patroon. Dit komt overeen met veel maar relatief korte jobs op het systeem. Zeker in het weekend is de belasting van het systeem soms erg laag. Een verklaring is dat verschillende grote gebruikers met succes Tier-1 projecten hebben ingediend. Als we kijken naar de statistieken (waarbij we enkel jobs die minstens 1 uur hebben geduurd meetellen), dan is 72% van de rekestijd gebruikt door jobs die op 1 node draaiden, en zelfs 48% door jobs die 1 CPU core gebruikten. Ongeveer 80% van de jobs liep voor minder dan 28 uur, 50% zelfs in minder dan 6 uur. Dit komt overeen met het grillige patroon uit de grafiek.

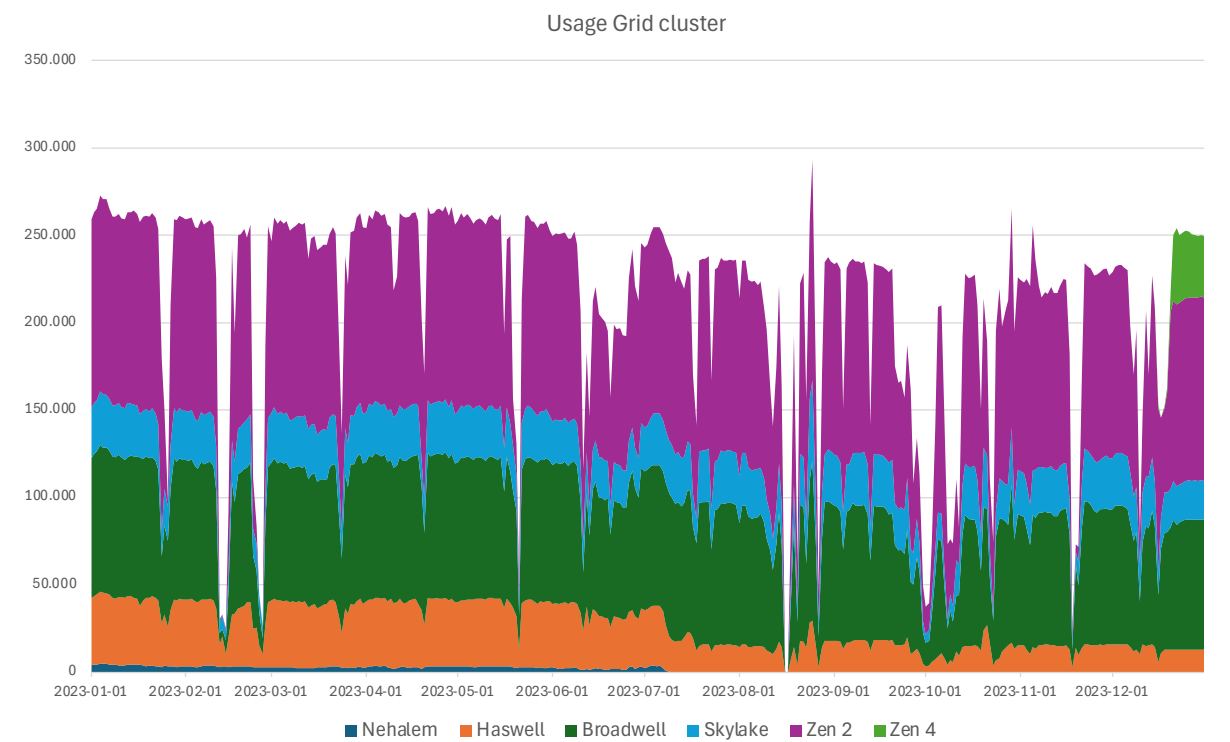
Ongeveer 90% van de jobs start binnen de 32 uur, de helft zelfs onmiddellijk. Uitgesplitst is dit:

	75% percentiel	90% percentiel
Single CPU core jobs	2,75 uur	16 uur
Single Node jobs	5,50 uur	32 uur
Multi node jobs	7,50 uur	45 uur

Tabel 9. Gebruik CPU rekestijd

Het GPU gedeelte is net als vorig jaar een stuk populairder. Er zijn verschillende momenten waarop we ongeveer 100% belasting hebben. Van de GPU jobs startte 50% binnen de paar minuten en 90% binnen de 31 uur. Ongeveer 80% van de jobs liep voor minder dan 20 uur. De overgrote meerderheid (92%) van de jobs gebruikt slechts 1 GPU die ook 87% van de GPU tijd vertegenwoordigen.

Er zijn dit jaar geen grote ongeplande onderbrekingen geweest. Op 27 en 28 november was er een gepland onderhoud om de nieuwe scratch in gebruik te nemen en alle systemen te upgraden naar Rocky Linux 8.8. Op 10 oktober was er een configuratie probleem met de job scheduler die grote impact had en op 14 juli was er een algemene netwerkpanne die ook de Tier-2 cluster trof.



Afbeelding 23. Gebruiksstatistieken van de grid-infrastructuur (2023)

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 grootte van de cluster wordt uitgedrukt in job slots wat overeenkomt met 1 hyper-threaded CPU core. Het gemiddelde gebruik van de cluster is ongeveer 80%.

Op 17 en 18 juli was er een reboot van alle worker nodes na een geplande stroomonderbreking. Tussen 16 en 23 augustus werd het dCache systeem geüpgraded en waren er problemen met de xrootdlocal daemon op de worker nodes. Tussen 17 en 20 november was er een geplande stroomonderbreking in het datacenter.

De grid-infrastructuur, beheerd door VUB/ULB, wordt ook intensief gebruikt door onderzoekers van verschillende instellingen: VUB, UAntwerpen en UGent. De overige rekestijd op de grid-infrastructuur wordt gebruikt door onderzoekers van ULB en UCL.

De meeste onderzoekers maken gebruik van het zogenaamde "glide in" mechanisme. Hierbij worden "pilot jobs" gesubmit die, eens actief op een worker node, elders de "payload" gaan halen. Voor de berekening van de hierboven vermelde percentages is alleen rekening gehouden met rekestijd 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 rekestijd.

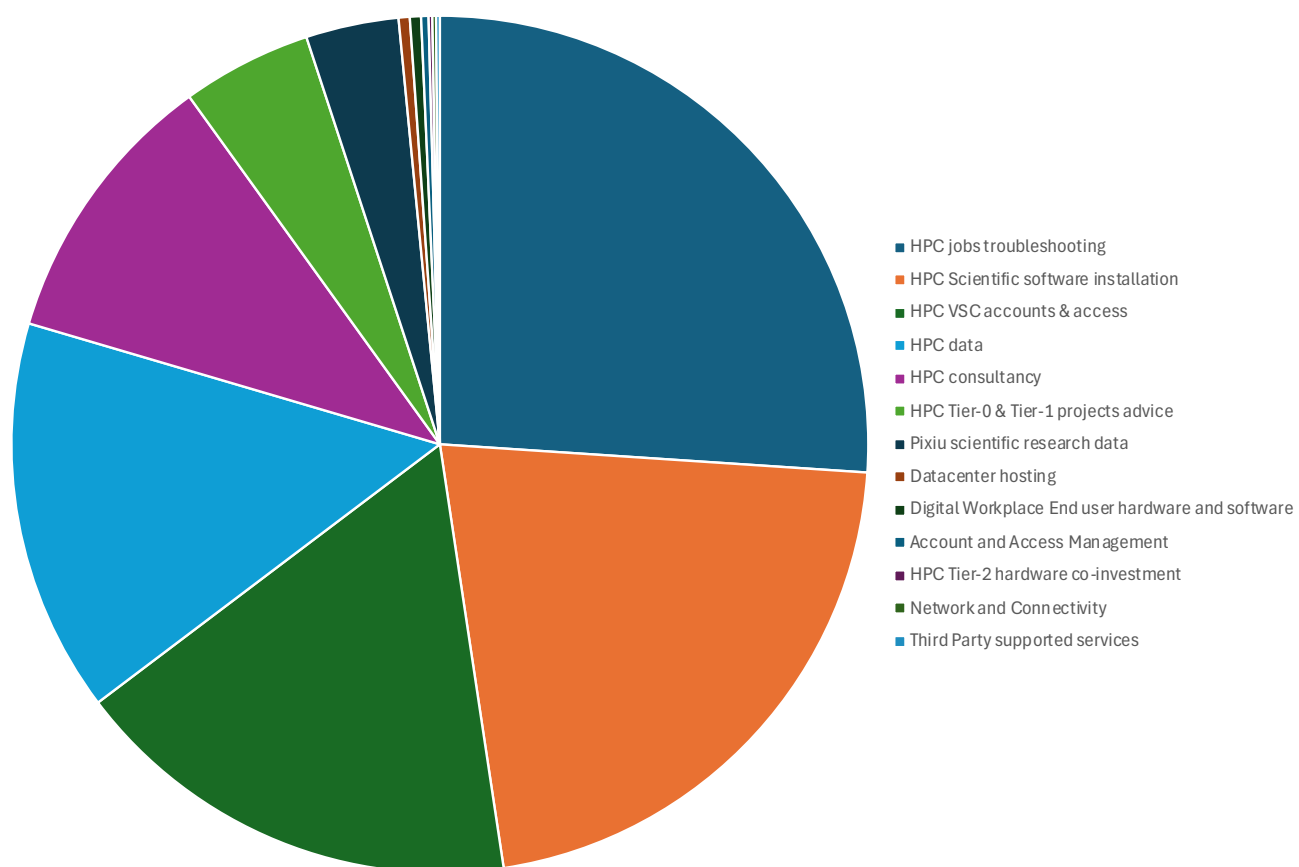


Toekennen rekentijd

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 en grid infrastructuur is kosteloos.

Gebruikersondersteuning

De VUB heeft een specifiek contactpunt voor alle HPC vragen op (hpc@vub.be). De vragen van gebruikers worden verdeeld over de verschillende aangeboden diensten. Vorig jaar zijn er in totaal 684 tickets voor Tier-2 en 189 voor grid verwerkt wat in lijn ligt met de voorbije jaren. Voor Tier-2 kunt u de verdeling over de services zien in de grafiek hieronder.



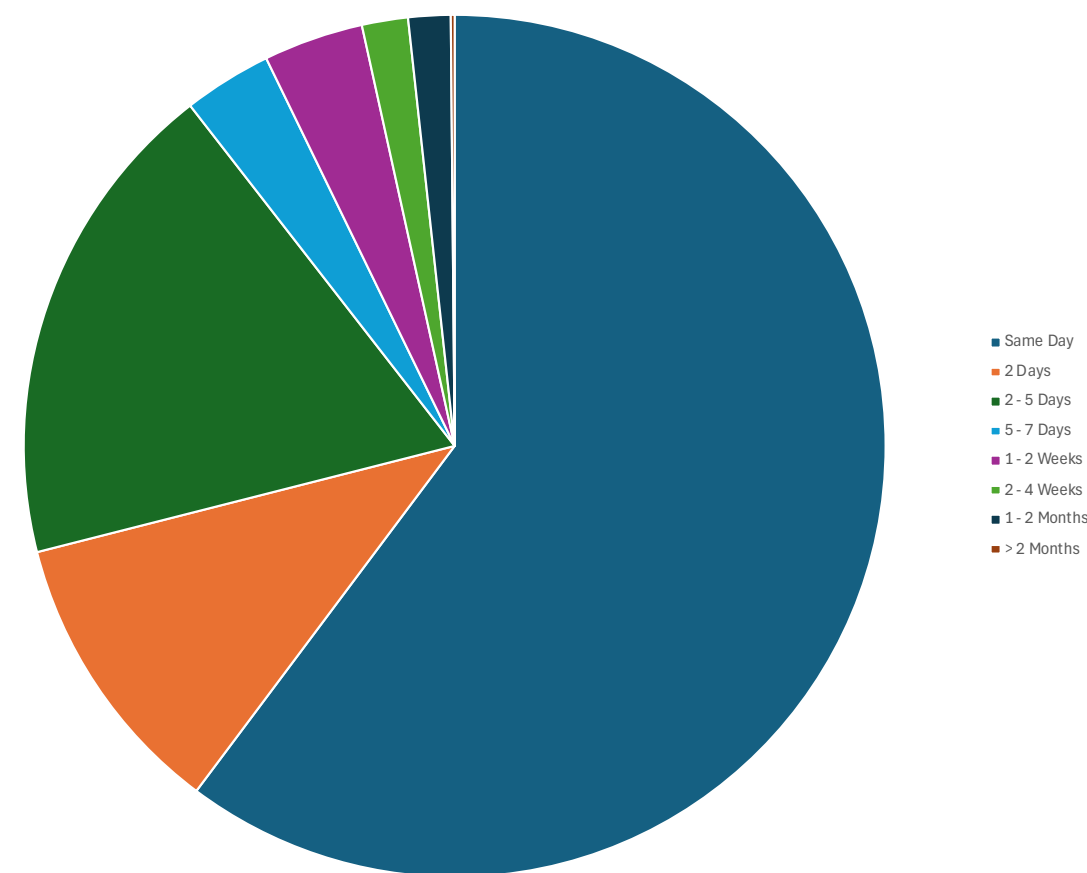
Afbeelding 24. Verdeling van tickets over de verschillende aangeboden diensten aan VUB

Voor grid is de verdeling:

Accounts	73
Software	14
Andere	102

Tabel 10. Overzicht behandelde grid tickets aan VUB.

De tijd tot oplossing uitgedrukt in werkuren voor Tier-2 vindt u hieronder:



Afbeelding 25. Oplossingstijd voor Tier-2 tickets aan VUB.

Het overgrote deel van de vragen wordt binnen een paar (werk)dagen opgelost.



Specifieke ondersteuning

Er worden tweemaal per jaar de cursussen “Introduction to Linux” en “Introduction to the use of HPC at the VUB” georganiseerd. Daarnaast zijn er verschillende vergaderingen geweest met onderzoeksgroepen om hen 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.

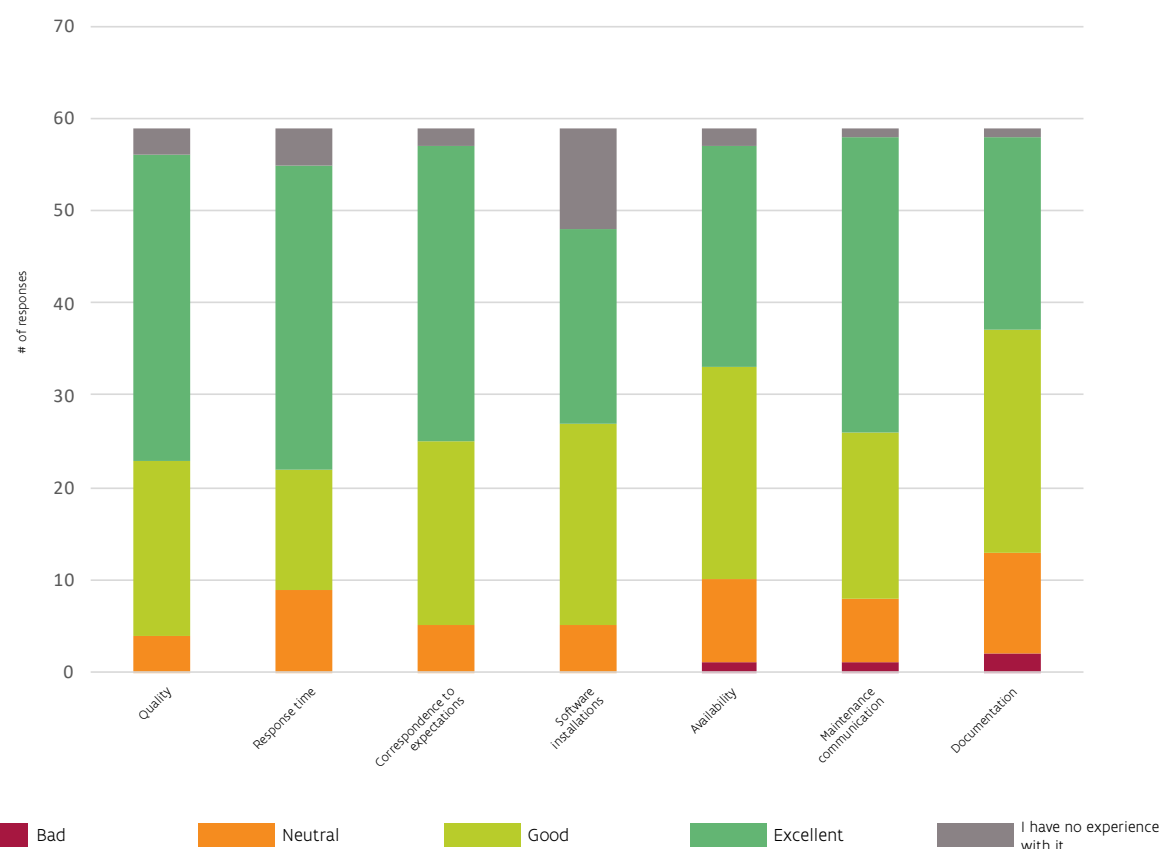
De klimaat groep van de VUB heeft verder nog specifieke ondersteuning gekregen om te migreren van BrENIAC naar Hortense.

De jaarlijkse user survey is vervangen door een VSC brede versie. Er waren 55 respondenten van de VUB. Over het algemeen zien we grote tevredenheid. Enkel voor de documentatie is de tevredenheid iets lager. De exacte oorzaak hiervan is niet meteen duidelijk.

De feedback van de gebruikers ging voornamelijk over de nood aan meer GPU rekenkracht en de wachttijd om jobs te starten. We willen in het komend jaar nog meer inzetten op het migreren van gebruikers richting Tier-1 en Tier-0 om aan deze klacht tegemoet te komen.

Showcase

Adrián Díaz en David Bickel van de onderzoeksgroep Bio2Byte geven een vak over Structural Biology aan masterstudenten. In het computationele luik van dit vak gebruiken ze o.a. AlphaFold en spreken ze over moleculaire dynamica simulaties. Voor dit luik hebben de studenten toegang nodig tot een HPC cluster maar elk jaar bleek dit een lastige opgave. Sinds de lancering van het notebook platform (<https://notebooks.hpc.vub.be>) en de automatische flow om VSC accounts aan te maken, gaat dit vlotter. Enkel via de webbrowser en met minimale inspanning kunnen studenten nu gebruikmaken van HPC kracht om de practica uit te voeren. Ze maken hierbij uitgebreid gebruik van de mogelijkheden van Jupyter notebooks om code en tekst met elkaar te combineren.



Afbeelding 26. Tier-2 bevraging VUB.

”

“Ons onderzoek was sterk afhankelijk van numerieke simulaties die een aanzienlijke hoeveelheid rekenkracht vereisten. Specifiek werden simulaties van prominences en hun vorming uitgevoerd op meer dan 300 cores. Deze berekeningen werden uitgevoerd met behulp van de geavanceerde Tier-2 (Genius) bronnen van de VSC.”

