

Samen sterk in rekenkracht en data voor Vlaanderen



Jaarverslag
2024

Inhoudsopgave

Voorwoord	4	Opleidingen	76
In de kijker	6	Users Day 24	80
Het VSC uitgelicht	8	Outreach	82
Ter inleiding	8	Digitale aanwezigheid	82
Structuur en werking VSC 2.0	9	Sociale media bij VSC	84
Financiering van het VSC	10	Campagnes in de kijker	86
Recurrente financiering	10	Internationale samenwerking	89
Impulsfinanciering Tier-1 platform	11	EuroCC	89
VSC gebruikersbevraging	14	EPICURE	90
Het Tier-1 supercomputerplatform	16	MultiXscale	90
Tier-1 Compute	16	Community building	92
Tier-1 Data	26	Bijlagen	92
Tier-1 Cloud	33	Colofon	102
RDI	37		
Klantenbestand	37		
Ondersteuning	39		
Gebruikersbevraging	40		
Tier-2 platforms	42		
Universiteit Antwerpen	42		
Vrije Universiteit Brussel	47		
Universiteit Gent	58		
KU Leuven/UHasselt	66		
Tier-0 ondersteuning	73		

INNOVATIVE COMPUTING
FOR A SMARTER FLANDERS

Voorwoord

Het jaar 2024 was een mijlpaal voor het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC), waarin onze missie om wetenschappelijk en innovatief onderzoek in Vlaanderen te ondersteunen met krachtige rekenkracht infrastructuur verder werd versterkt. Na de vernieuwde strategische VSC visie en implementatie in 2023 hebben we in 2024 aanzienlijke stappen gezet om ons innovatiepotentieel uit te breiden en onze gebruikers steeds beter van dienst te kunnen zijn.

De voorbereidingen voor de nieuwe Tier-1 supercomputer, die tegen eind 2025 operationeel zal zijn, markeren een strategisch hoogtepunt. Deze nieuwe infrastructuur belooft een krachtige impuls te geven aan Vlaamse onderzoeks- en innovatie-activiteiten. Ook onze data- en cloudplatformen hebben in 2024 sterke updates ondergaan, waarmee we o.m. de efficiëntie van workflows hebben verhoogd.

Een andere belangrijke ontwikkeling was de groeiende interesse vanuit de industrie. Het verdubbelde aantal bedrijven dat gebruikmaakt van onze diensten, benadrukt de waarde van VSC voor innovatieve toepassingen bij KMO's en multinationals, variërend van artificiële intelligentie tot milieusimulaties. Dit weerspiegelt onze inzet om niet alleen academisch onderzoek te dienen, maar ook de Vlaamse industrie te ondersteunen bij het benutten van supercomputing.

De gebruikersgemeenschap van VSC blijft groeien, met een stijging van 10% in de deelname aan onze jaarlijkse gebruikersbevraging, waarvan de resultaten ons helpen om onze diensten voortdurend te verbeteren. Het hoogtepunt van de community-interactie was zonder twijfel de VSC Users Day, waar meer dan 130 deelnemers samenkwamen voor inspirerende sessies en netwerkmomenten.

Met trots kijken we terug op de voorbije prestaties en met evenveel enthousiasme richten we ons op de uitdagingen en kansen van 2025. Het VSC blijft zich inzetten om Vlaanderen competitief en toekomstbestendig te houden in een wereld die steeds meer afhankelijk is van big data en geavanceerde rekenkracht.

Wij danken onze partners, gebruikers en alle betrokkenen voor hun voortdurende inzet en vertrouwen in VSC. Samen bouwen we aan een innovatieve en duurzame toekomst.

KU LEUVEN

LEEN VAN RENTERGEM
JAN OOGHE
INGRID BARCENA

**Universiteit
Antwerpen**

WIM VANROOSE
STEFAN BECUWE

**UNIVERSITEIT
GENT**

JOHAN VAN CAMP
EWALD PAUWELS

VUB VRIJE
UNIVERSITEIT
BRUSSEL

STEFAN WECKX
WARD POELMANS

UHASSELT
KNOWLEDGE IN ACTION

GEERT JAN BEX
RAFAL AL-TEKREETI

fwo
CAROLINE VOLCKAERT



In de kijker

2024 was een jaar vol beweging voor het Vlaams Supercomputer Centrum. Terwijl onze infrastructuur verder groeide in capaciteit, flexibiliteit en bereik, namen ook de gebruikersaantallen en toepassingsgebieden sterk toe. Van strategische investeringen in een nieuwe Tier-1 supercomputer tot de uitbouw van onze data- en cloudplatformen: VSC blijft een cruciale motor voor wetenschappelijk en technologisch onderzoek in Vlaanderen. Op deze pagina lichten we vijf sprekende hoogtepunten uit die onze ambities, innovaties en impact illustreren.



24 NIEUWE TIER-1 SUPERCOMPUTER OP KOMST

De voorbereidingen voor de opvolger van Hortense zijn gestart. Via workshops en een Europese aanbesteding werd input van gebruikers vertaald naar specificaties. Eind 2025 wordt deze nieuwe krachtpatser operationeel.



37 INDUSTRIE ONTDEKT SUPERCOMPUTING

Het RDI-office verdubbelde het aantal bedrijven dat VSC gebruikt. Van AI tot milieusimulaties—Vlaamse KMO's en multinationals zetten hun eerste stappen op Tier-1 dankzij ons aanbod en persoonlijke begeleiding.



14 MEER GEBRUIKERS, HOGE TEVREDENHEID

In 2024 vulden 555 mensen de gebruikersbevraging in—een stijging van 10%. Over alle diensten heen scoort VSC 'goed' tot 'excellent'. De feedback helpt ons om dienstverlening nog beter af te stemmen.



25 DATA EN CLOUD IN TOPVORM EN GROEI

Het Tier-1 data- en cloud platform kreeg grote updates. De ManGO Portal is nu open source en workflows zijn efficiënter dan ooit. 5,3 PB aan data werd veilig overgezet via Globus—dubbel zoveel als vorig jaar.



80 VSC USERS DAY BRACHT COMMUNITY SAMEN

Op 22 oktober 2024 verzamelden meer dan 130 deelnemers bij het FWO in Brussel voor inspirerende talks, sessies en netwerkmomenten. Dé ontmoetingsplek voor de VSC-community.

Het VSC uitgelicht

Ter inleiding

De ondersteuning en uitbating van High Performance Computing (HPC) is in Vlaanderen georganiseerd binnen het Vlaams Supercomputer 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, zowel uit universiteiten, kennisinstellingen, bedrijven als 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: UA Antwerpen, Vrije Universiteit Brussel, UGent en KU Leuven. Het VSC wordt beheerd door het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen (FWO).

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 op de lagen Tier-2 en Tier-1, en faciliteert aansluiting bij het Europese Tier-0 niveau.

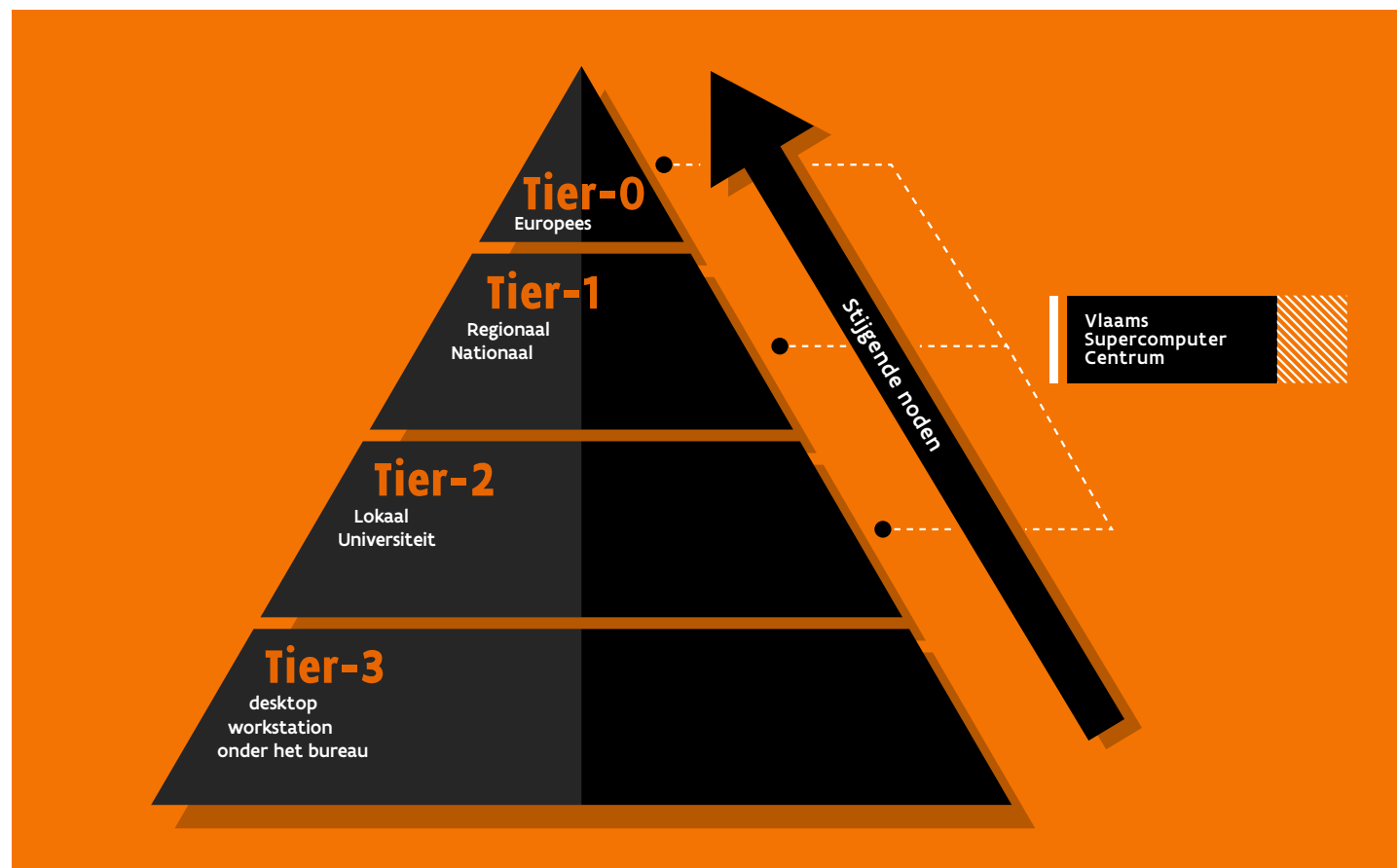
Het VSC fungeert als een belangrijk reken- en data-infrastructuurknooppunt voor onderzoekers en industrie in Vlaanderen en heeft zijn waarde als facilitator van onderzoek in Vlaanderen bewezen.

Structuur en werking VSC 2.0

Een strategisch plan en financiering voor een toekomstgerichte en duurzame uitbouw van het Tier-1-niveau werd in 2022 goedgekeurd waardoor de gebruikers blijvend ondersteund worden in hun nood aan rekenkracht en Vlaanderen competitief blijft 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 en vele initiatieven rond Artificiële Intelligentie (AI), maar ook op de eigen ontwikkeling van hardware technologie, niet in het minst vanuit geopolitiek-strategische overwegingen.

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

De klijtlijnen van het VSC 2.0 uitgewerkt in een operationele structuur voor VSC is als volgt samen te vatten:



Afbeelding 1. Tiering model

Afbeelding 2. Structuur en werking VSC 2.0

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 6.581.000 euro jaarlijks beschikbaar waarmee voornamelijk Tier-2 investeringen en het personeel gefinancierd worden, aangevuld met cofinanciering 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 computer, cloud en data gerealiseerd.

Recurrente financiering

In 2024 werd de Tier-2 infrastructuur gefinancierd door het FWO verdeeld over 3.721.000 euro investeringen in hardware en werking, 2.760.000 euro in personeel en werd 100.000 euro gereserveerd voor de outreach activiteiten naar niet-academisch gebruik. Het gezamenlijk budget bedraagt dus 6.581.000 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.

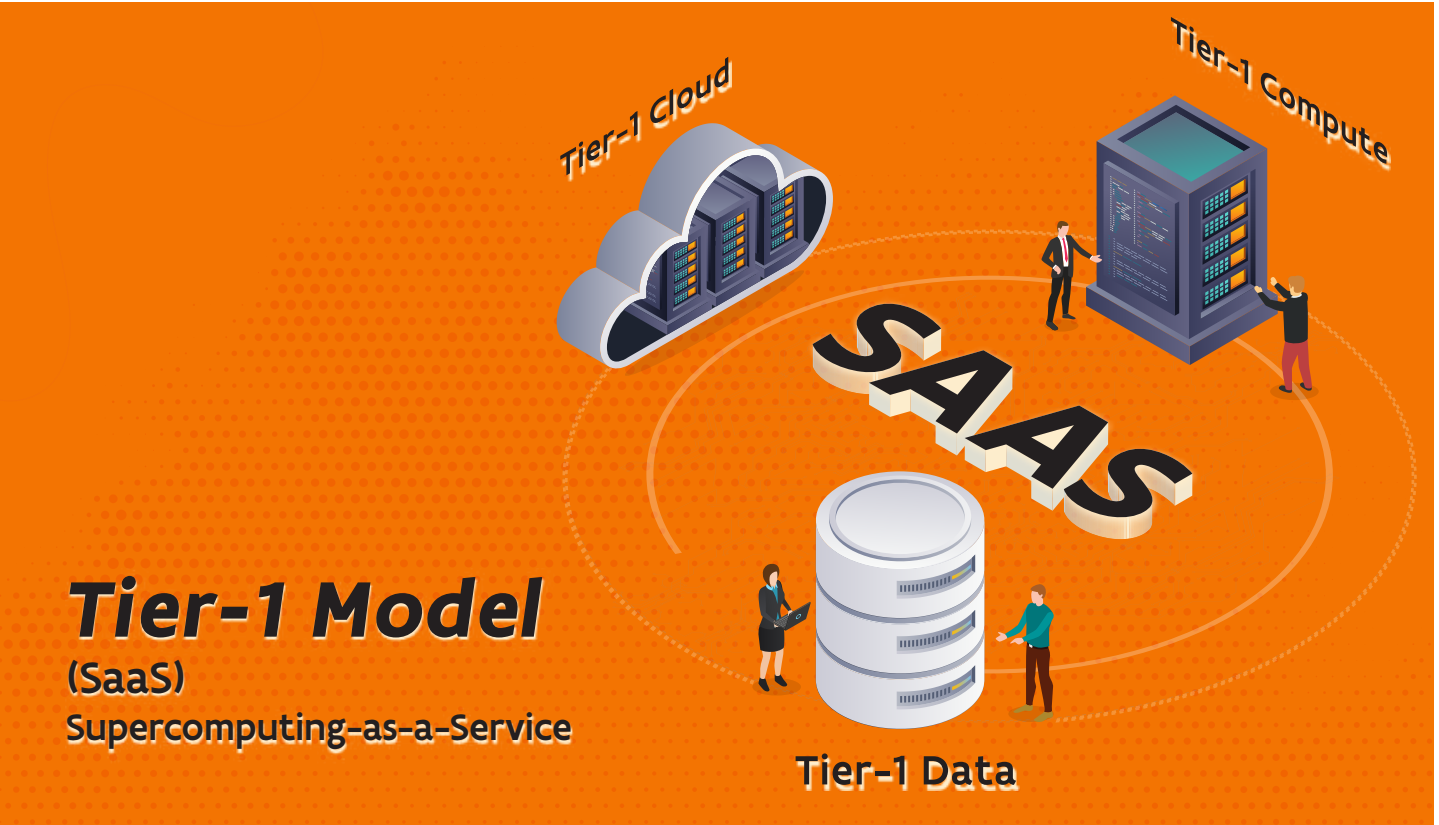
Verdeling recurrent budget 2024 over instellingen						
Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	totaal
Personeel in VTE	6	3	5	5	4	23
Personeel in Euro	€ 720.000	€ 360.000	€ 600.000	€ 600.000	€ 480.000	€ 2.760.000
Totaal personeel	€ 720.000	€ 360.000	€ 600.000	€ 600.000	€ 480.000	€ 2.760.000
Verdeelsleutel	0,4099	0,04	0,3174	0,1051	0,1276	1
CAPEX en werking Tier-2	€ 1.525.238	€ 148.840	€ 1.181.045	€ 391.077	€ 474.800	€ 3.721.000
Subtotaal	€ 2.245.238	€ 508.840	€ 1.781.045	€ 991.077	€ 954.800	€ 6.481.000
O outreach (IR en GR)						€ 100.000
Totaal						€ 6.581.000

Tabel 1. Verdeling recurrent budget 2024

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 worden verschillende infrastructuurcomponenten onderscheiden, die het samen mogelijk maken om een verhoogd servicelevel aan te bieden aan de gebruikers van het VSC:



Afbeelding 3. SaaS

- De belangrijkste component in dit model blijft de computerinfrastructuur: klassieke rekenclusters die zware of een veelvoud aan rekentaken kunnen verwerken.
- Onlosmakelijk daaraan verbonden is een datacomponent. Steeds meer gebruikers hebben immers computationeel werk dat intensief gebruik maakt van grote datasets. Het migreren van deze data van en naar de compute infrastructuur telkens deze voor een berekening moet worden gebruikt is omwille van de schaal zeer inefficiënt. Het is dan ook noodzakelijk een datacomponent toe te voegen waar grote datasets gedurende een langere tijd kunnen opgeslagen worden en van daaruit ook op een efficiënte manier worden verwerkt.
- 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 cloudproviders.

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 dataomgeving wordt opgebouwd en cloudservices worden aangeboden. Dankzij de impulsfinanciering van 2018-2022 kon een volledig model en infrastructuur worden uitgebouwd en het Supercomputing as a Serviceconcept 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 dienden verder uitgebouwd te worden. Ook de veranderende Vlaamse en internationale context dienden meegenomen te worden in de verdere uitbouw van het VSC. Door de Vlaamse Regering werd naast de recurrente middelen een eenmalige investering voor VSC 2.0 van 19,2 miljoen euro voor de periode 2023-2025 vrijgemaakt of gemiddeld 6,4 miljoen euro per jaar. Deze financiering is echter geen recurrente financiering. Het FWO zal zich blijvend inzetten om de VSC-financiering recurrent te krijgen.

	VSC 2.0	2023-2025
Gemiddeld per jaar		
Uitrusting	Tier-1 Compute	3.000.000
	Tier-1 Data	575.000
	Tier-1 Cloud	200.000
TOTAAL uitrusting		3.775.000
Werking	Tier-1 stroom	1.200.00
	Belnet	65.000
	Tier-1 integraties	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

In functie van de noden wordt elk jaar de begroting en de verdeling over de instellingen herzien. De planning per jaar en per instelling en de nodige investeringen om deze uit te werken worden grondig besproken en goedgekeurd. Voor 2024 is er een bedrag van 4,7 miljoen euro voorzien opgedeeld over 1,8 miljoen euro personeelskosten, een bedrag van 1,46 miljoen euro voor investeringen in hardware voor de drie componenten (compute, data en cloud) van het SaaS-platform en 1,465 miljoen euro voor werkingskosten waarvan de stroomkosten het grootste aandeel opeisen.

VSC 2.0 begroting	2023-2025 aangepast	2023	2024	2025
Budget VSC 2.0	€ 19.200.000,00	€ 2.765.000,00	€ 4.607.000,00	€ 11.828.000,00
Bijkomend FWO - indexatie 120 k/jaar	€ 240.000,00		€ 120.000,00	€ 120.000,00
Totaal	€ 19.440.000,00	€ 2.765.000,00	€ 4.727.000,00	€ 11.948.000,00

Personeel				
Tier-1 data	€ 1.360.000,00	€ 400.000,00	€ 480.000,00	€ 480.000,00
Tier-1 cloud	€ 1.360.000,00	€ 400.000,00	€ 480.000,00	€ 480.000,00
Ondersteuning toegang Tier-0	€ 760.000,00	€ 140.000,00	€ 360.000,00	€ 260.000,00
Tier-1 compute Site 1	€ 480.000,00	€ 0,00	€ 240.000,00	€ 240.000,00
Tier-1 compute Site 2	€ 480.000,00	€ 0,00	€ 240.000,00	€ 240.000,00
Totaal personeel in dienst	€ 4.440.000,00	€ 940.000,00	€ 1.800.000,00	€ 1.700.000,00

Uitrusting				
Tier-1 compute	€ 8.600.000,00	€ 0,00	€ 1.032.000,00	€ 7.568.000,00
Tier-1 data	€ 1.395.000,00	€ 300.000,00	€ 245.000,00	€ 850.000,00
Tier-1 cloud	€ 470.000,00	€ 100.000,00	€ 185.000,00	€ 185.000,00
Totaal uitrusting	€ 10.465.000,00	€ 400.000,00	€ 1.462.000,00	€ 8.603.000,00

Werking				
Stroomkost	€ 3.750.000,00	€ 1.100.000,00	€ 1.200.000,00	€ 1.450.000,00
Belnet	€ 195.000,00	€ 65.000,00	€ 65.000,00	€ 65.000,00
Integratie binnen VSC (accountpage e.d.)	€ 470.000,00	€ 140.000,00	€ 200.000,00	€ 130.000,00
Outreach (industriële raad en gebruikersraad)	€ 120.000,00	€ 120.000,00	€ 0,00	€ 0,00
Totaal werking	€ 4.535.000,00	€ 1.425.000,00	€ 1.465.000,00	€ 1.645.000,00

TOTAAL	€ 19.440.000,00	€ 2.765.000,00	€ 4.727.000,00	€ 11.948.000,00
--------	-----------------	----------------	----------------	-----------------

Tabel 3. VSC 2.0 begroting 2023-2025

VSC gebruikersbevraging

Zoals in 2023 werd op de VSC Gebruikersdag een nieuwe bevraging gelanceerd. Deelnemers kregen tussen 5 november en 17 december de tijd om aan te geven welke services van het VSC ze gebruiken en hoe ze die beoordelen (Tier-2, Tier-1 compute, Tier-1 data, Tier-1 cloud, het trainingsaanbod).

In vergelijking met vorig jaar is het aantal deelnemers aan de bevraging met meer dan 10 % gestegen: van 467 naar 555, waarvan 372 respectievelijk 411 de bevraging volledig hebben ingevuld. Die stijging weerspiegelt zich bijna bij alle instellingen of organisaties waarmee de deelnemers zeggen verbonden te zijn. Onderstaande grafiek geeft de spreiding weer over de verschillende instellingen, onderzoeksinstituten en bedrijven. 168 respondenten lieten hun mailadres achter zodat we hen kunnen contacteren.

Bij alle services beoordeelt de overgrote meerderheid van de deelnemers de voorgestelde aspecten als neutraal, goed of excellent.

Met de evaluatie van de bevraging vorig jaar hebben we gemerkt dat feedback die deelnemers konden geven niet altijd bij de juiste dienst vermeld stond. Dit maakte het soms moeilijk om die feedback correct te interpreteren en te remediëren indien nodig. Daarom werd in deze bevraging na elke dienst meteen de mogelijkheid gegeven voor feedback.

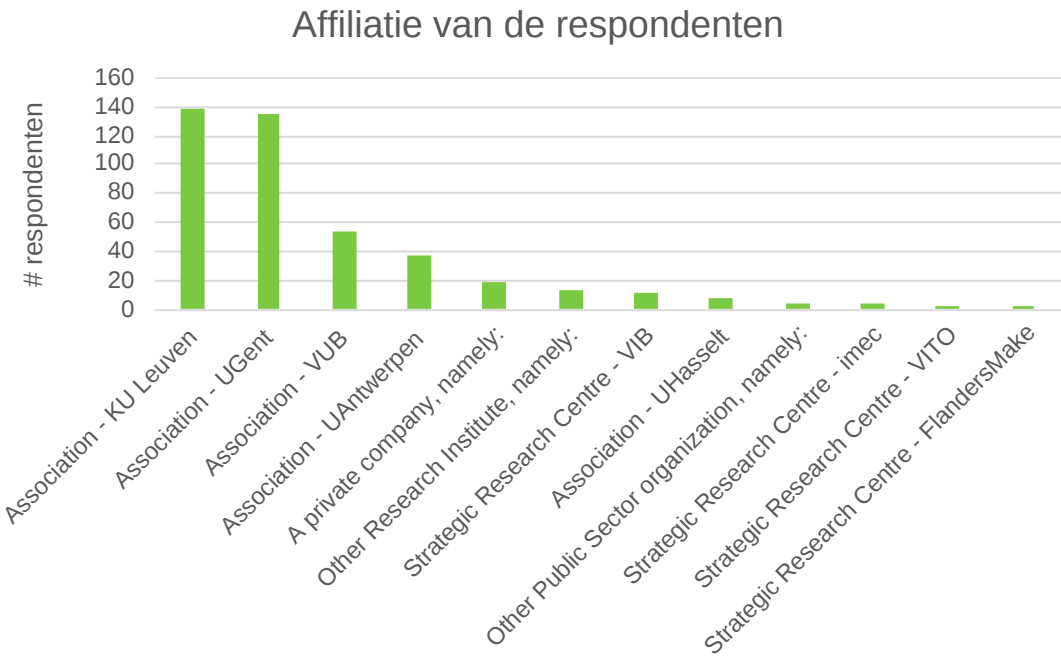
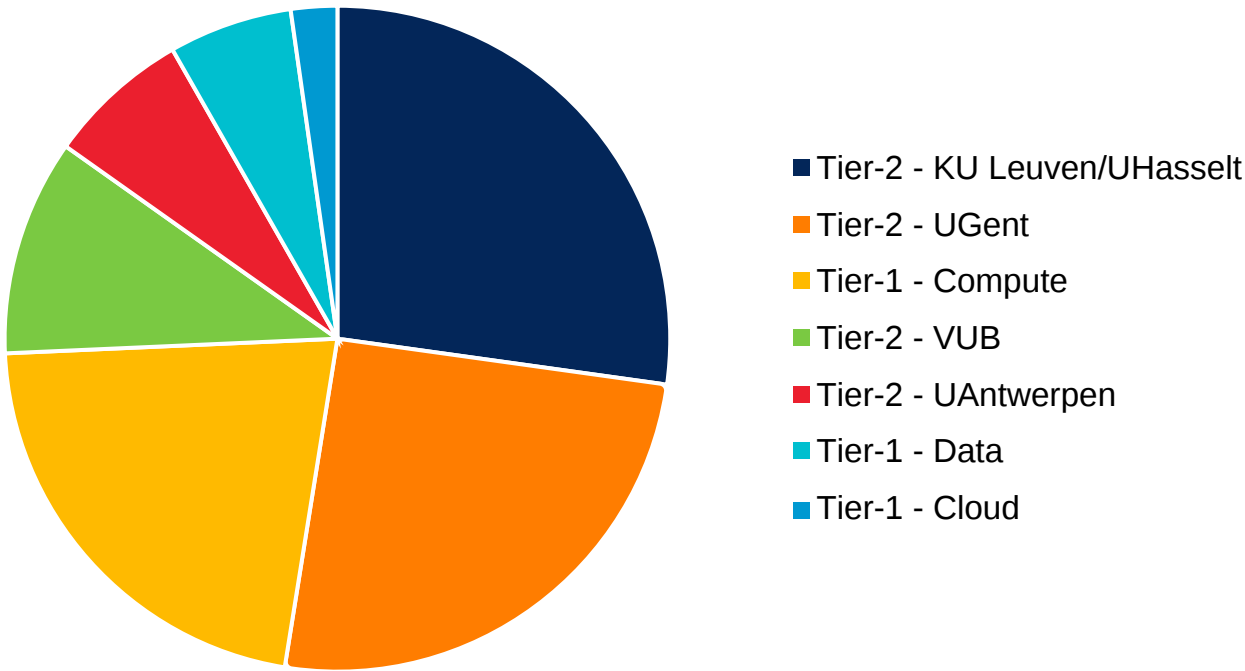
Daarnaast hebben we vastgesteld dat sommige vragen voor verwarring hebben gezorgd of te algemeen waren. Hierbij twee voorbeelden van de aangepaste vraagstelling.

In 2023 werd in één vraag gepeild naar het belang van een dienst voor het onderzoek en een algemene beoordeling van de dienst. Uit de verdere bevraging werd duidelijk dat sommige gebruikers niet steeds de juiste dienst hadden aangeduid. Daarom werd in deze bevraging de vraag opgesplitst. Eerst werd geïnformeerd naar het gebruik van diensten, en indien aangeduid, werd een beoordeling van de verschillende aspecten gevraagd.

Waar in 2023 gepeild werd naar het type gebruiker (ontwikkelaar of eindgebruiker), werd de vraag nu opengetrokken naar hoe gebruikers software gebruiken (zelf ontwikkelen, zelf installeren, centrale installatie, containers, Python-omgevingen, ...). Op basis van die antwoorden bekijken we dan welke aanpassingen aan bv. documentatie of ondersteuning moeten gebeuren.

Verderop in dit jaarverslag gaan de verschillende sites dieper in op de resultaten voor de specifieke service(s) waarvoor ze verantwoordelijk zijn.

De verschillende VSC-sites gaan in 2025 aan de slag met de feedback en zullen hierover in het volgend jaarverslag rapporteren..



Afbeelding 4. VSC gebruikersbevraging 2024

***Opmerking:** 22 respondenten gaven aan met meerdere instellingen geaffilieerd te zijn.

Tier-1 supercomputer platform

Tier-1 compute

Tier-1c Gent

In de loop van 2024 werden verscheidene werken uitgevoerd in en rond de Tier-1 compute opstelling Hortense van het VSC.

Infrastructuur

Extra login/debugnodes

Bijkomende debug- en loginnodes werden beschikbaar gemaakt in Tier-1 compute Hortense. Deze draaien als virtuele machines op speciaal daarvoor bestemde nodes van de Tier-1 cluster (hypervisors). Meer performante hardware werd geïnstalleerd voor de hypervisors, waardoor meer login/debugnodes als virtuele machines kunnen draaien. Dit levert voor de eindgebruikers meer flexibiliteit en minder wachttijd.

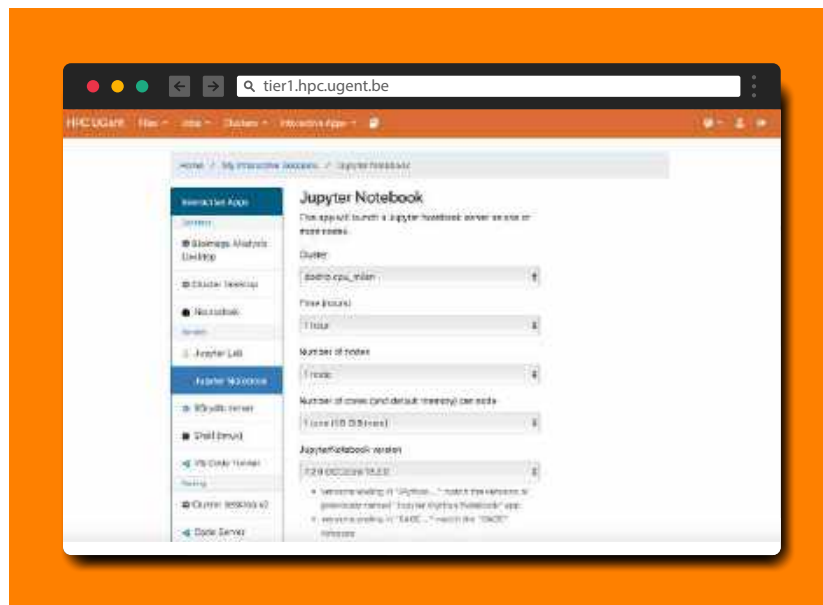
Versterking netwerk capaciteit

De interne netwerksetup van de Tier-1 compute cluster Hortense werd geoptimaliseerd. Verscheidene bijkomende netwerk-switches werden aangekocht en geïnstalleerd om het netwerk robuuster te maken. Op die manier werd de connectie van de cluster naar de Tier-2 systemen en centrale services van UGent verbeterd. Dit was van groot belang voor de data access van onder meer veel bedrijven, die deels UGent storage gebruiken.

User features en backend ontwikkelingen

Upgrade webportal

Tier-1 compute cluster Hortense beschikt over een webportal (<https://tier-1.hpc.ugent.be>) waarmee gebruikers eenvoudig toegang kunnen krijgen via een browser. Dit portal is gebaseerd op het product Open OnDemand (<https://openondemand.org>). In 2024 werd een nieuwe versie van Open OnDemand uitgerold op Hortense.