Veronika Jerčić
Plasma-astrophysics
KU Leuven

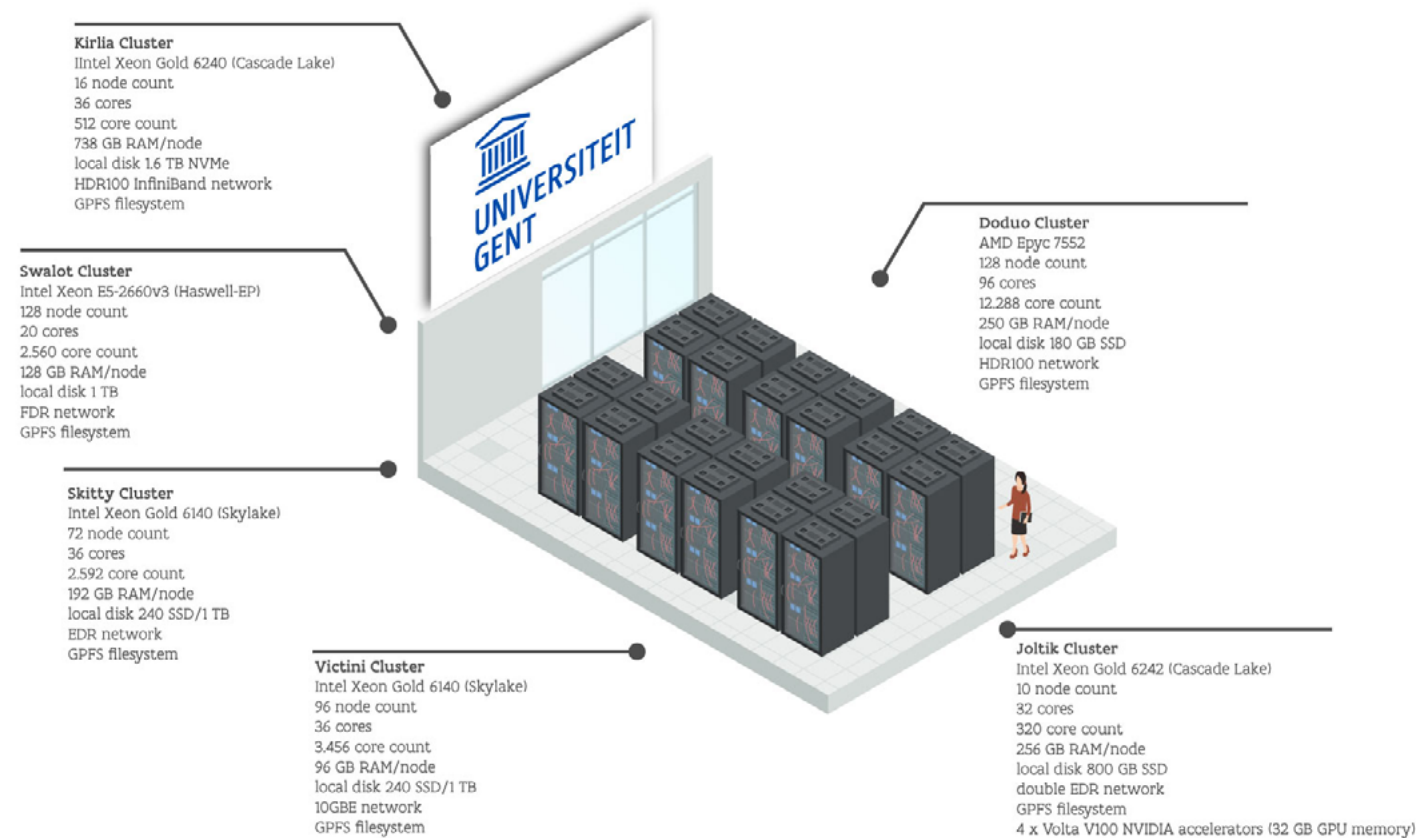
► Universiteit Gent

Beschikbare infrastructuur

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

- 4 CPU clusters
- 2 GPU clusters
- 1 interactieve debug cluster

In totaal 21.712 CPU cores, 92 GPU acceleratoren (NVIDIA)



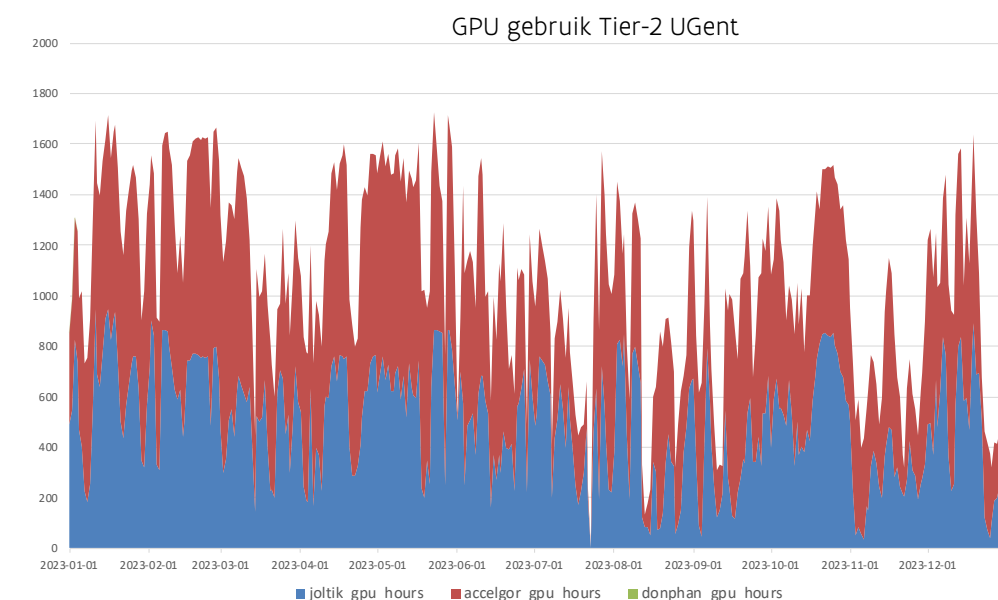
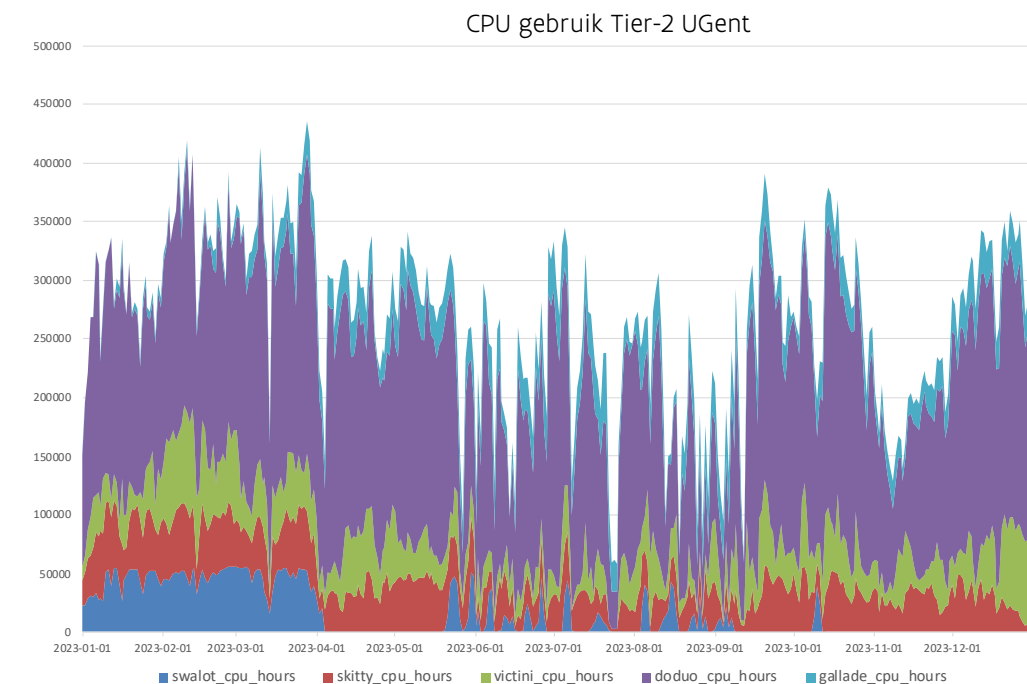
Afbeelding 27. Tier-2 infrastructuur UGent

In de loop van 2023 werden volgende infrastructuur- en servicewijzigingen doorgevoerd:

- Nieuwe cluster donphan werd geïntroduceerd. Dit is een debug/interactieve cluster ter vervanging van cluster slaking, die werd gedecommissioneerd.
- Nieuwe cluster gallade werd geïntroduceerd. Dit is een nieuwe large-memory cluster ter vervanging van cluster kirlia, die werd gedecommissioneerd.
- Een nieuwe service werd uitgerold, ter ondersteuning van lesgevers die gebruikmaken van de HPC infrastructuur van UGent. Een kick-off werd gehouden op 22 juni en documentatie werd opgetekend (https://docs.hpc.ugent.be/teaching_training/).

Gebruik en beschikbaarheid

Onderstaande figuren geven een overzicht van het day-per-day verbruik van rekestijd op de verschillende Tier-2 UGent clusters, opgesplitst volgens CPU gebruik en GPU gebruik. In totaal werd in 2023 101.969.556 CPU-uren aan rekestijd gebruikt, wat zou overeenkomen met 11.640 jaar rekenwerk op één CPU core. Er werd verder in totaal 395.358 GPU-uren gebruikt. Dit zou overeenkomen met 45 jaar rekenwerk op één GPU eenheid.



Afbeelding 28. Overzicht CPU- en GPU-gebruik op Tier-2 UGent

Er was een beperkt aantal onbeschikbaarheden van de Tier-2 infrastructuur in 2023:

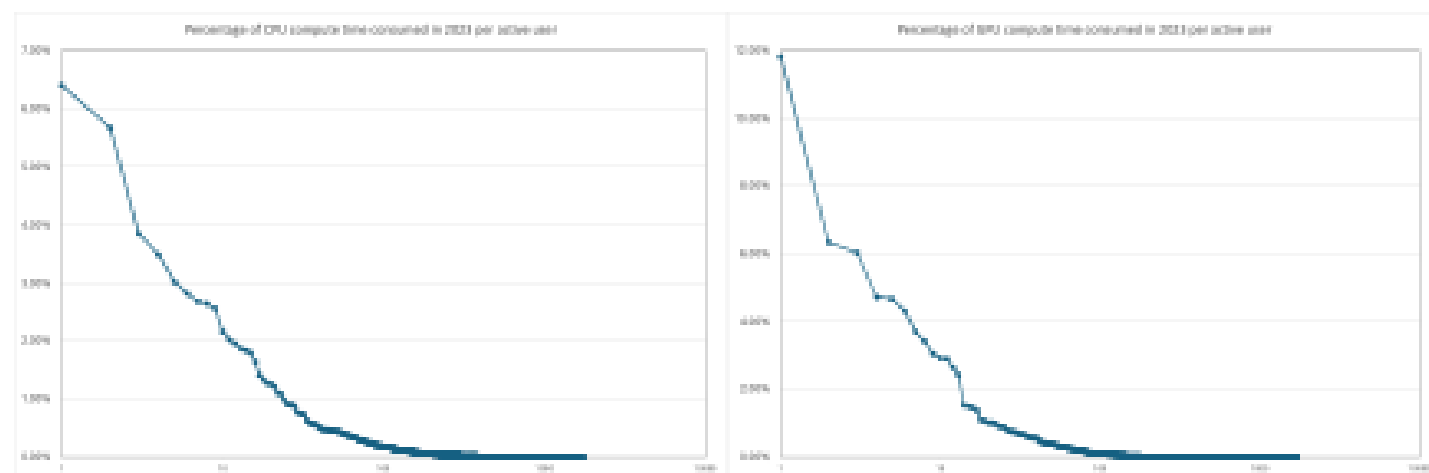
- 16/06/2023: alle clusters onbeschikbaar wegens stroomstoring (ongepland)
- 11-12/09/2023: vastlopen van Tier-2 gedeeld bestandssysteem (ongepland)

In totaal waren 1.700 gebruikers actief in 2023 op de Tier-2 UGent infrastructuur. Een groeiend aantal studenten maakte gebruik in het kader van lessen en scripties: 725 studenten. De verdeling volgens gebruik van rekenresources is:

	Procentueel aandeel in totaal van alle gebruikte resources	
	Onderzoekers	Studenten
CPU resources	93,44%	6,56%
GPU resources	89,67%	10,33%

Tabel 10. Aandeel van onderzoekers en studenten op Tier-2 UGent.

Zoals steeds werden de Tier-2 clusters zeer goed gebruikt door verscheidene power users, die verantwoordelijk waren voor een groot deel van het verbruik. Deze werden aangespoord om zeker een Tier-1 Compute aanvraag in te dienen. Een groeiende staart aan heel diverse gebruikers is ook duidelijk zichtbaar, zowel voor CPU (links) als voor GPU (rechts). Hier situeert zich een groot potentieel voor HPC gebruikers, in heel diverse wetenschappelijke domeinen.



Afbeelding 29. Procent of resp. CPU/GPU rekentijd gebruikt in 2023 per actieve gebruiker

Zoals afgesproken bij de oprichting van het VSC, kunnen Tier-2 clusters ook door andere instellingen worden gebruikt. Onderstaande tabel geeft een overzicht van het aantal gebruikers en hun aandeel in de totale rekentijd die werd verbruikt in 2023. Opsplitsing is gemaakt volgens de instellingen die consortium-partner zijn in het VSC en andere onderzoeksinstellingen (bv. VLIZ, RBINS, etc.) en bedrijven.

Aandeel in gebruik van Tier-2 UGent in 2023			
Instelling	#gebruikers	CPU gebruik	GPU gebruik
UAntwerpen	32	3,26%	6,75%
VUB	20	0,92%	4,10%
UGent	1.564	95,10%	86,89%
KU Leuven/UHasselt	35	0,08%	1,70%
Overige instellingen en bedrijven	49	0,65%	0,56%

Tabel 11. Aandeel van de verschillende gebruikers op Tier-2 UGent.

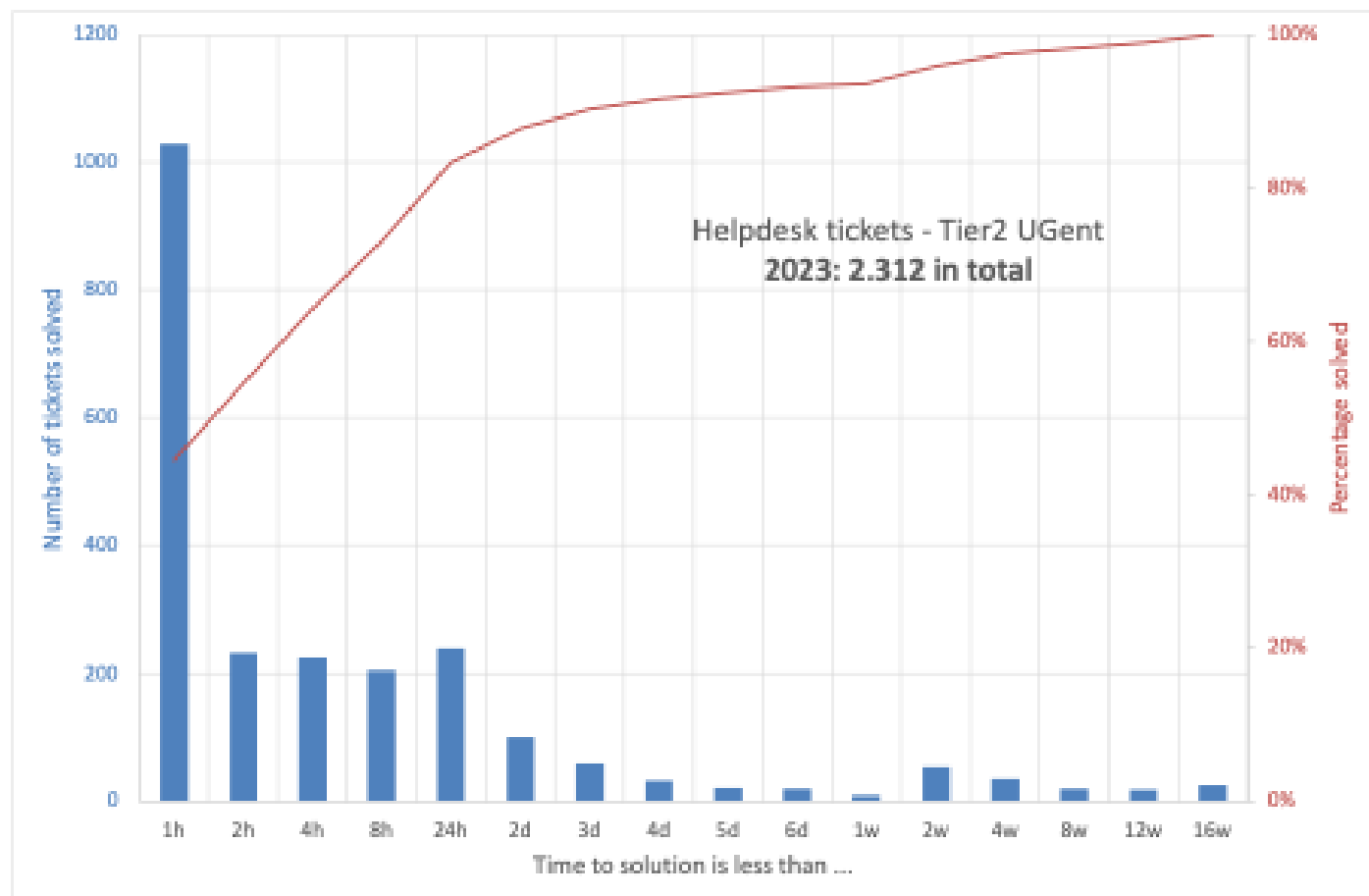
Helpdesk

Het gebruikersbeheer voor de Tier-2 UGent is getrieerd over een aantal helpdesk wachtrijen:

Wachtrij	#behandelde en gesloten tickets
Helpdesk Tier-2	2.312
Extern account management	82
Software installaties	293

Tabel 12. Overzicht behandelde tickets aan UGent.