Afbeelding 5. Screenshot van Hortense tier1.hpc.ugent.be

Voorbereiding OS upgrade en exit strategie Hortense fase 1

Eerste voorbereidende stappen werden genomen om het besturingssysteem van Tier-1 compute cluster Hortense te updaten naar een hogere versie van Red Hat Enterprise Linux. Voorafgaand aan de werkelijke upgrade is een goede voorbereiding nodig, om eventuele impact naar de gebruikers zo veel mogelijk te beperken. In de loop van 2024 werd een gelijkaardige actie geïnitieerd en grotendeels afgewerkt op de Tier-2 infrastructuur van UGent. De best practices verzameld tijdens deze operatie werden meegenomen en gebundeld in een plan van aanpak om de upgrade efficiënt uit te rollen in 2025. Hieraan gekoppeld werd de exit strategie bekeken voor fase 1 van Hortense. Eind 2025 verloopt de ondersteuning op deze fase, en wordt verwacht dat een nieuwe Tier-1 compute fase actief zal komen in het datacenter van de Vrije Universiteit Brussel.

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. Doorgevoerde aanpassingen omvatten onder meer:

- port en migratie naar django 4.2,
- bugfix CSV-export,
- verbeterde logging,
- snellere laadsnelheid van project-lijsten,
- extra labels in de project preview,
- aanpassen email adres in configuratie,
- oplossen van foutieve gebruiksgegevens in upload,
- verscheidene fixes aan het database schema.

Verder waren er doorheen het jaar geregeld interacties met het RDI-team voor de review en goedkeuring van exploratory en industry projecten op Tier-1 compute Hortense.

Nieuwe ontwikkelingen aan de VSC Account Page

Alle account- en groepenbeheer binnen het VSC is gecentraliseerd binnen de VSC Account Page (<https://account.vscentrum.be>) (en administratie/API pagina <https://apivsc.ugent.be>). Deze webtoepassing regelt toegang tot alle Tier-1 en Tier-2 infrastructuur van het VSC. De front- en backend van deze service wordt onderhouden door UGent. T.b.v. nieuwe features en bugfixes werd ook hier een cyclus van aanpassingen uitgevoerd, met onder meer:

- introductie knop 'toon leden' in group view,
- bijkomende feature om via de API 'force active' status te zetten o.a. voor industrie accounts,
- opruimen van persoonlijke data in oude accounts,
- start ontwikkeling van company code,
- controle op verborgen groepen in autogroups en group API fixes,
- update van quota informatie voor inactieve accounts.

Voor verscheidene niet-universitaire onderzoeksinstellingen werden tevens IdP en WAYF updates en aanpassingen uitgevoerd, teneinde onderzoekers van deze instellingen eenvoudiger toegang tot VSC en Tier-1 compute Hortense te kunnen geven. In een vergadering van HEC-raad en Management team werd besloten om deze niet-universitaire onderzoeksinstellingen (VLIZ, INBO, ILVO, RBINS, RMCA) preferentieel op het Tier-2 niveau te behandelen, en deze onderzoekers toegang te verlenen tot de Tier-2 infrastructuur van KU Leuven en UAntwerpen.

Wetenschappelijke projecten

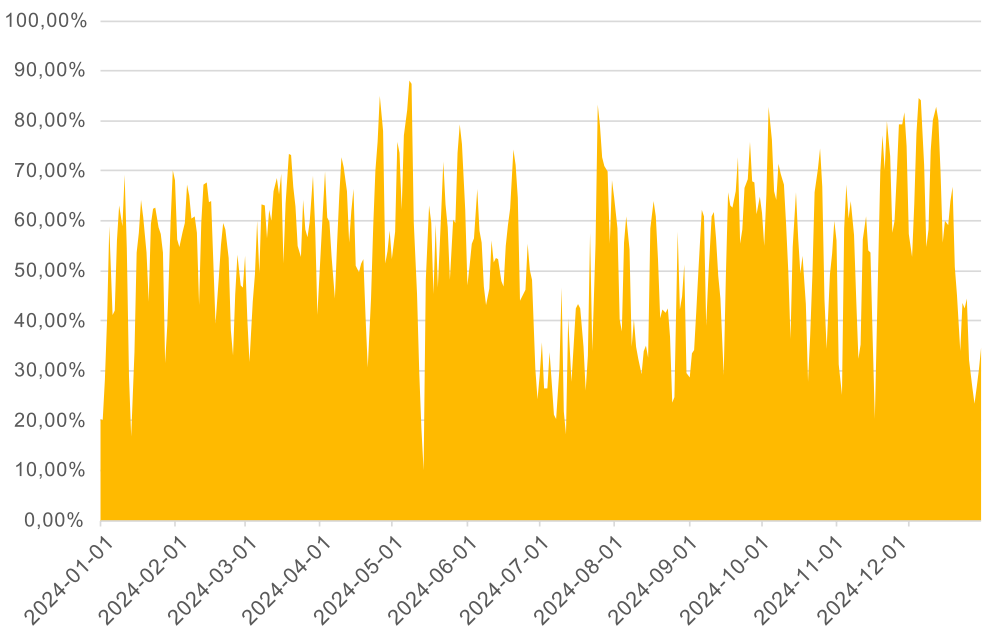
Hieronder een overzicht van het aantal academische projecten dat in 2024 liep op Tier-1 Hortense, opgedeeld per categorie en cutoff.

Categorie	#projecten	Gealloceerde rekentijd	
		CPU Hours	GPU Hours
Nog lopende projecten uit 2023	68	114.854.650	464.755
Cutoff 1 (5 februari)	38	126.594.362	358.428
Cutoff 2 (3 juni)	35	161.415.084	160.936
Cutoff 3 (7 oktober)	46	168.735.807	456.607
Starting grants	123	59.218.800	91.000
Nog lopende collaborative grant (sub)projects uit 2023	7	34.479.545	0
Nieuwe collaborative grant (sub)projects	3	11.000.000	3.800

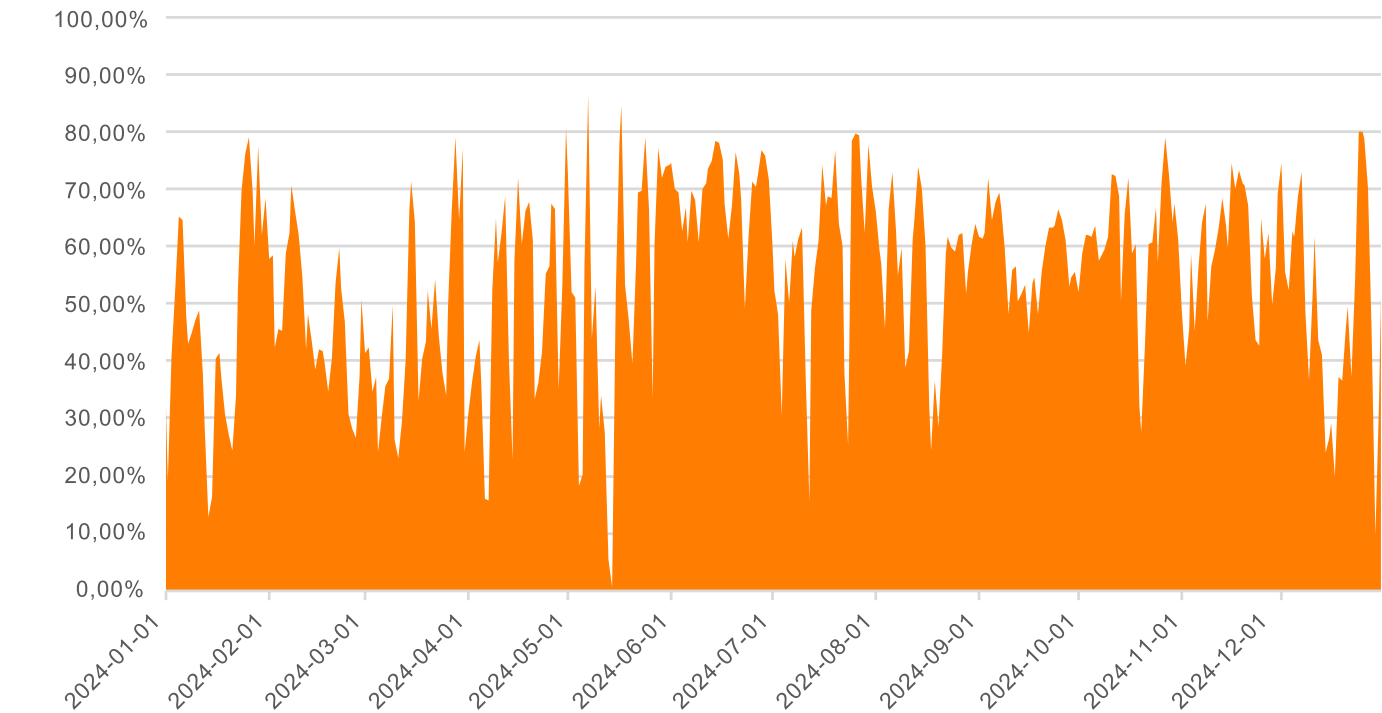
Tabel 4. Aantal academische projecten Tier-1 Hortense

Gebruik en beschikbaarheid

Onderstaande grafieken geven een dag-per-dag overzicht van de gebruikte rekentijd op Tier-1 compute Hortense. Beide plots tonen de gebruikte fractie van de maximaal theoretisch beschikbare rekentijd: eerst CPU-verbruik, vervolgens GPU-verbruik.



Afbeelding 6. Dagelijks CPU-verbruik op Tier-1 Hortense



Afbeelding 7. Dagelijks GPU-verbruik op Tier-1 Hortense

Omwille van o.m. onderhoud waren er enkele onbeschikbaarheden in 2024:

- 13-14 mei: gepland onderhoud,
- 11 juli: geplande test van de Disaster Recovery Procedure (DRP) voor het UGent datacenter S10 – tijdelijk geen netwerkverbinding met Tier-1 compute,
- 26 november-5 december: geplande kernel en InfiniBand updates – rollende updates, waardoor telkens één partitie per keer onbeschikbaar was,
- 23 december: stroomstoring in stad Gent (ongepland); de onverwachte uitval was reeds grotendeels opgelost op 24/12, maar sommige GPU nodes vereisten meer werk en konden pas online worden gebracht op 5/01/2025.

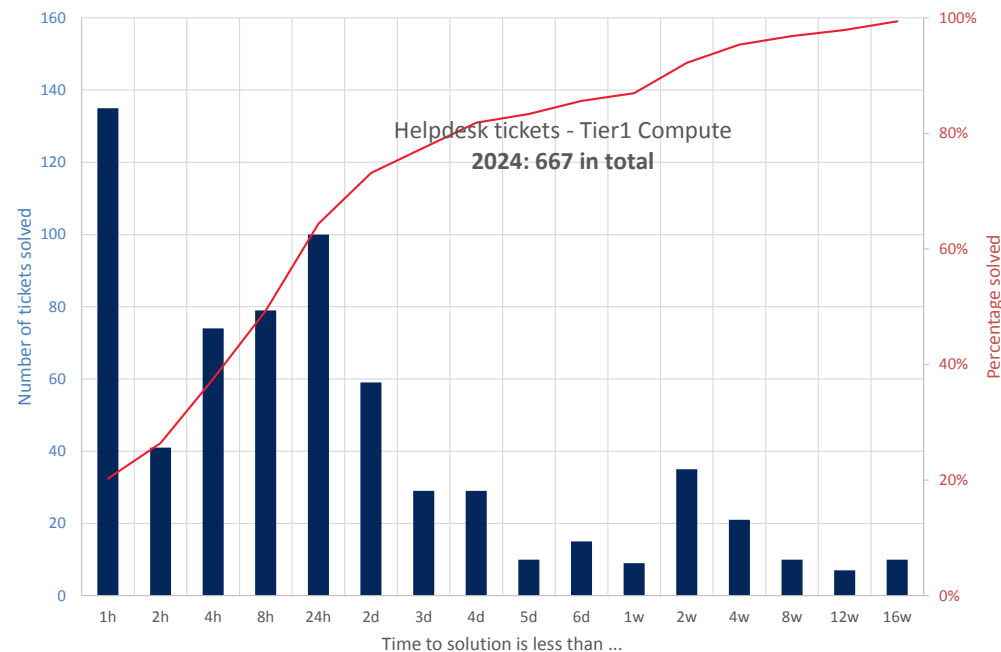
Helpdesk

T.b.v. het ondersteunen van het Tier-1 compute platform zijn verscheidene gecentraliseerde helpdesk wachtrijen ingericht. Deze tickets worden doorgaans door verscheidene VSC-instellingen behandeld.

Wachtrij	#gesloten tickets 2024	behandeld door
Tier-1 Compute (compute@vscentrum.be)	667	UGent (597) Vrije Universiteit Brussel (65) KU Leuven (5)
Software installaties	474	UGent

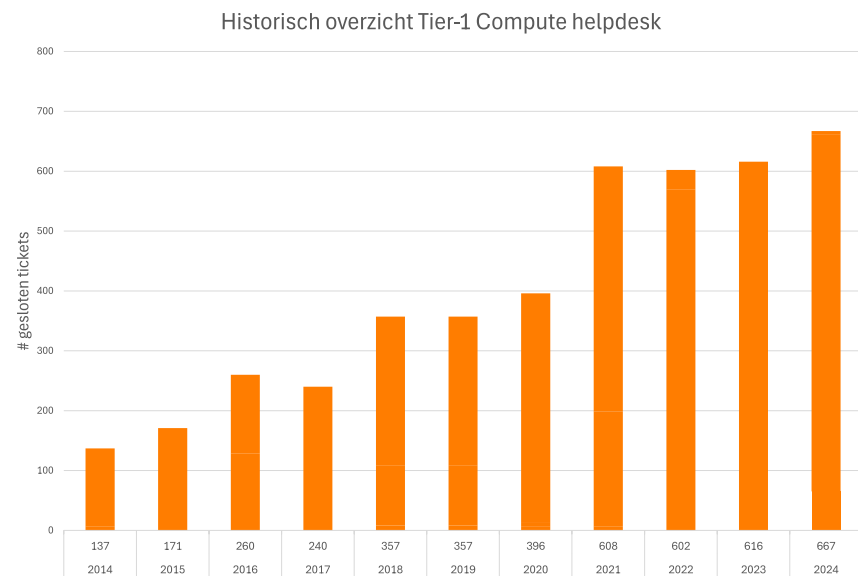
Tabel 5. Helpdeskactiviteit voor Tier-1 Compute

Middels de dedicated Tier-1 compute helpdesk (compute@vscentrum.be) kunnen gebruikers problemen of vragen aanmelden met rechtstreekse toepassing op Tier-1 compute Hortense. Een verdeling van de tijd waarbinnen elke aangemelde vraag werd opgelost, is weergegeven in onderstaande grafiek. In 2024 werd ongeveer 80 % van alle binnengekomen vragen opgelost binnen één week.



Afbeelding 8. Helpdesk tickets Tier-1 compute

Bekeken over een periode van de laatste 10 jaar, is het duidelijk dat de helpdeskbelasting voor het Tier-1 compute team fel is toegenomen. Komende van pakweg 200 tickets op jaarbasis voor de eerste Tier-1 supercomputer, muk in 2014, is het aantal afgehandelde tickets thans verdrievoudigd. Dit reflecteert de toegenomen en meer diverse gebruikersgroep, maar ook het groter aantal services (incl. GPU's en webportal) die worden geleverd door het Tier-1-compute team.



Afbeelding 9. Historisch overzicht Tier-1 compute helpdesk

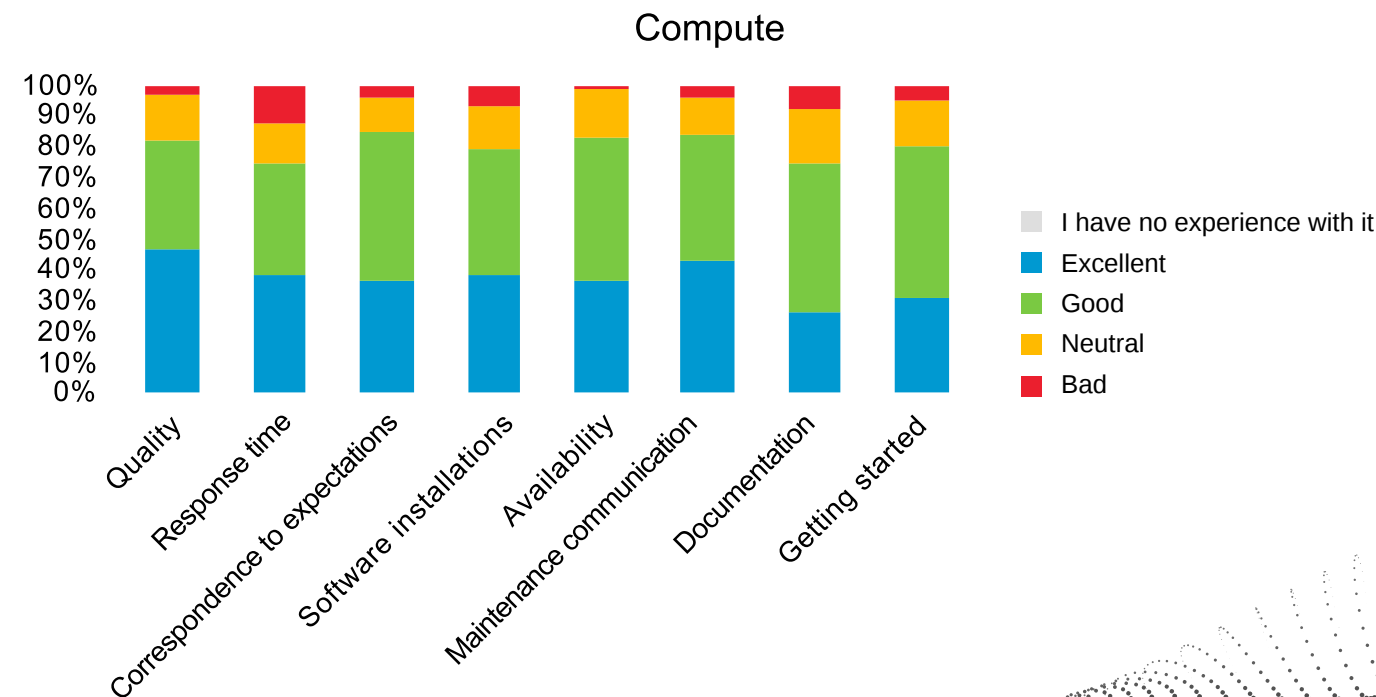
Verder werden in 2024 ook in totaal 474 tickets behandeld door het UGent team met betrekking tot software-installatie aanvragen. Een strikte opsplitsing tussen vragen voor Tier-1 compute en de Tier-2 UGent opstelling is niet eenvoudig, vandaar dat ook hier alle tickets worden gerapporteerd.

Voortvloeiend uit deze vragen werden over alle Tier-1 compute partities in totaal 2.478 software modules geïnstalleerd, waarvan 38 modules voor de GPU-partities en 2.440 modules voor de CPU-only partities. Dit is inclusief verschillende versies en aanpassingen voor de verscheidene partities. In totaal werden installaties voor 753 unieke softwareprojecten uitgevoerd.

De responstijd voor software-installaties is merkbaar langer dan voor andere tickets, en wordt meer in detail besproken bij de Tier-2 UGent opstelling.

Gebruikersbevraging

Ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-1 compute infrastructuur werd bevraagd in de VSC-gebruikersbevraging van 2024. 116 respondenten gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken van deze VSC-service.



Afbeelding 10. Gebruikerstevredenheid voor de Tier-1 compute

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

- 82 % – kwaliteit
- 74 % – responstijd
- 85 % – overeenstemming met verwachtingen
- 78 % – software-installaties
- 83 % – beschikbaarheid
- 84 % – communicatie omtrent onderhoud
- 74 % – documentatie
- 80 % – getting started

De volgende mogelijke suggesties voor verbeteringen werden vermeld.

Resource application

- Implementeer inzage op gebruik Tier-1 SCRATCH storage (1 respondent).
- Vereenvoudig de 2-factor authentication (1 respondent).
- Maak een terminal-versie van resapp (1 respondent).

Documentatie

- Verbeter de documentatie(structuur) (4 respondenten).
- Meer praktisch uitgewerkte voorbeelden van software, workflows (3 respondenten).
- Documentatie voor gebruik van Slurm commando's (1 respondent).
- Verbeter de webpagina voor bedrijfsgebruik (1 respondent).

User experience

- Versnel de doorlooptijd om GPU's te gebruiken (2 respondenten).
- Verleng de wall time voorbij 72h (1 respondent).
- Versnel de responstijd op de helpdesk (2 respondenten).
- Alloceer meer personeel voor de helpdesk (3 respondenten).

Software

- Versnel de responstijd voor software installaties (3 respondenten).
- Doe benchmarks van open source community codes (1 respondent).
- Unificeer software over de clusters heen (1 respondent).

Infrastructuur

- Meer GPU nodes (1 respondent).



Ook mogelijke suggesties voor nieuwe ontwikkelingen in de context van het Tier-1 compute platform werden vermeld.

- Een manier om eenvoudiger data te delen tussen gebruikers (1).
- Automatische backup van Tier-1 compute naar third-party data platform (1).
- Datastorage en -backup voor bedrijven (1).
- Ondersteuning voor XNAT als repository voor (medische) beelden (1).
- Update van de Tier-1 Compute Project Portal om gebruik per project eenvoudiger zichtbaar te maken.
- Meer GPU's (2).
- Specifieke infrastructuur voor foundation model research (1).
- High speed core cluster (cluster met CPU's van bv. 3.8 GHz) (1).
- Verhuur van servers als backend voor web toepassing (1).

Verdere suggesties werden vermeld die het Tier-1 compute platform overstijgen en van relevantie zijn voor heel het VSC.

- Unificeer het job submitatie systeem en het modulesysteem (1).
- Voorzie tutorials rond datamanagement (1).
- Implementeer verdere features om samenwerking makkelijker te maken, bv. door versie control systemen (Gitlab/Github) (1).

Tier-1d Brussel

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. In 2023 werd de Vrije Universiteit Brussel gekozen als verantwoordelijke voor de aankoop, installatie en uitbating.

In 2024 lag de focus op de voorbereiding en uitvoering van de aanbesteding om de Tier-1 supercomputer aan te kopen. Er werden statistieken gemaakt op basis van het gebruik van Hortense om een beter zicht te krijgen op de reële noden van de onderzoeksgemeenschap: hoeveel CPU cores, geheugen, GPU's, enz. worden er gebruikt door de onderzoekers en hoeveel van het gebruik van Hortense vertegenwoordigen ze.

Met deze data werden er vier verschillende workshops georganiseerd met onderzoekers uit de hele VSC-gemeenschap op basis van volgende domeinen:

- fysica & chemie op 11 januari,
- klimaat en CFD (vloeistofdynamica) 16 januari,
- life sciences en humane wetenschappen op 18 januari.

Er was ook nog een online sessie op 25 januari voor degenen die niet beschikbaar waren op een van de drie andere workshops. Op elke workshop was er een introductie en werden de inzichten van de beurs Supercomputing 2023 gepresenteerd, samen met de gebruiksstatistieken van Hortense. De verzamelde wensen en inzichten van de gebruikers vormden de bron om de technische vereisten voor de volgende Tier-1 neer te schrijven.

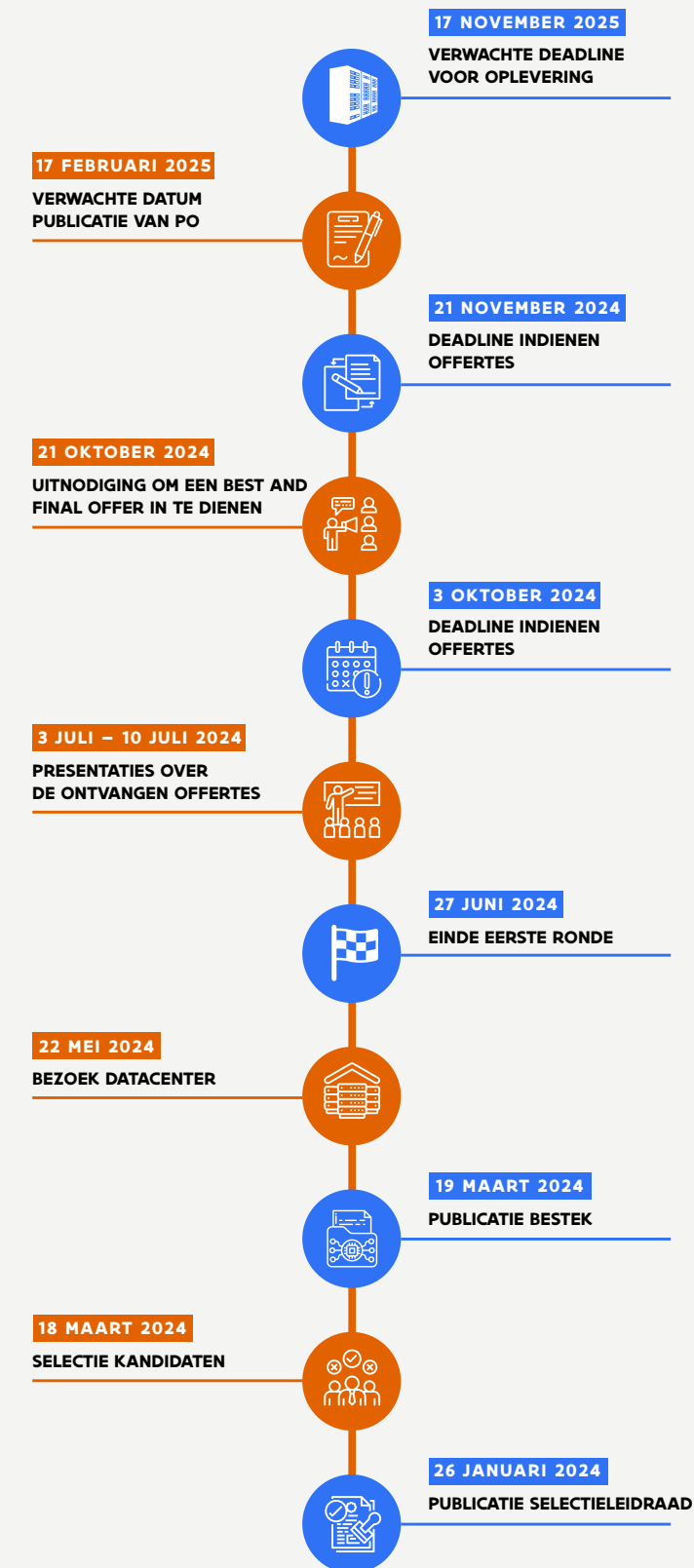
Er werd gekozen voor een Europese aanbesteding in stappen en met meerdere rondes. In de eerste stap moesten leveranciers zich kandidaat stellen. Na de doorselectie startte de eerste ronde en kregen de geselecteerde kandidaten het volledige bestek inclusief de technische vereisten. Er werd een datacenter bezoek georganiseerd en op het einde van de eerste ronde moest men een eerste versie van offerte indienen die nadien kon worden toegelicht. De jury bestaande uit 2 personen van de Vrije Universiteit Brussel, aangevuld met iemand van UAntwerpen en KU Leuven gaf feedback en er werden een aantal lichte bijstellingen aan het bestek uitgevoerd. Na de zomer liep de tweede ronde af en werden de ingediende offertes formeel beoordeeld. Enkel de beste mochten naar de volgende ronde (Best and Final Offer). De hele procedure is in december afgerond maar de administratie errond nog niet. De communicatie over de specificaties van de volgende Tier-1 supercomputer komen pas in 2025. De machine moet tegen eind 2025 operationeel zijn.



Afbeelding 11. Green Energy Park in Zellik VUB

Afbeelding 12. Timeline van Tier-1d

VSC TIER-1D VAN SELECTIE TOT OPLEVERING



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 in de VSC compute- of cloudomgevingen. Publicatie en lange termijn bewaren gebeurt op andere platformen, maar de beschikbaarheid van de metadata zal de overgang naar deze fase wel kunnen faciliteren.

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. In 2024 is de opzet van de Quality en Test omgeving identiek gemaakt aan de productieomgeving. Dit laat toe om na development en testen nieuwe features uit te rollen alvorens deze naar de productieomgeving te brengen.

Exploitatie en gebruik

Er werden 2 iRODS upgrades uitgevoerd (4.3.2 en 4.3.3) zodat het VSC de ontwikkeling van het consortium volgt. ManGO portal, de GUI-omgeving boven op de iRODS infrastructuur, werd door KU Leuven verder ontwikkeld. In 2024 werden 4 main versies van de portal gereleased (v0.15, v0.16, v0.17 en v0.18) plus een aantal extra minor en bug fix releases. De Python iRODS Client (PRC) die gebruikt wordt als basis voor de ManGO portal werd geüpgraded tot de versie 2.2.0 en ook alle Python packages werden geüpgraded naar de laatste versie. Met deze releases wordt getracht om de evoluerende noden van de onderzoekers zo goed mogelijk te beantwoorden. De belangrijkste features die in 2024 ontwikkeld werden zijn de gallery view met previews van bepaalde bestandsformaten, audit functionaliteit en de implementatie van een workflow framework. De audit informatie die wordt gelogd heeft betrekking tot acties die op bestanden zijn gebeurd (aanmaken, lezen, wijzigen, verwijderen, ...), wanneer ze zijn gebeurd, met welke client en wie ze heeft uitgevoerd. De eigenaar van de bestanden kan deze eenvoudig bekijken in de webportal. Met behulp van het gebruikersondersteuningsteam kunnen ook rapporten gemaakt worden van verwijderde bestanden.

ManGOFlow, een framework om workflows te kunnen samenstellen en uitvoeren op een schaalbare wijze, werd uitgerold (bv. conversie van nieuwe bestanden). Workflows die meer compute vereisen kunnen dan ook uitgevoerd worden buiten de iRODS infrastructuur. De workflows kunnen opgezet worden met de ondersteuners.

De metadataschema manager is de tool in de ManGO portal die gebruikt wordt om rijke en gestructureerde metadata toe te voegen aan zowel data objecten als collecties. In 2024 werd de metadataschema manager verbeterd en uitgebreid met nieuwe functionaliteiten. Er is een betere module om complexe velden in metadataschema's te editeren en datetime velden worden ook beter behandeld. De nieuw ontwikkelde functionaliteit bevat een "library of metadata fields". Deze is gebaseerd op velden van metadata standaarden (bijv. DataCite). Onderzoekers kunnen die standaard velden eenvoudig gebruiken als building blocks voor het aanmaken van eigen metadataschema's.

In 2024 is de source code van ManGO Portal (<https://github.com/kuleuven/mango-portal>) ook gepubliceerd als een open source project zodat deze beschikbaar is binnen de grotere iRODS community. Hiervoor was een refactoring van de code nodig. Om de portal meer generiek te maken werden afhankelijkheden van specifieke VSC-modules verwijderd. Het is een minimale core met de basis functionaliteiten. Optioneel kunnen bijkomende functionaliteiten als plugins toegevoegd worden. Hiermee is het eenvoudiger voor een nieuwe partij om ManGO portal te implementeren in een andere omgeving en kan de ondersteuning van de community dan ook verbreden.

Niet enkel de portal, maar ook de volledige service wordt steeds verder ontwikkeld. De ManGO Ingest tool werd gemaakt zodat data vanop bv. een HPC cluster automatisch opgeladen kan worden naar Tier-1 data. ManGO Ingest is een op Python gebaseerde tool die naadloos gegevens in Tier-1 data opneemt van elke client (bijv. HPC-systemen, wetenschappelijke instrumenten). Het bevat functionaliteit om een specifieke map te monitoren op nieuwe bestanden, deze automatisch te uploaden naar een vooraf gedefinieerd pad, metadata toe te voegen en de integriteit van de overdrachten te controleren.