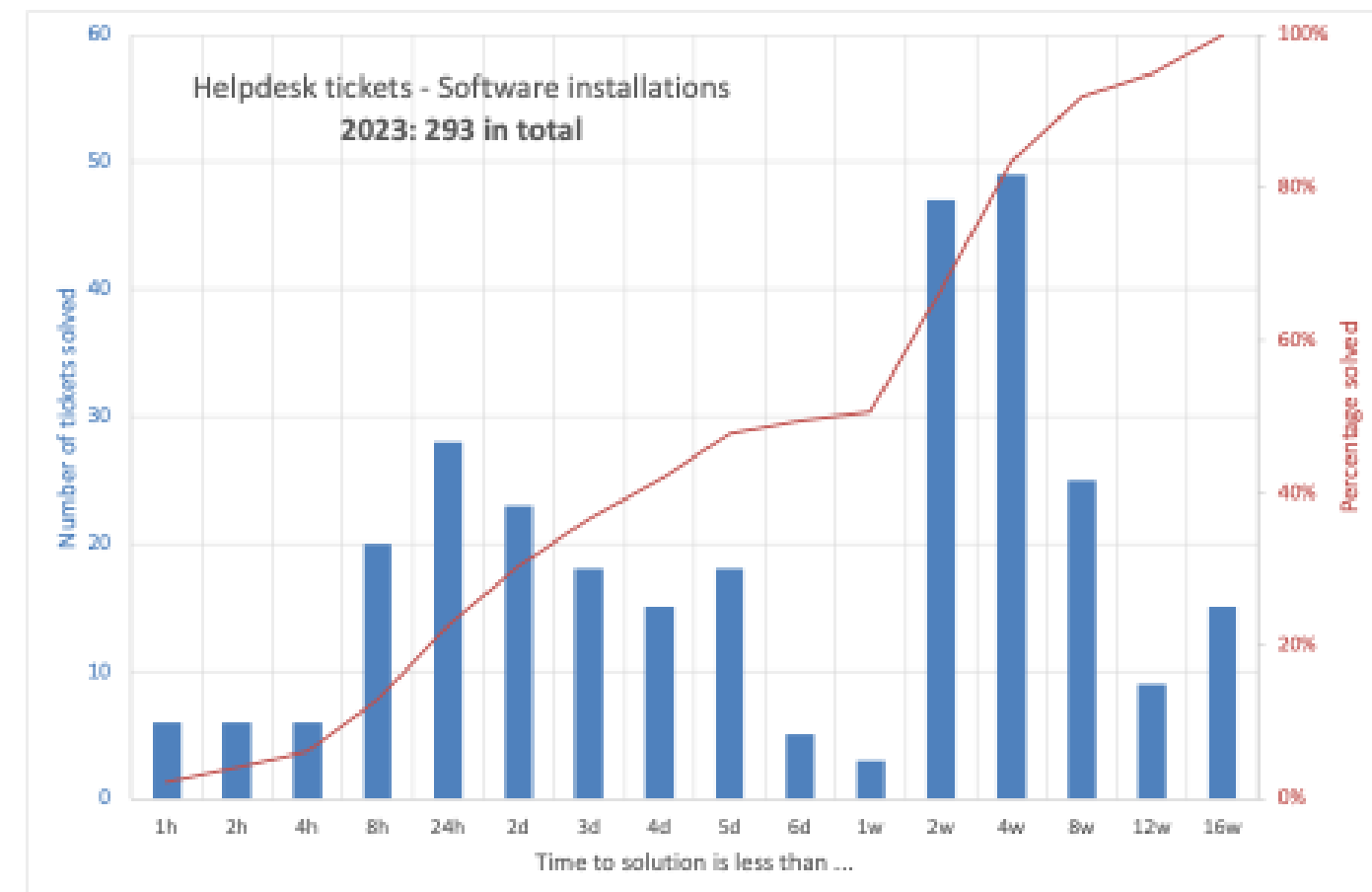
Via de dedicated Tier-2 helpdesk (hpc@ugent.be) kunnen gebruikers problemen melden of vragen stellen in verband met deze infrastructuur. Onderstaande grafiek toont een verdeling van de tijd waarbinnen elke aangemelde vraag werd opgelost. Ruim 80% van alle vragen werd binnen 24 uur opgelost.



Afbeelding 30. Oplossingstijd voor Tier-2 tickets aan UGent.

De Tier-2 van UGent werd in 2023 ook gebruikt door verscheidene bedrijven en onderzoeksinstellingen die niet inherent deel uitmaken van het VSC consortium, bv. INBO, ILVO, VLIZ, etc. T.b.v. het extern account management voor deze instellingen werden 82 technische vragen opgelost binnen de helpdesk wachtrij. In totaal gaat het over een 80-tal externe accounts, die niet-geautomatiseerd kunnen worden behandeld.

Zoals reeds vermeld in het stukje tekst over Tier-1 Compute, werden in 2023 in totaal 293 software installatie aanvragen behandeld door het UGent team, verdeeld voor Tier-1 Compute en Tier-2 UGent. Voortvloeiend uit deze vragen werden 1.313 software packages (inclusief dependencies) geïnstalleerd en/of geüpdatet t.b.v. Tier-2. De responstijd voor software installaties is merkbaar langer dan voor andere tickets, zoals weergegeven in onderstaande grafiek. Doorgaans vergt elke gecentraliseerde installatie de nodige R&D en is veel langere ontwikkeltijd nodig.

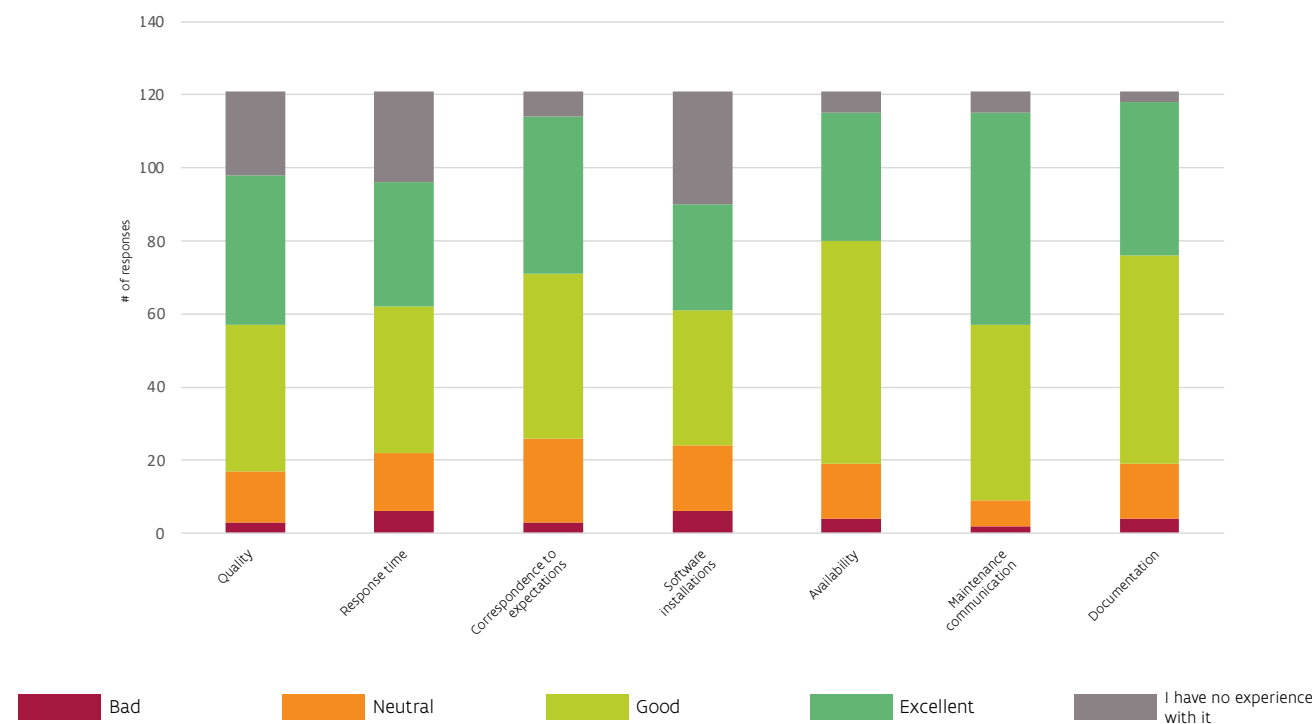


Afbeelding 31. Oplossingstijd voor aanvragen van softwareinstallaties aan UGent.



Gebruikersbevraging

In de VSC user survey eind 2023 werd ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-2 UGent infrastructuur en services bevestigd. 154 verschillende respondenten gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken.



Afbeelding 32. Tier-2 bevraging UGent.

Onderstaande componenten van de Tier-2 UGent infrastructuur werden door gebruikers als 'goed' of 'excellent' beoordeeld:

- 83% (81/98) - kwaliteit
- 77% (74/96) - responstijd
- 77% (88/114) - overeenstemming met verwachtingen
- 73% (66/90) - software installaties
- 83% (96/115) - beschikbaarheid
- 92% (106/115) - communicatie omtrent onderhoud
- 84% (99/118) - documentatie

Als mogelijke suggesties voor verbeteringen werden vermeld:

Infrastructuur

- Meer stabiele mounting van shares via kinit (2 respondenten)
- Meer clusters (1 respondent)
- Meer RAM per node (1 respondent)

Documentatie

- Duidelijkere vermelding van relatieve/absolute paden op verschillende clusters (1 respondent)
- Voorbeelden van job files (1 respondent)
- Hoe kan je zelf software/module installeren? (1 respondent)
- Hoe kan je werken met conda omgevingen? (1 respondent)
- Hoe kan je werken met VS Code? (1 respondent)

Software

- Jupyter notebooks voor R (2 respondenten)
- Snellere respons op software installatie aanvragen (4 respondenten)
- Eenvoudiger delen van software installaties in een VO (2 respondenten)
- Eenvoudiger deployen van Python deep learning applicaties (1 respondent)
- Een Abaqus desktop app (1 respondent)

Gebruikerservaring

- Hogere job walltime (2 respondenten)
- Info/impact op job/queue status overheen de verschillende clusters (2 respondenten)
- Grotere \$VSC_DATA folder (1 respondent)

Als mogelijke suggesties voor nieuwe ontwikkelingen werden vermeld:

- Specifieke data opslag voor gevoelige gegevens (1 respondent)
- Nextcloud-achtige interface met data op HPC (1 respondent)



► **KU Leuven/Hasselt**

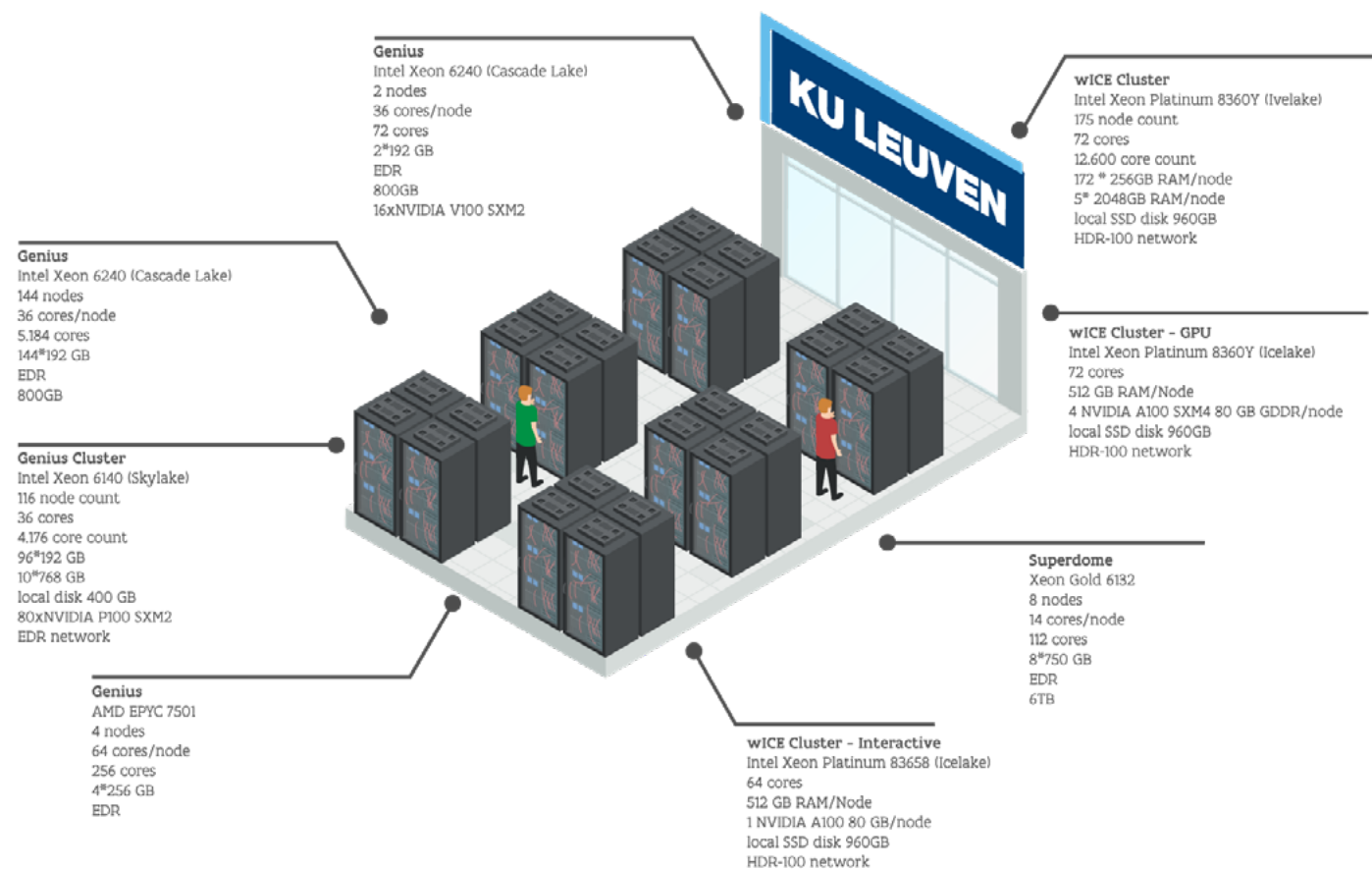
Beschikbare infrastructuur

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

De infrastructuur bestaat uit:

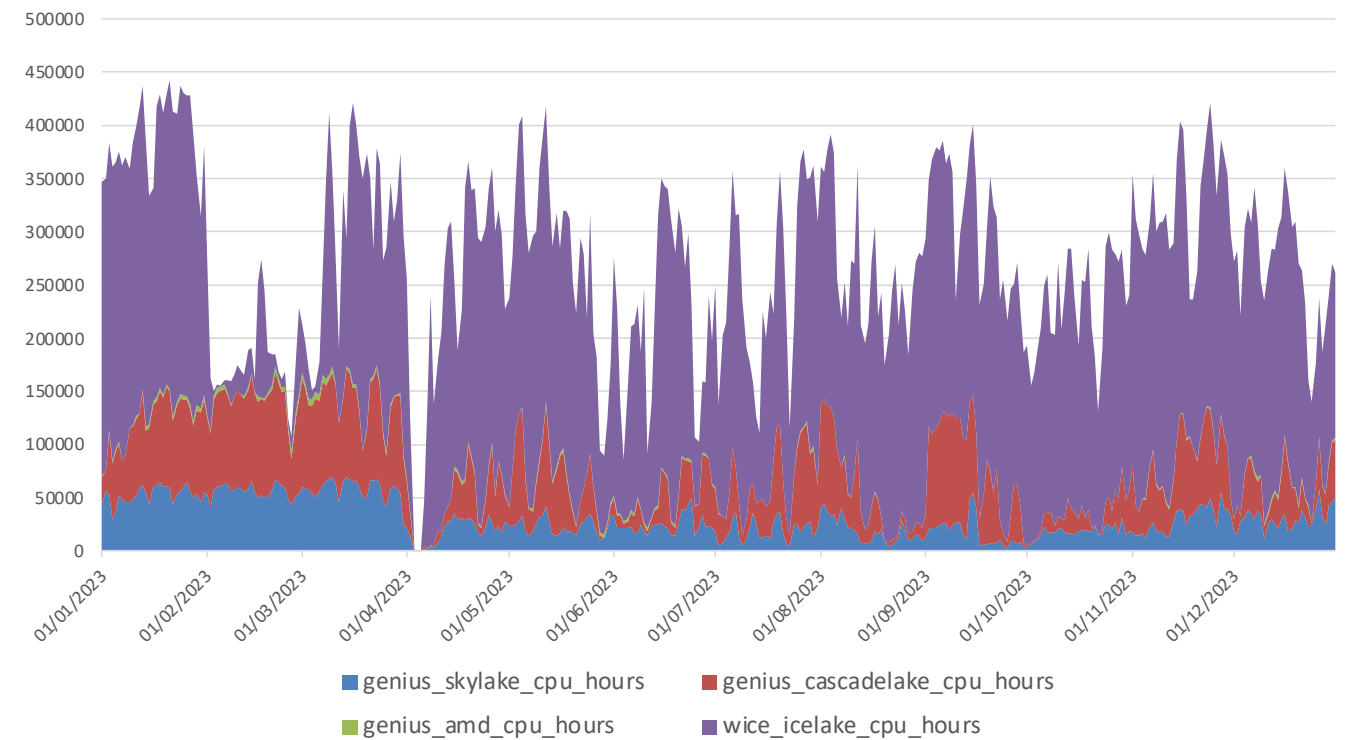
- 2 clusters, 6 partities
- 1.790 CPU TF, GPU 752 TF
- 23.194 CPU cores
- 120 TB geheugen
- 117 GPU devices / 368.640 GPU cores

Er waren in 2023 geen grote wijzigingen. De nieuwe cluster wICE werd in 2022 toegevoegd en is na een lange piloot periode in 2023 in productie gegaan. De capaciteit van de scratch storage werd uitgebreid in in 2023.



Afbeelding 33. Tier-2 infrastructuur KU Leuven – UHasselt

Exploitatie en gebruik

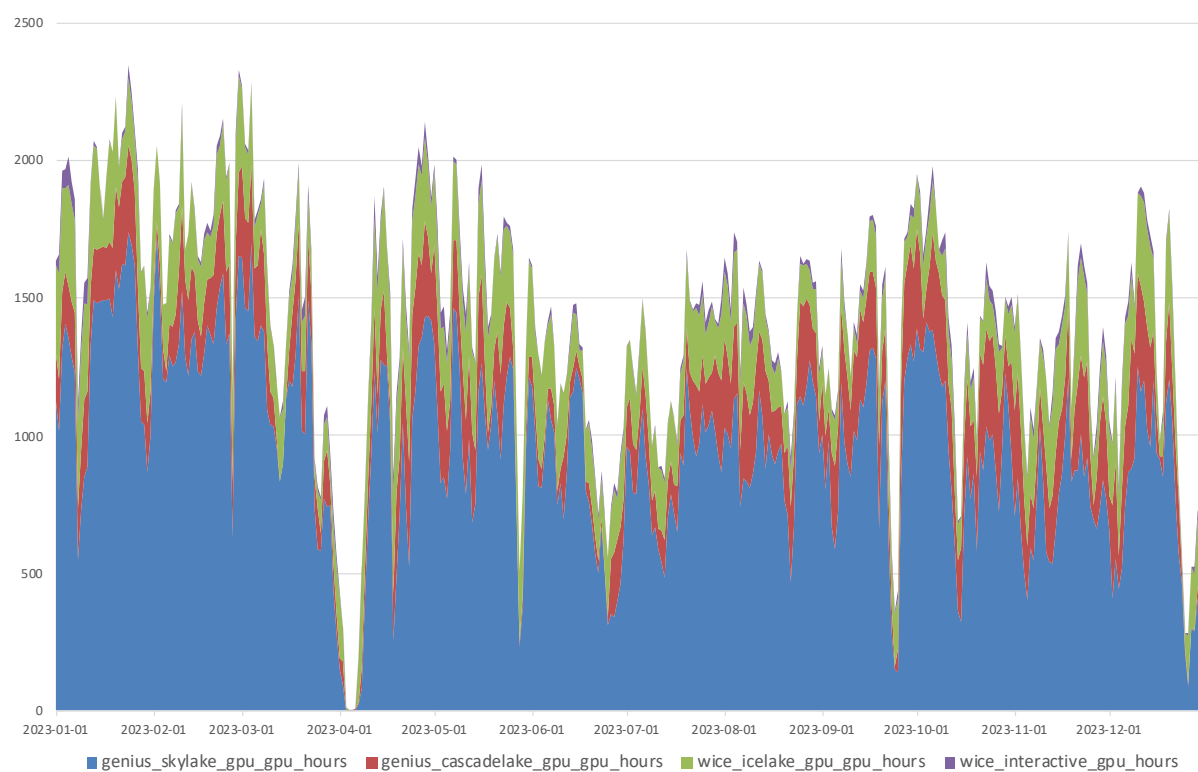


Afbeelding 34. Overzicht CPU-gebruik op Tier-2 KU Leuven/UHasselt

De grafiek met de bezetting van het Genius/wICE CPU gebruik toont dat de systemen continu in gebruik zijn. De uptime van de machine is zeer goed geweest. Enkel bij de upgrade van het scratch file systeem in april, gecombineerd met de volledige overgang naar Slurm, zijn de Tier-2 machines niet beschikbaar geweest. wICE was reeds opgezet met Slurm. De onderzoekers hadden dus al enkele maanden de tijd gehad om hun workflows om te zetten naar Slurm en deze op wICE uit te voeren. Na de update was het dan ook geen probleem voor de gebruikers om aan de slag te gaan met Genius.