De datasets in Tier-1 data zijn niet bedoeld om eeuwig te blijven staan in de Tier-1 data omgeving. Er kan verwacht worden dat een subset van de data naar domeinspecifieke repositories verplaatst wordt en andere data zal verhuizen naar een archief oplossing. Om de integratie van Tier-1 data met externe data publicatie repositories te faciliteren zijn verschillende ontwikkelingen uitgevoerd. De tool voor rechtstreekse upload naar een Dataverse data publicatie repository zorgt ervoor dat:

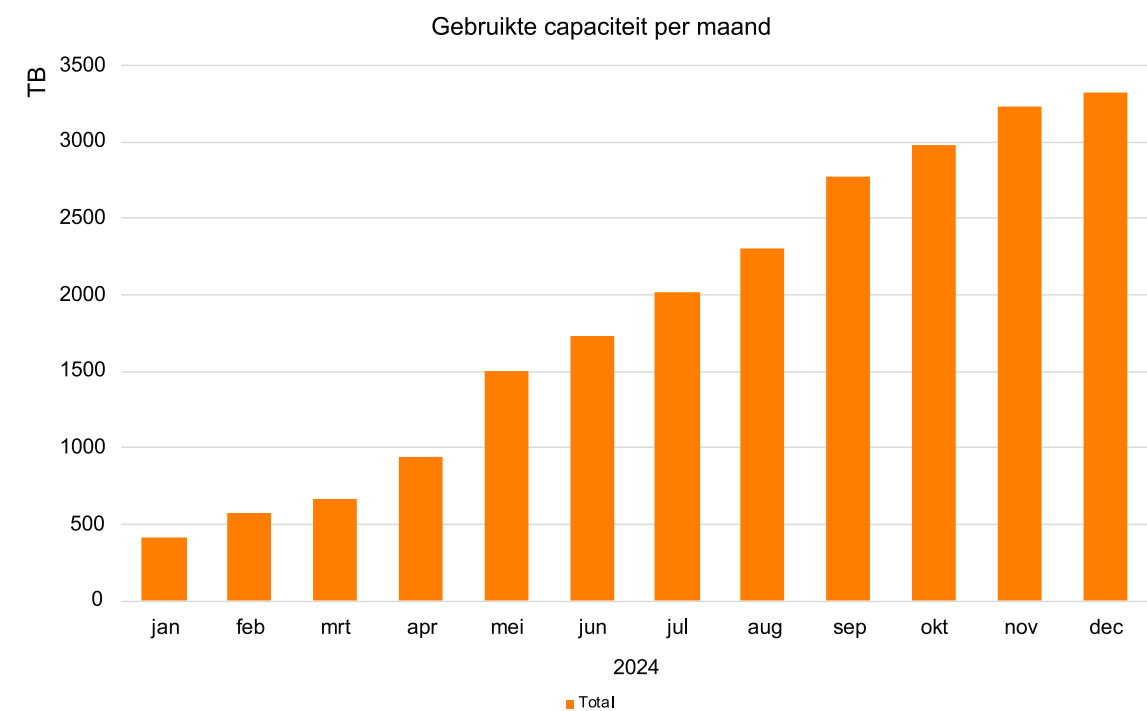
- een draft dataset wordt aangemaakt in de Dataverse repository met de repository specifieke nodige minimaal verplichte metadata. De geselecteerde files worden rechtstreeks geüpload van iRODS naar Dataverse (server to server),
- metadata met de DOI van een dataset wordt toegevoegd aan de dataset in Tier-1 data zodat gedocumenteerd is dat die dataset gepubliceerd werd.

In een volgende fase zal de omgekeerde richting (een dataset gepubliceerd in een Dataverse repository direct naar Tier-1 data te downloaden op basis van de DOI) mogelijk gemaakt worden. Op deze manier zal de herbruikbaarheid van gepubliceerde datasets vergemakkelijkt worden.

Bovendien is de ontwikkeling van een nieuwe feature gestart om gemakkelijk data van Tier-1 data (inclusief alle metadata) te kunnen exporteren. Hierbij wordt gebruik gemaakt van standaardformaten (bagit en RO-crate) zodat data eventueel kan geïmporteerd worden in andere systemen die deze standaardformaten ondersteunen. Die feature is momenteel in testfase en zal eind 2025 beschikbaar worden.

Tier-1 data gebruik

De onderstaande grafiek toont de evolutie van de gebruikte capaciteit in 2024.



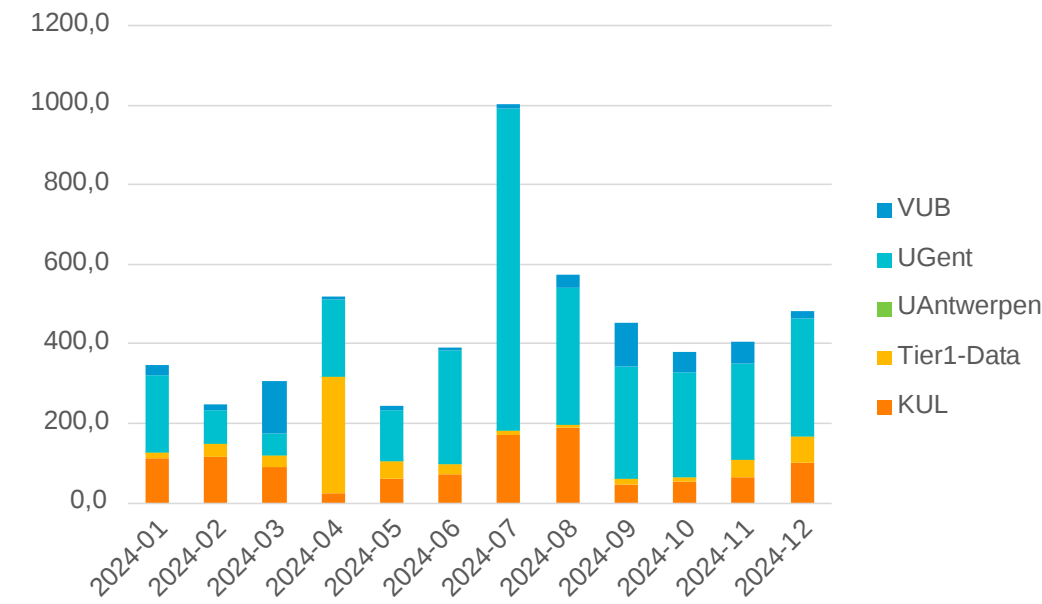
Afbeelding 13. Tier-1 data gebruikte capaciteit in 2024.

Globus uitrol en gebruik

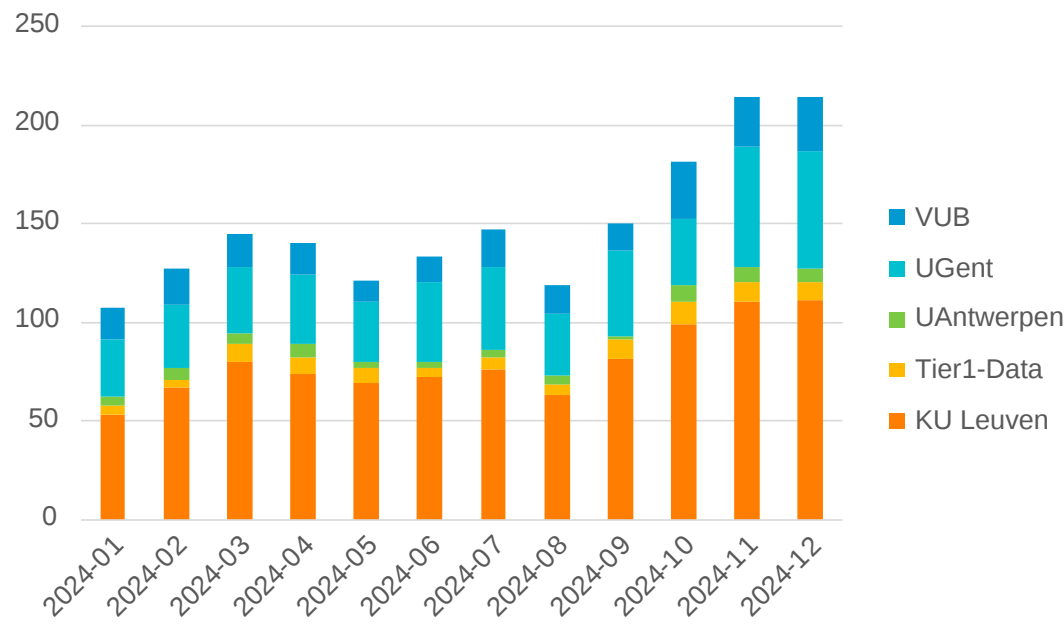
Globus online (www.globus.org) is een softwareoplossing om gegevens te kunnen uitwisselen op een veilige, snelle en betrouwbare manier tussen verschillende opslagoplossingen. Zoals onderstaande grafiek toont, gebruiken alle VSC sites de oplossing om transfers uit te voeren tussen verschillende VSC componenten en een groot aantal endpoints. Een 200-tal gebruikers verplaatsten in totaal meer dan 5.3 PB aan data met Globus. Ten opzichte van vorig jaar is dit meer dan een verdubbeling.



Afbeelding 14. Webpagina Globus.org



Afbeelding 15. Globus-uitrol en datatransfers bij VSC in 2024



Afbeelding 16. Groei in unieke Globus-gebruikers per VSC-site in 2024

Toekennen opslagcapaciteit

De toekenning van Tier-1 data-projecten verloopt via projectaanvragen. In 2024 waren er zes projectaanvragen die op een termijn van vier jaar een totaal van 2.670 TB aan storage zullen gebruiken.

Bovendien werden er 3 collaboration grants aangevraagd voor een totaal van 7,015 PB aan gevraagde dataopslag.

Gebruikersondersteuning

In 2024 zijn trainingssessies gegeven voor zowel HPC-ondersteuners als voor onderzoekers. Een specifieke sessie voor Globus werd bijgewoond door 44 onderzoekers. Tier-1 data documentatie werd aangepast met up-to-date informatie m.b.t. login procedures met de iPython client, iCommands installaties op de VSC-clusters en nieuwe portal functionaliteit. Het gebruikersondersteuningsteam organiseerde intake gespreken met verschillende onderzoeksteams ter voorbereiding van een aanvraag en om ze te helpen met starten.

Specifieke ondersteuning

Voor een aantal projecten, bv. VIB, werden op maat training sessies gehouden.

Het iRODS consortium

Tijdens de jaarlijkse iRODS User Group Meeting (iRODS) werden drie presentaties gegeven door KU Leuven en één lightning talk.

- Python package for metadataschemas.
- ManGO Portal (iRODS PRC based web UI): Feature updates, including extension points and workflows.
- Streamlining iRODS: Kafka-based Data Pipelines.
- iRODS Dataverse Integration.

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.



Afbeelding 17. Groepsfoto van iRODS User Group Meeting 2024

Gebruikersbevraging

Er werd gepeild naar de tevredenheid in de VSC-gebruikersbevraging eind 2024. Voor Tier-1 data gaven 32 verschillende respondenten aan in meer of mindere mate gebruik te maken van deze VSC-service.

Onderstaande componenten van de Tier-1 data infrastructuur werden door gebruikers als ‘goed’ of ‘excellent’ beoordeeld.

- 93 % kwaliteit
- 85 % responstijd
- 90 % overeenstemming met verwachtingen
- 84 % gebruik clients
- 88 % beschikbaarheid
- 80 % communicatie omtrent onderhoud
- 77 % documentatie
- 74 % getting started

De globale resultaten zijn wat beter dan vorig jaar, documentatie blijft een aandachtspunt. Voor de “Getting started” vraag waren er relatief veel neutrale antwoorden. Mogelijk wordt deze vraag niet relevant bevonden door respondenten die al langer geleden gestart zijn met de service.

Showcase

VSC Success Story: PIDGIN – Data Entry & Data Retrieval

A video player interface showing a success story. The video title is 'PIDGIN Data Entry & Data Retrieval'. The description mentions 'Using AI & HPC to enhance lung cancer diagnosis by digitizing tissue slides for precise analysis. Discover how VSC's Tier-1 Data & Compute streamline medical research.' The video is from 'UHASSELT' and is part of 'SUCCESS STORIES'. The player has a play button, progress bar, and settings icons.

Bekijk op VSC **YouTube**

AI en High-Performance Computing transformeren de diagnose van kanker. Het PIDGIN-project aan de Universiteit Hasselt overbruggt de kloof tussen oncologie, pathologie, biomedische wetenschap en datawetenschap om geavanceerde diagnostische hulpmiddelen voor longkanker te ontwikkelen.

Door gebruik te maken van de Tier-1 data en compute resources van VSC kunnen onderzoekers:

- microscopische weefselcouples analyseren met AI,
- enorme datasets moeiteloos opslaan en beheren,
- grootschalige batchverwerking uitvoeren voor betere detectie,
- metadata extraheren om beeldvorming en diagnostiek te verbeteren.

Met de supercomputinginfrastructuur van VSC versnelt het PIDGIN-team medisch onderzoek, waardoor de weg wordt vrijgemaakt voor nauwkeurigere en data-gedreven kankerdiagnostiek. Een succesverhaal over dit Tier-1 data-project werd gepubliceerd op de VSC-website.



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 postprocessingtaken.

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 (VM's), 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.

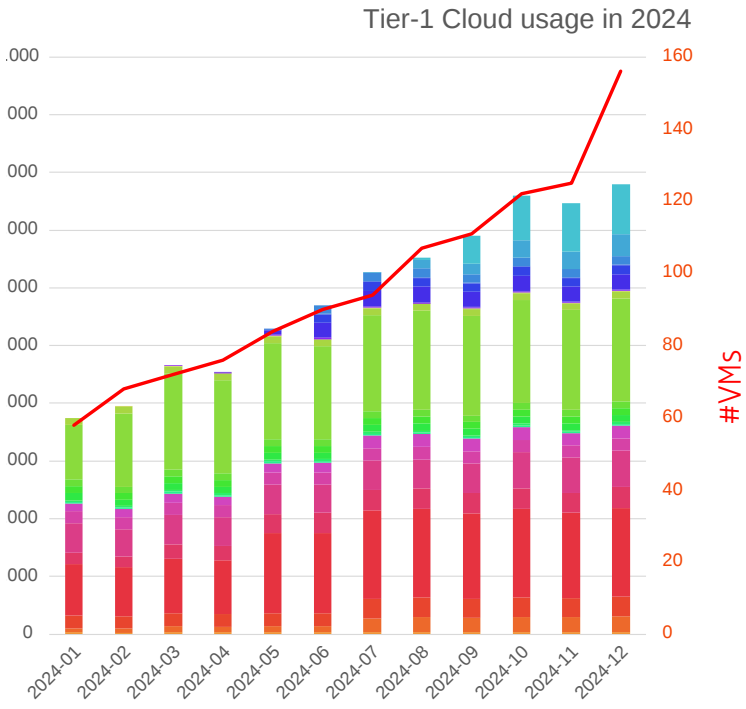
Om de functionaliteit van de Tier-1 cloud service in stand te houden werden in 2024 verscheidene aanpassingen voorbereid en doorgevoerd.

- Een omschakeling werd onderzocht naar het gebruik van Prometheus als basis om de hardware en configuratie van de Tier-1 cloud opstelling te monitoren. Initiële tests werden met succes afgerond.
- Voorbereidingen werden getroffen om de servers waarop de Tier-1 cloud infrastructuur draait over te schakelen naar Red Hat Enterprise Linux 9.0. RHEL 8 is niet langer ondersteund en ook OpenStack bouwt hier niet langer op verder. Deze hogere versie komt bovendien tegemoet aan de security ambities van het VSC. Deze upgrade is niet evident, zeker omdat ook bijkomend de storage servers van het cloud systeem moeten geüpdatet worden van Ceph4 naar Ceph5. De testopstelling werd met succes afgewerkt. Finale uitrol staat gepland voor 2025Q1, na een aangekondigde downtime van de cloud infrastructuur.

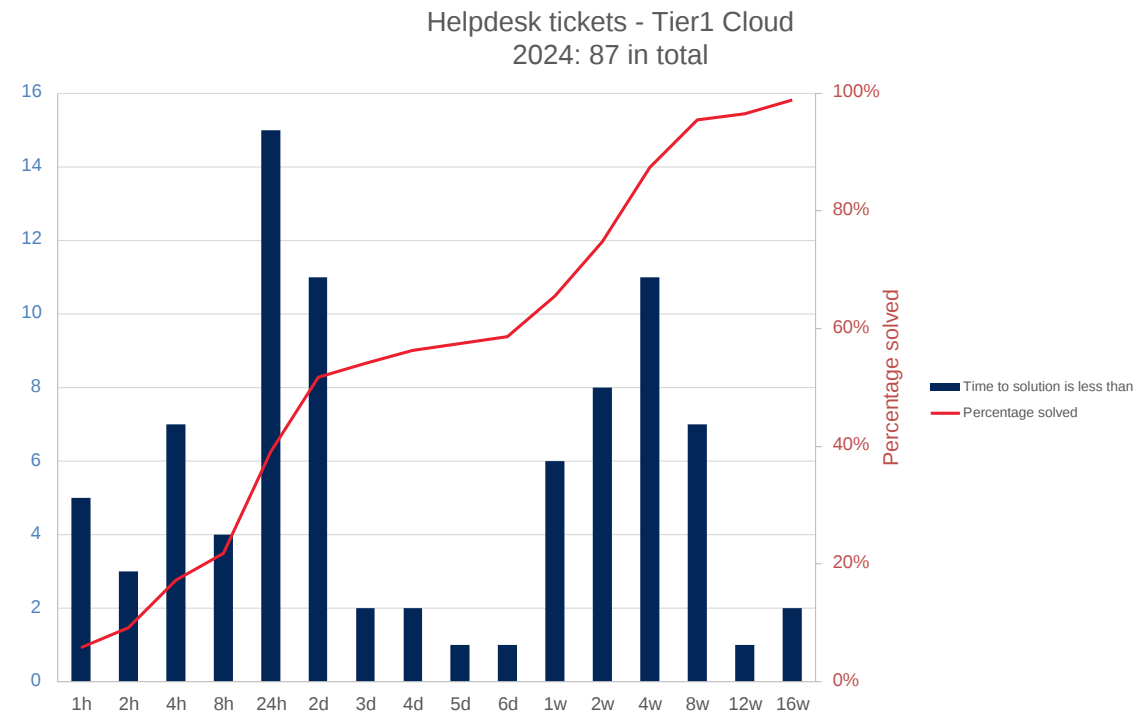
Als user feature in de kijker werd in 2024 een proof of concept uitgewerkt om Windows op de Tier-1 cloud opstelling te draaien. Hoewel de focus voor projecten op de Tier-1 cloud opstelling voornamelijk gericht is op Linux applicaties, bieden virtuele machines evenwel de mogelijkheid om ook typische Windows workflows te draaien, native in een Windows operating system. Documentatie werd uitgewerkt en is reeds voorhanden op (<https://docs.vscentrum.be/cloud/windows.html>). Een demo video wordt in de loop van 2025 gepubliceerd.

Gebruik en beschikbaarheid

Net als in 2023 is een gestage groei merkbaar voor zowel het totale aantal gebruikte virtuele machines (VM's) en de geconsumeerde rekentijd. In totaal waren er 28 verschillende Tier-1 cloud projecten actief in 2024, die een totale rekentijd ten belope van 7.212.454 CPU-uur hebben verbruikt. Er werden 9 full proposals en 8 starting grants aangevraagd, waarvan uiteindelijk 8 full proposals en 8 starting grants werden toegekend. Eén full proposal aanvraag werd niet weerhouden. Ook in de context van de Collaboration grant "VIB Data Core" door een consortium van VIB, UGent, KU Leuven, UAntwerpen, Vrije Universiteit Brussel en UHasselt werden verscheidene (sub)projecten operationeel gebracht.



Afbeelding 18. Gebruiksstatistieken voor Tier-1 cloud platform in 2024



Afbeelding 19. Tier-1 cloud gebruikersondersteuning in 2024

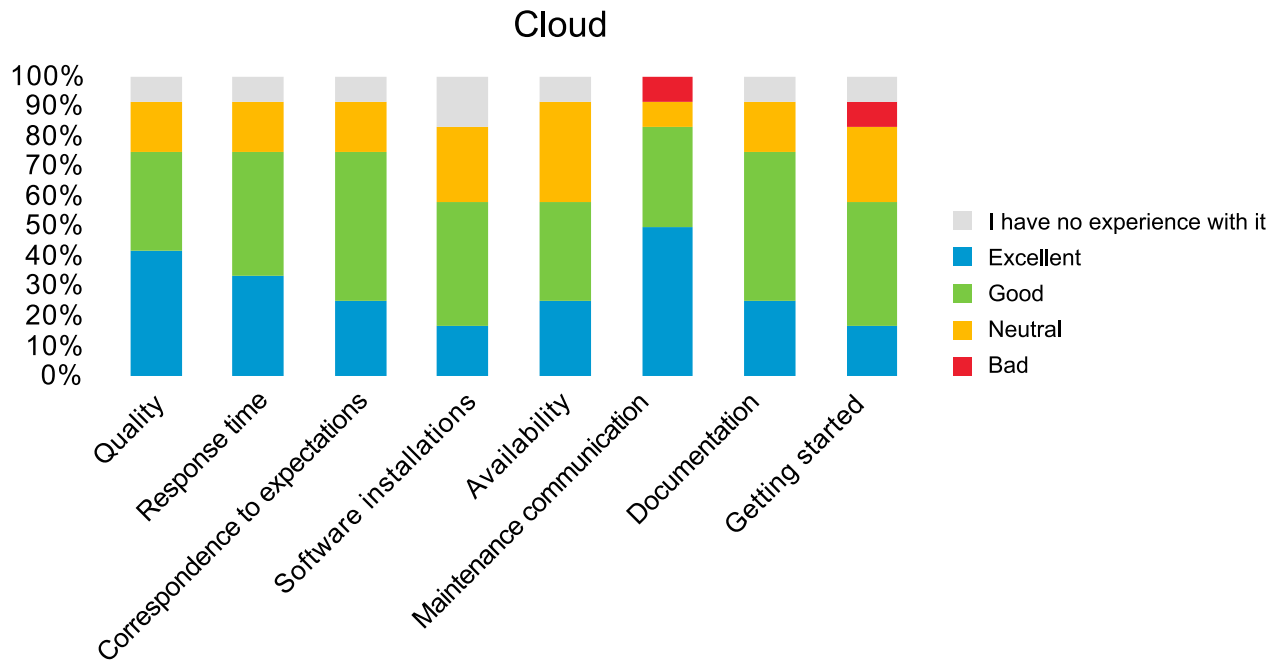
De specifieke Tier-1 cloud gebruikersondersteuning (cloud@vscentrum.be) sloot in 2024 in totaal 87 tickets. Meer dan de helft van de cases werd opgelost binnen de 48u.

Gebruikersbevraging

De gebruikerstevredenheid voor de Tier-1 cloud infrastructuur werd ook bevraagd in de VSC-gebruikersbevraging eind 2024. Slechts een beperkt aantal respondenten (12) gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken van de Tier-1 cloud infrastructuur.

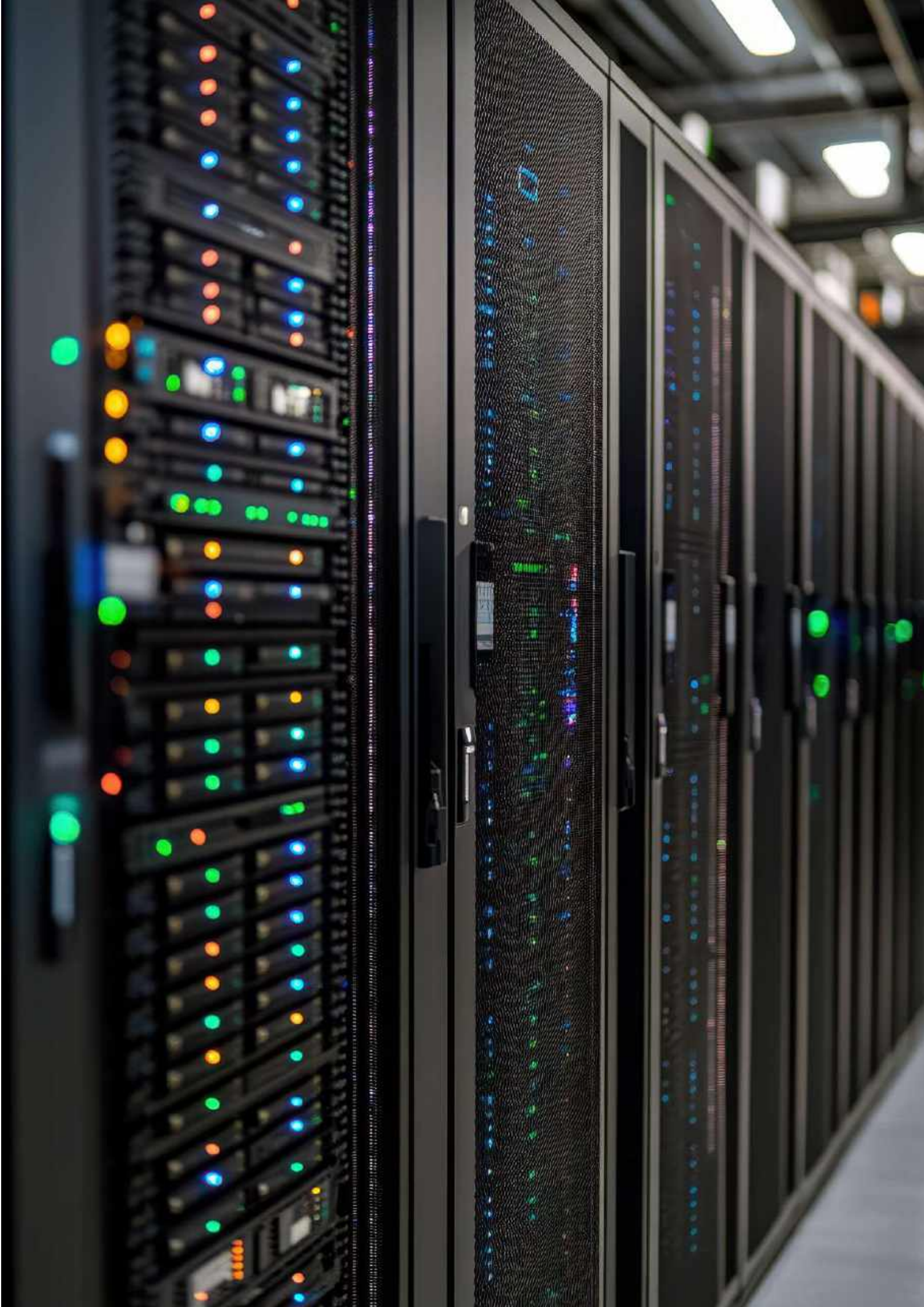
Onderstaande componenten van de Tier-1 cloud infrastructuur werden door gebruikers als 'goed' of 'excellent' beoordeeld:

- 93 % - kwaliteit
- 85 % - responstijd
- 90 % - overeenstemming met verwachtingen
- 84 % - software installaties
- 88 % - beschikbaarheid
- 80 % - communicatie omtrent onderhoud
- 77 % - documentatie
- 74 % - getting started



Afbeelding 20. Gebruikerstevredenheid voor de Tier-1 cloud





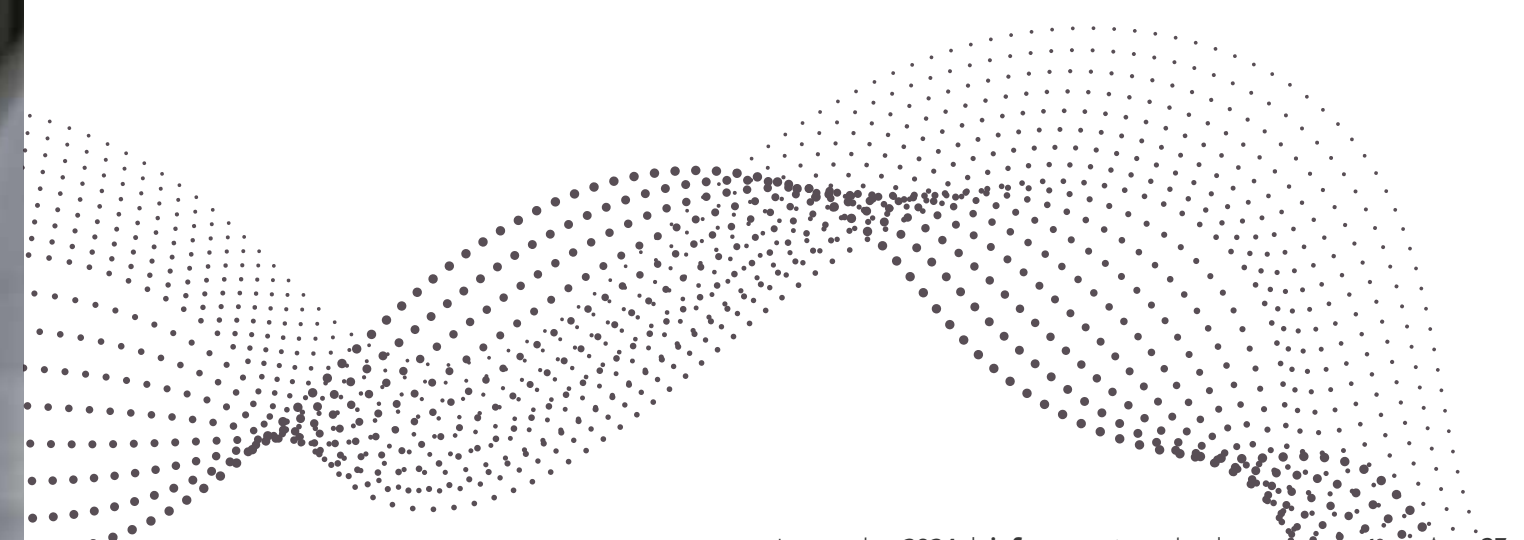
Research, Development and Innovation (RDI)

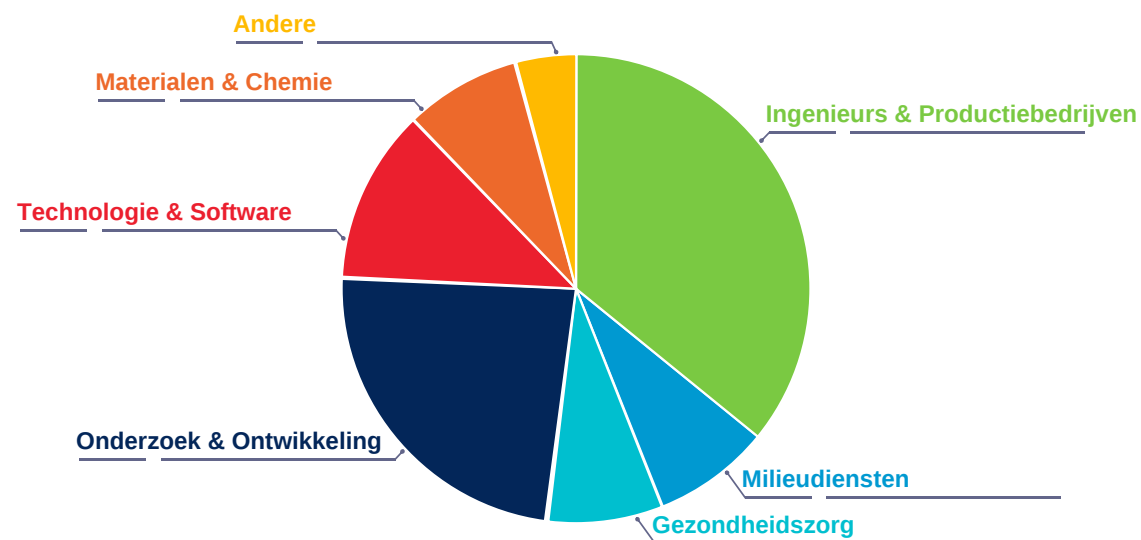
Naar aanleiding van het VSC 2.0 plan startte de Vrije Universiteit Brussel in juni 2023 het Research, Development & Innovation (RDI) office van het VSC op. Dit centraal aanspreekpunt voor niet-academische RDI-gebruikers bestaat uit een VTE business developer die tevens wordt bijgestaan door 2 extra collega's die actief zijn binnen het kader van het Europese EuroCC project. Daarnaast wordt de directe eerste lijn ondersteuning voor RDI-gebruikers verzorgd door 1 VTE met een meer technisch profiel. Deze persoon krijgt hierbij ook ondersteuning van de Tier-1 hosting instelling zelf, zijnde de UGent.

Het administratief en juridisch gedeelte betreffende de opmaak van contracten, onboardingsprocedure en finale facturering door de administratieve coördinator (Vrije Universiteit Brussel) werd in 2024 volledig operationeel. Met het oog op de komende Tier-1d infrastructuur werd eveneens reeds ingezet op het verder verfijnen en waar mogelijk automatiseren van de huidige procedures.

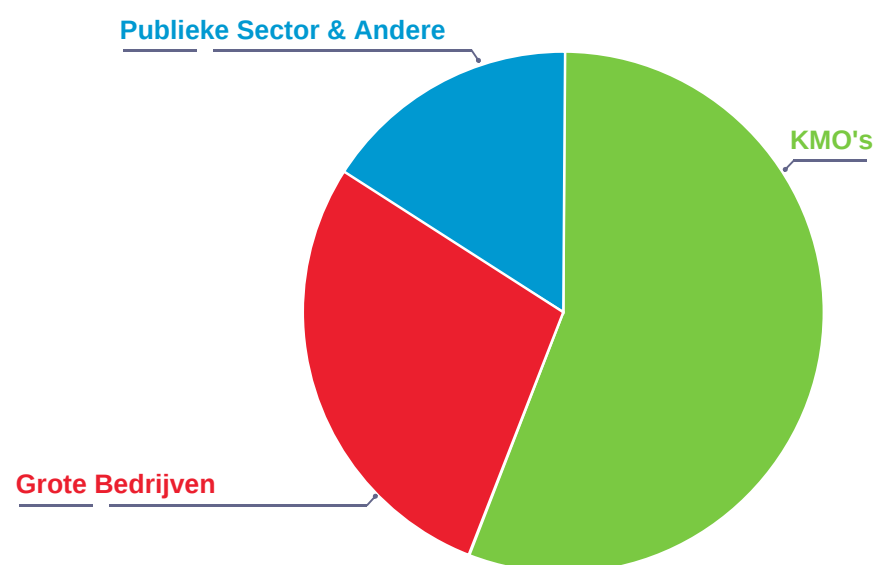
Klantenbestand

De vraag naar niet-academisch gebruik van VSC Tier-1 compute diensten nam het voorbij jaar uitgesproken toe. Aldus werden er 14 nieuwe exploratory contracten door zowel KMO's, grote bedrijven en openbare diensten ondertekend, hetgeen overeenstemt met een quasi verdubbeling ten opzichte van 2023. Deze exploratory contracten staan deze nieuwe gebruikers toe de geschiktheid van de beschikbare Tier-1 Hortense infrastructuur voor hun specifieke doeleinden na te gaan. Hiervoor worden € 5.000 aan VSC-credits gratis ter beschikking gesteld, dewelke zij vervolgens naar keuze kunnen spenderen aan CPU- en/of GPU-resources. Boven op het aantrekken van deze nieuwe gebruikers werden 11 exploratory contracten eveneens omgezet naar een betaald contract (~70 % omzettingsgraad) en werden 9 van onze al bestaande contracten met een jaar verlengd. Dit resulteert in een huidig gebruikersportfolio van 25 klanten, waarbij zoals aangegeven in onderstaande grafiek meer dan de helft (56 %) een KMO is. Daarnaast maken ook verschillende multinationals gebruik van onze VSC-infrastructuur. Minstens even opmerkelijk is de toegenomen diversiteit van dit klantenbestand. Zodoende blijkt de meerderheid van onze bedrijven nog steeds actief binnen de ingenieurswereld (9), maar ook gebruikers binnen de gezondheidszorg (2), milieu (2) en technologieontwikkeling (3) vonden dit jaar de weg naar het VSC.