Uit de grafiek kunnen ook een aantal belangrijke gebeurtenissen afgeleid worden. In februari/maart kan een daling van het gebruik van wICE geobserveerd worden. Dit is de overgang van piloot fase naar productie fase van de nieuwe Tier-2 cluster wICE. Zodra het nieuws van de productie fase goed bekend was bij de gebruikers, werd wICE weer snel gebruikt door alle onderzoekers. Verderop in de grafiek is het duidelijk dat het aandeel van Genius afneemt. Dit is nu de oudste machine. De onderzoekers hebben duidelijk een voorkeur voor de nieuwe machine die meer cores/node heeft en ook een betere performantie levert met geoptimaliseerde installaties van de software.

Op 25 september is er ook een daling te zien in het gebruik van Genius. Op deze dag werden alle Genius nodes van CentOS 7 naar Rocky Linux 8 geüpgraded. Deze upgrade was nodig vermits CentOS gewijzigd is van release strategie en versie 7 in 2024 niet langer updates gaat krijgen. De migratie van OS houdt ook in dat alle gebruikerssoftware op de cluster moet geherinstalleerd worden. Met de verschillende combinaties van softwareversie, compiler versie en CPU-versie was dit al snel een duizendtal installaties die ook getest moesten worden. Het hele proces is vlot verlopen en vermits de onderzoekers ook al op wICE met Rocky 8 werkten, is de overgang op Genius vlot verlopen en kon het systeem onmiddellijk terug in gebruik genomen worden.



Afbeelding 35. Overzicht GPU-gebruik op Tier-2 KU Leuven/UHasselt

De GPU's in de KU Leuven Tier-2 cluster zijn een essentieel onderdeel van de HPC omgeving en dat blijkt ook uit de bezetting. De dips in de grafiek houden verband met dezelfde updates die reeds beschreven werden bij het CPU gebruik. Bij de GPU grafiek kunnen nog enkele bijkomende kanttekeningen geplaatst worden. De rekencapaciteit van de verschillende GPU generaties is zeer snel toegenomen. Maar de AI-revolutie/hype heeft er ook voor gezorgd dat de prijzen voor GPU devices sterk zijn gestegen. De Genius Skylake partitie bevat het grootste aantal GPU's van onze Tier-2 omgeving (80). Deze zijn van de NVIDIA P100 generatie. WICE bevat slechts 16 GPU's (4 nodes met elk 4 GPU's) van de recentere A100 generatie. Afhankelijk van de workload kan een A100 vier tot tien keer meer rekenwerk verzetten dan een P100. Het belang van de A100 GPU's is dus groter dan wat op het eerste zicht op deze grafiek getoond wordt. In het eerste jaar in productie zijn er echter problemen geweest met twee van de GPU nodes. Bij één node duurde het langer dan een maand vooraleer het hardware probleem hersteld was. Vermits één node 25% van de beschikbare A100 resources is, heeft dit een zwaardere impact op gebruikcijfers.

Toekennen rekentijd

In 2023 waren 1.400 gebruikers actief op het systeem. Op de clusters van KU Leuven/UHasselt wordt gewerkt met een credit accounting systeem dat vervat zit in de scheduling software. In 2023 is dit overgegaan van de oude scheduler (Moab Accounting Manager – MAM) naar Slurm. Om een gelijkaardige gebruikerservaring te bieden, zijn de gebruikers commando's die in MAM beschikbaar waren omgezet naar een Slurm alternatief.

Nieuwe gebruikers krijgen rekentijd om vertrouwd te worden met het systeem en om eerste testen uit te voeren. Voor het echte werk wordt gebruik gemaakt van project credits. Dit systeem werkt verantwoord gebruik van de Tier-2 cluster in de hand. De hoofdonderzoeker is beheerder van het project. Hij kan onderzoekers toegang geven tot de rekentijd en ook de gebruikte rekentijd opvolgen. Bij het uitvoeren van een rekentaak wordt het project aangegeven waarop de credits aangerekend worden. De UHasselt onderzoekers werken ook met de projecten. Toekenning van rekentijd gebeurt door de lokale ondersteuning.

Docenten kunnen ook rekentijd aanvragen die nodig is in het kader van cursussen. Hiermee wordt de instapdrempel voor onderzoekers om over te stappen naar de Tier-2 infrastructuur zo laag mogelijk gehouden. Vervolgens kunnen credits aangevraagd worden via een eenvoudige procedure en tegen minimale kost. In 2023 werd de procedure voor docenten vereenvoudigd, zodat de accounts automatisch worden geprovisioneerd voor studenten in een cursus.

Gebruikersondersteuning

Vragen van gebruikers komen binnen via (hpcinfo@kuleuven.be).

In 2023 werden er ongeveer 3.500 vragen afgehandeld. 87% van deze tickets werden binnen de reactietijd beantwoord en vervolgens werden 91% van de tickets opgelost binnen de verwachte werktijd.

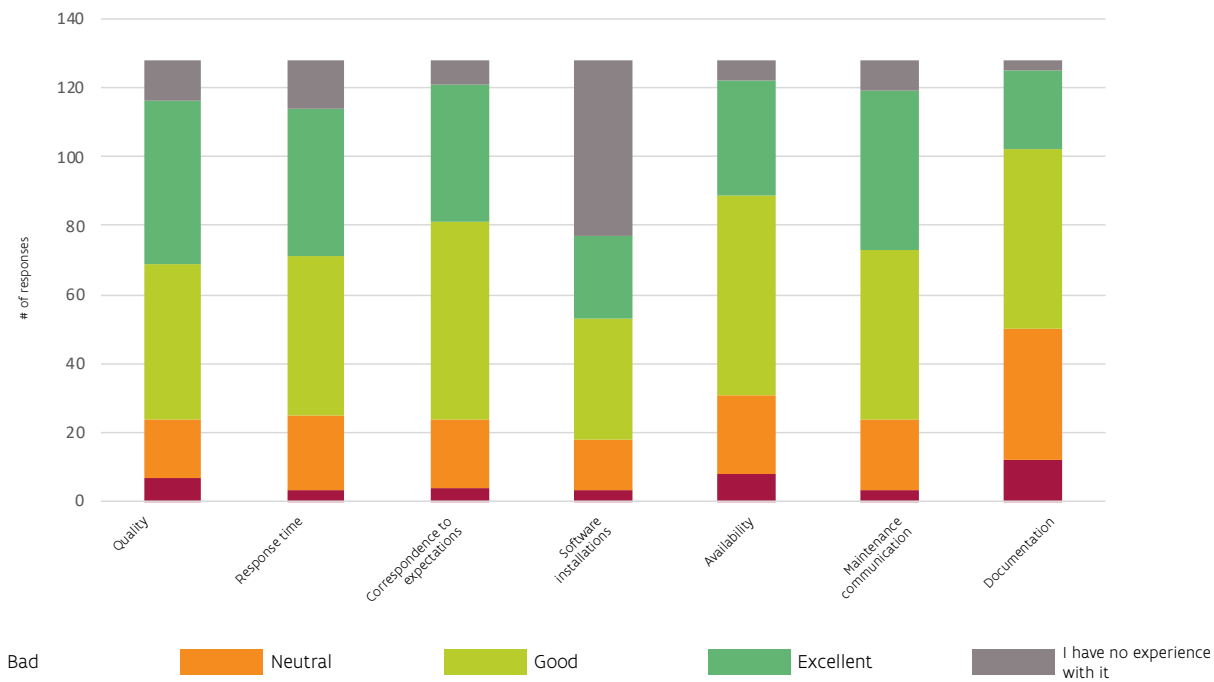
Type vraag	aantal
Accounts, toegang, project en storage management	2.109
User application support (incl software installaties)	681
System support	414
andere	346

Tabel 13. Overzicht behandelde tickets aan KU Leuven/UHasselt.

De diversiteit van de gebruikersgroep weerspiegelt zich ook in de vragen. Ze zijn afkomstig van een 200-tal verschillende onderzoeksgroepen.

Gebruikersbevraging

In de VSC user survey eind 2023 werd ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-2 KU Leuven/UHasselt infrastructuur en services bevestigd. 130 respondenten van KU Leuven en 12 van UHasselt gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken van de Tier-2 Cluster.



Afbeelding 36. Tier-2 bevraging KU Leuven/UHasselt.

Percentage van de gebruikers die goed of excellent antwoorden op de vragen :

- 79% kwaliteit
- 78% responstijd
- 80% overeenstemming met verwachtingen
- 76% software installaties
- 74% beschikbaarheid
- 81% communicatie omtrent onderhoud
- 60% documentatie

Belangrijk om hier mee te nemen zijn de opmerkingen over de documentatie. In een jaar met twee belangrijke veranderingen die impact hadden op de gebruikers (nieuwe scheduler en nieuw operating system), wordt meer in de documentatie gezocht. Er is een duidelijke vraag naar meer en specifieke voorbeelden.

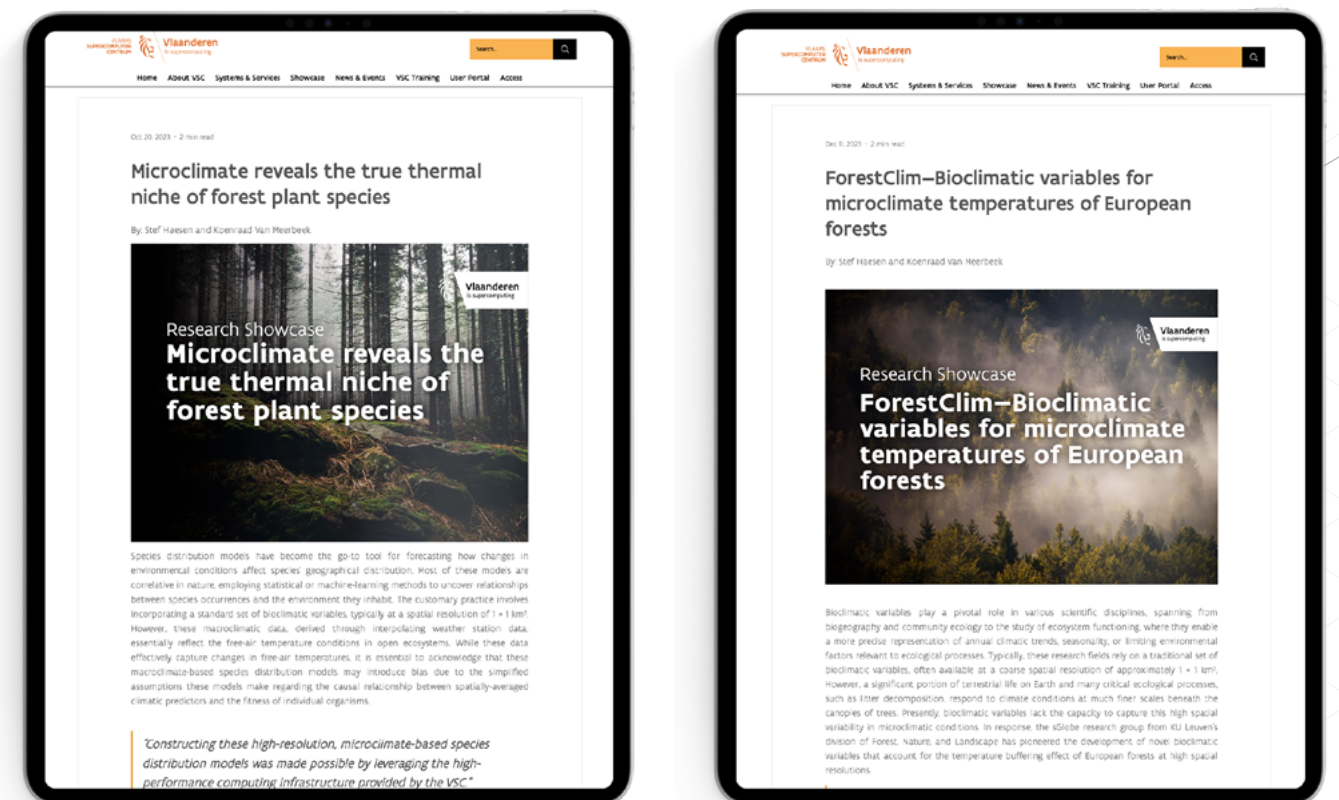
Specifieke ondersteuning

Met de Open OnDemand als webinterface is er een nieuwe toegang tot de cluster die het eenvoudiger kan maken voor startende gebruikers. Een specifiek initiatief werd genomen om dit naar groepen binnen Humane Wetenschappen te brengen.

Showcase

De toename van rekenkracht betekent dikwijls ook dat een onderzocht domein in een meer gedetailleerde resolutie kan gesimuleerd worden. Een mooi voorbeeld hiervan is het onderzoek naar het microklimaat in bossen. Voorheen werden gemiddelde temperaturen, geregistreerd in weerstations voor een 1 km x 1 km domein op een standaard hoogte van 2 m, gebruikt om het verspreidingsareaal van soorten te modelleren. Dit is een belangrijke methode om de impact van een veranderd leefmilieu te projecteren voor de verspreiding van een soort. Maar in bossen onder een bladerdek kan de temperatuur sterk verschillen van de gemeten temperatuur in een weerstation. Het sGlobe lab van KU Leuven Afdeling Bos, Natuur en Landschap heeft modellen uitgewerkt met microklimaat data (resolutie 25 m op 25 m) en toont aan dat verspreidingsmodellen accurater zijn dan de modellen gebaseerd om de macroklimaat data. Ze kunnen ook in het landschap kleine omgevingen detecteren waar een soort kan overleven, zelfs wanneer er wijzigingen zijn op macroklimaat gebied. De nieuwe modellen kunnen helpen bij het formuleren van beleidsbeslissingen ([Microclimate reveals the true thermal niche of forest plant species](#)).

De onderzoeksgroep heeft de 'ForestClim' dataset die hoge resolutie bioklimaat variabelen bevat, gepubliceerd, zodat ook andere onderzoekers deze verder kunnen gebruiken ([ForestClim—Bioclimatic variables for microclimate temperatures of European forests](#)).



Link naar het artikel

Link naar het artikel

Afbeelding 37. Beide artikelen gepubliceerd op de pagina "VSC Research Showcase".

Tier-0 ondersteuning

Vanaf 2023 is er binnen het VSC specifieke ondersteuning voor onderzoekers die willen gebruikmaken van de EuroHPC infrastructuur. In eerste instantie gaat het om LUMI (Finland), de pre-exascale machine waarin België/Vlaanderen mee heeft geïnvesteerd, maar ook gebruikers die op andere EuroHPC machines willen, worden ondersteund. In 2023 was één VTE actief. De zoektocht naar extra personeel loopt verder.

De beschikbare staf heeft, naast LUMI-specifieke cursussen, ook deelgenomen aan de “EuroHPC Virtual Workshop – AI on HPC”, “Best Practices in HPC training”, “Performance aware C++ programming” en opleidingen rond Julia en OpenFOAM.

Naar alle universiteiten werden volgende cursussen aangekondigd:

- LUMI – ontwikkelaars (14-17 februari, 30 mei-2 juni en 3-6 oktober),
- LUMI – gebruikers (9 en 16 mei en 21 september),
- LUMI – Hackathon (17-21 april @CSC en 27 november-1 december in Krakow).

Bij de hackathons waren geen deelnemers uit Vlaanderen, voor de andere cursussen wel met dikwijls nog personen op de wachtlijst.

Daarnaast werd ook de “Supercomputers for Starters” cursus verder uitgewerkt en aangevuld met materiaal relevant voor LUMI in het bijzonder en andere grote systemen in het algemeen.

In 2023 waren er drie oproepen voor rektijd op het Belgische aandeel op LUMI. Volgende aanvragen werden toegekend:

2023-03	Jelle Vekeman	UGent	Preparatory	Center for Molecular Modelling
	Ahmadreza Mehdipour	UGent	Preparatory	Center for Molecular Modelling
2023-04	Cem Sevik Jovana Vlahovic	UAntwerpen	Preparatory	Condensed Matter Theory
	Pieter Cnudde Massimo Bocus Jenna Mancuso	UGent	Regular	Center for Molecular Modelling
	Kenneth Hoste	UGent	Development	VSC
	Ahmadreza Mehdipour Alen Thykkoottahil Mathew Robin De Baker	UGent	Regular	Center for Molecular Modelling
	Olivier Beyens	UAntwerpen	Preparatory	Medicinal Chemistry
2023-05	Olivier Beyens	UAntwerpen	Preparatory	Medicinal Chemistry
	Olivier Beyens	UAntwerpen	Regular	Medicinal Chemistry
	Hans De Winter	UAntwerpen	Preparatory	Medicinal Chemistry

Tabel 14. Goedgekeurde LUMI-BE aanvragen in 2023.

Daarnaast heeft ook (minstens) een onderzoeker een aanvraag ingediend via de EuroHPC oproepen.

Aan onderzoekers werd de nodige feedback gegeven bij hun aanvragen, zowel voor als na indienen ervan.

Om meer gebruikers richting Tier-0 machines te krijgen, werd aan het aanvraagformulier voor Tier-1 de vraag toegevoegd of er interesse was voor GPU-rektijd op LUMI. Al die gebruikers werden gecontacteerd, en hun reacties varieerden: “We zijn er al mee bezig”, “We overwegen het nog, maar hebben er niet meteen tijd voor”, “Voorlopig geen interesse”. Het blijft in elk geval een aandachtspunt om meer gebruikers te bereiken. In totaal waren er in 2023 acht aanvragen van nieuwe gebruikers (die niet eerder LUMI hebben gebruikt), een aantal dat de volgende jaren hopelijk zal toenemen.

De mails die via het ticketingsysteem binnenkomen, vallen uiteen in twee grote categorieën: enerzijds aanvragen voor de LUMI-BE calls of hulp bij aanvragen voor EuroHPC calls, anderzijds vragen i.v.m. accounts op LUMI of specifieke problemen met het werken op LUMI.