Afbeelding 21. Verdeling klanten naar type organisatie



Afbeelding 22. Verdeling klanten naar sector

Dit toenemend klantenbestand kan worden toegeschreven aan verschillende outreach-specifieke acties die doorheen het jaar door het RDI-team werden ondernomen. Aanschaffing van LinkedIn Sales Navigator licenties stond desbetreffende toe op een efficiëntere en meer doelgerichte manier nieuwe leads te identificeren en te contacteren. Er werd eveneens sterk ingezet op een verhoogde zichtbaarheid van ons niet-academisch aanbod door deelname aan verschillende regionale, nationale en internationale events. We presenteerden ons zodoende als een alternatieve provider van compute diensten voor de industrie en publieke sector door middel van booths op de Trefdag Digitaal Vlaanderen en het Science For Health forum.

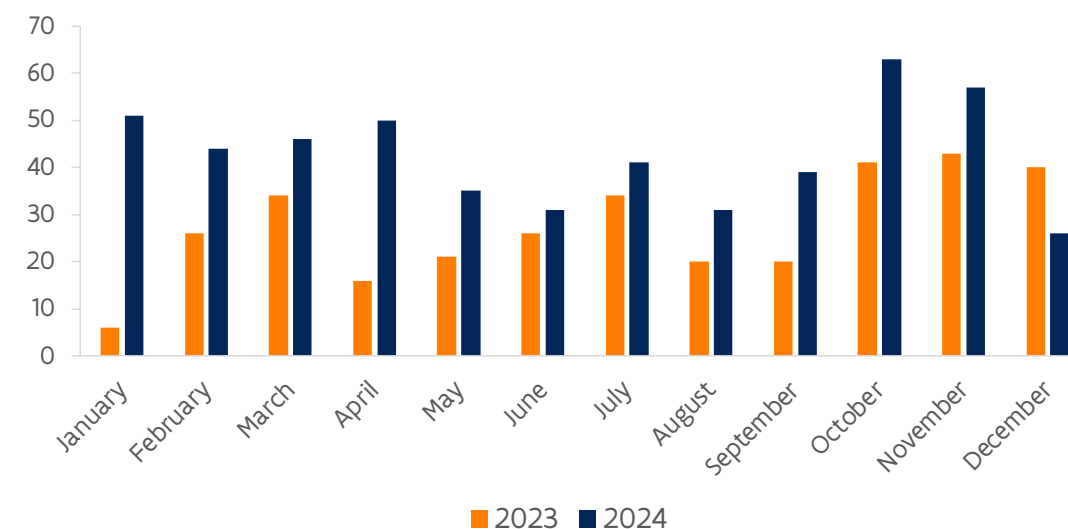
Het RDI-office was ook aanwezig op AI-specifieke netwerk events zoals het Flanders AI forum en de FARI 2024 conference en nam als lid van het EuroCC consortium onder meer deel aan de EuroHPC Summit in Antwerpen en de algemene vergadering met alle EuroCC partners in Slovaakse. Daarnaast werden contacten met sectorspecifieke organisaties zoals Agoria en VLAIO verdergezet, terwijl ook VOKA en het AI Expertisecentrum van de Vlaamse overheid geïntroduceerd werden met het VSC-aanbod. De samenwerking met deze organisaties moet het RDI-office helpen sneller en efficiënter in contact te komen met de brede waaier aan Vlaamse KMO's.

Dit alles heeft er mee voor gezorgd dat over het boekjaar 2024 voor een totaalbedrag van 557.346,12 euro aan facturen werden uitgestuurd. Deze facturering is uitsluitend gebaseerd op de effectief gebruikte rekentijd (CPU- of GPU-uren) en de gereserveerde opslagcapaciteit volgens de volgende prijsstructuur (incl. BTW): 24 euro voor 1 CPU-node/dag, 94 euro voor 1 GPU-node/dag en 16 euro voor elke extra TB opslag/maand. Ten opzichte van vorig jaar liggen deze inkomsten 160.958,21 euro lager, maar dit is volledig toe te schrijven aan het eenmalig extensieve gebruik van de infrastructuur in 2023 eerder dan aan tegenvallende resultaten in 2024. We kunnen bovendien al meegeven dat er verschillende nieuwe exploratory contracten in de beginmaanden van 2025 werden opgestart, wat er bijgevolg op wijst dat ons RDI-office opnieuw een succesvol jaar voor de boeg heeft!

Ondersteuning

Naast het aantrekken van nieuwe gebruikers staat het RDI-office in samenwerking met de Tier-1 hosting instelling (UGent) eveneens in voor de dagelijkse technische ondersteuning van deze niet-academische gebruikers. Elke aanvraag tot ondersteuning gebeurt via compute@vscentrum.be waarna het helpdesksysteem van de UGent alle vragen verwerkt en toekent aan de relevante medewerker. In overeenstemming met het toenemend aantal nieuwe gebruikers, werden het voorbije jaar eveneens een groter aantal vragen tot ondersteuning behandeld. In 2024 werden zodoende in totaal 410 tickets opgelost. Ter illustratie: het aantal vragen van RDI-gebruikers is tussen juni en december met 40 % gestegen ten opzichte van dezelfde periode in 2023 (start van het RDI-office). Deze tickets hebben zowel betrekking op technische kwesties zoals software-installaties, troubleshooting en workflowoptimalisatie als meer administratieve zaken zoals onboarding en projectbeheer.

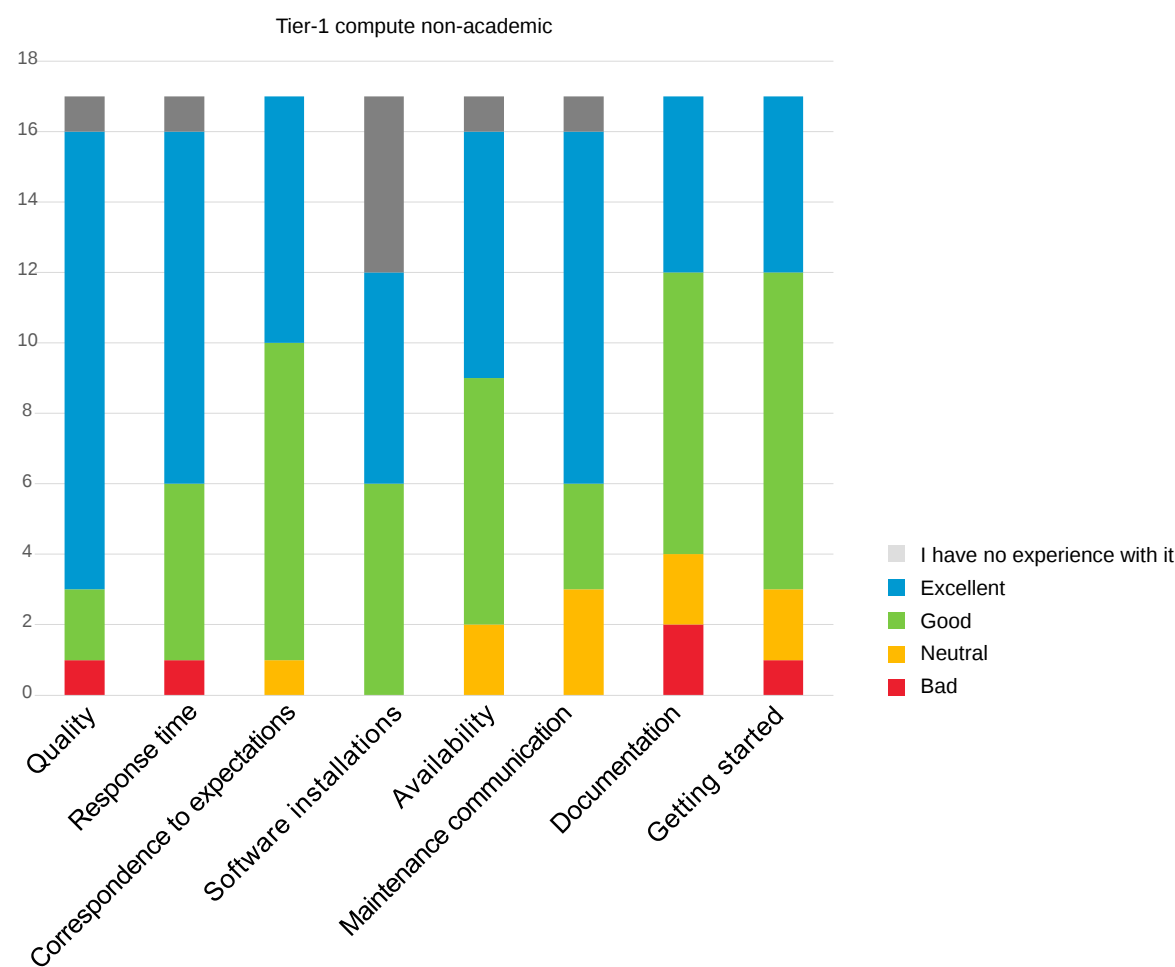
Industry Helpdesk Tickets



Afbeelding 23.
Helpdesktickets
Industrie

Gebruikersbevraging

Net als voor academische gebruikers, werd in de VSC-gebruikersbevraging naar de tevredenheid van onze niet-academische gebruikers voor de Tier-1 compute infrastructuur en bijhorende diensten gepeild. Aan deze bevraging namen 17 personen met een link in een privébedrijf deel en hun oordeel gaande van slecht tot excellente dienstverlening wordt hieronder grafisch weergegeven.



Afbeelding 24. Tier-1 compute non-academic

Uit deze figuur kan worden opgemaakt dat de verleende VSC-diensten door deze doelgroep als uiterst positief worden ervaren. Zodoende wordt de algemene kwaliteit van de dienstverlening (15/16), de responstijd (15/16) en de overeenstemming met verwachtingen (16/17) door 94 % van de respondenten beoordeeld als ‘goed’ of ‘excellent’, terwijl voor software-installaties (12/12) zelfs een score van 100 % wordt verkregen.

Voor de resterende componenten was de beoordeling als volgt:

- 88 % (14/16) - beschikbaarheid
- 81 % (13/16) - communicatie omtrent onderhoud
- 77 % (13/17) - documentatie
- 82 % (14/17) - eenvoud waarmee nieuwe gebruikers aan de slag kunnen met de cluster

Documentatie is met 77 % de minst goed gequoteerde categorie. Dit is mogelijks toe te schrijven aan het feit dat deze initieel werd uitgeschreven voor onze academische gebruikers en bijgevolg verschillende verwijzingen bevat naar de Tier-2 clusters. Daar deze laatstgenoemde clusters voornamelijk dienen voor academische doeleinden en het gebruik ervan bepaalde verschillen vertoont ten opzichte van de Tier-1 compute infrastructuur kan dit voor niet-academische gebruikers als verwarrend worden ervaren. Ten einde dit probleem weg te werken zal de VSC-documentatie in 2025 worden herschreven en onderverdeeld in subcategorieën, dewelke als klikbare links zullen verschijnen op de homepage. Zodoende zullen niet-academische gebruikers direct kunnen worden doorverwezen naar de voor hen relevante documentatie.

Naast het beoordelen van de reeds bestaande diensten, werden eveneens mogelijke suggesties voor verbeteringen achtergelaten:

- Investeer in een groter aantal GPU nodes en performantere CPU nodes (5)
- Voorzie geautomatiseerde backups van data gegenereerd door bedrijven op Tier-1 compute (2)
- De info voor niet-academisch gebruik van VSC-diensten op de website is onduidelijk (1)
- Breid de walltime van 72u uit voor simulaties op Tier-1 compute (1)

Hiermee werd reeds aan de slag gegaan. Zodoende onderging de VSC-website een opfrisbeurt, waarbij alle info die betrekking heeft tot niet-academisch gebruik van onze diensten werd samengevat in een nieuw en afzonderlijk tabblad. Met de bouw van het nieuwe VSC Tier-1d systeem zal de hardware eveneens een volledige make-over ondergaan, waarbij de nieuwste en efficiëntere generaties aan GPU en CPU nodes tegen eind 2025 ter beschikking van onze gebruikers zullen worden gesteld.

“We are extremely happy with everything VSC provides.”

Antea Belgium

“The support service to enroll was great and the system is easy to use if you have basic knowledge of HSPC. The modules are easy to understand and use.”

Raidyn

“I think, you are doing a great job! Keep it up, please!”

Umicore

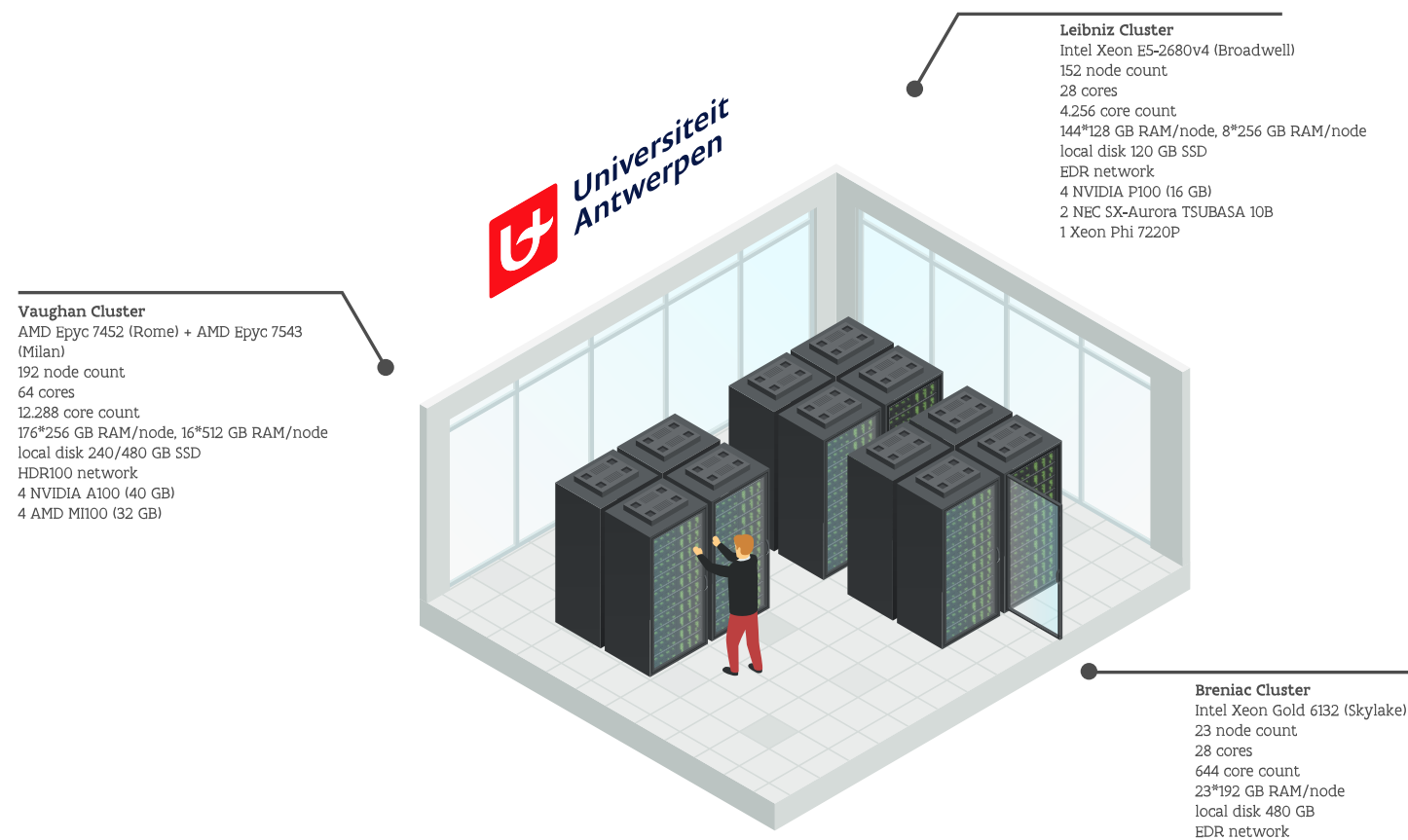
Tier-2 supercomputer platform

► Universiteit Antwerpen

Beschikbare infrastructuur

In 2024 zijn er geen aanpassingen gebeurd aan de bestaande Leibniz en Vaughan clusters. De configuratie ziet er dus nog steeds uit als volgt:

- 3 clusters, met CPU-, GPU- en large mem-partities
- 681 TF CPU, 106 TF GPU
- 17.216 CPU cores, 12 GPU devices, 2 specifieke acceleratoren
- 620 TB scratch file systeem



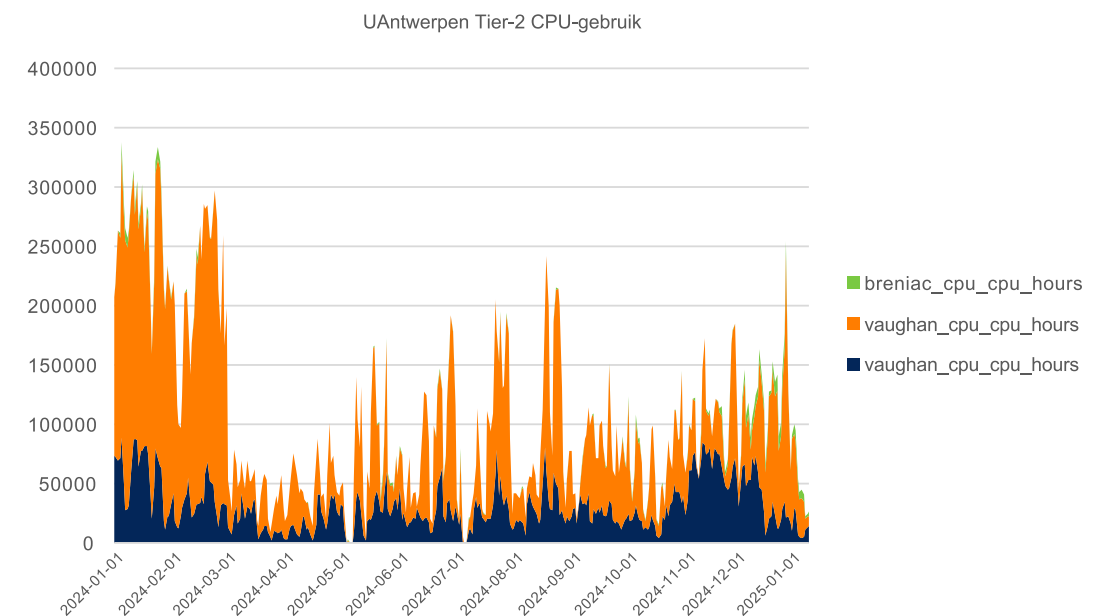
▲ Afbeelding 25. Tier-2 infrastructuur UAntwerpen

Exploitatie en gebruik

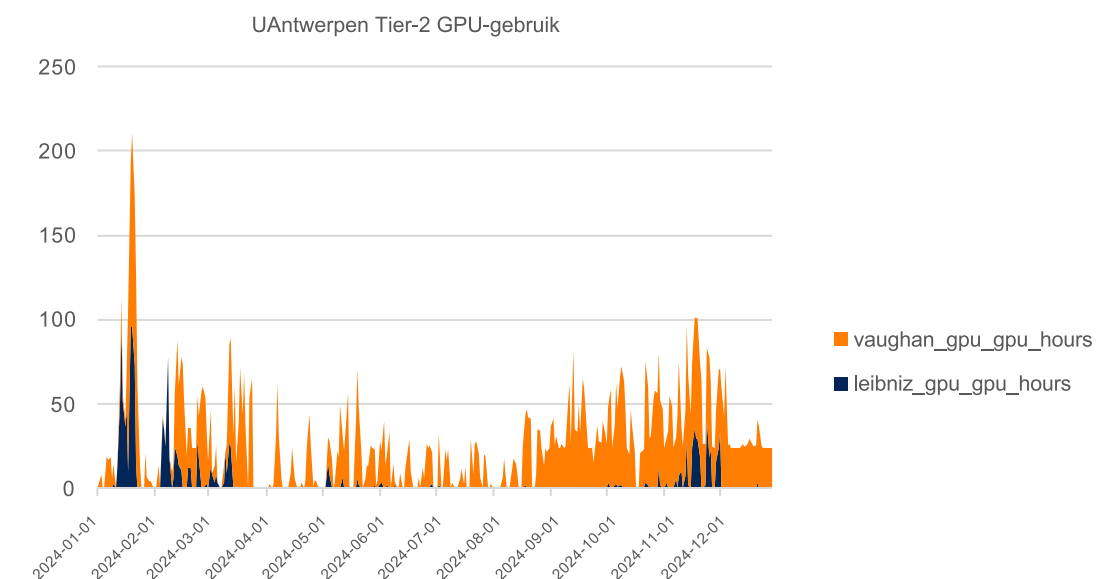
Het aantal onderbrekingen in 2024, al dan niet voorzien, is beperkt gebleven.

- 20 februari: korte onderbreking door problemen op scratch.
- 1 mei: onvoorziene onderbreking door een probleem bij de stroomvoorziening van de koelinstallatie. Na de heropstart bleken er problemen met het scratch file systeem. Dat file systeem was pas 5 dagen later opnieuw beschikbaar.
- 2-5 juli: voorziene onderbreking voor upgrade firmware in storage systeem.

Door de invoering van betalend rekenen (zie volgende paragraaf) is er een duidelijke vermindering van de gebruikte rekestijd vanaf 1 maart. Het verschil situeert zich vooral bij de groepen die veel rekestijd verbruikten voor 1 maart 2024. Daarnaast merken we ook dat nieuwe gebruikers/onderzoeksgroepen de weg naar de infrastructuur hebben gevonden, dus dat is positief.



▲ Afbeelding 26. UAntwerpen Tier-2 CPU-gebruik



▲ Afbeelding 27. UAntwerpen Tier-2 GPU-gebruik

Toekennen rekentijd

Sinds 1 maart 2024 is betalend rekenen ingevoerd voor de onderzoekers van de AUHA. Onderzoeksgroepen kunnen een of meerdere projecten aanmaken waarop gerekend kan worden. Er dient geen projectbeschrijving te worden ingediend. De groepen kunnen het gebruik eenvoudig opvolgen via een script. In februari 2024 werd een infosessie georganiseerd.

Gebruikersondersteuning

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 eerste instantie gebeurt de gebruikersondersteuning via het helpdesksysteem. Het aantal ingediende vragen en de verdeling over de verschillende categorieën is vergelijkbaar met vorig jaar. Software-gerelateerde vragen blijven het meest “populair”.

Categorie	Tickets
Accounts	105
Software	134
Tier-1	13
Overig	100
Totaal	352

Tabel 6. Aantal helpdesktickets per categorie in 2024

Daarnaast waren er ook 1-op-1 gesprekken of gesprekken met onderzoeksgroepen om vragen te bespreken of de verschillende services van het VSC (opnieuw) onder de aandacht te brengen. We vermelden hierbij in het bijzonder de faculteit Toegepaste Ingenieurswetenschappen en de onderzoeksgroepen Medische Genetica, EVECO en CLIPS.

Belangrijk in het kader van ondersteuning zijn ook de halfjaarlijkse introductiecursussen die worden georganiseerd aan het begin van een semester: “Linux introduction” (twee halve dagen), “Supercomputers for starters” (twee halve dagen) en “HPC@UAntwerp introduction” (twee 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.

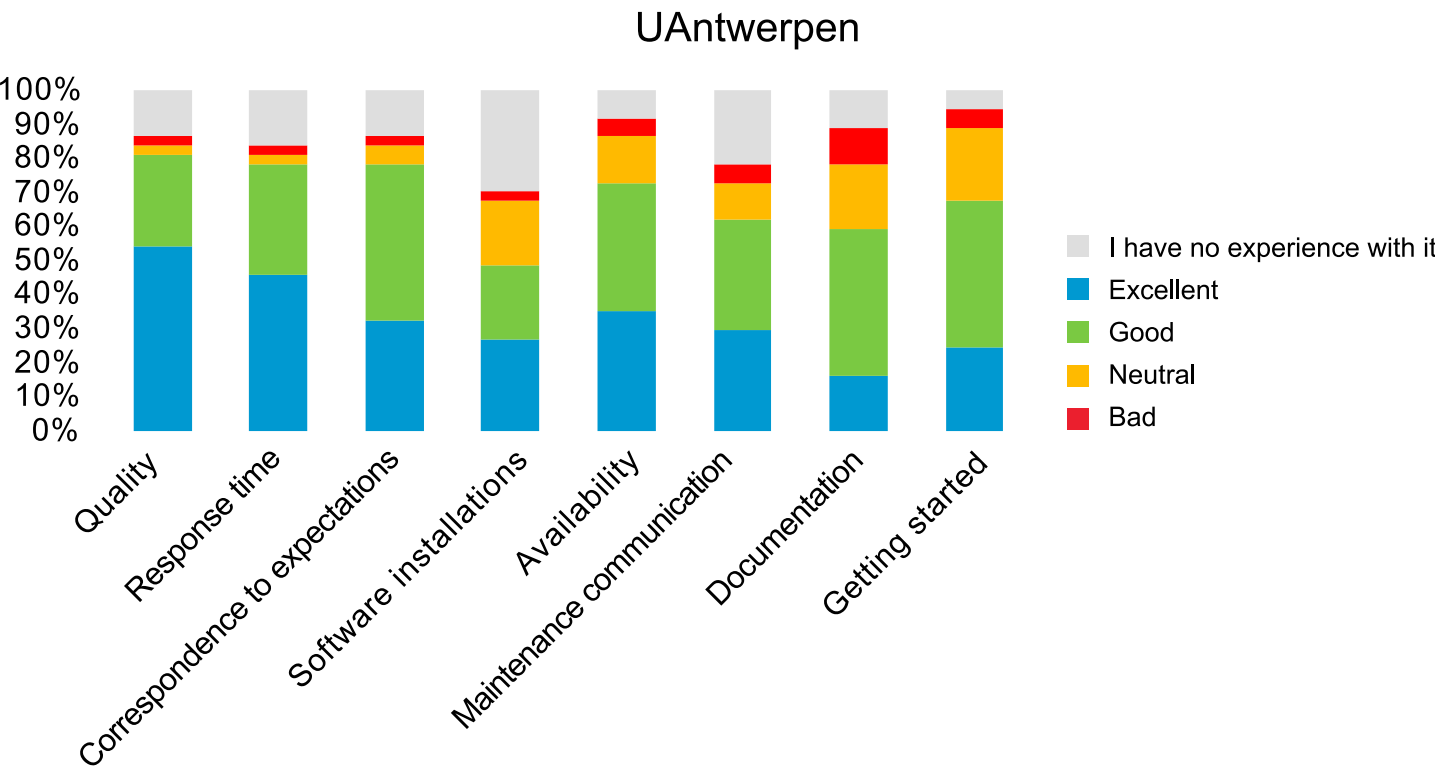
Door de overstap in 2023 naar de gedeelde (EasyBuild) buildscripts (die ook in gebruik zijn op de andere VSC-hubs), is de installatie van software in 2024 ook vlot verlopen. Recentere versies (en nieuwe software) worden nu sneller geïnstalleerd.

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

Gebruikersbevraging

Uit de bevraging van 2023 kwamen vier werkpunten naar voor: software-installaties, beschikbaarheid, communicatie rond onderbrekingen en documentatie. Hierboven werd reeds vermeld dat de aanpak voor het installeren van software is gewijzigd. Vermits het aantal onderbrekingen in 2024 zeer beperkt was, was de beschikbaarheid beter. We hebben ook geprobeerd de communicatie zo goed mogelijk te laten verlopen.

De bevraging die eind 2024 georganiseerd werd onder alle gebruikers, laat in zekere mate zien hoe de aanpak geëvalueerd werd. 38 deelnemers hebben aangegeven de Tier-2 UAntwerpen infrastructuur in meer of mindere mate te gebruiken.



Afbeelding 28. Gebruikerstevredenheid Tier-2 UAntwerpen

Onderstaande componenten van de Tier-2 UAntwerpen infrastructuur werden door gebruikers als ‘goed’ of ‘excellent’ beoordeeld:

- 94 % (31/33) - kwaliteit
- 94 % (30/32) - responstijd
- 91 % (30/33) - overeenstemming met verwachtingen
- 70 % (19/27) - software installaties
- 80 % (28/35) - beschikbaarheid
- 77 % (23/30) - communicatie omtrent onderhoud
- 68 % (23/34) - documentatie
- 72 % (26/36) - getting started

Behalve voor documentatie is het aantal gebruikers die de aanpassingen aan de werkpunten als ‘goed’ of ‘excellent’ bestempelt met 10-15 % gestegen. Voor documentatie blijven de gebruikers echter zeer kritisch. We zullen in 2025 dan ook bekijken hoe we dit verder kunnen verbeteren.

Voor het eerst werd ook gepeild naar hoe eenvoudig het is om met de infrastructuur aan de slag te gaan. Uit de bevraging blijkt dat dit nog beter kan. De introcursussen Linux en HPC werden in herwerkte vorm voor het eerst gegeven in oktober 2024. Het is niet duidelijk of de personen die hierover ‘neutraal’ of ‘slecht’ hebben aangeduid, al de nieuwe cursus gevolgd hebben. De drempel zo laag mogelijk houden en zorgen voor aangepaste documentatie blijven permanente aandachtspunten.

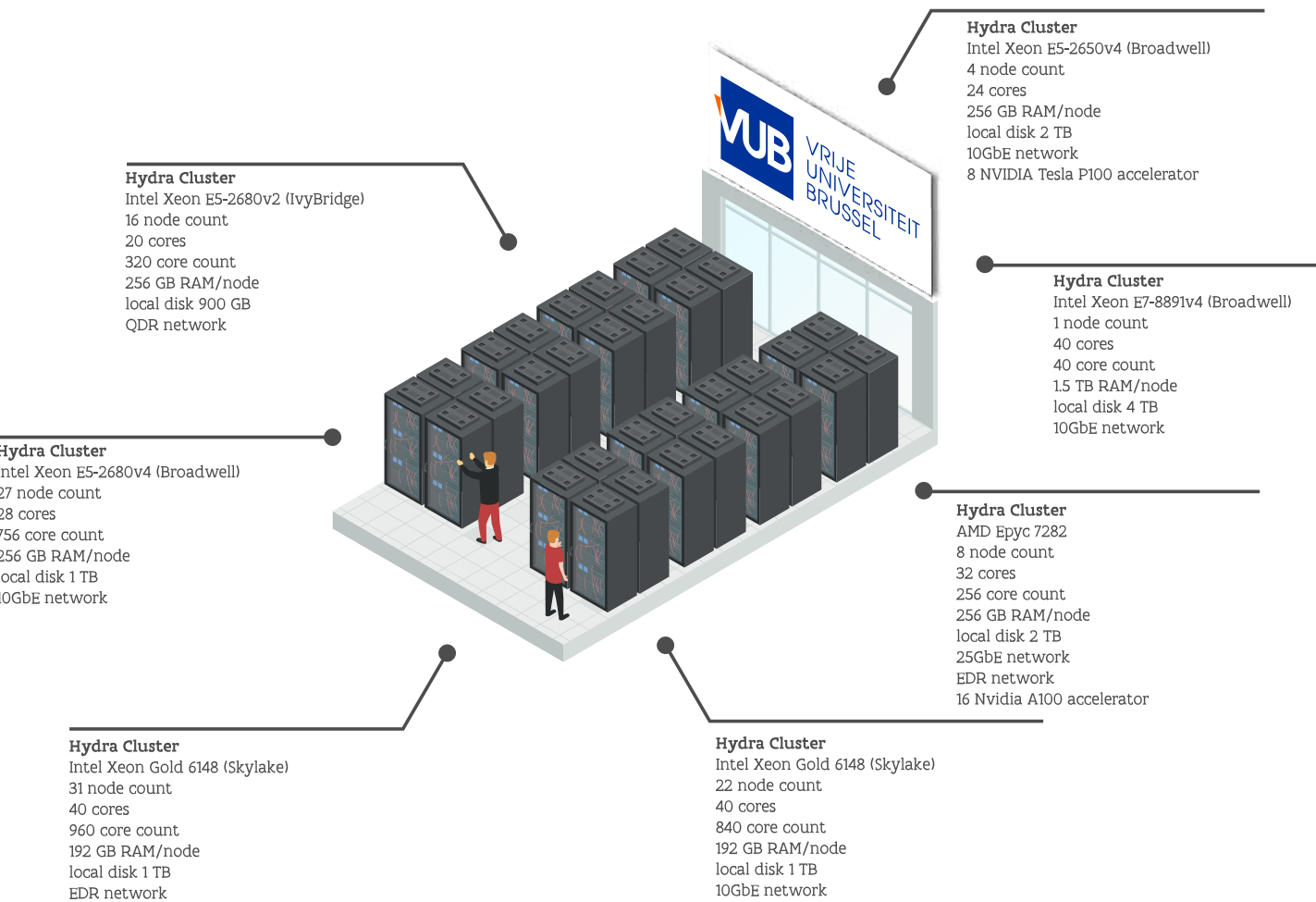
Kijken we naar de geschreven opmerkingen bij de bevraging van 2024, dan onthouden we de vraag voor een webportal (Open OnDemand) om de drempel te verlagen, wat daarbij perfect aansluit. Dit staat op het programma voor 2025.

► Vrije Universiteit Brussel

Beschikbare infrastructuur

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

- 1 cluster met CPU-, GPU-, large mem-partities
- 265 TF CPU, 236 TF GPU
- 3.968 CPU cores, 22 GPU devices
- 660 TB scratch filesystem



▬ Afbeelding 29. Tier-2 infrastructuur VUB

Aan de Vrije Universiteit Brussel 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 aan meerdere partities toe te wijzen.

In 2024 zijn volgende wijzigingen gebeurd aan de Hydra-omgeving:

- Alle gewone nodes van de Broadwell generatie zijn uit dienst gehaald: <https://hpc.vub.be/news/2024/hydra-broadwell-removal/>
- De NVME-storage pool van de scratch werd verdubbeld in omvang: <https://hpc.vub.be/news/2024/hydra-flash-storage-extension/>
- Er werden 20 nieuwe nodes van de zen4 generatie toegevoegd. Deze beschikken over een Genoa-X CPU met een extra grote L3 cache: <https://hpc.vub.be/news/2024/hydra-new-genoax-nodes/>
- Het notebook platform kreeg een update naar de modules van de generatie 2023a: <https://hpc.vub.be/news/2024/notebook-update-2023a/>
- De cluster Anansi werd in productie gezet. Deze cluster mikt op interactief gebruik en visualisaties. De cores van de CPU worden standaard gedeeld tussen jobs zodat met 32 fysieke cores er 128 virtuele cores worden aangeboden. Meer info op: <https://hpc.vub.be/news/2024/anansi-cluster/>
- De cluster kreeg een update naar RockyLinux 8.10: <https://hpc.vub.be/news/2024/hydra-os-upgrade-network/>
- Een piloot setup van Open OnDemand werd gelanceerd voor een select publiek van testers.

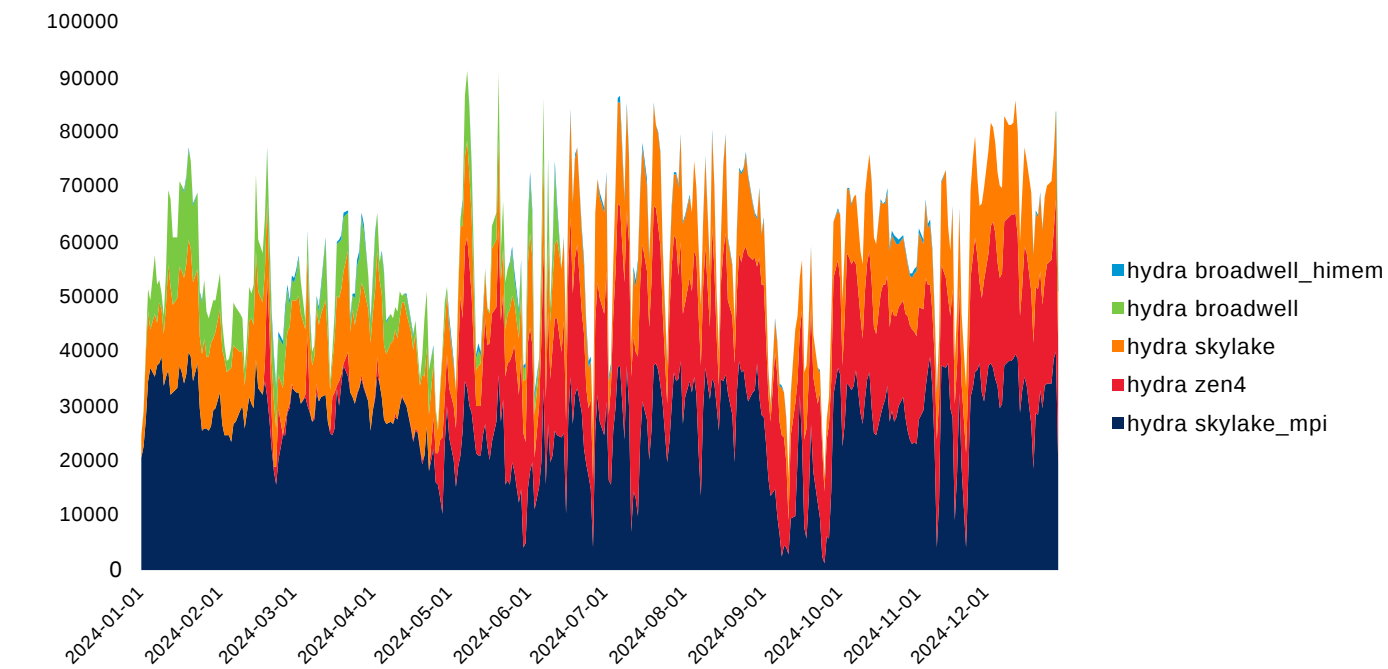
Naast haar eigen Tier-2-infrastructuur beheert de Vrije Universiteit Brussel–samen met de ULB– ook de grid-infrastructuur, die onder meer gebruikt wordt voor het verwerken van de gegevens die worden verzameld bij het uitvoeren van experimenten met de Large Hadron Collider (LHC) aan het CERN, maar ook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

- 1 cluster
- 218 TF
- 6304 CPU cores

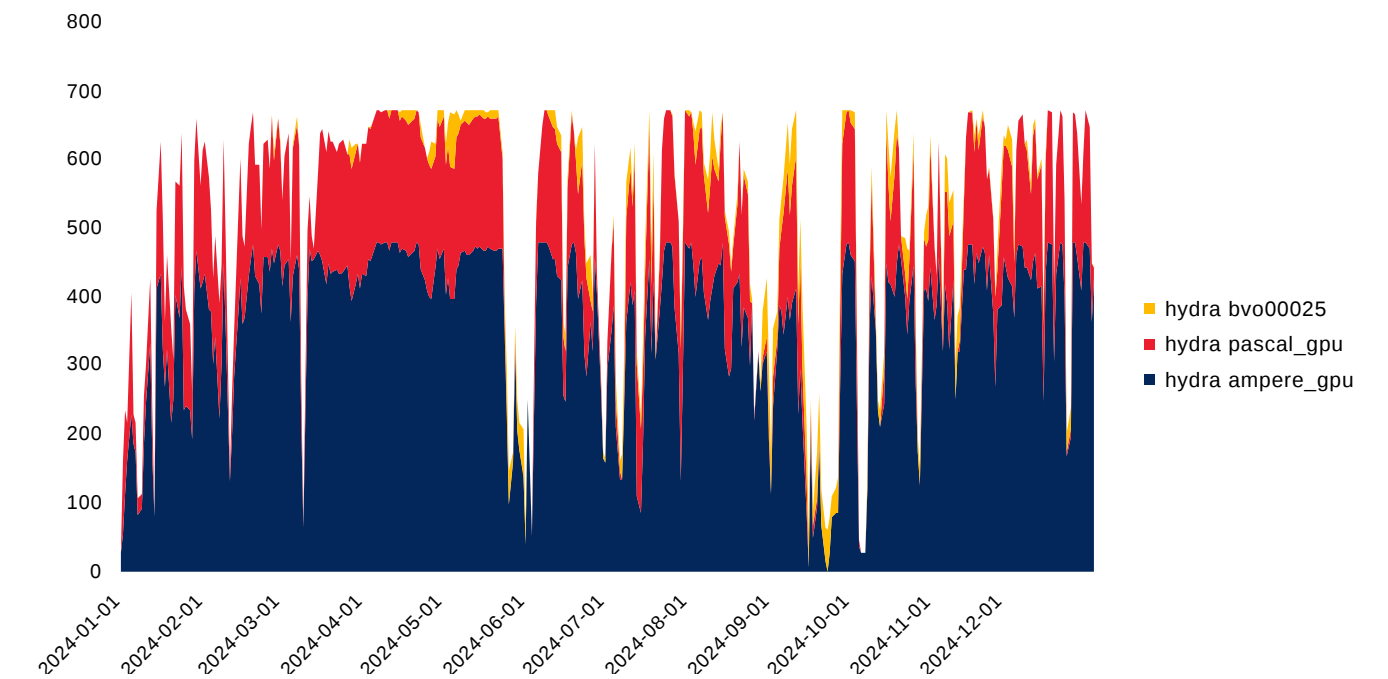
In 2024 werd de capaciteit van de grid-infrastructuur uitgebreid naar 218 TF door de toevoeging van 20 AMD Epyc nodes. Het dCache systeem bleef stabiel op 11,2 PB capaciteit.

De transitie naar AlmaLinux 9 is de grootste wijziging aan het systeem en deze overgang is nog niet afgerond.

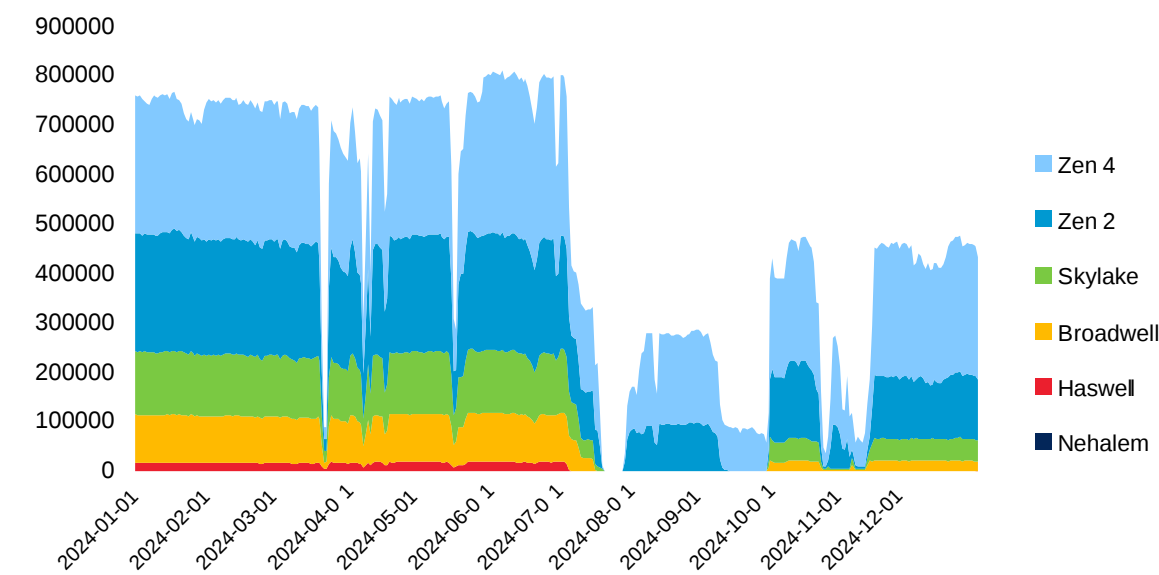
Exploitatie en gebruik



Afbeelding 30. VUB Tier-2 CPU-gebruik



Afbeelding 31. VUB Tier-2 GPU-gebruik



Afbeelding 32. Grid-infrastructuur VUB

Het gemiddelde gebruik lag in 2024 op 61 % voor het CPU-gedeelte en 75 % voor het GPU-gedeelte. Er werden in totaal 22.682.627 CPU uren (2.589 jaren op 1 core) gebruikt en 185.711 GPU uren (21 jaar op 1 GPU). De bulk van de rekentijd (98 %) werd verbruikt door 24 % van de jobs.

Er waren in totaal 383 unieke gebruikers actief op de cluster waarvan 363 unieke op het CPU-gedeelte en 130 unieke op het GPU-gedeelte (dus sommigen op beide). De verdeling van de gebruikers per categorie vind je de tabel hieronder. Op zowel CPU als GPU waren de top 10 % van de gebruikers verantwoordelijk voor 80 % van het gebruik. Een uitsplitsing per faculteit staat in de tabel hieronder:

	CPU tijd	GPU tijd	Aandeel gebruikers
Guest professor	0,5%	0%	1,3%
Professor	1,5%	0,2%	2,3%
Administrative/technical staff	6,0%	1,5%	4,4%
Non-Vrije Universiteit Brussel	0,9%	2,7%	6,0%
student	14,7%	21,9%	25,3%
Researcher	76,3%	73,8%	60,6%

Tabel 7. Gebruik en gebruikers per categorie in 2024 van VUB

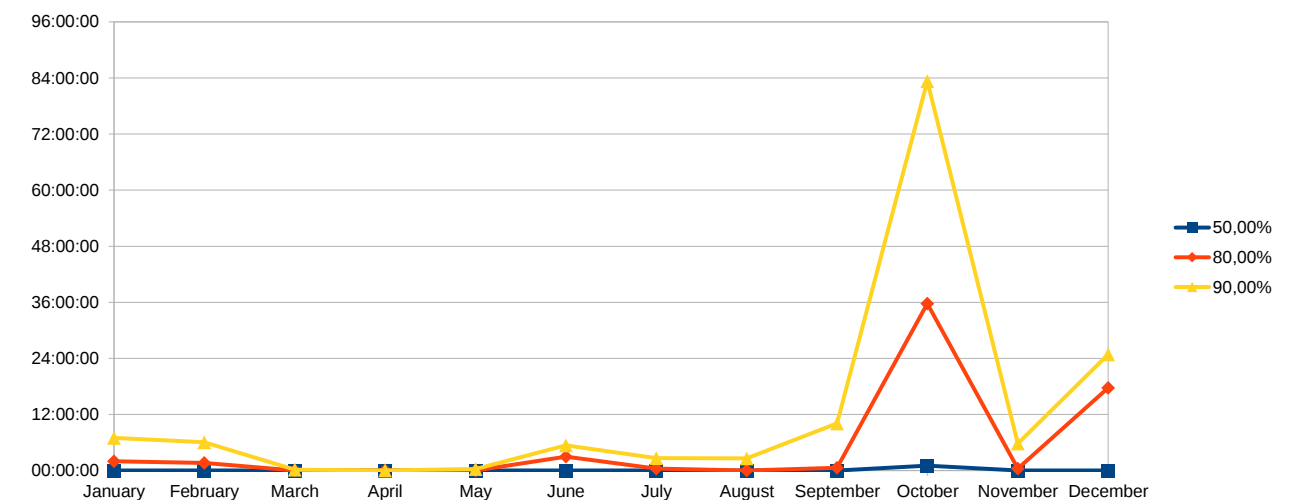
Faculteit	CPU tijd	GPU tijd
Faculteit Sociale Wetenschappen en Solvay Business School	0,3%	15,9%
Directie ICT	0,8%	1,5%
Non-Vrije Universiteit Brussel	0,9%	2,7%
Faculteit Geneeskunde en Farmacie	1,3%	7,7%
Student	14,8%	22,0%
Faculteit Ingenieurswetenschappen	16,1%	19,0%
Faculteit Wetenschappen en Bio-ingenieurswetenschappen	65,7%	31,3%

Tabel 8. CPU- en GPU-gebruik per faculteit in 2024 van VUB

Voor het CPU-gebruik zien we dezelfde trend als de voorbije jaren: een vrij 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. Dit type jobs lijken het dominante gebruikspatroon aan de Vrije Universiteit Brussel te zijn. Als we hier in de data duiken komt volgende beeld naar boven: 61 % van de jobs loopt op 1 node, slechts 19 % gebruikt meer dan 4 nodes.

Als we kijken naar de statistieken (waarbij we enkel jobs die minstens 1 uur hebben geduurd meetellen), dan is 61 % van de rekentijd gebruikt door jobs die op 1 node draaiden en slechts 19 % door jobs die 4 of meer nodes gebruikten. Ongeveer 90% van de jobs liep voor 14 uur of minder, 50 % zelfs voor 4 uur of minder. Dit komt overeen met het grillige patroon uit de grafiek.

De wachttijd om jobs te laten starten is bijgevolg niet zo hoog:

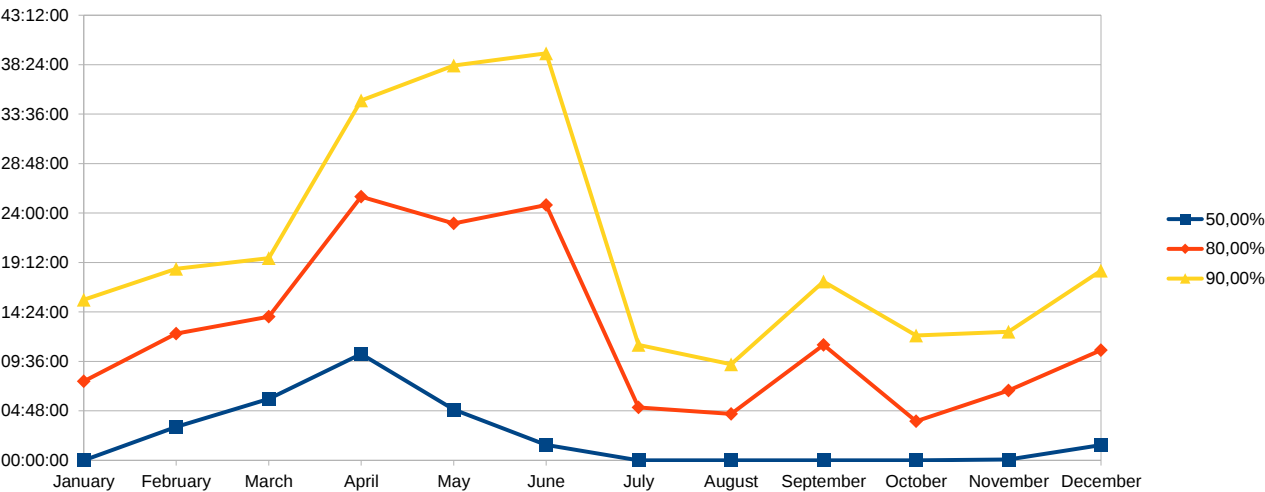


Afbeelding 33. Wachttijd per maand voor CPU-jobs aan de VUB

Ongeveer 80% van de jobs start binnen de 1,5 uur, de helft zelfs onmiddellijk. Uitgesplitst is dit:

	75 % percentiel	90 % percentiel
Single CPU core jobs	0,11 uur	3,75 uur
Single node jobs	0,40 uur	4,96 uur
Multi node jobs	8,87 uur	40 uur

Tabel 9. Wachtijd per jobtype (percentielen)

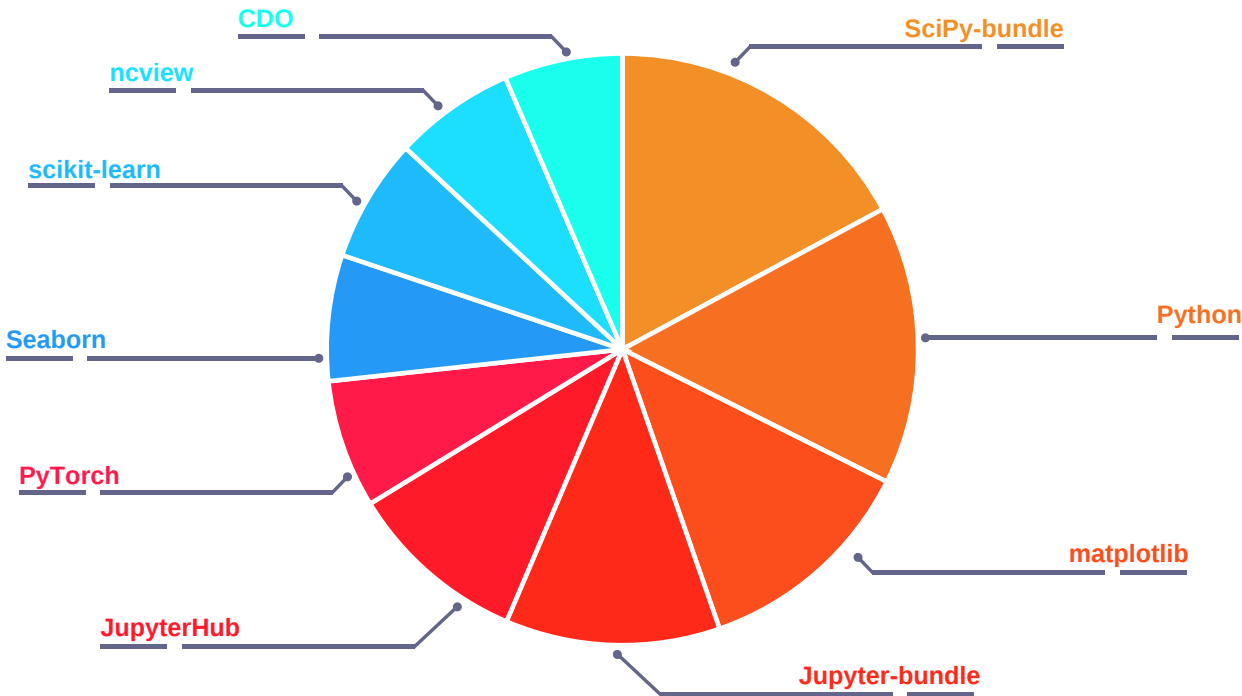


Afbeelding 34. Wachtijd per maand voor GPU-jobs aan de VUB

Het GPU-gedeelte is net als de voorbije jaren heel druk bezet. Er zijn verschillende momenten waarop we ongeveer 100 % belasting hebben. Van de GPU-jobs startte 50 % binnen de 3 uur en 90 % binnen de 24 uur. Ongeveer 90 % van de jobs liep voor minder dan 24 uur. De overgrote meerderheid (95 %) van de jobs gebruikt slechts 1 GPU die ook 91 % van de GPU-tijd vertegenwoordigen.

De top 10 van de software modules met het grootste aantal unieke gebruikers vind je in grafiek 35. De top 5 bestaat volledig uit Python gerelateerde modules.

Top 10 van software modules



Afbeelding 35. Top 10 meest gebruikte softwaremodules in 2024 aan de VUB

In 2024 zijn in totaal 5.694 modules geïnstalleerd over de verschillende partities heen waardoor er nu 1.137 unieke software modules beschikbaar zijn voor de gebruiker met daarin 3.482 unieke extensies.

Meer details over het gebruik van de Hydra-omgeving zijn te vinden op <https://hpc.vub.be/news/2025/overview-of-2024/>

Er zijn in 2024 geen grote ongeplande onderbrekingen geweest. Op 6 april was er een algemeen netwerkonderhoud op de campus van de Vrije Universiteit Brussel wat impact had op de bereikbaarheid van de Tier-2 cluster. Daarnaast zijn er verschillende systeem upgrades uitgevoerd maar deze gebeuren in fases zodat er altijd een stuk van de cluster operationeel blijft. In de week van 21 april en de week van 24 juni werd er telkens zo'n upgrade uitgevoerd.

De Begrid cluster is heterogeen: de cluster bestaat uit verschillende series van worker nodes met verschillende generaties van voornamelijk Intel CPU's. Het doel van de cluster is voornamelijk om data intensive, single-core berekeningen te doen (zogenaamde High Throughput Computing) en de 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 90 % gedurende de eerste 6 maanden van 2024. In de laatste week van juli is het systeem uitgezet door problemen met de koeling in het datacenter. In augustus en september was het systeem terug gedeeltelijk operationeel: door een beperking op de koeling hebben we een deel van de capaciteit niet terug online kunnen brengen. Ondanks de neerwaartse trend in de grafiek is de rekenkracht van de cluster in termen van FLOPs wel gestegen doorheen het jaar.

De grid-infrastructuur, beheerd door VUB/ULB, wordt ook intensief gebruikt door onderzoekers van verschillende instellingen: Vrije Universiteit Brussel, UAntwerpen en UGent. De overige rekentijd op de grid-infrastructuur wordt gebruikt door onderzoekers van ULB en UCLouvain.

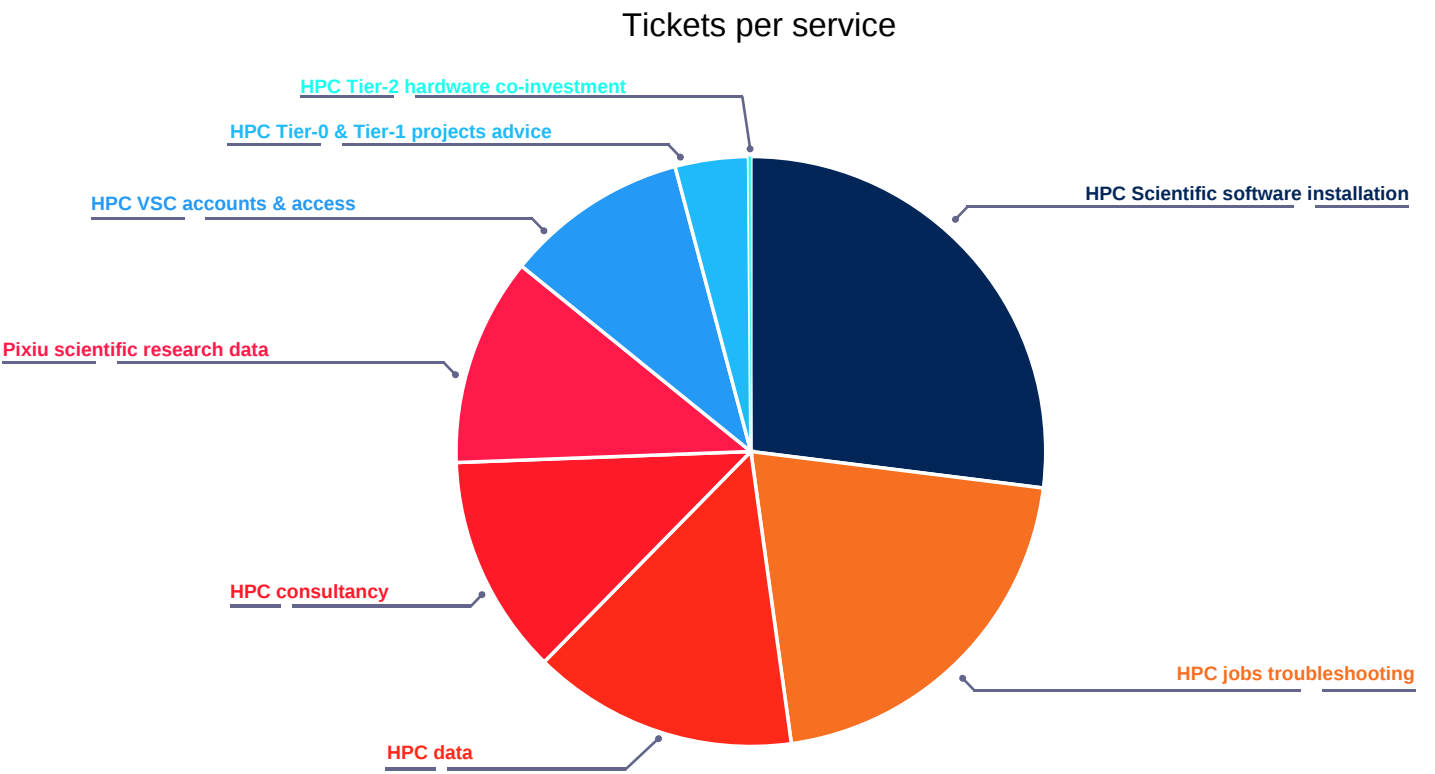
De meeste onderzoekers maken gebruik van het zogenaamde “glide in” mechanisme. Hierbij worden “pilot jobs” gesubmit die, eens actief op een worker node, elders de “payload” gaan halen. Voor de berekening van de hierboven vermelde percentages is alleen rekening gehouden met rekentijd van de “pilot jobs”,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

Toekennen rekentijd

De onderzoekers van de Vrije Universiteit Brussel 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 Vrije Universiteit Brussel heeft een specifiek contact punt 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 814 (tegenover 684 in 2023) tickets voor Tier-2 en 208 (tegenover 189 in 2023) voor grid verwerkt wat in lijn licht met de voorbije jaren. Voor Tier-2 kunt u de verdeling over de services zien in de grafiek hieronder.



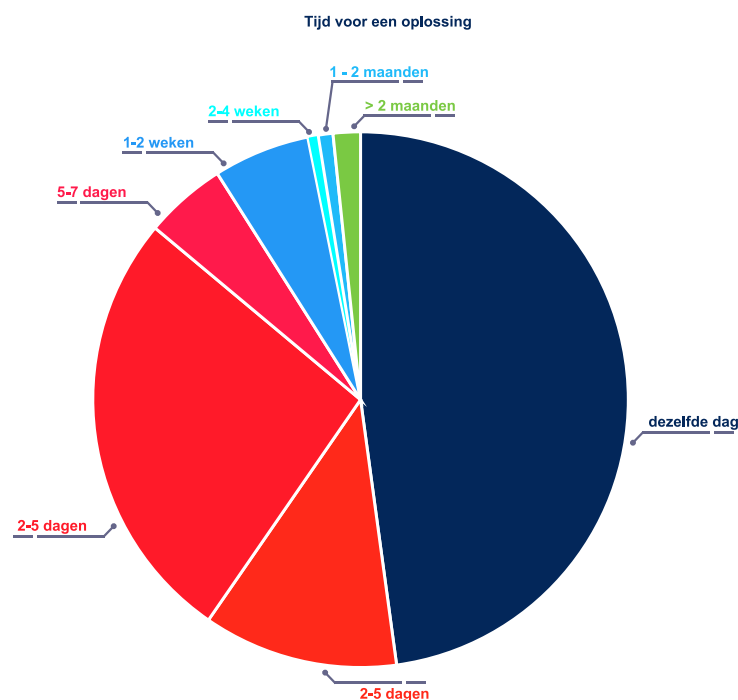
Afbeelding 36. Verdeling van helpdeskincidenten per dienst in 2024

Voor grid is de verdeling:

Accounts	77
Software	26
Andere	105

Tabel 10. Verdeling van helpdeskvragen per categorie

Van de tickets voor de Tier-2 die in 2024 werden afgesloten vindt u hieronder de tijd tot oplossing in werkuren:



Afbeelding 37. Oplostijd van Tier-2 Tickets in werkuren – 2024

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

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 in HPC en VSC in het algemeen (en af te stappen van hun eigen machines). En er werden ook verschillende sessies met individuele onderzoekers georganiseerd.

Gebruikersbevraging

De jaarlijkse gebruikersbevraging is vervangen door een VSC brede versie. Er waren 56 respondenten die de Tier-2 van de Vrije Universiteit Brussel gebruiken. Over het algemeen zien we gelijkaardige resultaten als het vorige jaar. Er is grote tevredenheid van onze gebruikers. De slechtste score vinden we bij ‘Getting started’ en ‘Documentation’. Deze laatste kwam ook vorig jaar als zwakste punt uit de bus. Er is in 2024 dan ook de nodige tijd geïnvesteerd in het verbeteren en uitbreiden van onze documentatie maar het tij is hiermee helaas nog niet gekeerd. Ook in het komende jaar gaan we hierop blijven inzetten. Het starten met het gebruik van een HPC-cluster kan een grote stap zijn maar we hopen met het Open OnDemand portaal waarvan de piloot in december gestart is hier de drempel te kunnen verlagen.

De feedback van de gebruikers bevatte de klassiekers: de vraag naar meer (GPU) rekenkracht en de wachttijd voor jobs starten is te lang. We blijven investeren in hardware en de wachttijd lijkt uit de statistiek onder controle te zijn maar er kunnen wel tijdelijk pieken zijn.

Over het algemeen is de tevredenheid hoog.