Op 6 november werd op FWO de LUMI-BE gebruikersdag georganiseerd, samen met CÉCI. Naast presentaties van EuroHPC, PRACE, het national competence centre en LUMI, waren er zeven voordrachten door gebruikers:

- Josephine Wood (EuroHPC JU): EuroHPC JU: Leading the way in European Supercomputing
- Serge Bogaerts (PRACE): The Third Phase of PRACE - A User-centric Association
- Benoît Dompierre (NCC Belgium): EuroCC Belgium: Empowering the Belgian supercomputing community
- Kurt Lust (LUST): LUMI introduced: Opportunities and limitations
- Wouter Ryssens (ULB): Dense matter in the cosmos: nuclei, pasta and explosions
- Christophe Geuzaine (ULiège): GmshDDM on LUMI: first runs of a new solver for large scale time-harmonic flow acoustics problems
- Denis Haumont (RMI): Destination Earth: using LUMI to improve the prediction of extreme weather events
- Olivier Beyens (UAntwerpen): Design of novel DPP8 and DPP9 inhibitors using cosolvent molecular dynamics simulations
- Michel Rasquin (Cenaero): High fidelity flow simulations of the boundary layer transition on a high-pressure turbine vane in view of accurate predictions of the heat flux distribution
- Pierre Beaujean (UNamur): Pushing the boundaries of molecular simulations with LUMI: multi-million atoms simulations on a realistic dyed cell membrane
- Thomas Gillis (UCLouvain): Faster MPI: GPU-to-GPU Communication on Slingshot-11

Er waren 53 deelnemers. In het najaar van 2024 wordt de volgende gebruikersdag georganiseerd.

In opvolging van deze LUMI-BE gebruikersdag werd gekeken naar de MOCCA code van Wouter Ryssens (ULB). Die kampt met load balancing problemen die grootschalig rekenen beperken. Er wordt onderzocht hoe daaraan verholpen kan worden om ervaring op te doen met code modernization en parallelization op LUMI. Er wordt een performantie-analyse gepland in het voorjaar van 2024.

Opleidingen

Het VSC voorziet opleidingen die in eerste instantie gericht zijn op haar gebruikers of potentiële gebruikers. Dit zijn dus werknemers in de particuliere sector, de openbare diensten en, wat betreft de aantallen, voornamelijk onderzoekers verbonden aan de Vlaamse universitaire associaties en de diverse kennisinstellingen.

Geleidelijk aan merken we ook een, zij het nog klein, maar gestaag groeiend, aantal buitenlandse deelnemers aan onze trainingsactiviteiten. Dit is enerzijds toe te schrijven aan een grotere naamsbekendheid van het VSC in het buitenland, maar ook aan het netwerk van de National Competence Centers (NCCs) die samenwerken in het kader van EuroCC. Dit is zonder twijfel een positieve evolutie.

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 er efficiënt gebruik gemaakt wordt van deze infrastructuur. 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 CÉCI, 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 eerste aanbevolen aan wie nog niet over de nodige vaardigheden beschikt. De plaatselijke VSC-medewerkers leiden deze sessies. Dat biedt onderzoekers ook de kans om kennis te maken met de personen die de vragen beantwoorden die ze aan de helpdesk stellen. Dat neemt het onpersoonlijke en anonieme karakter van het e-mailverkeer weg en werkt dus drempelverlagend.

Om de sessies op het intermediate niveau te volgen, zijn de introductory-cursussen als voorkennis vereist. Deze sessies behandelen dan ook meer specifieke 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 meer gespecialiseerd en intensiever zijn dan de introductory-opleidingen, worden ze niet op elke VSC-site gegeven. Gebruikers worden dan ook aangemoedigd de opleidingen op een andere site bij te wonen. Veel van deze trainingen worden online aangeboden, zodat de geografische afstand geen rol meer speelt, wat drempelverlagend zou moeten werken.

Opleidingen op advanced niveau vereisen nog meer ervaring en zijn meer domeinspecifiek dan de intermediate opleidingen, die er ook vaak vereiste voorkennis voor vormen. Voor deze cursussen doet het VSC ook beroep op externe lesgevers. Vaak zijn ze verbonden aan EuroCC National Competence Centers of komen ze uit de industrie. In 2023 organiseerde het VSC samen met EuroCC@Belgium, het Belgische Competence Center, een training "Performance-aware C++". Het aanbod aan EuroCC en LUMI-trainingen werd geregeld onder de aandacht gebracht via sociale media en de website.

In totaal waren er 1.057 deelnemers aan 58 training sessies.

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. Vaak kaderen deze events in community building. Meer informatie hierover kan teruggevonden worden in die sectie.

Het VSC ontwikkelde twee MOOCs voor PRACE, "Defensive programming and debugging" en "Fortran for scientific computing". De eerste is niet langer beschikbaar en een vervangende training is in voorbereiding. "Fortran for scientific computing" wordt nog steeds aangeboden en werd reeds gevolgd door meer dan 1.500 deelnemers uit 98 landen.

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 2023 werd bijvoorbeeld een training over het gebruik van AI in software engineering gegeven.

VSC-staf volgde zelf ook trainingen online (een halve of een hele dag) en op ISC 2023 in Hamburg, Duitsland.

Via de website, interne mailinglists en sociale media worden de aankondigingen verspreid onder de (potentiële) gebruikers van de infrastructuur. Gerichte mailings vestigen de aandacht op specifieke opleidingen als die nuttig kunnen zijn voor een beperkte doelgroep of voor potentiële gebruikers.



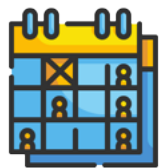
Afbeelding 38. VSC & EuroCC Belgium team op ISC 2023 Hamburg



VSC training 2023



1057
participants



57
training events

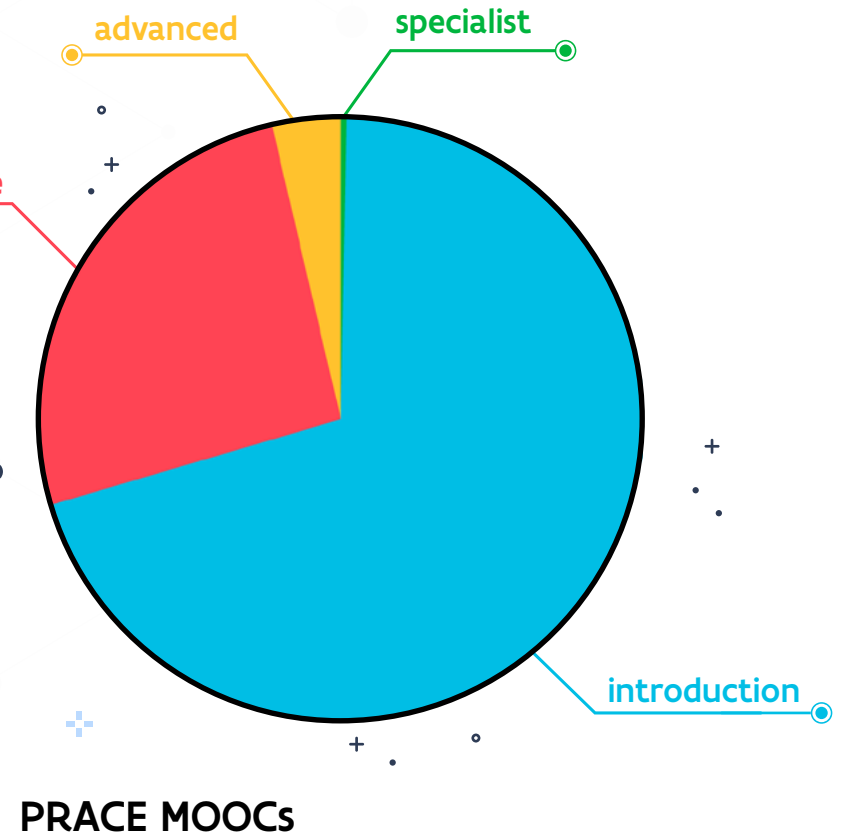


1 external
specialist

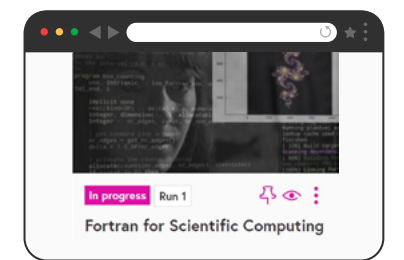
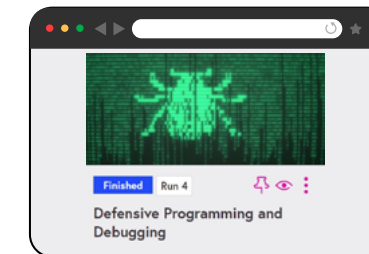


15
topics

- Machine learning + Debugging
- MPI + Fortran
- OpenMP + Optimization
- C++ + Data science
- C + Containers
- HPC intro + Software engineering
- Linux + Interactive computing
- Python +



PRACE MOOCs



Evenementen

VSC Gebruikersdag

Het evenement, dat plaatsvond op 24 oktober 2023 bij FWO, Hoek 38, Brussel, was een daverend succes. Het thema van de dag draaide om het optimaliseren van workflows voor maximale HPC-efficiëntie. We hebben dit evenement tot in de puntjes gepland met de aanwezigen in gedachten, waarbij we zorgden voor een diverse selectie van prikkelende lezingen en boeiende lightning talks. De dag bood een ongeëvenaarde gelegenheid om contact te maken en in gesprek te gaan met mede-VSC HPC-gebruikers, waarmee we onze toewijding aan het bevorderen van een sterke gemeenschap bevestigden.

Speakers



Frederik De Ceuster
KU Leuven
Scientific Programming in The Age of AI



Geert Jan Bex
VSC
ChatGPT for HPC



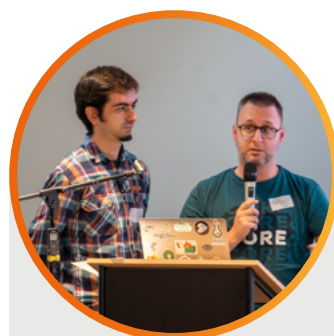
Frédéric Wautelet
University of Namur
Ansible Lightspeed



Ewald Pauwels, Jan Ooghe
VSC
Beyond traditional HPC: Tier-1 Cloud and Tier-1 Data, Open OnDemand, containers



Sebastian Munck
VIB Bio Imaging Core
Flanders Bioimaging – Towards efficient centralized research data management and analysis of bioimaging data



Alex Domingo, Kenneth Hoste
VSC
Best Practices for HPC or How to get your work done faster?

Ontdek de webpagina van VSC Gebruikersdag 2023

Lightning Talks

Hieronder een lijst van deelnemers aan de lightning talks. Klik op de titel van de presentatie om deze te bekijken.

Speaker	Institute	Title
Olivier Beyens	UAntwerpen	DPP9 inhibition design using cosolvent molecular dynamics simulations
Alexander Botzaki	VIB	VSC infrastructure as cornerstone for VIB technology training operations
Kurt De Grave	FlandersMake	RAISE: a challenge to hone your AI-on-HPC skills
Adrián Díaz	VUB	Interactive teaching in computational biology with Jupyter notebooks
Nicholas Janssen	KU Leuven	End-to-end simulations as an indispensable tool for the ESA PLATO space mission
Cécile Kremer	UHasselt	Evaluating COVID-19 testing policies in primary schools
Selma Mayda	UAntwerpen	From paintings to batteries: our DFT journey through CdS and Li batteries on Tier-1 and Tier-2
Derrick Muneki	VUB	Hydroclimatic data digitization campaign of the INERA archives in Yangambi, DRC & the state archives of Belgium
Jérôme Neiryck	KU Leuven	Freewind project
Jochen Schütz	UHasselt	High-fidelity parallel time-stepping schemes
Astrid Sierens	UHasselt & VUB	The role of venue-based superspreading in the transmission of infectious diseases
Lander Willem	UAntwerpen	Modeling COVID-19 in Belgium using the VSC HPC cluster
Max Yudayev	KU Leuven	How to train better time-series AI models, on bigger data, in shorter time, on smaller GPUs?
Jure Oder	VKI	Validation of liquid metal pool-type nuclear reactor CFD simulations

Tabel 15. Lijst met Lightning Talks-deelnemers (klik op de titel om de presentatie te bekijken).



Afbeelding 39. Sfeerbeelden van het evenement

In 2023 organiseerde VSC een aantal netwerkevenementen, zoals de Quantum Computing sessie en Data-driven Approaches in Life Sciences in samenwerking met Universiteit Antwerpen

VSC Lunch Session on Quantum Computing

In april 2023 organiseerde VSC een twee uur durende online Lunchsessie met als focus Quantum Computing, een snel opkomende technologie die problemen oplost die te complex zijn voor klassieke computers. De sessie, geleid door vooraanstaande experts op dit gebied, omvatte presentaties van Dr. Ariana Torres, Dr. Mikael Johansson en Dr. Koen Groenland. Dr. Torres besprak de fundamentele concepten en de huidige stand van zaken in quantum computing, Dr. Johansson verkende de integratie van quantum computers met high-performance computing via LUMI-Q, en Dr. Groenland onderzocht de potentiële toekomstige toepassingen van grootschalige, foutloze quantum computers. De sessie werd afgesloten met een boeiende Q&A sessie. Onder de deelnemers waren er onderzoekers, enthousiastelingen en overheidsfunctionarissen. Het evenement benadrukte de gezamenlijke reis naar het bereiken van quantumvoordeel en is beschikbaar om te bekijken op het YouTube-kanaal van VSC.



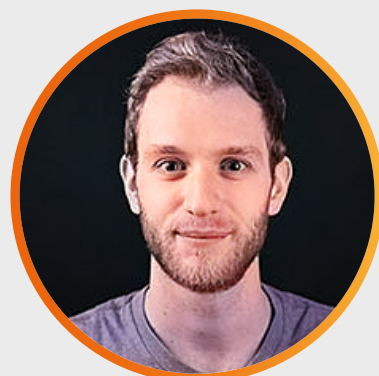
Afbeelding 40. Illustratie van de sessies



Dr. Ariana Torres
SURF



Dr. Mikael Johansson
LUMI-Q / CSC - IT



Dr. Koen Groenland
QuSoft / Quantum
Amsterdam / UvA



Dag van de Wetenschap

Afgelopen november gingen we op een buitengewone reis van innovatie, waarbij we drie baanbrekende use cases presenteerden die mogelijk werden gemaakt door onze ultramoderne supercomputers. Aan de Universiteit Hasselt fascineerde het Innoptus Solar Team de aanwezigen met hun zonneauto en benadrukte daarmee de toekomst van groene energie en supercomputing. Het Museum van de Universiteit Gent verdiepte zich in geavanceerde klimaatmodellen en onthulde hoe onze supercomputers de geheimen van de atmosfeer met bliksemsnelle snelheid ontcijferen. In het UFO-gebouw van de Universiteit Gent demonstreerden we onze toewijding aan duurzaamheid met innovatieve recyclingprocessen en biologisch afbreekbare kunststoffen.



Afbeelding 41. Illustratie van de publicatie van het evenement op de sociale media (links) en sfeerbeelden van de DWW in UHasselt (rechts)



Bovendien deelde onze VSC-collega Geert Jan Bex inzichten over supercomputers en weersvoorspellingen in een live podcast tijdens de Universiteit van Vlaanderen-activiteit. Het evenement was een getuigenis van onze toewijding aan ontdekking en opwinding in de wereld van supercomputing.

Luister hier naar de podcast



Outreach

VSC in de pers

Het VSC maakt aanzienlijke wetenschappelijke vooruitgang mogelijk in Vlaanderen en daarbuiten. Dankzij zijn prominente status hebben we in 2023 media-aandacht gekregen in verschillende nationale en internationale publicaties. Deze aandacht richt zich voornamelijk op de uitbreiding van Tier-1 aan de VUB, wat zowel de academische wereld als de industrie ten goede zal komen.

Op 9 november 2023 heeft de website **Techzine Europe** gepubliceerd dat België een nieuwe Tier-1 supercomputer krijgt. Deze wordt geplaatst in Brussel, maar zal toegankelijk zijn voor alle wetenschappers in Vlaanderen.

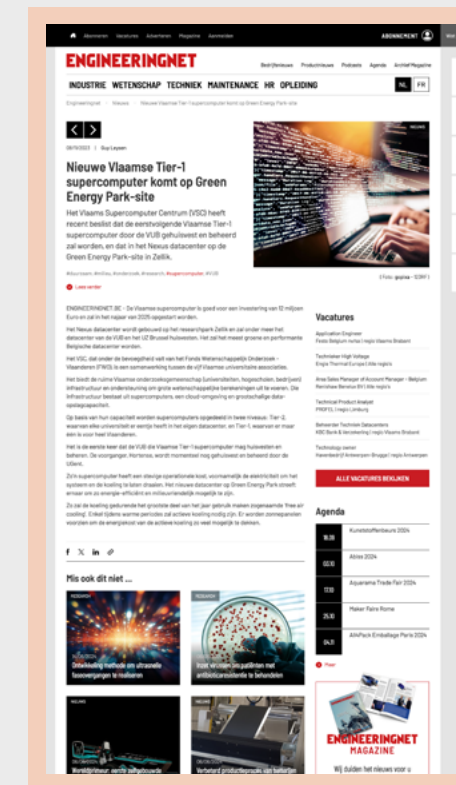
Het zal tot de herfst van 2025 duren voordat de supercomputer beschikbaar komt. Deze zal gevestigd zijn in het Green Energy Park van de Vrije Universiteit Brussel. Het project vereist een totale investering van 12 miljoen euro, waarbij de universiteit deelt in de kosten.

[Link naar het artikel](#)



Engineeringnet.be heeft gemeld dat het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) heeft besloten dat de volgende Vlaamse Tier-1 supercomputer gehuisvest en beheerd zal worden door de Vrije Universiteit Brussel (VUB). De supercomputer zal gevestigd worden in het Nexus datacenter op de Green Energy Park-site in Zellik. Deze investering van 12 miljoen euro zal naar verwachting operationeel zijn in het najaar van 2025. Het Nexus datacenter, gelegen op het researchpark Zellik, zal onder andere dienen als datacenter voor de VUB en het UZ Brussel. Het wordt gepositioneerd als het meest groene en performante datacenter in België.

[Link naar het artikel](#)



Het artikel op **Computable.be**, gepubliceerd op 8 november, meldt dat de Vrije Universiteit Brussel (VUB) in het najaar van 2025 de Vlaamse Tier-1-supercomputer zal opstarten in het Nexus-datacenter in Zellik. Het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) heeft besloten dat de VUB verantwoordelijk zal zijn voor het huisvesten en onderhouden van deze supercomputer, die een investering van twaalf miljoen euro vertegenwoordigt.

[Link naar het artikel](#)



Het artikel van **DataNews** van 8 november bespreekt de voorbereidingen van het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) voor hun volgende Tier-1 supercomputer, die bij de Vrije Universiteit Brussel (VUB) zal worden gehuisvest. Deze supercomputer zal beschikbaar zijn voor alle wetenschappers en is gepland om operationeel te zijn rond oktober-november 2025, gevestigd op de Green Energy Park site in Zellik. De totale investering voor de supercomputer bedraagt 12 miljoen euro. De specificaties van de machine en de bouwer zijn nog niet bekend, aangezien de Europese aanbesteding voor de bouw nog moet plaatsvinden. Ward Poelmans, afdelingshoofd van Scientific Data and Compute bij de VUB, vermeldt dat de aanbesteding tegen eind 2024 of begin 2025 zal worden afgerond.