Onderstaande componenten van de Tier-2 Vrije Universiteit Brussel infrastructuur werden door gebruikers als ‘goed’ of ‘excellent’ beoordeeld:

- 98 % (51/52) - kwaliteit
- 98 % (49/50) - responstijd
- 89 % (47/53) - overeenstemming met verwachtingen
- 93 % (39/42) - software installaties
- 93 % (50/54) - beschikbaarheid
- 94 % (47/50) - communicatie omtrent onderhoud
- 89 % (49/55) - documentatie
- 84 % (46/55) - getting started



“I am very impressed by how the HPC team listens to the users' requirements. They were very quick to implement a test partition for GPU jobs which can enhance the workflow.”

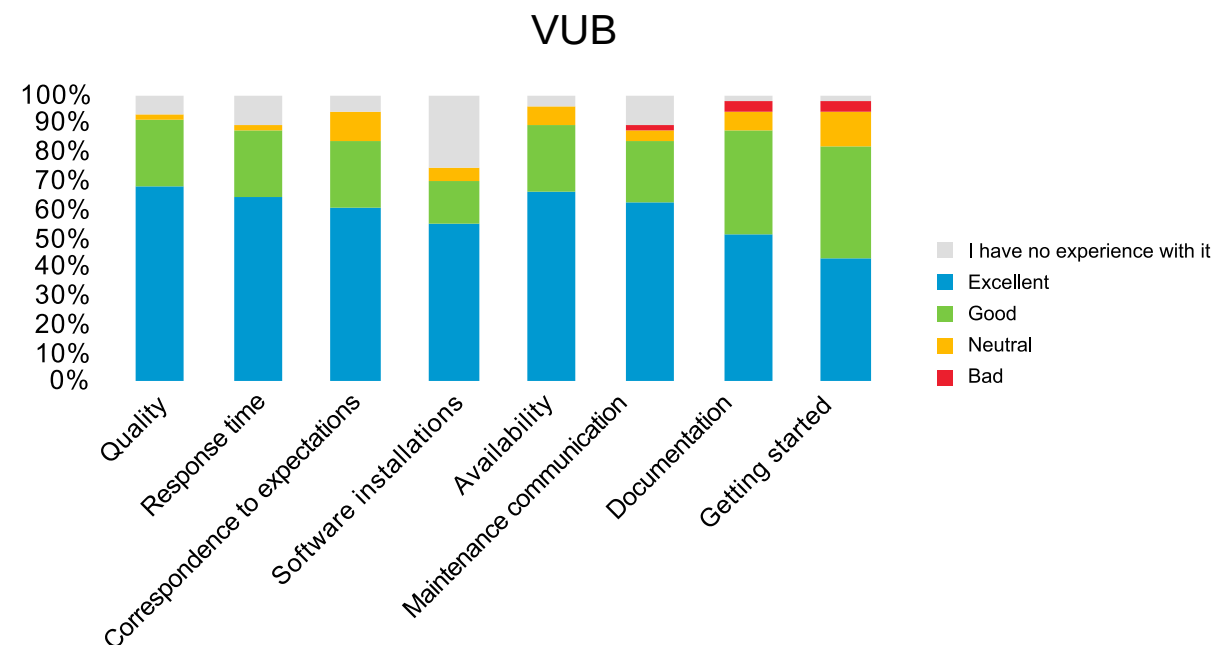
“The user manual is very detailed and highly usable.”



“Sometimes the queue time is quite long. However, I want to emphasize that the HPC team at VUB is incredibly helpful. They are always kind and take the time to explain things to me.”



“They are always very friendly and helpful, very nice to work with them!”



Afbeelding 38. Gebruikerstevredenheid VUB

► Universiteit Gent

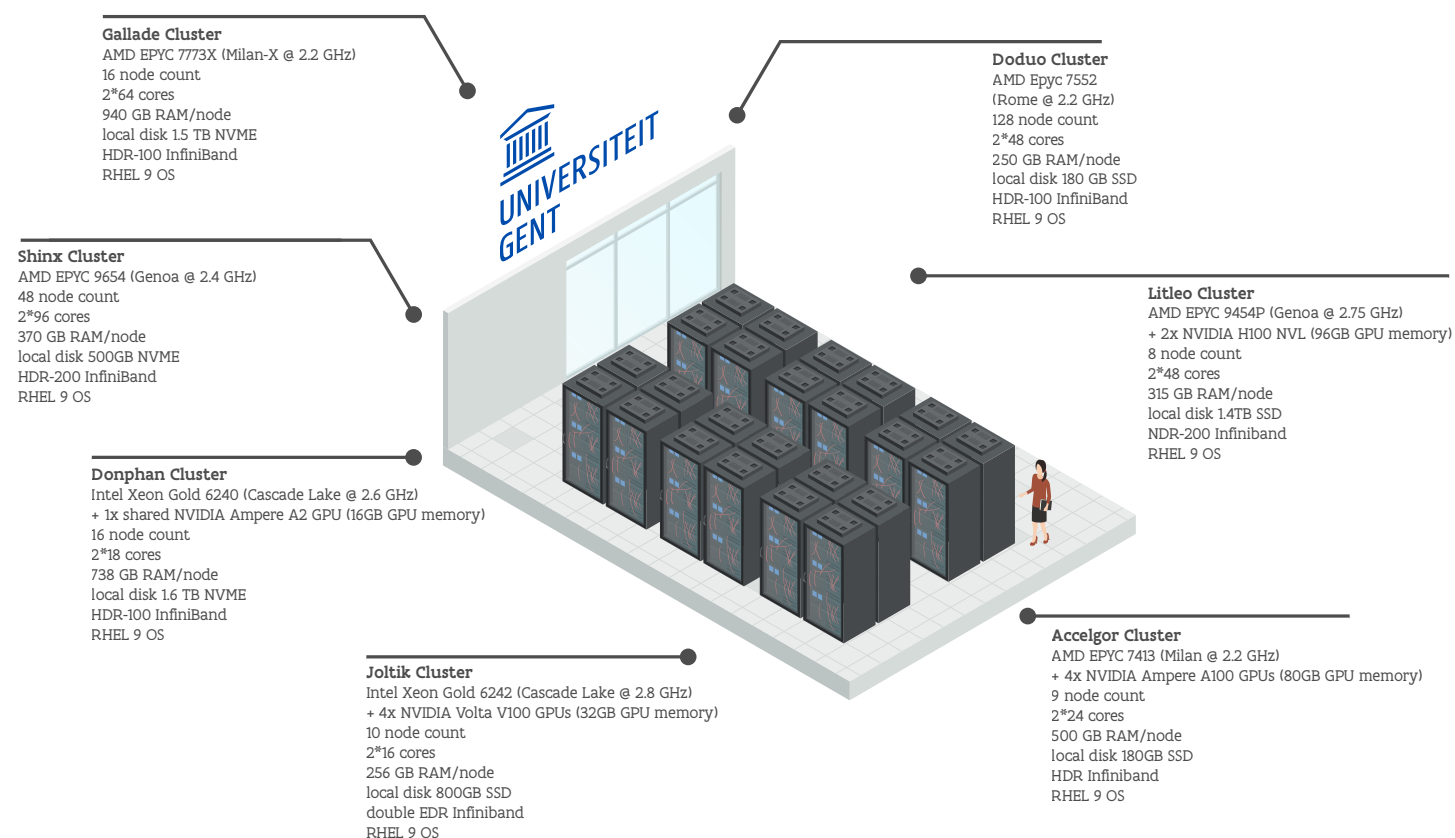
Beschikbare infrastructuur

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

- 7 clusters
- 1038.6 TF CPU, 1185 TF GPU
- 25.264 CPU cores/ 92 GPU devices
- 86 TB geheugen

In de loop van 2024 werden volgende infrastructuur- en servicewijzigingen doorgevoerd:

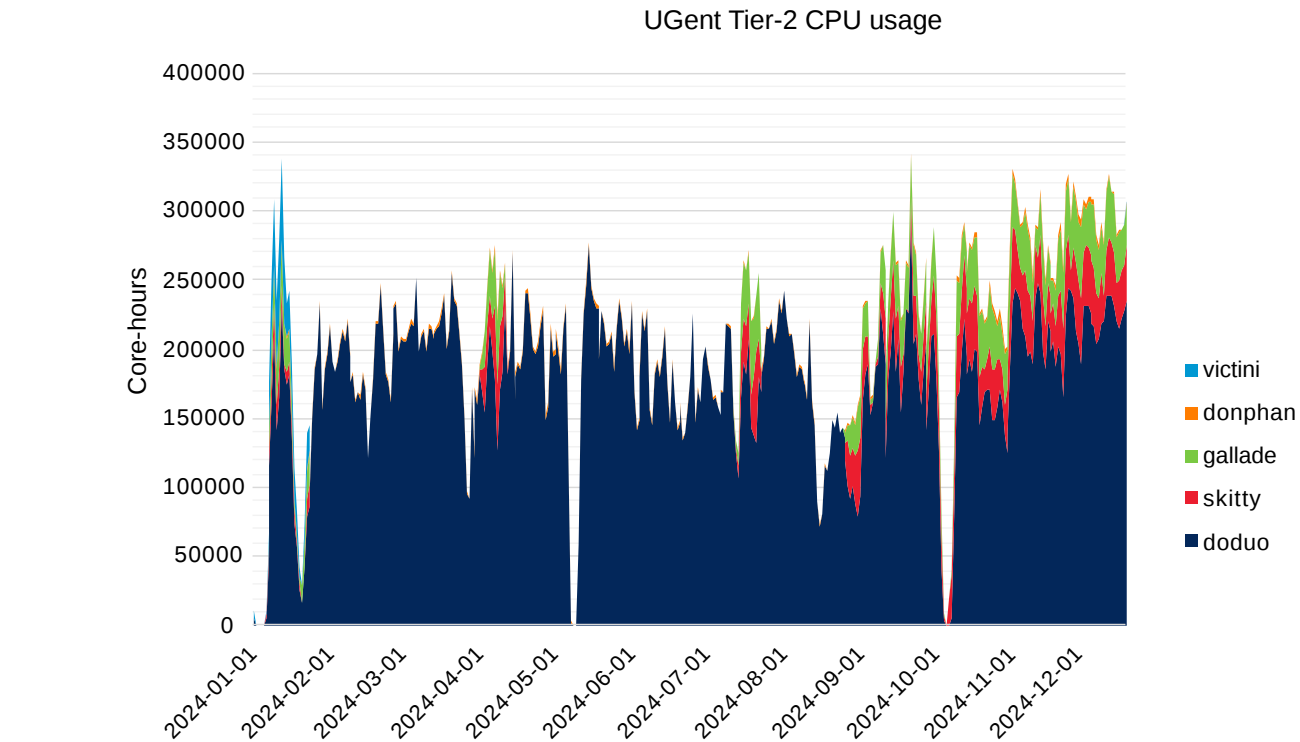
- Cluster victini werd gedecommissioneerd.
- Nieuwe cluster shinx werd geïntroduceerd. Dit is een nieuwe CPU-cluster ter vervanging van clusters victini en swalot, die eerder werden gedecommissioneerd.
- Start van de migratie van alle clusters naar RHEL9. Clusters skitty, joltik en accelgor werden in de periode oktober-november gemigreerd naar een hoger OS.



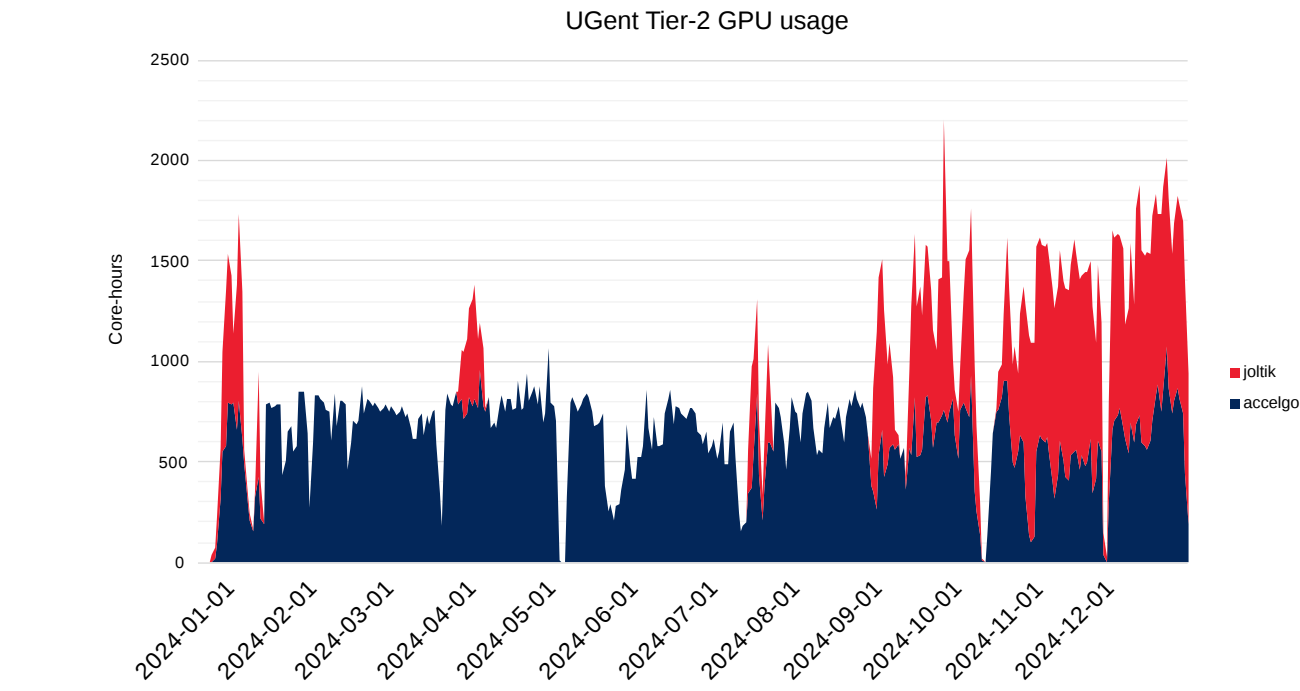
Afbeelding 39 Tier-2 infrastructuur UGent

Gebruik en beschikbaarheid

Onderstaande figuren geven een overzicht van het day-per-day verbruik van rekentijd op de verschillende Tier-2 UGent clusters, opgesplitst volgens CPU gebruik en GPU gebruik. In totaal werd in 2024 90.579.856 CPU-uren aan rekentijd gebruikt. Er werd verder in totaal 422.960 GPU-uren gebruikt.



Afbeelding 40. UGent Tier-2 CPU-gebruik



Afbeelding 41. UGent Tier-2 GPU-gebruik

Er was een beperkt aantal onbeschikbaarheden van de Tier-2 infrastructuur in 2024:

- 13-17 mei 2024: eerste fase van de herstructurering van het netwerk tussen alle HPC-UGent clusters (gepland)
- 11 juli 2024: HPC-clusters niet bereikbaar wegens datacenter test (gepland)

In totaal waren 2095 gebruikers actief in 2024 op de Tier-2 UGent infrastructuur.

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 2024. Opsplitsing is gemaakt volgens de instellingen die consortium-partner zijn in het VSC en andere onderzoeksinstellingen (bv. VLIZ, RBINS, etc.) en bedrijven.

Instelling	#gebruikers	CPU gebruik	GPU gebruik
UAntwerpen	36	4.66 %	3.38 %
Vrije Universiteit Brussel	21	0.03 %	0.49 %
UGent	1945	94.91 %	93.22 %
KU Leuven/UHasselt	50	0.15 %	2.78 %
Overige instellingen en bedrijven	43	0.25 %	0.13 %

Tabel 11. Aandeel in gebruik van Tier-2 UGent in 2024

Toekennen rekentijd

De onderzoekers van UGent en haar associatie hebben volledig vrije toegang tot de eigen Tier-2 infrastructuur en deze is kosteloos.

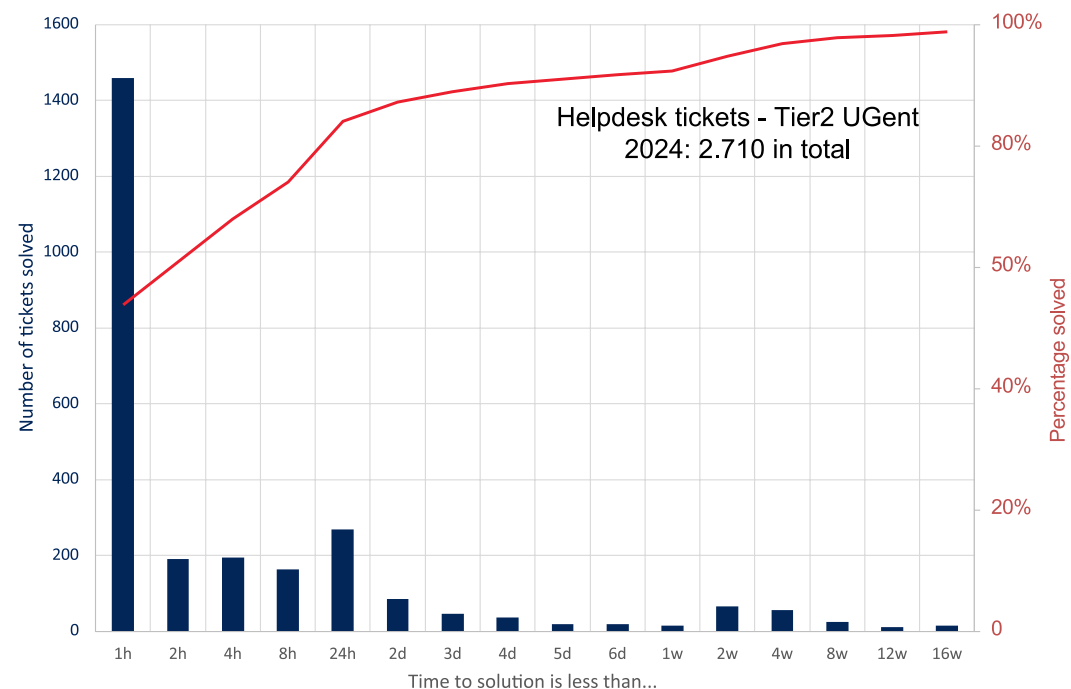
Gebruikersondersteuning

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

Wachtrij	#behandelde en gesloten tickets
Helpdesk Tier-2	2.710
Software-installaties	474

Tabel 12. Gebruikersondersteuning Tier-2 UGent – Ticketoverzicht 2024

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 42. Helpdesktickets Tier-2 UGent 2024

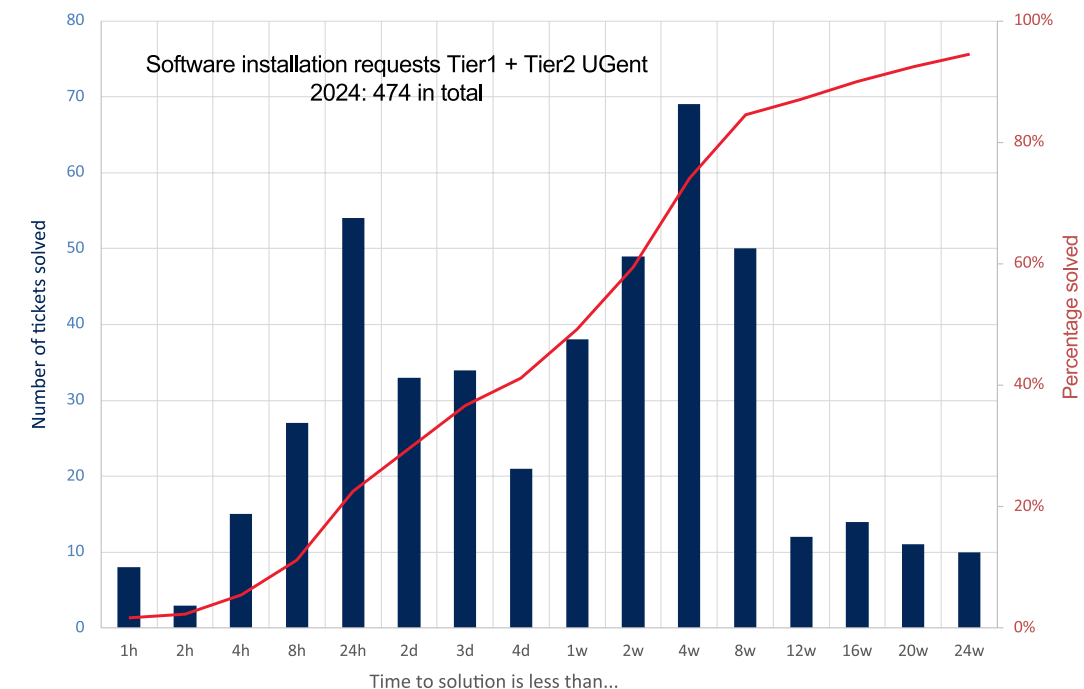
Zoals reeds vermeld bij Tier-1 compute, werden in 2024 in totaal 474 software-installatie aanvragen behandeld door het UGent team, verdeeld voor Tier-1 compute en Tier-2 UGent.

In 2024 zijn in totaal 17.267 modules geïnstalleerd over alle clusters heen, waarvan:

- 7.909 voor het RHEL8 operating system, 6.598 voor RHEL9
- 2.931 modules voor de GPU-clusters, 14.336 modules voor de CPU-only clusters

Dit is inclusief verschillende versies en aanpassingen voor de verscheidene partities. In totaal zijn installaties voor 1.533 unieke softwareprojecten beschikbaar op de UGent Tier-2 infrastructuur.

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.

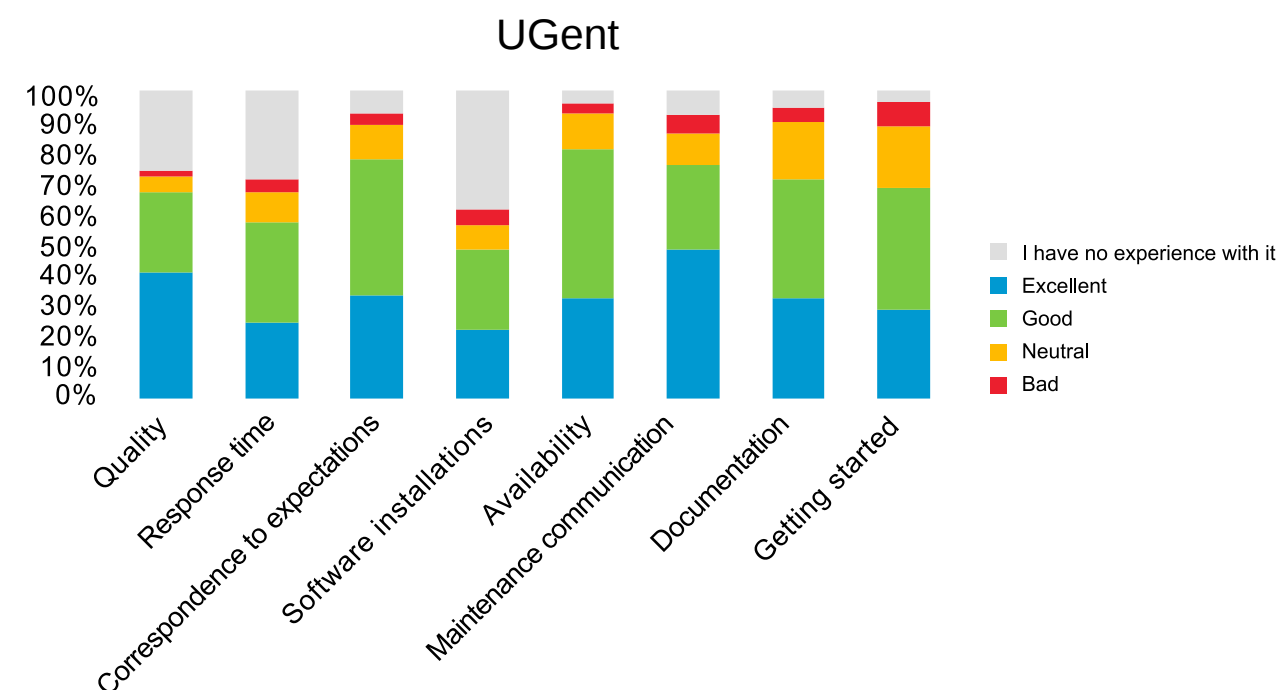


Afbeelding 43. Oplostijd software-installatieverzoeken – Tier1 + Tier2 UGent (2024)

In 2024 werd een site-specifieke training gegeven om nieuwe gebruikers vertrouwd te maken met de Tier-2 HPC-infrastructuur van UGent.

Gebruikersbevraging

In de VSC-gebruikersbevraging eind 2024 werd ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-2 UGent infrastructuur en services bevestigd. 135 verschillende respondenten gaven aan in meer of mindere mate gebruik te maken.



Afbeelding 44. Gebruikerstevredenheid Tier-2 UGent – VSC Bevraging 2024

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

- 90 % - kwaliteit
- 80 % - responstijd
- 84 % - overeenstemming met verwachtingen
- 78 % - software installaties
- 85 % - beschikbaarheid
- 82 % - communicatie omtrent onderhoud
- 76 % - documentatie
- 71 % - getting started

Het meest prangende werkpunt uit de gebruikersbevraging van 2023 was een snellere respons op software-installatie aanvragen. Dit punt is in 2024 verre van opgelost: verscheidene respondenten vragen opnieuw om software-installaties sneller af te handelen. Bijkomend wordt expliciet de suggestie gemaakt om meer personeel te alloceren voor de Tier-2 helpdesk.

Deze stagnatie kan grotendeels worden teruggebracht op een transitiefase binnen het ICT-departement van de UGent, die de capaciteit tijdelijk heeft beperkt. Deze operatie werd eind 2024 afgerond, waardoor o.a. de responstijd wat betreft software-installaties vanaf 2025 opnieuw met meer aandacht kan worden bekeken.

Hieronder is de volledige lijst weergegeven van mogelijke suggesties voor verbeteringen, zoals aangegeven door respondenten in de gebruikersbevraging 2024:

Infrastructuur

- Meer GPU's (2)

Documentatie

- Eenvoudigere documentatie/cheat sheet (2)
- Update van de bestaande documentatie (1)
- Betere documentatie voor webportal (1)
- Gedeelde documentatie voor applicaties (1)
- Meer applicatie-specifieke praktische voorbeelden (1)
- Documentatie/best practices voor conda (2), docker (1), Rstudio (1), Slurm (1), Dask (1), Nextflow (1)

Software

- Snellere respons op software-installatie aanvragen (5)
- Manier om eenvoudiger met modules en toolchains te werken, bv. conda environment solver (1)
- Verbeter prestatie van standaard BLAS voor AMD CPU's (1)
- MKL voor AMD en enable AVX2 (1)
- Container images voor populaire software (1)
- Homogene toolchains/software over alle clusters (1)
- Ondersteuning voor Pixi (1)

Gebruikerservaring

- Raadplegen van cluster status op de VSC-status page (1)
- Manier om de wachttijd in te schatten (1)
- Manier om stroomverbruik van jobs te raadplegen (1)
- Verminder de (GPU) wachttijden (5)
- Alloceer meer personeel voor de helpdesk (5)
- Verhoog de timeout in de webportal om timeout te vermijden (2)
- Meer geduld voor (beginnende) gebruikers (1)

Data

- Gegevens verwijderen van ex-gebruiker (1)
- Verduidelijk permissies om data te delen (1)
- Gedeelde database repositories (1)
- Delen van onderzoeksdata overheen VO's of met onderzoekers zonder VSC-id (1)



"I think the service is close to perfect. Also, the people working at the UGent VSC team are great (very friendly and helpful). Thank you very much and keep up the good work!"

"I appreciate the support I receive from VSC."



"At UGent we are really fortunate to be able to count on our HPC team."



"It's extremely useful"



"It is a very good infrastructure / service."

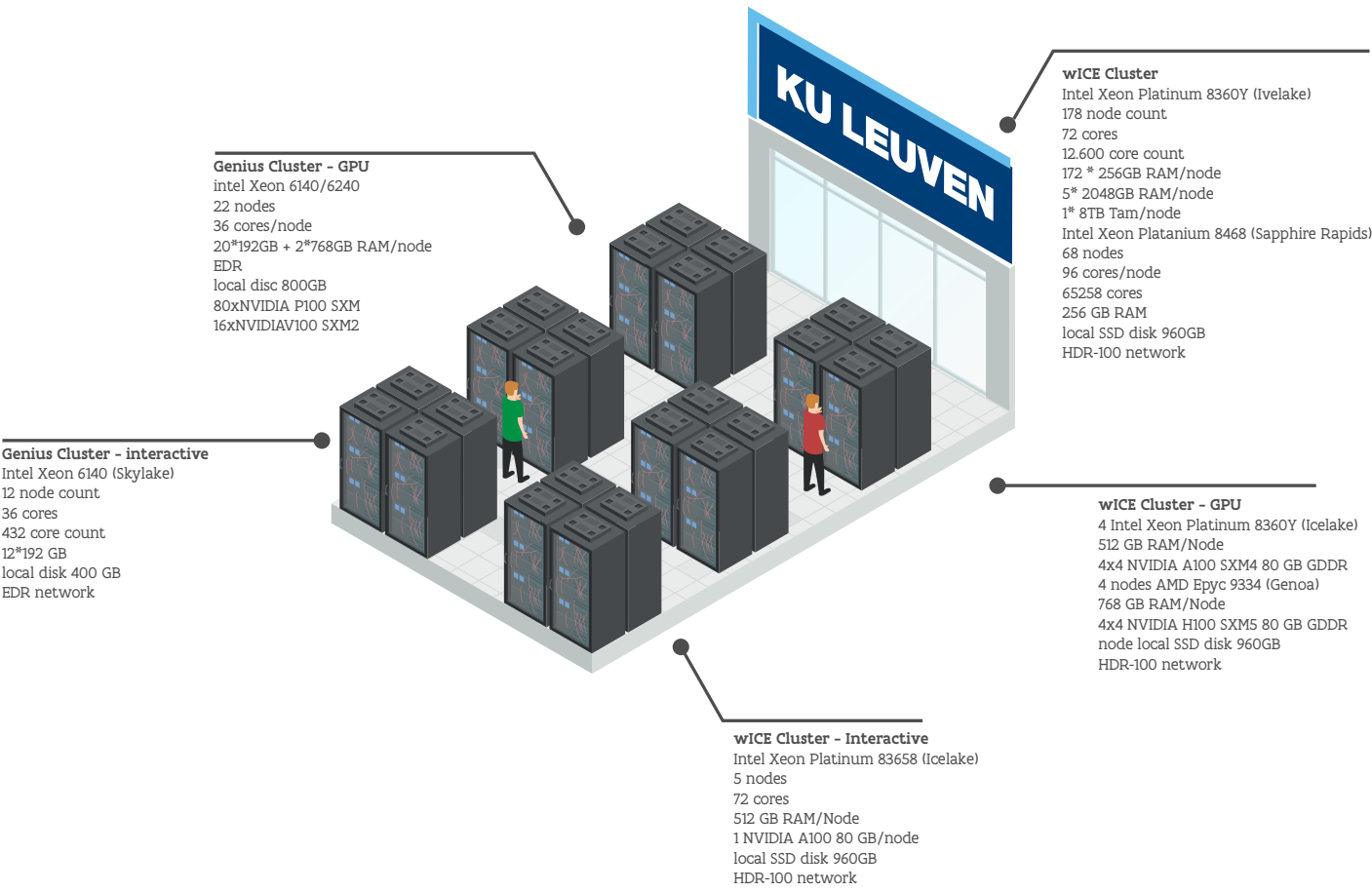
► **KU Leuven/Universiteit Hasselt**

Beschikbare infrastructuur

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

De infrastructuur bestaat uit:

- 2 clusters, met CPU-, GPU-, large mem, very large mem en interactive-partities
- 1.790 CPU TF, 1.290 TF GPU
- 24.456 CPU cores, 133 GPU devices
- 4.5 PB parallel filesysteem

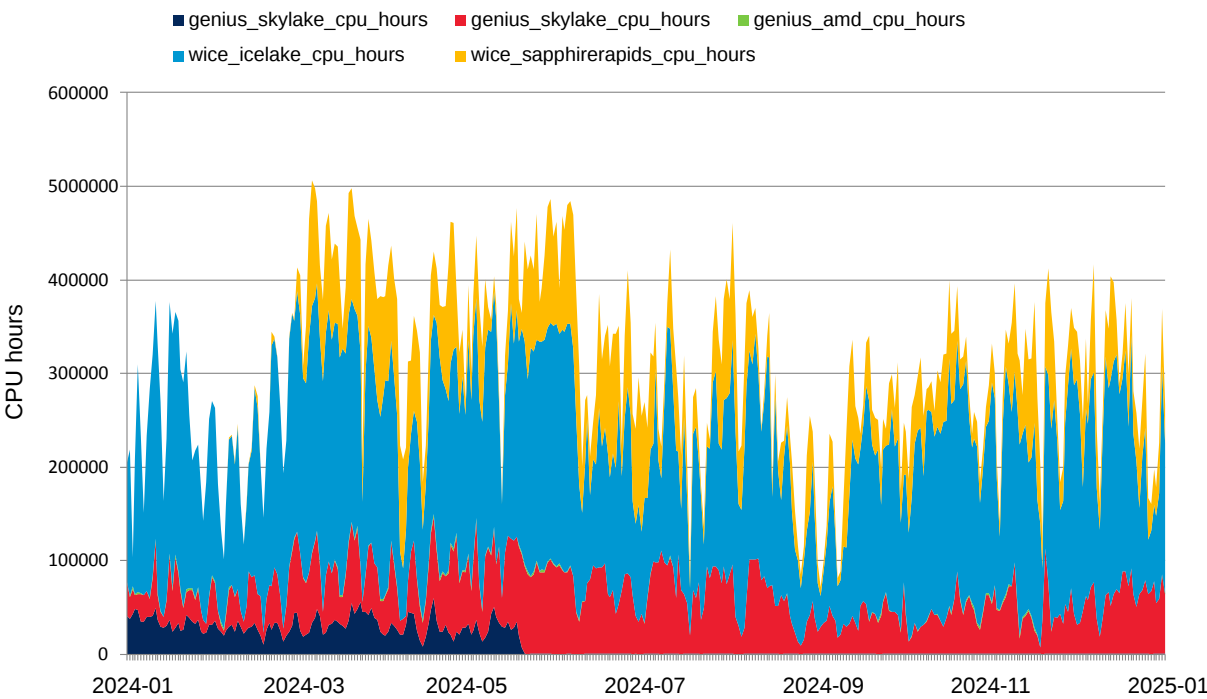


Afbeelding 45 Tier-2 infrastructuur KU Leuven

In 2024 is het oudste deel van Genius uitgezet. Deze nodes waren sinds 2018 operationeel. De GPU-sectie die bij deze aankoop behoorde blijft nog operationeel. De cluster wICE werd uitgebreid met een nieuwe partitie bestaande uit 68 servers (Sapphire Rapids 96 cores/server) en 4 GPU nodes met de recente NVIDIA H100 GPU.

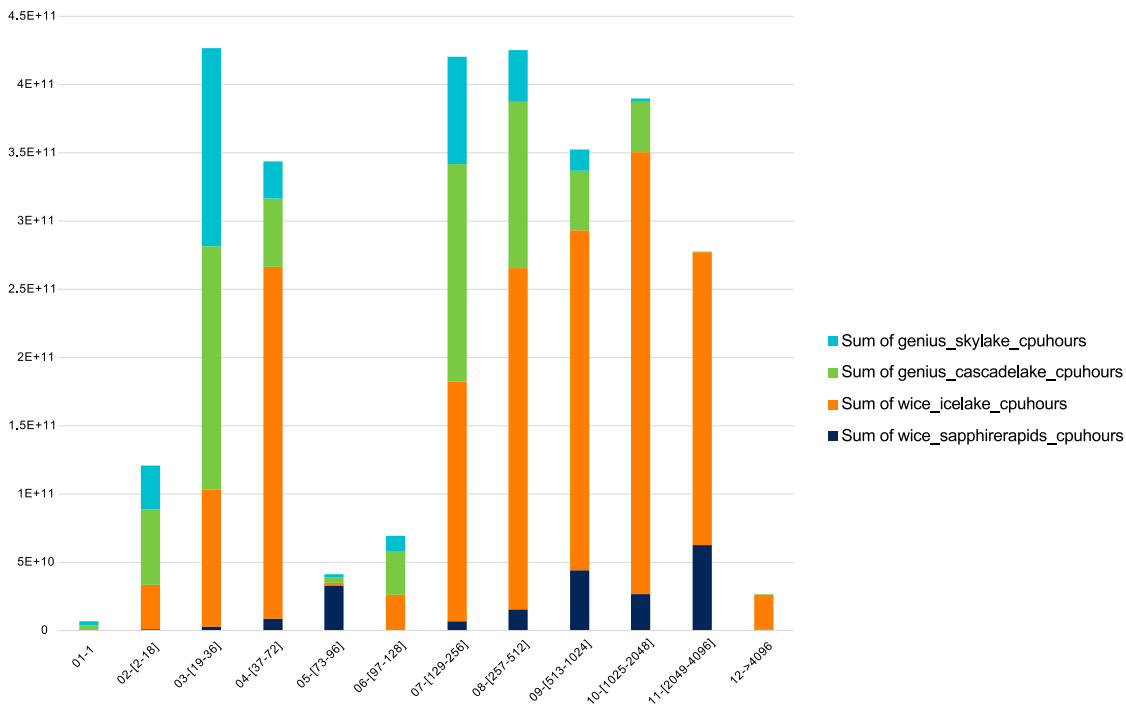
Exploitatie en gebruik

De grafiek toont data de cluster het ganse jaar zonder onderbreking beschikbaar is geweest. Er zijn geen grote wijzigingen of updates geweest die het systeem onbeschikbaar maakten.



Afbeelding 46 KU Leuven Tier-2 CPU-gebruik

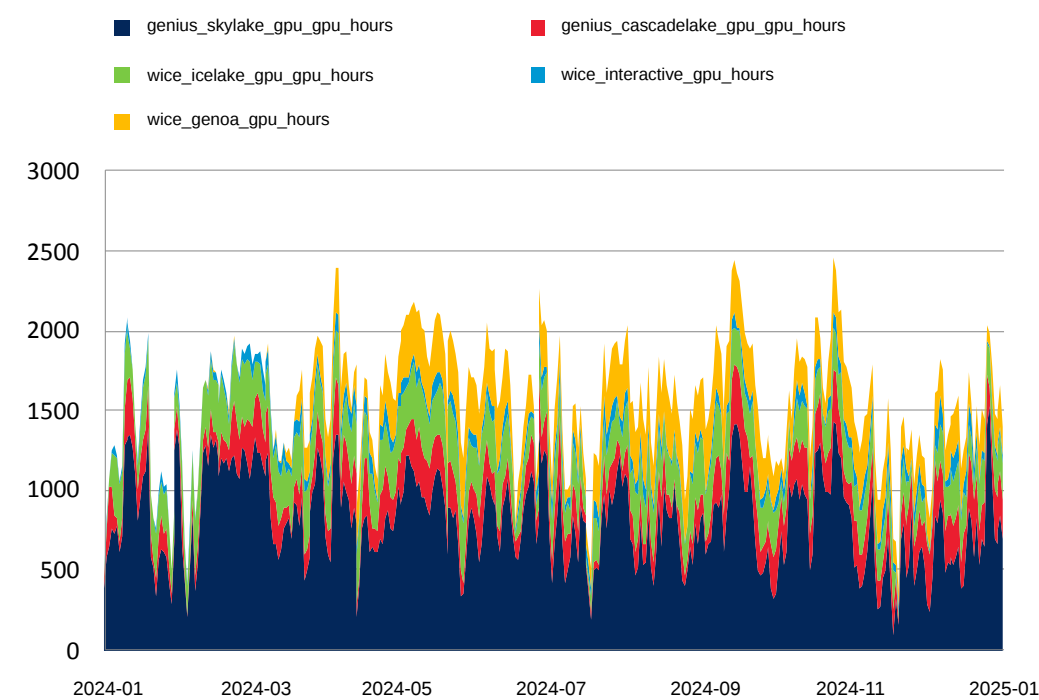
In mei is de Genius Skylake partitie uit gebruik genomen. In februari was reeds gestart met de nieuwe wICE Sapphire Rapids partitie. Deze omvat 68 nodes met 96-core servers.



Afbeelding 47. Tier-2 KU Leuven time by jobs size

Bovenstaande grafiek zoomt wat verder in op het gebruik van de clusters. Hieruit blijkt dat de workload van Genius vooral uit de kleinere jobs bestaat en dat de jobs met hogere aantal cores op wICE worden uitgevoerd. Het aandeel van wICE Sapphire Rapids is nog niet zo groot, gezien deze partitie pas in 2024 toegevoegd werd.

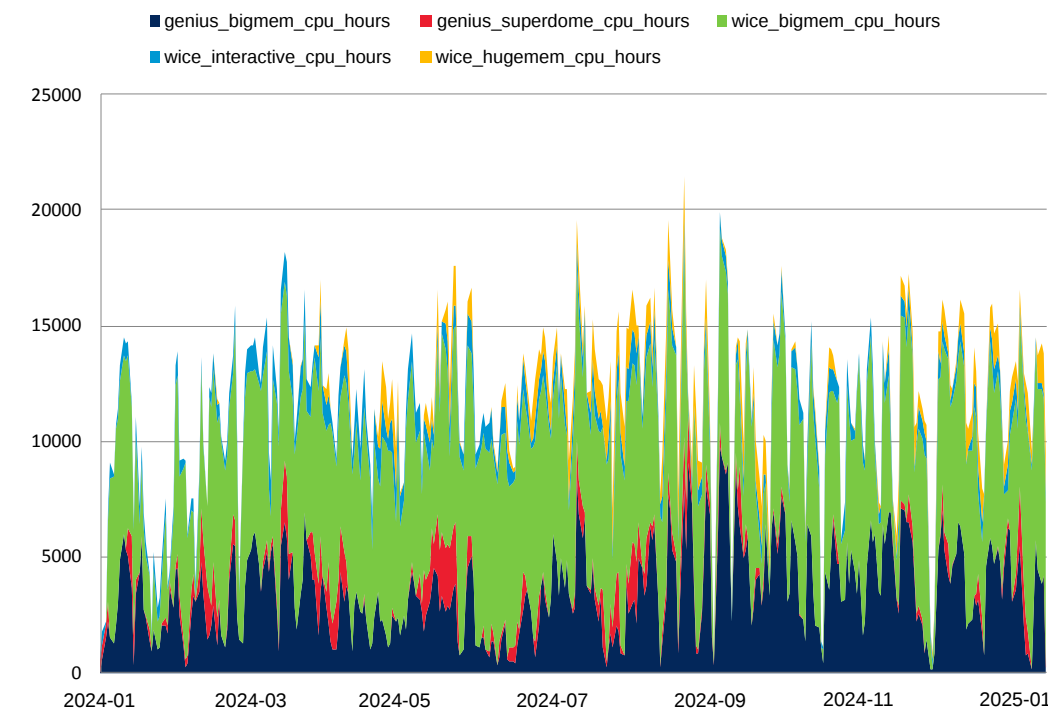
De nieuwe uitbreiding van de Tier-2 cluster is de eerste die met Direct Liquid Cooling wordt gekoeld. Het systeem heeft zonder problemen gefunctioneerd in 2024. Vloeistof koeling tot op de CPU zorgt er ook voor dat de CPU's langdurig op vol vermogen kunnen opereren.



Afbeelding 48. KU Leuven Tier-2 GPU-gebruik

De GPU's in de KU Leuven Tier-2 cluster zijn een belangrijk onderdeel van de HPC-omgeving, wat ook blijkt ook uit de bezetting. Merk wel op dat de Genius Skylake het grootste aantal GPU's omvat (80). Maar deze zijn van de oude NVIDIA P100 generatie. Vermits ze nog goed gebruikt blijven, en de GPU-resources beperkt zijn, worden deze nog operationeel gehouden. wICE bevat nu na de update 16 A100 GPU's (4 nodes met elk 4 GPU's) en bijkomend de meer recente H100 generatie (4 nodes met 4 GPU's). Deze zijn ook vloeistof gekoeld.

Afhankelijk van de workload kan een A100 4 tot 10 keer meer rekenwerk verzetten dan een P100. Het belang van de A100 en H100 GPU's is dus groter dan wat op het eerste gezicht op deze grafiek getoond wordt. Er dient ook vermeld te worden dat wanneer één van de recentere GPU generaties nieuwe onderdelen vereist, dit lang kan duren. De toelevering van deze specifieke onderdelen staat door de hoge vraag duidelijk nog altijd onder druk.



Afbeelding 49. KU Leuven Tier-2 CPU-gebruik

De KU Leuven cluster heeft ook nodes specifiek voor rekenwerk dat meer RAM nodig heeft. Deze nodes zijn in continu gebruik. De nodes met zeer veel geheugen (de oude Superdome en de nieuwe hugemem) zijn specifiek voor workloads die nergens anders kunnen uitgevoerd worden. De nodes zijn regelmatig maar niet continu bezet. Dit valt wel te verwachten voor deze workloads. Vermits het ook maar 1 node is, zijn het ook maar een beperkt aantal CPU-uren in de grafiek.

In 2024 werd ook een beperkte test cluster opgebouwd met gedecomissioneerde hardware. Deze wordt intern door de technische staf gebruikt om updates en aanpassingen voor te bereiden. Testen kunnen dan uitgevoerd worden zonder impact op de productie-omgeving.

Vorbereiding nieuwe Tier-2 cluster

In 2024 zijn de voorbereidingen gestart voor de aankoop van een nieuwe Tier-2 cluster. Een 30-tal onderzoekers werden in verschillende workshops betrokken om de belangrijkste kenmerken van een nieuw systeem te bespreken. Deze input is gebruikt voor het lastenboek. Vier leden van de technische teams woonden de ISC-conferentie in Hamburg bij om een duidelijk beeld te hebben van de beschikbare hardware. Om alternatieve of nieuwe technologieën goed te kunnen beoordelen heeft het technische team in de loop van het jaar testen kunnen uitvoeren op een systeem met andere netwerkcomponenten (Omnipath) en andere CPU- en GPU-architecturen (ARM Neoverse V2, MI250X GPU op LUMI).

Toekennen rekentijd

In 2024 waren 1800 gebruikers actief op het systeem. Op de clusters van KU Leuven/UHasselt wordt gewerkt met een credit accountingsysteem dat gebouwd werd boven op de scheduling software (Slurm).

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. Via een eenvoudige procedure kunnen credits aangevraagd worden tegen minimale kost. 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. UHasselt onderzoekers werken ook met de projecten. De toekenning van rekentijd wordt gedaan door de lokale ondersteuning.

Docenten kunnen ook rekentijd aanvragen die nodig is in het kader van cursussen. Er is een eenvoudige procedure om studenten in zo een kader toegang te geven. Wanneer studenten dan later in hun carrière onderzoekers worden is de stap naar gebruik binnen onderzoek zeer klein.

Gebruikersondersteuning

In 2024 werden er ongeveer 4.174 vragen afgehandeld die binnenkomen via het servicedesk emailadres. 96,7 % van deze tickets werden binnen de verwachte eerste reactietijd beantwoord, 91,4 % van de tickets werden vervolgens verder binnen de verwachte tijden beantwoord.

Type vraag	Aantal Tier-2	Aantal Tier-1
Accounts, toegang, project en storage management	2953	46
User application support (incl. software-installaties)	703	23
System support	323	3
Andere	128	13

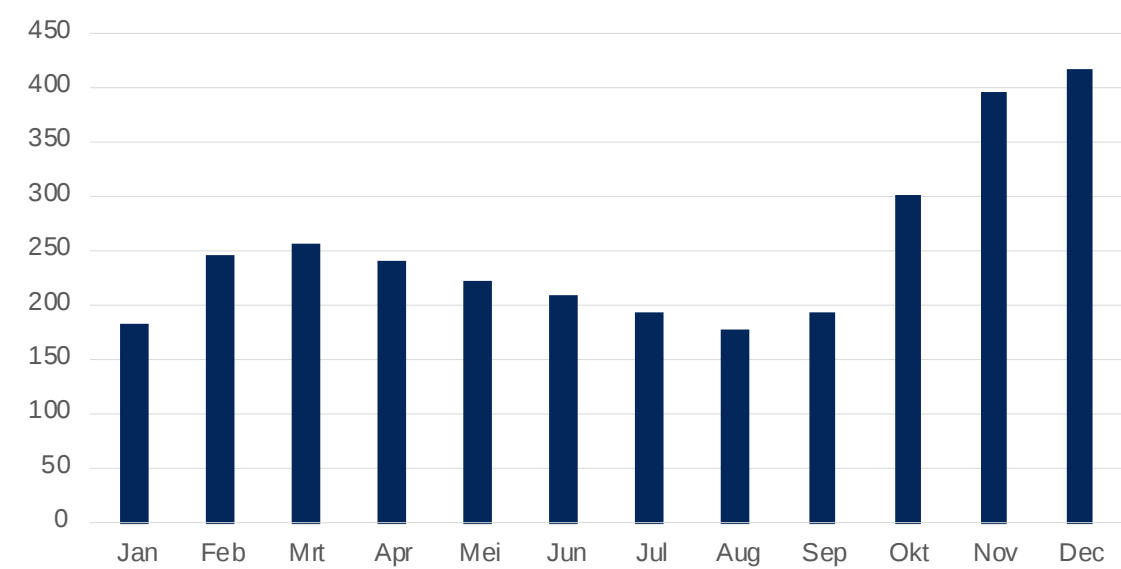
Tabel 13. Gebruikersondersteuning in 2024

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

Met Open OnDemand als webinterface is er een nieuwe toegang tot de cluster die het eenvoudiger kan maken voor startende gebruikers. In 2024 gebruikten meer dan 1.000 gebruikers OnDemand om werk op de cluster uit te voeren. Het gebruik is in de loop van het jaar duidelijk gestegen:

De meest gebruikte applicaties zijn Jupyter notebooks, Code Server en terminal shell en Rstudio.

Unieke maandelijkse gebruikers via Open OnDemand



Afbeelding 50. Evolutie van unieke maandelijkse gebruikers via Open OnDemand (2024)

In 2024 is een initiatief gestart om samen met onderzoeksgroepen het gebruik van de HPC-omgeving in hun onderzoek in detail in kaart te brengen en zo acties definiëren met betrekking tot verdere ondersteuning. Er werd gestart met de onderzoeksgroep “Structurele Materialen” en de onderzoeksgroep “Bos, natuur en landschap”.

Op 13 juni werd een HPC-gebruikersdag georganiseerd aan KU Leuven met een 70-tal deelnemers. Tijdens die dag kwamen zowel workshops aan bod als het werk dat onderzoekers verricht hebben op de cluster. De workshops omvatten volgende onderwerpen: LUMI, Tier-1 data, Slurm, Open OnDemand en eigen software op de cluster. Deze presentaties werden gebracht door onderzoekers van Hydraulics and Geotechnics; Forest, Nature and Landscape; Processing Speech and Images (PSI) en Leuven.AI en een 12-tal onderzoekers brachten een 1-minute poster pitch.

Er werden in 2024 10 site-specifieke trainingen georganiseerd voor nieuwe gebruikers van de infrastructuur. UHasselt gebruikers kunnen uiteraard deelnemen aan deze sessies, maar indien mogelijk wordt er geopteerd voor individuele sessies die toegespitst zijn op de specifieke noden van die gebruiker. Sinds het academiejaar 2024-2025 kunnen deze sessies ook ingebracht worden in de portfolio voor de doctoral schools aan UHasselt.

Gebruikersbevraging

In de VSC-gebruikersbevraging eind 2024 werd ook de gebruikerstevredenheid voor de Tier-2 KU Leuven/UHasselt infrastructuur en services bevraagd. 145 respondenten hebben geantwoord op de specifieke vragen voor KU Leuven Tier-2 omgeving. Hiervan gaven 126 respondenten van KU Leuven en 7 van UHasselt aan in meer of mindere mate gebruik te maken van de Tier-2 cluster.

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.

De beschikbare staf heeft, naast LUMI-specifieke cursussen, o.a. ook deelgenomen aan “2nd ExaFOAM workshop”, “ColonyOS - A Meta Operating System for HPC and Cloud”, “Enhancing CFD simulations: Optimizing STAR-CCM+ performance on a supercomputer”, “POP3 Profiling and Optimisation Tools”, “MPI for Python”, “Kokkos: Getting Lucky by Design”, “From zero to multi-node GPU programming”, “Build Systems Course”, “ChEESE and POP: a Story of Success and Fruitful Interaction” en “Streaming Optimised Scientific Software: an Introduction to EESSI”.

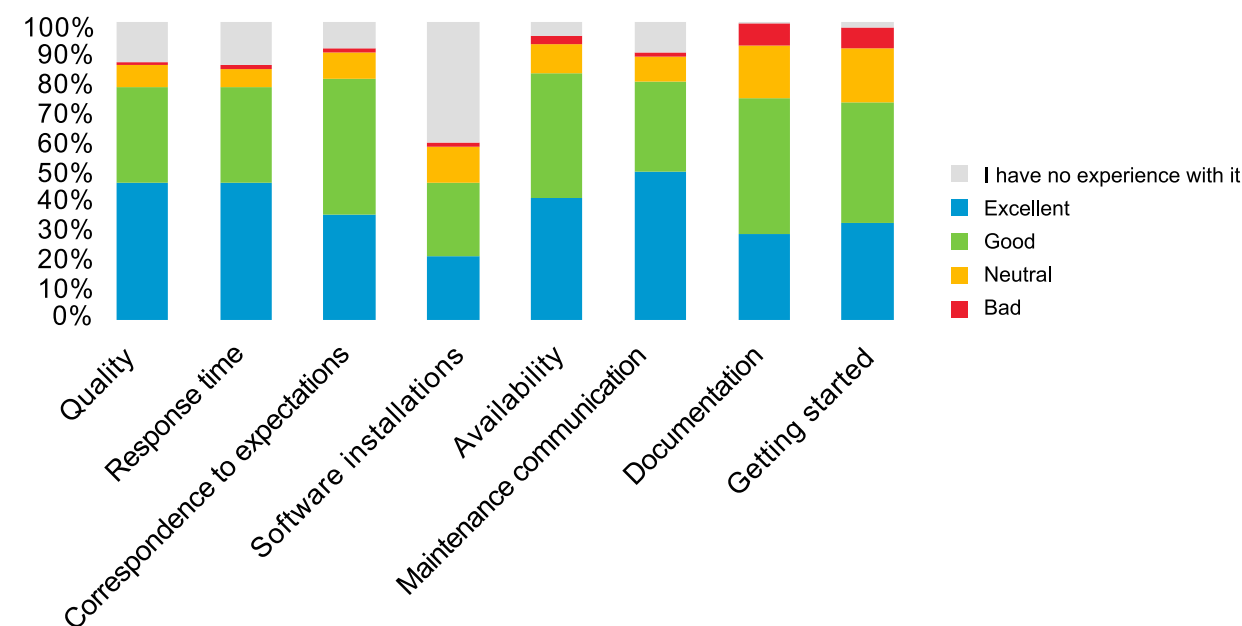


Afbeelding 52. Beelden van de LUMI-BE Gebruikersdag 2024. Sander Vandenhoute (rechts) en Michiel Van Ginderachter (links)

Volgende cursussen werden aangekondigd:

- LUMI 1-day training (8 februari)
- Comprehensive General LUMI Training (23-26 april)
- Supercomputing with LUMI (2-3 mei)
- Moving your AI training jobs to LUMI (29-30 mei, 26-27 november)
- Performance analysis and optimization (11-12 juni)
- Advanced LUMI Training (28-31 oktober)
- High-Level GPU Programming course (27-29 november)
- Intro to Supercomputing with LUMI (10-11 december)

Tier-2 KU Leuven/UHasselt



Afbeelding 51. Gebruikerstevredenheid Tier-2 KU Leuven/UHasselt – VSC Bevraging 2024

% van de gebruikers die goed of excellent antwoordden op de vragen:

- 90 % - kwaliteit
- 91 % - responstijd
- 89 % - overeenstemming met verwachtingen
- 78 % - software installaties
- 87 % - beschikbaarheid
- 89 % - communicatie omtrent onderhoud
- 75 % - documentatie
- 75 % - getting started

Documentatie blijft een werkpunt. Veranderingen moeten tijdig opgenomen worden en specifieke voorbeelden worden gevraagd. Starten met de cluster wordt door sommige gebruikers als moeilijk aangeduid. In 2024 waren er 12 introductie sessie waaraan gemiddeld 20 nieuwe gebruikers per sessie deelnamen. Het is duidelijk dat dit een belangrijk aandachtspunt zal blijven. Er is een duidelijke vraag naar meer en specifieke voorbeelden.

Naar aanleiding van opmerkingen op de survey van 2023 werd er in 2024 aandacht geschonken aan gebruik van R en Python in combinatie met standaard modules. Dit topic kwam ter sprake in een workshop op de HPC-gebruikersdag aan KU Leuven. Bij aanloggen op de cluster krijgen gebruikers nu een status overzicht van de cluster te zien, alle partitienamen zijn consistent gemaakt en er is verder gewerkt aan documentatie.

Bij alle cursussen waren een of meerdere Vlaamse onderzoekers aanwezig, m.u.v. “LUMI Performance analysis and optimization” en “High-Level GPU Programming course”. Bij die twee cursussen was er wel deelname vanuit het VSC Tier-0 ondersteuningsteam.

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 2024 waren er drie oproepen voor rekentijd op het Belgische aandeel op LUMI. Van de 13 ingediende “regular” aanvragen werden volgende 11 aanvragen toegekend:

Datum	Naam onderzoeker(s)	Instelling	Onderzoeksgroep / Afdeling
2024-06	Evgeny Gorbunov, Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics
	Nicolas Wijsen	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics
	Evgeny Gorbunov	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics
	Daniel Groselj	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics
2024-07	Hans De Winter	UAntwerpen	Medicinal Chemistry
	Nikola Dukic	KU Leuven	Processing Speech and Images
2024-08	Zhaochun Liu	Vrije Universiteit Brussel	Materials Modelling Group
	Zifu Wang	KU Leuven	Processing Speech and Images
	Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modelling
	Cem Sevik	UAntwerpen	Condensed Matter Theory
	Evgeny Gorbunov	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics

Tabel 14. LUMI-aanvragen 2024 – Toegekend aan Vlaamse Onderzoekers

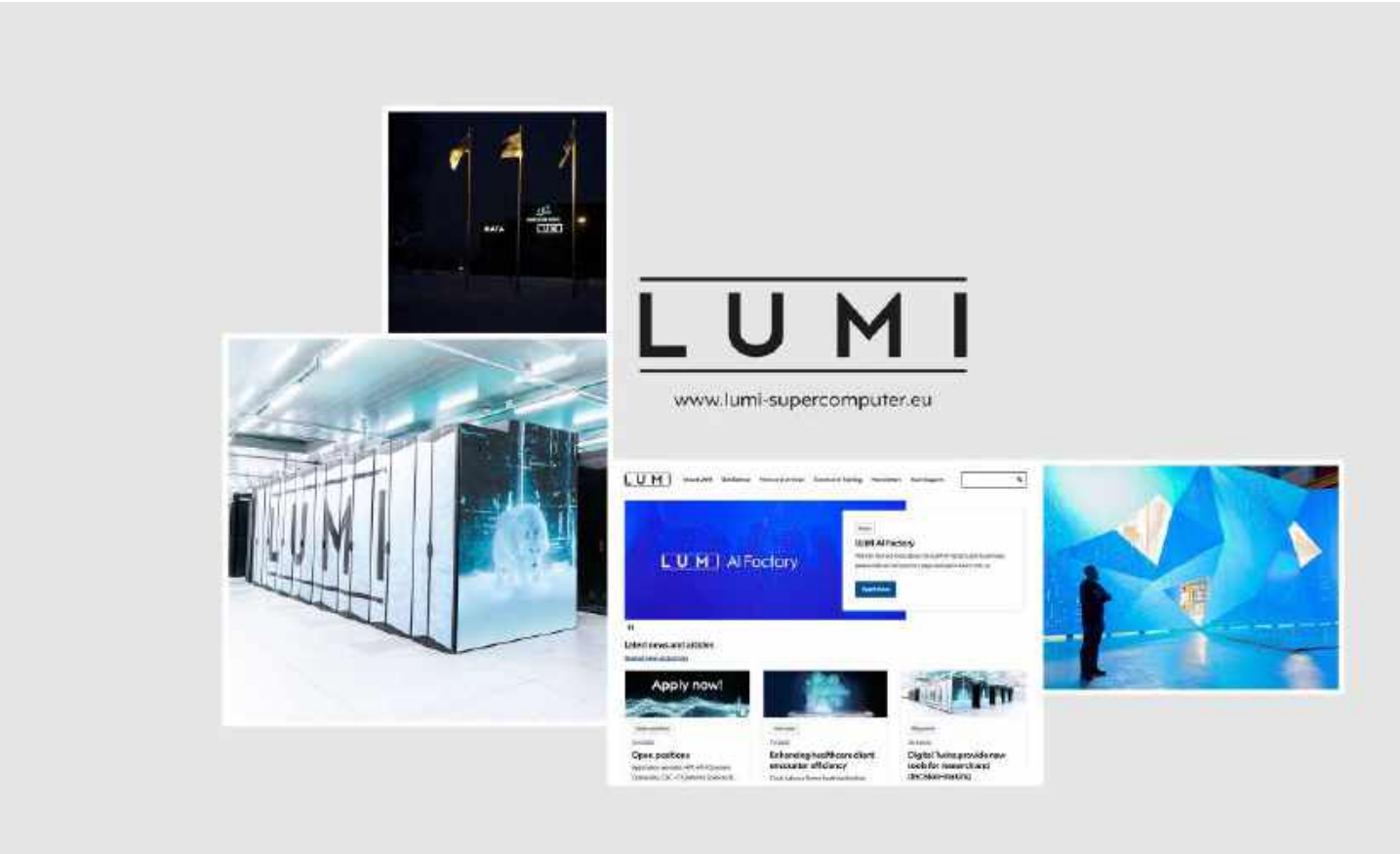
Daarnaast waren er ook nog 28 preparatory (“benchmark” en “development”) aanvragen waarvan er 26 zijn goedgekeurd. De meerderheid (23/41) van de aanvragen in 2024 kwam van onderzoekers die nog niet eerder een aanvraag voor LUMI hebben ingediend, een duidelijke stijging t.o.v. de acht aanvragen van nieuwe gebruikers in 2023.

De mails die via de helpdesk 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 7 november werd in A6K in Charleroi de LUMI-BE gebruikersdag georganiseerd, samen met CÉCI. Naast presentaties over JUPITER, LUMI en het EPICURE-project waren er zes voordrachten door gebruikers:

- Sander Vandenhaute (UGent): Accelerating Molecular Simulation: From Wave Functions to Thermodynamics.
- Kurt Lust (LUMI) : LUMI update.
- Guy De Pauw (Textgain): CaLICO, a foundation LLM to wrangle toxic language.
- Mathis Bode (Forschungszentrum Jülich): JUPITER – The Arrival of Exascale in Europe.
- Emmanuel Hanert (UCLouvain): Multiscale ocean modelling: bridging the gap between global changes and local impacts.
- Michiel Van Ginderachter (RMI): Machine Learning Weather Prediction: moving to higher resolutions.
- Antoine Barthélemy (UCLouvain): From coarse to crisp: evaluating the impact of horizontal resolution on global ocean-sea ice simulations.
- Wouter Van Putte (Puxano): Building novel AI models to facilitate experimental structural biology: company strategies and EU initiatives.
- Stefan Becuwe (UAntwerpen): EPICURE Application Support for EuroHPC Users.

Er waren 42 deelnemers. In het najaar van 2025 wordt de volgende gebruikersdag georganiseerd.



Opleidingen

Het VSC voorziet opleidingen die in eerste instantie gericht zijn op haar huidige 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.

We merken ook een toenemend, zij het nog klein aantal deelnemers aan onze trainingsactiviteiten. Dit is enerzijds toe te schrijven aan een grotere naambekendheid van het VSC in het buitenland, vooral dankzij de nauwe samenwerking met EuroCC@Belgium voor communicatie en training. Dit is zonder twijfel een positieve evolutie aangezien het illustreert dat onze activiteiten een meerwaarde bieden.

Voor het VSC is opleiding één van de kernactiviteiten. 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. Een ander argument is dat het gebruik van deze infrastructuur en services een middel is, geen doel op zich. Het is dus belangrijk dat gebruikers zo snel als mogelijk op een efficiënte manier aan de slag kunnen, zodat ze zich kunnen concentreren op de resultaten van hun berekeningen, eerder dan de manier waarop ze die moeten uitvoeren. Hieraan dragen de trainingen in hoge mate bij. Hoewel deze korte-termijn voordelen uiteraard belangrijk zijn, zal een professioneel gebruik van deze infrastructuur op langere termijn ook zorgen voor een grotere competitiviteit van zowel onze onderzoekers als onze bedrijven en leiden tot een ecosysteem waarvan alle partijen de vruchten kunnen plukken.

Opleidingen en trainingsmateriaal dragen ook bij tot de uitstraling en reputatie van het VSC. Uit de analyse van het gebruik 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 EuroCC2.

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



Introductory-cursussen zijn bedoeld voor alle gebruikers van de infrastructuur en worden ten zeerste aanbevolen aan wie nog niet over de nodige vaardigheden beschikt. De plaatselijke VSC-medewerkers leiden deze sessies. Dat biedt onderzoekers ook de kans om kennis te maken met de personen die de vragen beantwoorden die 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 hybride of online aangeboden, zodat de geografische afstand geen rol 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 EuroCC2 National Competence Centers of komen ze uit de industrie. Het ruime aanbod aan EuroCC2 en LUMI-trainingen werd geregeld onder de aandacht gebracht via sociale media en de website.