Hoewel er veel aandacht is voor kunstmatige intelligentie en taalmodellen, blijft de nieuwe supercomputer een algemene machine. Dit komt omdat de kosten hoog zijn en de machine door alle Vlaamse universiteiten gebruikt zal worden.

[Link naar het artikel](#)

VSC Website

Inleiding

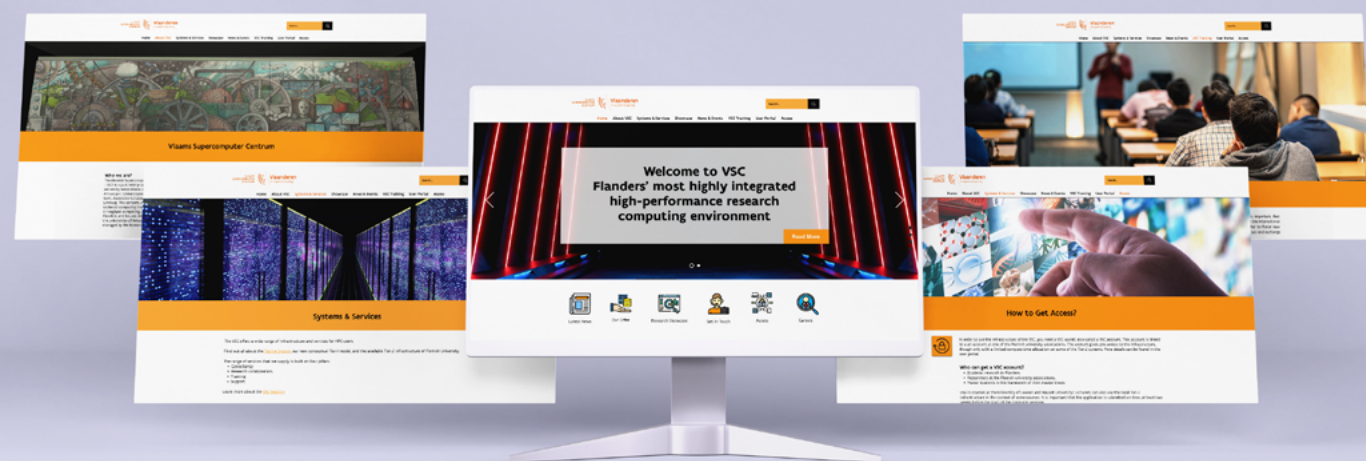
De VSC website (www.vscentrum.be) is een cruciaal platform dat de onderzoeksgemeenschap ondersteunt door uitgebreide informatie te verstrekken over onze supercomputerbronnen, diensten en prestaties.

Website doelstellingen

Onze website heeft als doel gemakkelijke toegang tot VSC-bronnen te faciliteren, onderzoekers te ondersteunen met gedetailleerde documentatie en de gemeenschap op de hoogte te houden van het laatste nieuws en de laatste evenementen.

Belangrijke kenmerken en secties

- **Homepagina:** Krijg een dynamisch overzicht van VSC-activiteiten.
- **Over Ons:** Leer meer over onze missie, visie en geschiedenis.
- **Diensten:** Verken onze supercomputerdiensten en bronnen.
- **Toegang en accounts:** Stapsgewijze gids voor het verkrijgen van toegang.
- **Ondersteuning en documentatie:** Toegang tot gebruikershandleidingen, gidsen en helpdesk services.
- **Nieuws en evenementen:** Blijf op de hoogte van ons laatste nieuws en aankondigingen van evenementen.
- **Succesverhalen en “Research Showcase”:** Lees over succesvolle onderzoeksprojecten die door VSC zijn gefaciliteerd.
- **Contactinformatie:** Ontdek hoe u contact met ons kunt opnemen.



Gebruikersbetrokkenheid

Vorig jaar heeft onze website aanzienlijke gebruikersbetrokkenheid gezien, met meer dan 26.129 bezoekers en 57.277 paginaweergaven.

Technische aspecten

Onze website wordt ondersteund door een robuuste technische infrastructuur, die betrouwbaarheid en prestaties waarborgt. In het afgelopen jaar hebben we verschillende updates geïmplementeerd om de functionaliteit en beveiliging te verbeteren.

Toegankelijkheid en bruikbaarheid

Wij zetten ons in om onze website toegankelijk te maken voor alle gebruikers, met een gebruiksvriendelijk ontwerp en gemakkelijke navigatie.

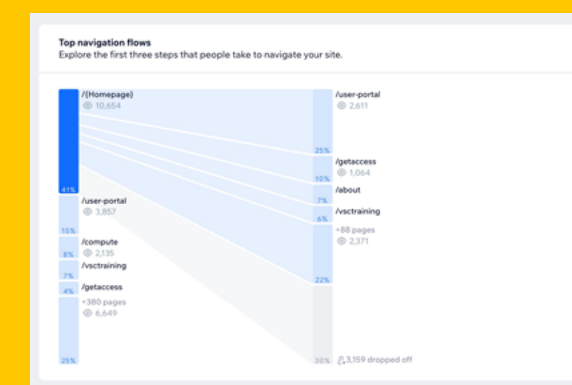
Toekomstplannen

Vooruitkijkend zijn we van plan om nieuwe functies te introduceren en de gebruikerservaring verder te verbeteren. Ons doel is om voortdurend in te spelen op de behoeften van onze gemeenschap en de best mogelijke ondersteuning te bieden.

► Conclusie

De VSC-website is een essentieel hulpmiddel voor onze onderzoeksgemeenschap en biedt waardevolle bronnen en informatie. We moedigen iedereen aan om (www.vscentrum.be) te bezoeken voor de laatste updates en ondersteuning.

 www.vscentrum.be





Sociale media-engagement en gemeenschapsbetrokkenheid

Ons bereik uitbreiden via sociale media

In het huidige digitale tijdperk spelen sociale media een cruciale rol in het verbinden met onze gemeenschap en het promoten van innovaties in high-performance computing (HPC). Het Vlaams Supercomputer Centrum heeft zijn aanwezigheid op sociale media aanzienlijk vergroot en maakt gebruik van platformen zoals LinkedIn en YouTube om betrokkenheid te creëren bij HPC-enthousiastelingen, onderzoekers en professionals uit de industrie.

Afbeelding 42. VSC LinkedIn rollupbanner

Groei en impact van LinkedIn

Onze [LinkedIn-pagina](#) is een centraal platform geworden voor het delen van de laatste updates, doorbraken in onderzoek en aankondigingen van evenementen. In het afgelopen jaar hebben we een substantiële groei van ons aantal volgers gezien, wat ons vermogen heeft vergroot om belangrijke informatie te verspreiden en professionele connecties binnen de HPC-gemeenschap te bevorderen. Regelmatige berichten over vorderingen, gebruikersverhalen en samenwerkingsmogelijkheden hebben niet alleen de zichtbaarheid vergroot, maar ook een divers publiek aangetrokken dat geïnteresseerd is in ontwikkelingen binnen HPC.

YouTube Kanaal: een visuele poort naar HPC

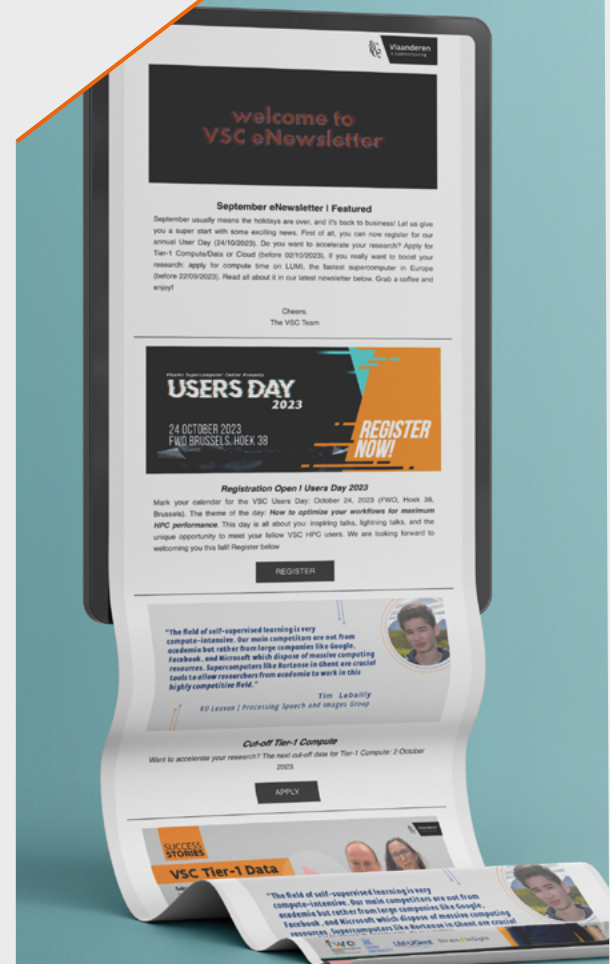
Het VSC YouTube-kanaal ([VSC YouTube](#)) dient als een dynamisch platform voor het delen van educatieve inhoud, webinars en opnames van evenementen. Onze videoinhoud biedt een toegankelijke manier voor gebruikers om complexe HPC-concepten te begrijpen, toepassingen van supercomputing te zien en op de hoogte te blijven van VSC-activiteiten. De groeiende abonneebasis van het kanaal is een bewijs van de waarde van visueel leren en de boeiende aard van onze inhoud.

De gemeenschap betrekken via de VSC nieuwsbrief

De VSC-nieuwsbrief, die elk kwartaal wordt verstuurd, is een essentieel hulpmiddel geworden voor het onderhouden van een continue verbinding met onze abonnees. Elke editie zit boordevol inzichten in recente HPC-projecten, aankomende evenementen en succesverhalen van onze gebruikers. De nieuwsbrief houdt niet alleen ons publiek geïnformeerd, maar moedigt ook actieve deelname en feedback aan, waardoor een gevoel van verbondenheid en gemeenschap onder VSC-gebruikers wordt bevorderd.

Groeiend Aantal Abonnees

Onze lijst met nieuwsbriefabonnees groeit gestaag, wat de toenemende interesse en betrokkenheid binnen de HPC-gemeenschap weerspiegelt. Het bereik van de nieuwsbrief zorgt ervoor dat onze laatste ontwikkelingen en kansen effectief worden gecommuniceerd, wat samenwerking en innovatie stimuleert.



Research Showcase

Geïntroduceerd in 2022, dient de “Research Showcase” pagina op de website van VSC als een levendige tentoonstelling van het diverse en baanbrekende onderzoek dat wordt gefaciliteerd door de geavanceerde infrastructuur van VSC. Dit dynamische blog-platform bevat op maat gemaakte versies van originele onderzoeksartikelen, zorgvuldig aangepast door de onderzoeksauteur om de cruciale rol van VSC in deze innovatieve projecten te benadrukken.

De voorgestelde onderzoeksprojecten beslaan alle disciplines en tonen de brede waaier van wetenschappelijke onderzoek en technologische vooruitgang die door VSC worden ondersteund. Elk uitgelicht onderzoek toont niet alleen de innovatieve methoden en belangrijke bevindingen van de onderzoekers, maar illustreert ook hoe de middelen van VSC essentieel waren bij het overwinnen van complexe computationele uitdagingen en het bereiken van onderzoeksdoelen.



“De langeafstandskoppeling maakt de numerieke integratie van deze vergelijkingen zeer uitdagend, en het grote aantal simulaties dat voor dit project nodig is, zou niet mogelijk zijn geweest zonder de HPC-infrastructuur van het Vlaams Supercomputer Centrum.”

Robin Msiska
UGent

Via deze pagina onderstreept VSC zijn inzet voor het bevorderen van baanbrekend onderzoek en het bieden van ongeëvenaarde ondersteuning aan de academische en wetenschappelijke gemeenschap. Deze pagina viert niet alleen de prestaties van onderzoekers, maar inspireert ook toekomstige samenwerkingen en ontdekkingen, en versterkt zo de positie van VSC als hoeksteen van wetenschappelijke vooruitgang in Vlaanderen en daarbuiten.

ontdek de pagina van
Research Showcase

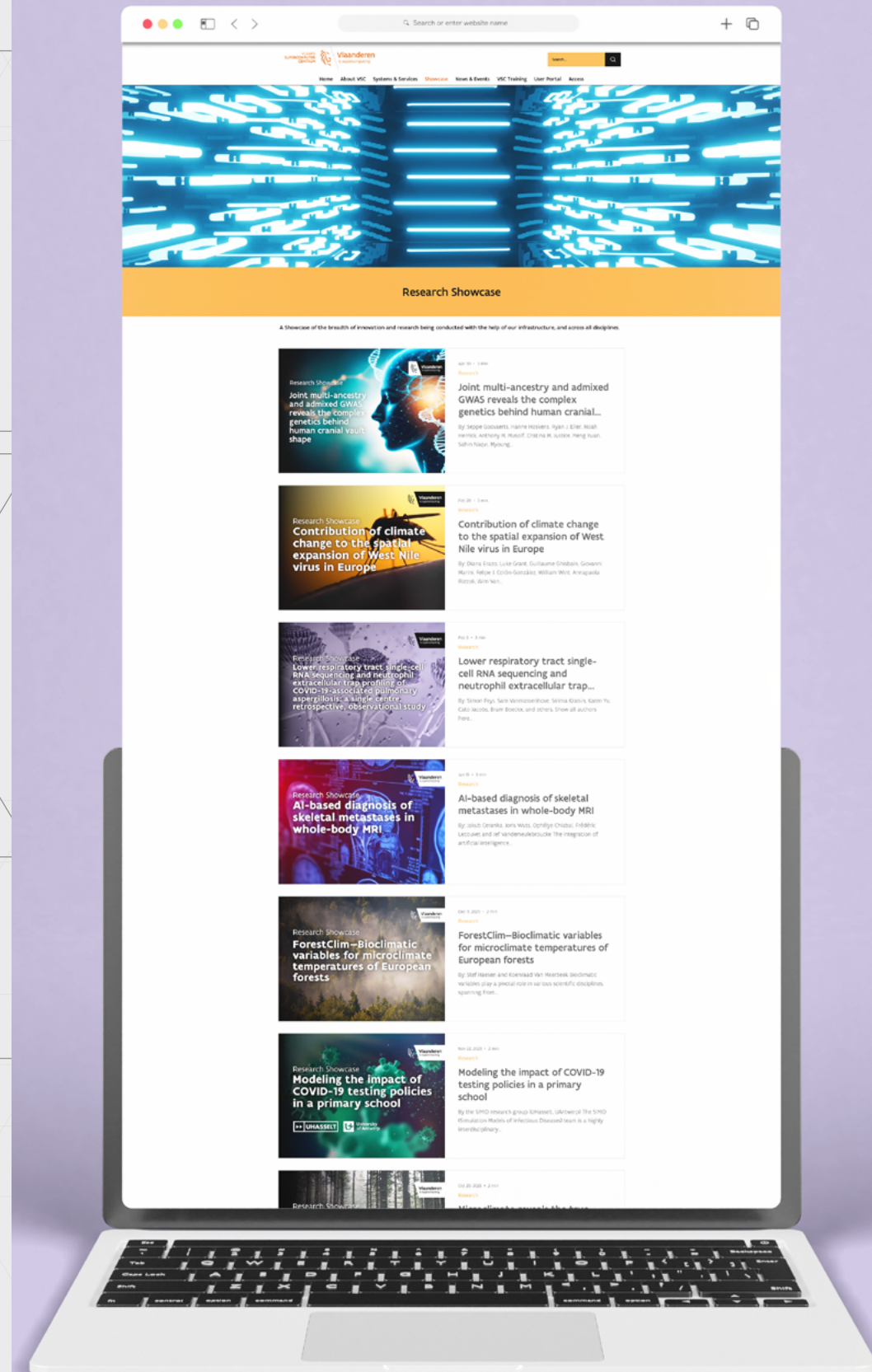


“De middelen die door de VSC-infrastructuur worden geleverd, spelen een grote rol in het verminderen van de rekentijd bij het uitvoeren van ons simulatiemodel voor veel verschillende parametervariabelen. Dit maakt het mogelijk om de impact van een breed scala aan scenario's te onderzoeken, zoals verschillende screeningsintervallen, in een herhaald testbeleid.”

SIMID research group
UHasselt, UAntwerpen

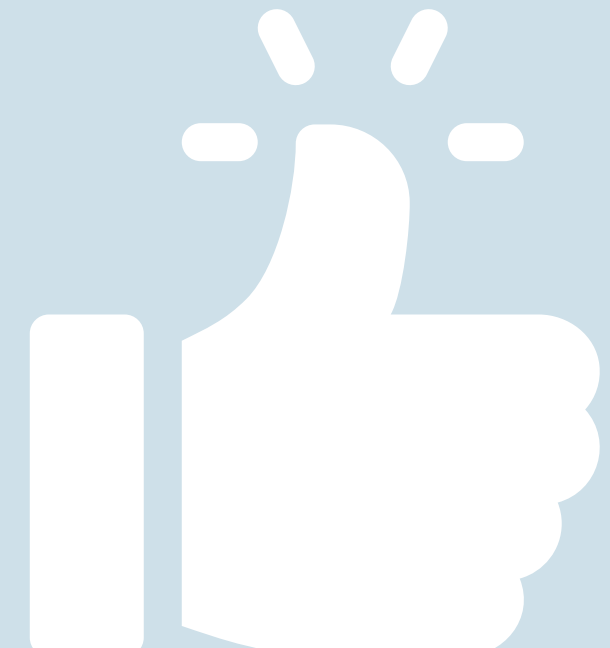
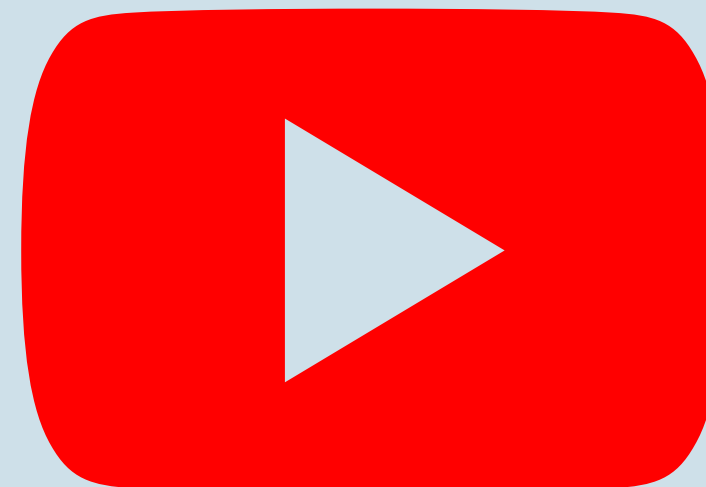
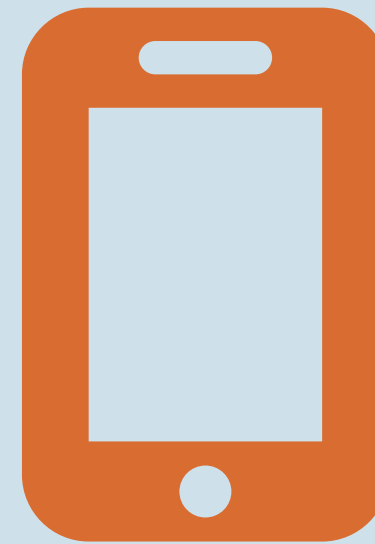
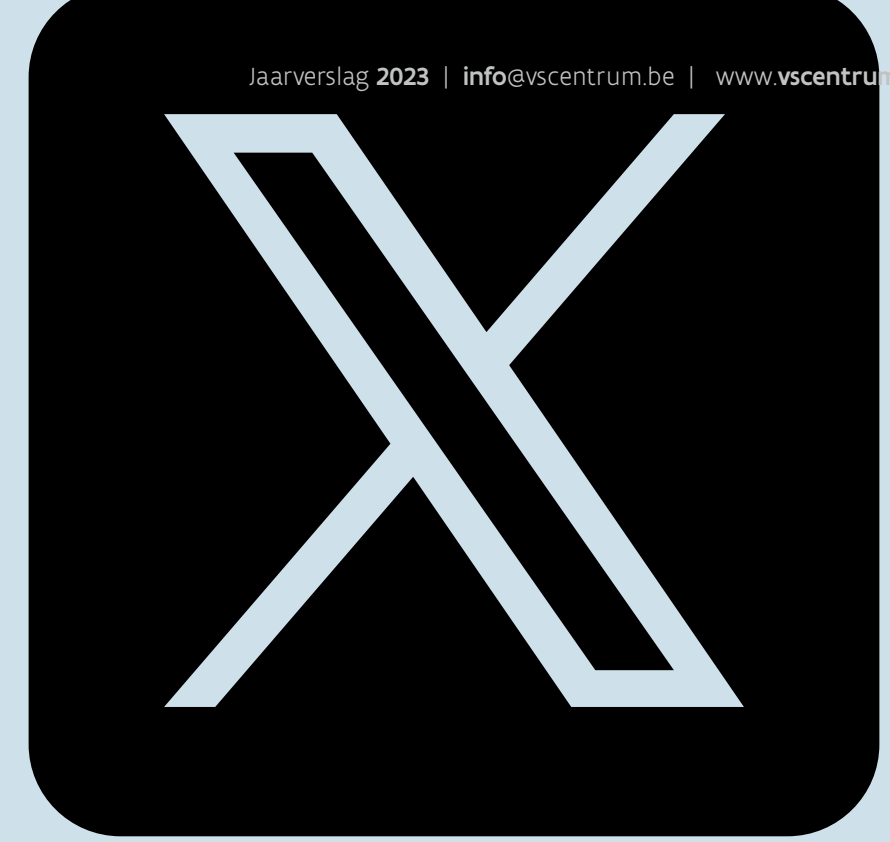
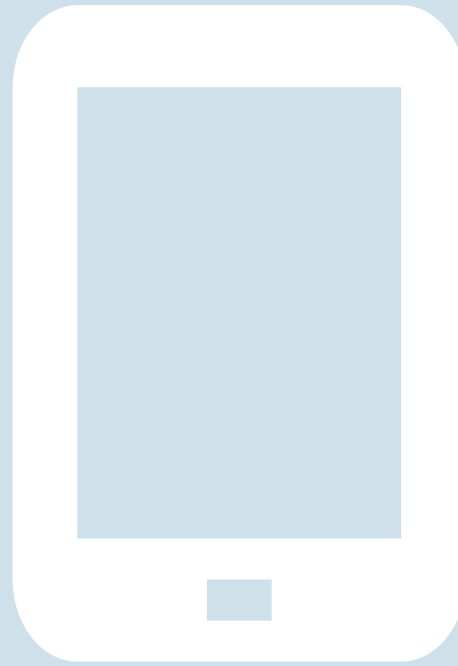
“VSC speelde een cruciale rol in dit onderzoek door de benodigde computationele middelen te leveren voor de CFD-modellering van de Swirling Flow Reactor.”

Thomas Holemans & Zhu Yang
KU Leuven



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 realiseren. 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.



Mpacts | Leveraging Expertise

De Mpacts-simulatiesoftware, ontworpen om het gedrag van granulair materiaal in diverse industriële processen te modelleren, heeft aanzienlijke prestatieverbeteringen bereikt dankzij de samenwerking met het Vlaams Supercomputing Centrum (VSC). Granulaire dynamica, inherent complexer dan moleculaire dynamica, omvat ingewikkelde contactdetectie en rotatievrijheidsgraden, wat leidt tot rekenintensieve simulaties. Een van de grootste uitdagingen voor Mpacts was inefficiënte geheugentoegang door de niet-aaneengesloten aard van de interacties tussen deeltjes in het geheugen. Experts van VSC stelden een innovatieve oplossing voor: het sorteren van de deeltjes zodat deeltjes die dicht bij elkaar zijn in de gesimuleerde ruimte ook dicht bij elkaar zijn in het computergeheugen. Deze techniek verminderde cache-misses en verbeterde de prestaties van de software aanzienlijk. Dankzij de ondersteuning en expertise van VSC werkt Mpacts nu efficiënter en biedt het snellere en betrouwbaardere simulaties voor industriële toepassingen. Deze samenwerking benadrukt de waarde van de diensten van VSC bij het optimaliseren van computationele software voor high-performance computing omgevingen.



“

“De mogelijkheid om samen te werken met de hooggekwalificeerde experts op het gebied van HPC bij VSC was een zeer interessante en lonende ervaring. Ik zou iedereen die betrokken is bij supercomputing aanraden om contact op te nemen met het VSC en te profiteren van hun beschikbare expertise om uw berekeningen te verbeteren.”

Simon Vanmaercke
Mede-oprichter Mpacts

”

PUXANO | Matchmaking

Puxano, een innovatief biotechbedrijf dat structuurgebaseerde eiwitonderzoeksdiensten aanbiedt, onderscheidt zich door de ontwikkeling van eigen technologieën zoals het Procondor-platform voor geautomatiseerd ontwerp van eiwitconstructen. Dit platform optimaliseert eiwitsequenties, cruciaal voor effectieve expressie en zuivering van eiwitten.

Door deel te nemen aan de ‘Oproep voor uitgebreide HPC-ondersteuning’ van het Vlaamse Supercomputer Centrum (VSC), werd Puxano geïntroduceerd bij het Data Science Institute van UHasselt (DSI). DSI, met meer dan 150 datawetenschappers, herdefinieerde de scope van het Procondor-project en ontwierp een optimale databasestructuur. Deze samenwerking tussen Puxano, VSC en DSI demonstreert hoe strategische ondersteuning en expertise leiden tot significante vooruitgang in biotechonderzoek en ontwikkeling.



“

“We zijn zeer positief over de samenwerking met de academische wereld. De aanpak was zeer professioneel. Stijn nam de tijd om het probleem te analyseren en alle resultaten werden tijdig geleverd. Hij slaagde erin onze behoeften te begrijpen door de juiste kritische vragen te stellen. Dat was zeer waardevol voor het succes van het project.”

Dit is ook waar de VSC naar streeft, zoals Mia Vanstraelen, voorzitter van de VSC Industriële Raad, opmerkt: “VSC is toegewijd aan het stimuleren van innovatie in Vlaanderen. Naast het aanbieden van hoogwaardige HPC-infrastructuur en adviesdiensten, richten we ons op het overbruggen van kennis en ervaringen tussen de academische wereld en de industrie en vice versa.”

Wouter Van Putte
Oprichter en CEO Puxano

”

Tier-1 Cloud | Eliza Depoorter & Charlotte Peeters

In dit succesverhaal duiken we in de transformerende impact van het VSC Tier-1 Cloud platform, met name door de ervaringen van Eliza Depoorter en Charlotte Peeters van LM-UGent. Geconfronteerd met de uitdaging van het beheren van uitgebreide omics-datasets, kozen ze voor onze cloudservices voor een oplossing op maat van hun bio-informatica behoeften.

Bij LM-UGent, waar toonaangevend onderzoek in bio-informatica bloeit, was de vraag naar een robuuste en flexibele omgeving van essentieel belang. VSC Tier-1 Cloud, gebouwd op OpenStack, voorzag hen van het perfecte ecosysteem. Ze maakten gebruik van op maat gemaakte softwarepakketten, interactieve data-analysetools en workflowportals om hun werkzaamheden te stroomlijnen. Cruciaal hierbij was de Infrastructure as a Service-capaciteit van de VSC Tier-1 Cloud, waarmee ze virtuele machines en opslagsystemen konden implementeren die naadloos aansloten op hun wetenschappelijke workflows.

Het gemak van het opzetten van databases en webservers met behulp van onze gebruiksklare catalogus van sjablonen verbeterde verder hun efficiëntie. Dit stelde Charlotte Peeters en Eliza Depoorter in staat zich meer te richten op hun onderzoek, wat resulteerde in aanzienlijke tijdsbesparingen en maximalisatie van de impact van hun bevindingen. Hun succesverhaal benadrukt niet alleen de veelzijdigheid van onze cloudoplossingen, maar ook het transformerende potentieel wanneer geavanceerde technologie samenkomt met baanbrekend onderzoek.



“

“We ervaren dat de VSC-infrastructuur zeer stabiel en goed georganiseerd is. De beschikbare documentatie is uitgebreid, en de ondersteuning is echt uitstekend.”

Eliza Depoorter
LM-UGent

”

Tier-1 Data | Sebastian Munck & Ingrid Barcena Roig

In een wereld waarin het uitvoeren van rekenintensieve taken op grote datasets grote uitdagingen met zich meebrengt, is het essentieel om efficiënte manieren te vinden om onderzoeksgegevens te beheren en te delen. Het VSC Tier-1 Data platform biedt een transformerende oplossing voor onderzoekers zoals Sebastian Munck, assistent-professor aan KU Leuven en VIB BiImaging Core. Sebastians bio-imaging projecten profiteren enorm van de robuuste mogelijkheden van het platform op het gebied van metadata en gegevensbeheer, waardoor workflows worden gestroomlijnd en gegevensintegriteit en toegankelijkheid worden gewaarborgd. Bovendien benadrukt Ingrid Barcena Roig, een gerespecteerde collega aan KU Leuven, de geavanceerde functionaliteiten van het platform, die samenwerking verbeteren en onderzoeksresultaten versnellen. Het VSC Tier-1 Data platform staat als een hoeksteen in het mogelijk maken van onderzoekers om veilig onderzoeksgegevens op te slaan, te beheren en te delen, wat innovatie stimuleert binnen wetenschappelijke disciplines.



“

“Wij halen veel voordeel uit het gebruik van de Tier-1 Data door toegang te hebben tot geoptimaliseerd en efficiënt onderzoeksdatamanagement. We kunnen vertrouwen op een geweldig ondersteuningsteam van het VSC en bevorderen eerlijke en open data samen met efficiënte en snelle datatransfer. We raden Tier-1 Data aan omdat we ons willen concentreren op wetenschap, afbeeldingen willen verwerven en de beste service willen bieden aan onze gebruikers. Met het VSC zijn onze gegevens in goede handen. We kunnen vertrouwen op hun expertise en profiteren van een groot ondersteuningsteam dat de service biedt die we nodig hebben.”

Sebastian Munck
Assistant Professor | KU Leuven
VIB BiImaging Core

”

Diamcad

In het hart van het beroemde diamantkwartier van Antwerpen staat Diamcad als een baanbrekende kracht in de kunst van het diamantslijpen, gedreven door geavanceerde technologie en de immense rekenkracht van VSC-supercomputers. Onder leiding van Bart De Hantsetters, de visionaire algemeen directeur, en gesteund door Jonas Tollenaere, een toegewijde doctoraatsstudent van KU Leuven, heeft Diamcad een revolutionaire reis ingezet.

Gewapend met de mogelijkheid om miljoenen potentiële slijpmogelijkheden te verkennen, creëert Diamcad nauwgezet op maat gemaakte slijppatronen die zijn afgestemd op de unieke kenmerken van elke diamant. Van grootte en gewicht tot complexe interne gebreken, elke facet van de diamant wordt geoptimaliseerd, waardoor ongeëvenaarde schittering en waarde worden gegarandeerd. Deze innovatieve aanpak verbetert niet alleen de precisie van het diamantslijpen, maar stelt ook nieuwe normen van uitmuntendheid in de branche. Diamcads samensmelting van traditioneel vakmanschap met geavanceerde rekenkundige technieken garandeert niet alleen een superieure kwaliteit, maar luidt ook een nieuw tijdperk in van diamanten perfectie.



“

De samenwerking met de VSC verliep vanaf het begin erg soepel. We kregen snel toegang tot de cluster en vonden de documentatie op de website en de softwarebibliotheken voldoende om onze toepassing te starten. Bovendien was de communicatie over clusterdowntimes en onderhoud duidelijk en helder.

Jonas Tollenaere
PhD student | KU Leuven

”

Atlas Copco | Support

Atlas Copco heeft een uiterst positieve ervaring gehad in samenwerking met de VSC, die snelle en vakkundige ondersteuning biedt bij het opzetten van simulaties en softwaretools. Met een uitgebreide bibliotheek van simulatie- en berekeningsgereedschappen direct beschikbaar en nieuwe tools die snel op verzoek worden geïnstalleerd. Tom Saenen, technologieontwikkelaar bij Atlas Copco, benadrukt het onschatbare belang van de hulp die zij hebben ontvangen. Ewald Pauwels, wetenschappelijk coördinator van de UGent High Performance Computing-infrastructuur aan de Universiteit Gent & VSC, heeft een cruciale rol gespeeld in het succes van deze samenwerking.



“

Onze ervaring met het VSC-team was telkens zeer positief telkens wanneer we een technische vraag hadden. Ze waren echt geïnteresseerd om tot een oplossing te komen. Het voelde echt alsof ze met ons samenwerkten om de resultaten te bereiken die Atlas Copco wilde behalen. Ze stonden klaar om hun inzichten en expertise te delen bij het oplossen van uitdagingen.

Tom Saenen
Technology Developer
Atlas Copco

”

Internationale samenwerking

EuroCC

VSC neemt sinds 2023 deel aan het EuroCC 2 project als opvolger van het EuroCC 1 project dat startte in 2020. Dit is het initiatief gesteund door EuroHPC JU en de lokale overheden om een netwerk van meer dan 30 NCC's in de deelnemende landen te onderhouden. De NCC's fungeren als centrale toegangspunten in elk land tussen belanghebbenden en nationale EuroHPC-systemen. Ze opereren op regionaal en nationaal niveau om contact te onderhouden met lokale gemeenschappen, om HPC-competenties in kaart te brengen en toegang te vergemakkelijken tot Europese HPC-bronnen voor gebruikers uit de private en publieke sector.

EuroCC Belgium bundelt de krachten van VSC, Cenaero en CÉCI, en voert een divers takenpakket uit dat onder meer het opzetten van communicatiecampagnes omvat, het bieden van een formeel kader tussen HPC-gerelateerde activiteiten, het ontwikkelen en presenteren van een uitgebreide en transparante kaart van HPC-competenties en -instellingen, en het fungeren als toegangspoort voor industrie en academische wereld tot providers met geschikte expertise of relevante projecten, zowel nationaal als internationaal. EuroCC Belgium verzamelt ook het HPC-opleidingsaanbod en toont deze op een centrale plaats, samen met opleidingen in het buitenland, verzameld door andere NCC's. Bovendien stimuleert het de industriële adoptie van HPC en vergemakkelijkt het de toegang tot systemen en expertise.

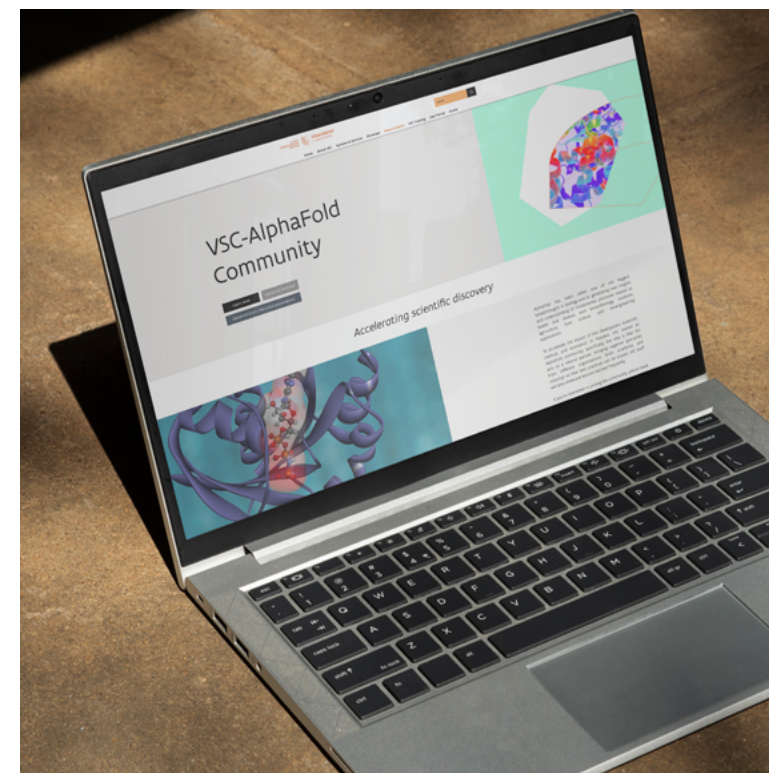
In 2023 ondersteunde VSC via EuroCC België trainingen op industrie gericht zoals een OpenFold training op Puxano Talks, en webinars rond Quantum Computing, met 140 deelnemers van bedrijven.

Via outreach campagnes en deelname aan evenementen zoals Tech Meets Chem, Smart ventilation in mid-sized buildings, Data-driven Approaches in Life Sciences, Energy Innovations, ELIXIR, en Advanced Engineering bouwde VSC contacten uit met meer dan 100 bedrijven en werden 30 bedrijven aan toegang tot HPC en expertise geholpen in 2023.

Naast een rechtstreekse connectie met industrie, onderhouden we ook contacten met andere organisaties en lokale overheden, zoals de POMs, VLAIO, BioTope, TTOs, Stad Antwerpen, VAIA, AGORIA, MCA, Flemish Aerospace Group, imec en Agentschap Natuur & Bos, om de nood aan computercapaciteit en expertise in verschillende soorten organisaties in kaart te brengen.

Community building

Om een goede relatie met de huidige gebruikersgroepen te onderhouden en contacten te leggen met potentiële nieuwe gebruikers uit academische, industriële of overheidskringen, bouwt VSC mee aan een aantal communities. Het doet dat in het kader van een aantal actuele thema's met een hoge impact zoals AI en quantum computing. Zo organiseerde VSC al een aantal evenementen rond de significante invloed van AI in structurele biologie en life sciences, gezien de grote impact van tools zoals AlphaFold2 op deze domeinen. Verder neemt VSC actief deel aan een aantal initiatieven rond quantum computing, en organiseerde het de voorbije jaren al een aanzienlijk aantal webinars rond quantum computing en de toekomstige impact ervan op verschillende vakgebieden.



Afbeelding 43. VSC AlphaFold communitypagina

PRACE

Het PRACE 2 programma is geëindigd op 31 maart 2023, na verschillende verlengingen. Er worden geen nationale "resources" meer verdeeld via PRACE oproepen. Ook de PRACE-IP projecten zijn tot een eind gekomen. Oproepen voor acties gebeuren nu door EuroHPC.

Gezien de rol die EuroHPC speelt in het Europese landschap, wil PRACE zich vanaf 2024 omvormen tot een associatie van gebruikers en HPC centra in Europa. Het wil de gebruikersgemeenschappen op het voorplan plaatsen en de gebruiker dus centraal stellen. Daarnaast wil het ondersteuning bieden voor het zo goed mogelijk gebruiken van de EuroHPC infrastructuur en internationale samenwerking verder bevorderen. Tijdens de LUMI-BE gebruikersdag heeft Serge Bogaerts dit alles toegelicht.



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 Krišťák	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%
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%

Personeelslijst

Instelling	Naam	% tewerkstelling in het kader van HPC
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%
KU Leuven	Filip Severants	100%
KU Leuven	Jo Wijnant	100%
UAntwerpen	Franky Backeljauw	100%
UAntwerpen	Stefan Becuwe	100%
UAntwerpen	Kurt Lust	50%
UAntwerpen	Carl Mensch	20%
UAntwerpen	Michele Pugno	60%
UAntwerpen	Engelbert Tijskens	100%
UAntwerpen	Robin Verschoren	100%
UAntwerpen	Annie Cuyt	5%
UAntwerpen	Wim Vanroose	5%
UAntwerpen	Koen Decauwsemaecker	10%
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	Jan Turek	58,33%
VUB	Cintia Willemys	58,33%
VUB	Olivier Devroede	30,00%
VUB	Joachim Verschelden	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

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Growth of Nitrogen doped diamond: dynamics, bonding and charge transfer.	Vanpoucke, Danny Eric Paul	UHasselt	Institute for Materials Research (IMO-IMOMEC)
Discovery of selective DPP8/9 inhibitors: Identification of hydrophobic affinity sites	Beyens, Olivier	UAntwerpen	UAMC / Department of Medicinal Chemistry
Free energy perturbations for the optimization of DPP9 selective inhibitors	Beyens, Olivier	UAntwerpen	UAMC / Department of Medicinal Chemistry
Studies of fluid-scale nonlinear surface waves in collisionless plasmas	Magyar, Norbert; Bacchini, Fabio	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics, Department of Mathematics
Extracting Meaning from Multilingual Text with Deep Neural Networks	Vanroy, Bram	KU Leuven (& UGent)	Computational and Formal Linguistics (ComForT) / Center for Computational Linguistics (CCL)
Characterizing the adsorbate-induced response of metal-organic frameworks for applications in carbon capture and water harvesting from desert air.	Goeminne, Ruben	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Hydrogen diffusion pathways in a clathrate	Lamaire, Aran	UGent	Center for Molecular Modeling
Evaluating the role of acidity on alkene protonation in zeolites	Cnudde, Pieter	UGent	Center for Molecular Modeling
Potential Energy surfaces of Hydrogen on Iron surfaces for the Exploration of the Hydrogen Embrittlement Effect in Pipeline Steel	Meier, Lukas	UGent	Center for Molecular Modelling
Selective catalytic conversion of CO2 to ethanol over high entropy alloys	Yan, Dengxin	UGent	Prof. Mark Saeys's group at the Laboratory for Chemical Technology (LCT) in the Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
Computational Fluid Dynamics Based Process Intensification of CO2 Capture: Solvent Regeneration in a Gas-Liquid Vortex Reactor	Chen, Siyuan	UGent	Laboratory for Chemical Technology Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Effect of phase mixing on collisionless plasma turbulence	Bacchini, Fabio; Pucci, Francesco	KU Leuven	CmPA, Department of Mathematics
High-throughput screening of covalent organic frameworks for carbon capture	De Vos, Juul	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
FineSegment	Picron, Cédric	KU Leuven	ESAT-PSI, Visics
High-throughput simulations of antisolvent addition to solvated polymer solutions - continued	Denayer, Mats	VUB	DSCH - ALGC
The first general relativistic kinetic simulations of black hole jet formation in the center of the Milky Way	Küchler, Lorenzo; Ripperda, Bart; Hertog, Thomas; Vercnocke, Bert; Mayerson, Daniel;	KU Leuven	theoretical physics group, physics department
Operational MHD modelling of the solar corona for space-weather applications	Brchnelova, Michaela	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Conformational dynamics of membrane proteins	Mathew, Alen T	UGent	Centre for Molecular Modelling
Electron scattering simulation with deep learning molecular dynamics	Zhang, Zezhong	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
Genotype imputation from low-pass cell-free DNA sequence data	Becelaere, Sara	KU Leuven	Laboratory for Human Evolutionary Genetics / Department of Human Genetics
First-principles investigation of superconductivity in transition metal dichalcogenide bilayers	Bekaert, Jonas	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT), Department of Physics

Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Probing the stability and flexibility of Interleukin-12 (IL-12) and extracellular IL-12 ligand-receptor complexes	Mehdipour, Ahmad Reza	UGent	Center for Molecular Modeling
Tuning properties of magnetic monolayers under strain and strain gradient	Pandey, Tribhuvan	UAntwerpen	Department of Physics/ CMT group
Unsteady aerodynamic simulations of an airborne wind energy reference system in realistic flight and atmospheric conditions using computational fluid dynamics.	Pynaert, Niels	UGent	Department of Electromechanical, Systems and Metal Engineering
Iterative scheme for Collective variable discovery for Cesium Lead Iodide	Devoogdt, David	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Superconductivity in intercalated bilayer kagome borophene	Soskic, Bozidar	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT) - Department of Physics
Computational and Experimental Study of Grain Growth in Stainless Steels Containing Inclusion Particles	Gupta, Aman	KU Leuven	Nano- and Microstructure Design of Materials / Department of Materials Engineering (MTM)
Grain boundaries in UO2	Mayda Bacaksiz, Selma and Arts, Ine	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
Investigating the effect of mutations on ABL- imatinib binding kinetics using a novel path-sampling methodology.	Vervust, Wouter	UGent	IBiTech – BioMMeda, department EA06
First principles analysis of stacking schemes and functional group mobility through molecular dynamics simulations of covalent organic frameworks	Vanlommel, Siebe	UGent	Center for Molecular Modeling / Department of applied physics
Coronal mass ejections and solar energetic particles: modelling their effects in the inner heliosphere.	Wijsen, Nicolas	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
Molecular Dynamics Simulations on UAMC-0001305 Warhead Derivatives to Theragnostically Target Fibroblast Activation Protein	Joep Wals	UAntwerpen	Medicinal Chemistry Group
Computational Fluid Dynamics (CFD) study on the oxidation of Volatile Organic Compounds (VOCs) in a photocatalytic reactor.	Mohammad Rusydi Fatahillah, Yi Ouyang and Geraldine Heynderickx	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT); Department of Materials, Textiles, and Chemical Engineering (EA11)
Membrane permeation study of a series of radical trapping agents using umbrella sampling simulations	De Winter, Hans	UAntwerpen	Laboratory of Medicinal Chemistry / Department of Pharmaceutical Sciences
Advanced Document Image Processing using Large Scale Language Models	Tan LU	VUB	Digital Mathematics (DIMA), Department of Mathematics and Data Science
Direct Numerical Simulations of stably stratified Ekman layers over heterogeneous surfaces	Thijs Bon and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation and Optimization, Department of Mechanical Engineering
Kinetic Modelling of Novel Solar Wind Observations	Luca Pezzini and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Large-eddy simulations of wind farms in stable boundary layers	Luca Lanzilao, Steven Vandenbrande and Johan Meyers	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation and Optimization (TFSO) Research Group, Mechanical Engineering Department
Characterization of the flow field around a staple fiber yarn on microscale level using computational fluid dynamics	Axel Bral and Joris Degroote	UGent	Department of Electromechanical, Systems and Metal Engineering



Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
A new reaction route of initial stage methanol to olefins conversion via frustrated Lewis pair involving trimethyloxonium ion	Wei Chen and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling
Variational transition state theory investigation of the barrierless reactions involved in atomic-scale diamond growth mechanisms	Emerick Guillaume, Danny Vanpoucke, Luc Henrard and Ken Haenen	U Hasselt	Material Physics (IMOMAF)
Next Level Flemish Speech Recognition - Flemish Speech Recognition At Scale	Jakob Poncelet	KU Leuven	Electrical Engineering ESAT - PSI, Speech Processing group
Unsteady computational fluid dynamics reactor design to accelerate the electrification of steam cracking.	Mike Bonheure, Yi Ouyang and Kevin Van Geem	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT)- Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Theoretical DFT study of silicates' vibrational spectra in solution	Fileto Rodríguez and Frederik Tielens	VUB	Materials modelling group, ALGC, Chemistry department
Anatomy-aware representation learning of large medical images	Joris Wuts	VUB	ETRO (Department of Electronics and Informatics)
Multimodal Egocentric Vision	Gorjan Radevski and Dusan Grujicic	KU Leuven	PSI-VISICS / ESAT
Conformational dynamics of Covid Spike protein: Effects of glycosylation and nanobody interactions	Alen T. Mathew and Ahmadreza Mehdipour	UGent	Centre for Molecular Modelling
Rationalizing Phase Selection in Inorganic Zeolite Synthesis Through Extensive DFT Calculations	Jelle Vekeman and Toon Verstraelen	UGent	Centre for Molecular Modelling
Investigating Water Splitting Reaction on Covalent Organic Framework through Molecular Dynamics Simulations	Kuber Singh Rawat and Veronique Van Speybroeck	UGent	Centre for Molecular Modelling
Evaluating the adsorption properties of metal-organic frameworks for applications in olefin/paraffin separation and detection of volatile organic compounds in air.	Siddharth Ravichandran	UGent	Centre for Molecular Modelling
Modelling particle acceleration and transport at a 3-D coronal mass ejection-driven shock	Zheyi Ding, Zheyi Ding and Zheyi Ding	KU Leuven	Centre for mathematical plasma-astrophysics
Model Compression of Large Image Generative Models	Junyi Zhu, Han Zhou and Matthew Blaschko	KU Leuven	PSI / ESAT
Quantifying adsorption-diffusion barriers for unique adsorption sites on external zeolite surfaces	Jenna Mancuso, Massimo Bocus and Pieter Cnudde	UGent	Centre for Molecular Modelling
Investigating Metal-Phosphonate Properties in NU-1000 Structure through DFT Studies and Spectroscopy Simulations (Part of PHOSPORE Project)	Roberth Mateo Narvaez Adams, Frederik Tielens and Tom Hauffman	VUB	Materials Modelling Group, General Chemistry Research Group (ALGC),
Numerical simulation of re-entry vehicle aerothermodynamics using in-house CFD solver.	Vatsalya Sharma	KU Leuven	Centre for Mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Developing SO-CASSI Energies for Te and Po molecules using Machine Learning	Okan Koeksal and Stefaan Cottenier	UGent	Department of Electromechanical, Systems and Metal Engineering and Center for Molecular Modeling
Calculating Diffusion Barriers of Hydrogen through Alloyed Iron Surfaces for the Exploration of the Hydrogen Embrittlement Effect in Pipeline Steel	Lukas Meier and Stefaan Cottenier	UGent	Center for Molecular Modelling
Characterization of wind farm wakes and weather conditions for offshore wind farms in the North Sea	Wim Munters, Alexandros Palatos-Plexides and Simone Gremmo	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Department of Environmental and Applied Fluid Dynamics
Tier1 proposal - Power-2-Olefins: Electrified rotor-stator reactor for steam cracking - Geometry optimization using meta-models	Rejish Lal Johnson Samee Lal, Yi Ouyang and Kevin Van Geem	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering

Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Accurate free energy profile of trimethyloxonium ion evolution in initial stage methanol to olefins conversion by umbrella sampling	Wei Chen and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modelling
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
Uncertainty quantification of the forces acting on a tube bundle in axial two-phase flow	Henri Dolfen and Joris Degroote	UGent	Department of Electromechanical, Systems and Mechanical Engineering
Machine learning potentials for an accurate modelling of alkene chemisorption in zeolites	Massimo Bocus, Pieter Cnudde and Sander Vandenhoute	UGent	Center for Molecular Modelling
Taming Dutch Llamas: Finetuning open-source LLMs on Dutch data	Bram Vanroy	KU Leuven	Computational and Formal Linguistics (ComForT)
Dynamo's in accretion disks: how did the magnetic field get there?	Bart Ripperda, Thomas Hertog, Lorenzo Küchler, Daniel Mayerson and Bert Vercocke	KU Leuven	theoretical physics group, physics department
Cluster-based active learning to model spatially disordered metal-organic frameworks	Pieter Dobbelaere	UGent	Center for Molecular Modelling
Tier-1 Compute application: Hyperbolic contrastive learning for remote sensing images	Liang Zeng	KU Leuven	Geomatics, Faculty of Engineering Technology
Driven decay-less oscillations of loops in a stratified solar atmosphere.	Konstantinos Karamelas and Tom Van Doorselaere	KU Leuven	CmPA / Department of Mathematics
Calculation of the Infrared spectra for the adsorption of citrate ions on hydroxyapatite surfaces and the carbonate-substituted hydroxyapatite surfaces by ab initio molecular dynamics simulations	Yuheng Zhao, Frederik Tielens and Ionut Tranca	VUB	ALGC material modelling group
Evaluating the diffusion properties of metal-organic frameworks for applications in olefin/paraffin separations.	Bernd Schmidt, Ruben Goeminne and Siddharth Ravichandran	UGent	Center for Molecular Modeling/ EA17
Llama-NL: a Dutch Llama-2-based, open-source Large Language Model	Veronique Hoste, Els Lefever, Thomas Demeester, Anthony Rathé and Matthieu Meeus	UGent	Language and Translation Technology Team (LT3)/ Internet and Data Science Lab (IDLab)
Control of magnetic states in a Ni-halide monolayer with in-plane strains: an ab initio study	Ali Ghojavand and Milorad Milosevic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT)/ Department of Physics
The effect of Mg on a Ni during CO2 methanation	Servaas Lips	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
Discrete element method (DEM)-based mechanistic modelling of powder flow in a gravimetric feeder for continuous pharmaceutical production	Luz Naranjo and Ashish Kumar	UGent	Pharmaceutical Engineering Research Group (PharmaEng), Department of Pharmaceutical Analysis
Radiation General Relativistic magnetohydrodynamics simulations of formation of black hole accretion disk coronae in active galactic nuclei	Bart Ripperda, Fabio Bacchini and Matthew Liska	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA)
Automated Food Intake Monitoring with Multi-Modality Sensors and Deep Learning	Chunzhuo Wang, Hans Hallez and Bart Vanrumste	KU Leuven	ESAT-STADIUS and the e-Media Research Lab
Conformational dynamics of membrane proteins	Alen T. Mathew and Ahmadreza Mehdipour	UGent	Center for Molecular Modelling (Department of Applied Physics)
Computational characterization of interlayer exciton states in multilayer transition metal dichalcogenides	Cem Sevik and Milorad Milosevic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory Group / Physics
Long Read Sequencing for the detection of methylome changes in patients with developmental disorders	Erika Souche, Benjamin Huremagic and Joris Vermeesch	KU Leuven	Laboratory of Cytogenetics and Genome Research



Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Understanding Solar Energetic Particle Discrepancies and Space Weather Forecast Uncertainties	Nicolas Wijzen and Christine Verbeke	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA)
Deep neural network study on satellite imagery and Flemish biological valuation map	Mingshi Li	KU Leuven	PSI-VISICS / ESAT
Application Tier-1 Hortense, López Figueiras, Emilio vsc46149	Emilio López Figueiras and Jure Oder	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Aeronautics and Aerospace Department
Magnons in moiré heterobilayers	Maarten Soenen	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT)
Application form: Compute component of the Flemish Tier-1 supercomputing platform	Tingyu Qu and Wei Sun	KU Leuven	Language Intelligence and Information Retrieval Lab, Declarative Languages and Artificial Intelligence section / Department of Computer Science
Exploring the design space of Solid Micellar Catalysts	Sara Santos, Konstantijn Rommens and Dengxin Yan	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
Simulating Ruddlesden-Popper defects in CsPbI3 due to Zn and Cd doping	Tom Braeckeveld, David Devoogdt and Mieke De Schepper	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Theoretical characterization of black TiO2	Selma Mayda Bacaksiz	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
Design of a microkinetic model for Fischer-Tropsch synthesis on Ni at CO saturation coverages	Konstantijn Rommens, Sara Santos and Dengxin Yan	Universiteit Gent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
Global 3D GR-PIC simulations of non-thermal flares in the magnetosphere of Kerr black holes	Ileyk El Mellah and Fabio Bacchini	KU Leuven	CmPA
Development and applications of efficient methods to study conformational transitions in biomedically relevant proteins	Kenno Vanommeslaeghe	VUB	Analytical Chemistry, Applied Chemometrics and Molecular Modelling (FABI)

Tier-1 Cloud

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
"Hosting clinical data in a harmonized data model to participate in the European Health Data and Evidence Network (EHDEN)"	Marcel Parciak, Lotte Geys, Liesbet Peeters, Ashkan Pirmani and Hamza Khan	UHasselt	Research group in Biomedical Data Sciences / Biomedical research institute (BIOMED) and Data Science Institute (DSI)
Annotation database for oligogenic variant analysis.	Tom Lenaerts and Emma Verkinderen	VUB	Artificial Intelligence lab / Interuniversity Institute of Bioinformatics Brussels (IB)2 (Vakgroep Computerwetenschappen)
Tier-1 Data Application form: Adaptation Genomics	Steven Van Belleghem	KU Leuven	Eco-Evolutionary Genomics / Biology
Understanding genetic variation in Parkinson's disease through long-read and single-cell multi-omics analyses	Stein Aerts	VIB-KU Leuven	Laboratory of Computational Biology, VIB Center for AI & Computational Biology, VIB-KU Leuven Center for Brain & Disease Research and Department of Human Genetics KU Leuven

Tier-1 Data

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
PiDiGiN: Future proof pathology for predictive medicine and disease prognosis based on tumor heterogeneity	Melvin Geubbelmans, Christel Faes, Dirk Valkenborg, Jari Claes, Esther Wolfs, Kim Nijsten, Michiel Thomeer and Sandrina Martens	UHasselt	Data Science Institute (DSI) – BIOMED – LCRC-ZOL
AIDefSpace, Using Artificial Intelligence to defend telecommunications and satellite positioning systems from the interference of space weather events	Giovanni Lapenta and Ekaterina Dineva	KU Leuven	"Center for Mathematical Plasma Astrophysics / Departement Wiskunde"
Tier-1 Data Application form: Adaptation Genomics	Steven Van Belleghem	KU Leuven	Eco-Evolutionary Genomics / Biology
Understanding genetic variation in Parkinson's disease through long-read and single-cell multi-omics analyses	Stein Aerts	VIB-KU Leuven	"Laboratory of Computational Biology, VIB Center for AI & Computational Biology, VIB-KU Leuven Center for Brain & Disease Research and Department of Human Genetics KU Leuven"

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

Creatie en vormgeving

Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in **juli 2024**