In totaal waren er 1.233 deelnemers aan 59 training sessies, een stijging van 10 % ten opzichte van 2023.

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 werd gegeven. In de loop van 2024 werd ook "Fortran for scientific computing" door FutureLearn op non-actief gezet aangezien de hosting niet langer door PRACE betaald wordt. Hiervoor is een vervangende training in voorbereiding voor 2025.

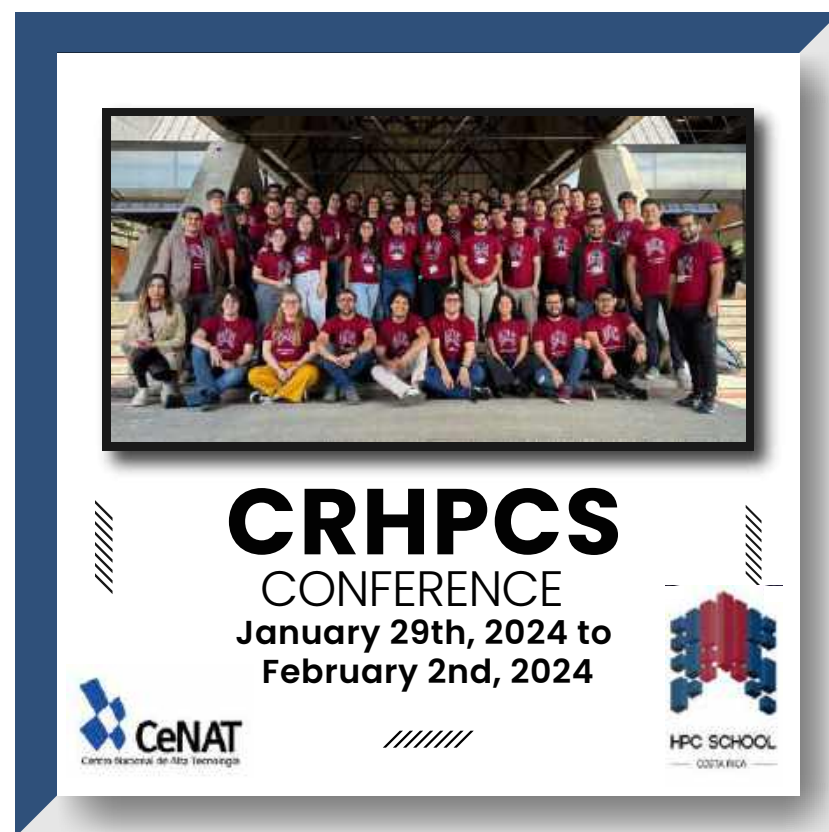


Uiteraard worden de bestaande opleidingen steeds up-to-date gehouden met recente ontwikkelingen, maar er worden ook jaarlijks nieuwe onderwerpen voor training geselecteerd en uitgewerkt. In 2024 werd bijvoorbeeld een training over “Defensive programming and debugging” en “Deploying LLMs locally” gegeven. Ook het VSC Tier-1 datateam werkte nieuwe trainingen rond het gebruik van deze services uit waarvan al vier trainingssessies georganiseerd werden.

VSC-staf volgde zelf ook trainingen online (vaak meerdaagse trainingen).

Via de website, interne mailinglijsten 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.

Het VSC verzorgde ook een aantal trainingen op maat in samenwerking met andere organisaties zoals CENAT (San José, Costa Rica) waar een vierdaagse workshop gegeven werd onder de titel “Python for HPC” waaraan 47, vooral jonge, onderzoekers deelnamen afkomstig uit de regio.



Afbeelding 53. CENAT (San José, Costa Rica)

Meer lokaal werden er trainingen opgezet samen met FLAMES (FLAnders’ training network for MEthodology and Statistics) rond “Python for data science” (2 dagen) en “R best practices” (3 uur) met in totaal 60 deelnemers. Voor VIB werd een training ontwikkeld voor een workshop rond scientific software engineering die het gebruik van Large Language Models (LLM’s) op eigen infrastructuur als onderwerp had, en ook hoe deze te gebruiken op eigen data. Deze training van een dag had 27 deelnemers.

Op uitnodiging van de Vlaamse AI Academy werd een presentatie gegeven met als titel “Possibilities of the use of Vlaams Supercomputer Centrum in machine learning models” op tweedaagse masterclass waarop een 25-tal jonge onderzoekers aanwezig waren.

Gebruikersbevraging

Uit de gebruikersbevraging van 2023 blijkt dat de gebruikers van onze infrastructuur en services de kwaliteit van het trainingsaanbod zeer goed vinden. Deze vraag werd beantwoord door 146 respondenten.

- 0,0 % Zeer lage kwaliteit
- 3,4 % Lage kwaliteit
- 17,8 % Gemiddelde kwaliteit
- 53,4 % Hoge kwaliteit
- 25,3 % Zeer hoge kwaliteit

Er werd ook bevraagd of het aantal trainingen in de diverse categoriën voldoende is. Het aanbod aan introductory en intermediate trainingen lijkt zeker voldoende, maar uit de cijfers blijkt een behoefte aan meer advanced en domeinspecifieke trainingen.

- Introductory (111 respondenten)
 - 17 % te weinig
 - 73 % voldoende
 - 10 % te veel
- Intermediate (76 respondenten)
 - 17 % te weinig
 - 79 % voldoende
 - 4 % te veel
- Advanced (60 respondenten)
 - 33 % te weinig
 - 58 % voldoende
 - 8 % te veel
- Domain/application-specific (57 respondenten)
 - 51 % te weinig
 - 46 % voldoende
 - 3 % te veel

Op 374 respondenten nam slechts 35 % deel aan een VSC-training van welke aard dan ook. Het is interessant dit in verband te brengen met de andere resultaten van de bevraging, waaruit blijkt dat gebruikers het vaak moeilijk vinden met de infrastructuur van start te gaan.

Uit de bevraging blijkt jammer genoeg ook dat het trainingsaanbod nog steeds niet ruim genoeg bekend is, aangezien er bij de vraag om suggesties vaak een behoefte aangehaald wordt waarin in het huidige aanbod al voorzien is. Daarnaast werd er in 2024 ook gewerkt aan het opvullen van lacunes, en de eerste edities van deze trainingen rond GPU-computing en workflows worden in 2025 gegeven.

Naast de trainingen die het VSC zelf organiseert is er ook een erg ruim aanbod binnen het netwerk van National Competence Centers en Centers of Excellence. Zeker deze laatsten bieden geavanceerde en domeinspecifieke trainingen aan. Hoewel er hiernaar verwezen wordt vanop de VSC-website zal er in de toekomst geprobeerd worden dit via gerichte communicatie nog meer bekendheid te geven.

Users Day 24

Op 22 oktober 2024 organiseerde het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) zijn jaarlijkse Gebruikersdag in het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek (FWO) in Brussel. Met als thema “Artificial Intelligence and Research” bracht het evenement onderzoekers, technologen en HPC-gebruikers uit heel Vlaanderen samen om te verkennen hoe AI wetenschappelijke ontdekkingen en computationeel onderzoek transformeert.

Speakers



Andrea Beck
University of Stuttgart
*SCFD, HPC and AI:
Ingredients for the next
generation flow solvers*



Niels Bylois
Hasselt University
*Conditional Metrics for
Data Ingestion Validation*



Ceder Dens
UAntwerpen
*Artificial intelligence
to decode the peptide
sequences driving the
immune response*



HPC Support Team
VSC
*AMD versus NVIDIA GPUs:
do's and don'ts*



Support Team
VSC
*HPC best practices and
some magic trick*



Danai Kafetzaki
VSC Data Team
*VSC Tier-1 Data: Research
Data Management Made
Easier*

www.vscentrum.be/ud24

Lightning Talks

Spreker	Instelling	Titel
Floriano Tori	VUB	The unreasonable effectiveness of hyperparameters in machine learning
Mattia Olcuire	Stellantis e-Transmissions	Gearbox intelligence: detecting hidden anomalies in hybrid transmissions using recurrent neural networks
Maarten Dobbelaere	UGent	A chemical space odyssey: discovering tomorrow's drugs throught AI and HPC
Carmen Bravo Gonzalez-Blas	KU Leuven	Tailoring glioblastoma treatment: the power of functional precision oncology
Stuti Pathak	UAntwerpen	When machine learning meets point clouds
Nick Seeuws	KU Leuven	Outsourcing to silocon
Rober Mamani	KU Leuven/VITO	Urban CFD for wind comfort and clean energy in Antwerp
Tobe Vorsselmans	UAntwerpen	Decoding the hidden chemistry of cosmic dust surfaces
Sepideh khalatabad	UGent	AI powered material characterization and modelling for green steel technology
Melvin Geubbelmans	UHasselt	PiDGiN: studying tumor heterogenicity in lung cancer tissue
Frédérique Vilenne	UHasselt	Charge state prediction for (un)modified peptides in electrospray ionization
Ramos Pedro	KU Leuven	Sialing in the cloud
Changsheng Chen	KU Leuven	Assessing learners' abilities for adaptive learning
Arts Ine	UAntwerpen	Understanding oxidized nuclear fuel: how DFT sheds light on experimental findings

Tabel 14. Lijst met Lightning Talks-deelnemers (klik op de titel om de presentatie te bekijken).



Ine Arts
UAntwerpen
*Understanding Oxidized Nuclear Fuel: How DFT Sheds
Light on Experimental Findings*

Digitale aanwezigheid

In 2024 heeft VSC zijn online communicatiestrategie versterkt, met een grotere zichtbaarheid en betrokkenheid via web- en sociale mediakanalen. Met informatieve content, aantrekkelijke campagnes en consequente interactie ondersteunen de digitale platformen van VSC haar missie om onderzoekers, bedrijven en het brede publiek te bedienen.

VSC Website

Een Centrale Hub voor Gebruikers en Bezoekers

De VSC-website (www.vscentrum.be) is de primaire digitale toegangspoort tot de diensten, infrastructuur en expertise van het Vlaams Supercomputer Centrum, en vormt een cruciaal platform dat de onderzoeksgemeenschap ondersteunt door uitgebreide informatie te verstrekken over onze supercomputerbronnen, diensten en prestaties. In 2024 telde de site meer dan 30.000 sessies en 14.184 unieke bezoekers. 32% van het verkeer was herhaalbezoek, een stijging van 5% ten opzichte van 2023 en ruim boven het VZW-gemiddelde van 18%, wat wijst op sterke gebruikersloyaliteit en herhaalde betrokkenheid.

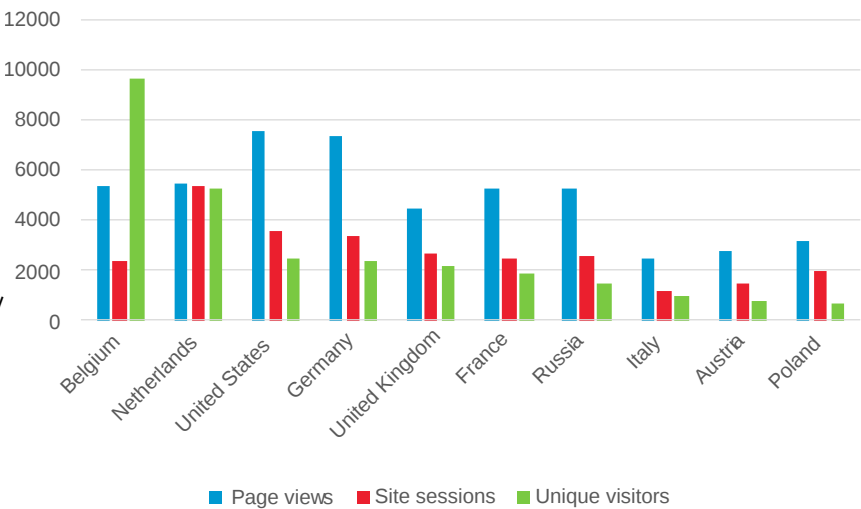
De website is gestructureerd voor een breed publiek, waaronder:

- Onderzoekers op zoek naar toegang tot HPC-resources, ondersteuning en training
- Bedrijven die innovatiekansen verkennen via rekeninfrastructuur
- Studenten en jonge wetenschappers die zich willen bijscholen in HPC, AI en data science
- Beleidsmakers en het publiek dat inzicht wil krijgen in de maatschappelijke impact van supercomputing



Belangrijkste bezochte secties:

- Opleidingsmogelijkheden
- VSC Services
- Succesverhalen
- Research Showcase
- Nieuws & Evenementen
- Ondersteuning & Documentatie / User Portal
- Get access



Afbeelding 49. Websiteverkeer per land in 2024: paginaweergaven, sessies en unieke bezoekers

Toekomstplannen

De VSC-website is dé centrale toegangspoort tot geavanceerde rekenkracht en expertise in Vlaanderen.

Als onmisbaar platform voor onderzoekers, bedrijven en studenten biedt de site diepgaande informatie, uitgebreide documentatie en directe toegang tot onze diensten en supercomputers. Met duizenden bezoekers per jaar is de VSC website hét startpunt voor iedereen die wil innoveren, versnellen en excelleren..

VSC plant de volgende initiatieven:

- Lancering van de blog “VSC Connect”: een maandelijkse blog met inzichten uit de wereld van HPC, AI, datawetenschap en duurzaamheid. Medewerkers tonen hoe onze infrastructuur onderzoek en innovatie ondersteunt.
- Uitbreiding van de videostrategie met korte, snelle video’s.
- Verbetering van de interactiviteit en toegankelijkheid van de website.



Afbeelding 54. Promofoto van de komende “VSC Connect Blog” in 2025

Sociale media bij VSC

Sociale media spelen een centrale rol in hoe VSC in contact staat met haar gemeenschap en haar impact communiceert. Via kanalen zoals LinkedIn, YouTube en recent ook Bluesky deelt VSC nieuws, viert onderzoeksresultaten, promoot trainingen, en toont hoe supercomputing innovatie mogelijk maakt in verschillende disciplines. Deze kanalen maken HPC toegankelijker en zichtbaarder – en bereiken onderzoekers, partners, studenten en het brede publiek met content die informeert, inspireert en verbindt.

LinkedIn: betekenisvolle groei en betrokkenheid



De LinkedIn-pagina van VSC (@vschpc) is een strategisch communicatiekanaal voor outreach en communitybuilding binnen het HPC-landschap. Hier delen we cruciale informatie, promoten we diensten, trekken we talent aan, tonen we impact, en bouwen we aan een sterke gebruikersbasis.

- Volgers gegroeid tot 1.957 volgers, 532 volgers toegevoegd in 2024
- Organische groei, met pieken tijdens campagnes en evenementen zoals Users Day, Research Showcase, Succesverhalen en trainingsaankondigingen
- Beste posts: onderzoekers in de spotlight, prijsuitreikingen, en AI-gerelateerd nieuws
- Impressies piekten regelmatig boven de 2.000 per dag

VSC YouTube kanaal: jouw visuele toegang tot HPC

Het VSC YouTube-kanaal (@vschpc) groeide in 2024 uit tot een krachtig platform voor educatie, outreach en kennisdeling. Met een zorgvuldig opgebouwde videobibliotheek – van webinars en workshops tot reeksen als Succesverhalen en AI in Structurele Biologie – brengt het kanaal HPC-expertise op een toegankelijke en aantrekkelijke manier. Het ondersteunt de onboarding van nieuwe gebruikers en vergroot tegelijk de zichtbaarheid van onderzoek dat dankzij VSC mogelijk werd gemaakt.

Bluesky

Het VSC Bluesky-account (@vschpc.bsky.social) weerspiegelt VSC's openheid voor innovatie en digitale onafhankelijkheid. In 2024 begon VSC dit kanaal te gebruiken voor het delen van updates, evenementen en inzichten uit HPC- en AI-onderzoek. Deze aanwezigheid – nog in een verkennende fase – bereikt een technisch en privacybewust publiek, en positioneert VSC aan de voorhoede van nieuwe digitale communicatietrends.



“The computing resources, as well as the excellent documentation and support provided by the Flemish Supercomputer played an invaluable role in providing proof of concept for achieving precise DNA correction through the developed prime editing approaches and establishing a genome-wide safety profile for this novel technology.”

Mattijs Bulcaen (KU Leuven)

Zie pagina 85 “Research Showcase”:

Prime editing allows tackling Cystic Fibrosis at its genetic roots

Campagnes in de kijker

Research Showcase

De “Research Showcase”-pagina op de VSC-website bleef in 2024 groeien en trekt steeds meer onderzoekers aan die hun gepubliceerde werk willen delen. De bijbehorende blog is uitgegroeid tot een bruisend platform dat een divers en baanbrekend overzicht biedt van onderzoek mogelijk gemaakt door de geavanceerde infrastructuur van VSC. Elke blogpost bevat een aangepaste versie van de oorspronkelijke wetenschappelijke publicatie, opgesteld in samenwerking met de auteurs om de cruciale rol van VSC in hun onderzoek te belichten.

De voorgestelde studies bestrijken een breed scala aan disciplines en weerspiegelen de wetenschappelijke en technologische innovatie die VSC ondersteunt – van klimaatwetenschap en AI tot engineering en medisch onderzoek. Deze verhalen tonen niet alleen de vindingrijkheid van de onderzoekers en hun bevindingen, maar illustreren ook hoe toegang tot high-performance computing essentieel was om complexe computationele uitdagingen te overwinnen.

Alle gegevens over het bereik en de betrokkenheid van de Research Showcase-blog in 2024 zijn samengevat in de bijgevoegde infographic.



Research Showcase



Onderstaande bijdragen werden in 2024 gepubliceerd op de Research Showcase-pagina van VSC

- Accelerating Rare Disease Diagnosis: A Breakthrough with VSC Computational Power | UZ Leuven
- Burned Area Increasingly Explained by Climate Change | VUB
- Borophane: The Hydrogen-Boosted Superconductor | UAntwerpen
- Detecting imagined speech events from brain signals | KU Leuven
- Stable Boundary Layers with Subsidence: Scaling and Similarity of the Steady State | KU Leuven
- Investigating screw agitator speed ratio impact on feeding performance using DEM | UGent
- Unlocking the power of nanopores | VUB
- Direct probing of low-energy intra d-band transitions in gas-phase cobalt clusters | KU Leuven
- CHIT1 at diagnosis predicts faster disability progression and reflects early microglial activation in multiple sclerosis | KU Leuven
- Benchmarking of methods for DNA methylome deconvolution | KU Leuven
- Prime editing allows tackling Cystic Fibrosis at its genetic roots | KU Leuven
- Joint multi-ancestry and admixed GWAS reveals the complex genetics behind human cranial vault shape | KU Leuven
- ForestTemp – Sub-canopy microclimate temperatures of European forests | KU Leuven
- Contribution of climate change to the spatial expansion of West Nile virus in Europe | VUB
- Lower respiratory tract single-cell RNA sequencing and neutrophil extracellular trap profiling of COVID-19-associated pulmonary aspergillosis: a single centre, retrospective, observational study | KU Leuven
- Mapping Cell Composition of Metastatic Melanoma To Identify Cause of Immunotherapy Resistance | KU Leuven
- AI-based diagnosis of skeletal metastases in whole-body MRI | VUB

Succesverhalen

Een visuele reeks interviews met onderzoekers en partners uit academische en industriële wereld, die baanbrekende resultaten boekten dankzij HPC.

Faces of VSC

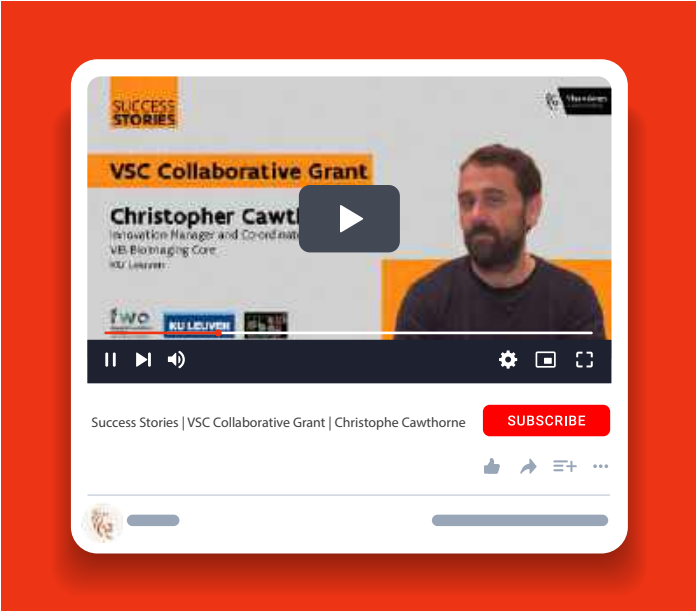
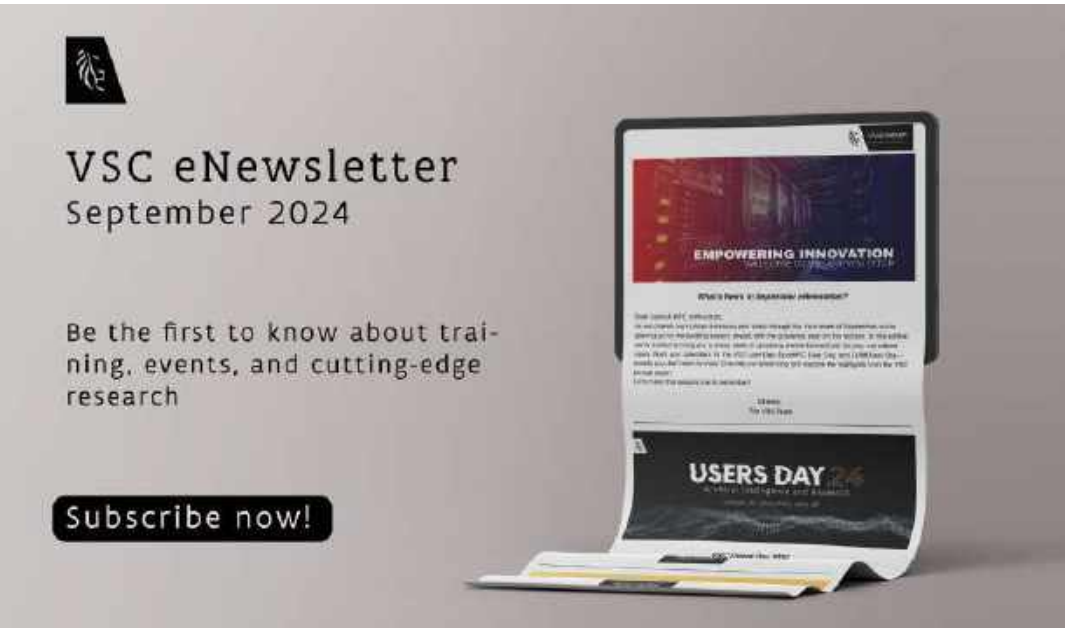
Een campagne die de mensen achter VSC in beeld brengt: experten, ondersteunend personeel en samenwerkingspartners. Portretten en persoonlijke quotes tonen de diversiteit en toewijding van het team dat HPC toegankelijk en impactvol maakt voor de Vlaamse onderzoeksgemeenschap.

Nieuwsbrief

De VSC e-nieuwsbrief is een belangrijk outreachkanaal en verschijnt vier keer per jaar. Ze informeert onderzoekers, partners en stakeholders met relevante updates over het Vlaamse HPC-landschap. Elke editie bevat:

- Aankondigingen van trainingen en deadlines
- Onderzoeksresultaten en praktijkvoorbeelden
- Updates over nieuwe hardware, software en diensten
- Oproepen tot samenwerking of projectdeelname

Naast de kwartaaledities zijn er ook event-specifieke nieuwsbrieven, zoals uitnodigingen voor VSC Users Day, workshops en campagne-lancerings. De nieuwsbrief blijft groeien en bereikt een diverse groep van academici, IT-experten, ondernemers en beleidsmakers. De openingspercentages en doorklikcijfers blijven hoog, wat de blijvende interesse in HPC-nieuws uit Vlaanderen bevestigt.



EuroCC

VSC neemt sinds 2023 deel aan het EuroCC2 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 33 nationale competentiecentra (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 academische, 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, 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 omvat, 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 2024 ondersteunde VSC via EuroCC België trainingen op industrie gericht zoals een webinar in samenwerking met Siemens, DEME en Daikin om CFD-simulaties te versnellen, en webinars en live training rond Quantum Computing, met 291 deelnemers afkomstig uit verschillende bedrijven.

Via outreach campagnes en deelname aan infosessies en netwerkevenementen rond engineering, biotechnologie, kwantumtechnologieën en artificiële intelligentie evenals de Trefdag Digitaal Vlaanderen, bouwde VSC nieuwe contacten uit met meer dan 200 bedrijven en werden 67 bedrijven aan toegang tot HPC en expertise geholpen in 2024.

Naast rechtstreekse contacten met industrie, onderhouden we ook relaties met andere organisaties en lokale overheden, zoals de POM's, VLAIO, BioTope, TTO's, Stad Antwerpen, VAIA, AGORIA, MCA, Flemish Aerospace Group, imec, Agentschap Natuur & Bos, The Beacon, VMM, FARI AI, en anderen om de nood aan computercapaciteit en expertise in verschillende soorten organisaties in kaart te brengen.

EPICURE

In februari 2024 is het EPICURE (epicure-hpc.eu) project gestart, het “EuroHPC Application Support Project”. Het consortium is opgebouwd rond de hosting sites van (toekomstige) EuroHPC machines. Het VSC neemt deel binnen het team rond de LUMI-supercomputer. Binnen dit project wordt zogenaamde Level 2- en Level 3-ondersteuning aangeboden aan gebruikers van de EuroHPC-machines. Het volstaat hiervoor op de projectaanvraag voor rekentijd ondersteuning aan te vragen. De ondersteuning varieert in tijd tussen 3 en 6 maanden. Diensten die worden aangeboden omvatten performantie-analyse, benchmarking, code refactoring, code optimalisatie, aanpassen van code voor een nieuwe architectuur e.d. Daarnaast wordt er ook gewerkt aan zogenaamde “Best Practice Guides”, en worden er ook hackathons, cursussen en webinars georganiseerd.

Het VSC is vooral actief binnen WP 2: “Code Porting, Enabling and Scaling”.

Vermits toegang tot EPICURE niet mogelijk is voor de nationale of regionale projecten zoals VSC Tier-1 projecten, is het dus complementair aan de VSC Tier-0 ondersteuning.

MultiXscale

MultiXscale is een vierjarig Europees project dat functioneert als een Centre of Excellence binnen de European High Performance Computing Joint Undertaking (EuroHPC JU). Het project richt zich op het ontwikkelen van software voor efficiënte multiscale simulaties op (pre-)exascale HPC-systemen. Dit stelt wetenschappers in staat om complexe fenomenen, variërend van biomedische toepassingen tot duurzame energie en civiel transport, met hoge nauwkeurigheid te modelleren.

Het consortium bestaat uit 16 partners uit zowel de academische wereld als de industrie, verspreid over Europa. Belangrijke partners zijn onder andere het Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM) en de European Environment for Scientific Software Installations (EESSI). CECAM levert de wetenschappelijke expertise voor multiscale modellering, terwijl EESSI zorgt voor een gedeelde softwarestack die geoptimaliseerd is voor diverse HPC-architecturen.

Het hoofddoel van MultiXscale is het verhogen van de prestaties, productiviteit en portabiliteit van software en workflows voor wetenschappers die werken aan multiscale simulaties. Dit wordt bereikt door het co-design van applicaties voor exascale technologieën en het aanbieden van exascale-georiënteerde bibliotheken en diensten. Daarnaast streeft het project naar het ontwikkelen van gebruiksvriendelijke, eenvoudig te installeren software met duurzame ondersteuning voor gebruikers.

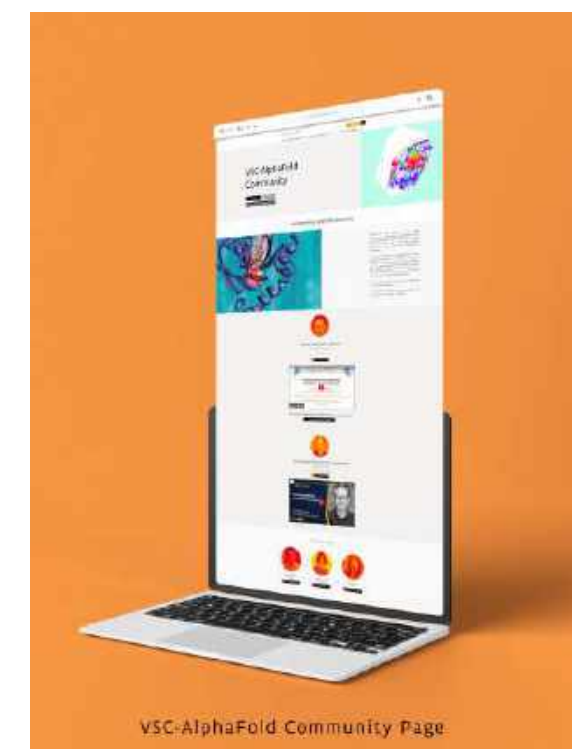
UGent is één van de partners in dit project en draagt bij aan EESSI. In het kader hiervan namen VSC-medewerkers deel aan de volgende events.

- 15 maart 2024: EESSI tutorial For EuroHPC Hosting Entities via CASTIEL2
aard: internationaal, webinar (in kader van MultiXscale)
opname beschikbaar via https://www.youtube.com/watch?v=cz_9PZV7Mjk
- 23-25 april 2024: 9th EasyBuild User Meeting (Umeå, Zweden)
<https://easybuild.io/eum24>
aard: 3-daagse user meeting

- 14 mei 2024: ISC'24 Birds-of-a-Feather sessie over EESSI (Hamburg)
aard: internationaal (ISC conferentie)
zie ook <https://www.eessi.io/docs/blog/2024/05/17/isc24/>
- 18 juni 2024: online presentatie “European Environment for Scientific Software Installations (EESSI)” op HPC-SIG meeting
aard: internationaal, online <https://hpc-sig.org.uk/index.php/event/hpc-sig-meeting-university-of-sheffield/>
- 4 oktober 2024: “Introductie to EESSI” webinar voor EuroCC Nicks
opname beschikbaar via <https://www.youtube.com/watch?v=Xf6KqSCIAqw>
aard: internationaal, webinar (in kader van MultiXscale)
- 21-23 oktober 2024: EuroHPC User Day
presentatie over EESSI (~50 aanwezigen) + actieve deelname aan walk-in netwerking sessie met MultiXscale & EESSI
zie ook https://www.eessi.io/docs/blog/2024/10/25/eurohpc_user_day_2024/
- 15 november 2024: EPICURE webinar “Streaming Optimized Scientific Software: an Introduction to EESSI”
<https://epicure-hpc.eu/2024/10/17/webinar-streaming-optimised-scientific-software-an-introduction-to-eessi/>
- 13 december 2024: EPICURE webinar “Building Software With Ease: an Introduction to Easy Build” <https://epicure-hpc.eu/2024/11/29/webinar-building-software-with-ease-an-introduction-to-easybuild/>

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 A.I. en kwantumcomputing. Zo organiseerde VSC een symposium rond de significante invloed van A.I. in structurele biologie en life sciences. Verder neemt VSC actief deel aan een aantal initiatieven rond kwantumcomputing, en organiseerde het de voorbije jaren al een aanzienlijk aantal webinars rond kwantumcomputing en de toekomstige impact ervan op verschillende vakgebieden.



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	Ivo De Decker	100%
UGent	Abdella Bouharak	10%
UGent	Johan Van Camp	30%
UGent	Frédéric De Leersnijder	20%
UGent	Wim Waeyaert	20%
UGent	Erwin Plancke	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	50%
UGent	Pavel Tomanek	100%
UGent	Petr Kral	100%
UGent	Martin Sakin	100%
UGent	Jonathan De Loght	100%
KU Leuven	Herman Moons	20%
KU Leuven	Ingrid Barcena	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	Mariana Montes	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	Joachim Bovin	100%
KU Leuven	Filip Severants	100%
KU Leuven	Jo Wijnant	100%
KU Leuven	Yorick Poels	100%
KU Leuven	Peter veraedt	100%
KU Leuven	Guy Van Den Bergh	20%
KU Leuven	Rudy Rys	30%

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	Bart Vanneste	100%
KU Leuven	Sofie Pieraerd	10%
KU Leuven	Philip Brusten	10%
UAntwerpen	Ine Arts	38%
UAntwerpen	Franky Backeljauw	100%
UAntwerpen	Stefan Becuwe	100%
UAntwerpen	Bert Jorissen	7%
UAntwerpen	Kurt Lust	33%
UAntwerpen	Carl Mensch	20%
UAntwerpen	Michele Pugno	60%
UAntwerpen	Engelbert Tijskens	96%
UAntwerpen	Robin Verschoren	100%
UAntwerpen	Wim Vanroose	5%
UAntwerpen	Koen Decauwsemaecker	5%
UAntwerpen	Herwig Kersschot	10%
UAntwerpen	Wim Holemans	10%
UAntwerpen	Bertin Peeters	5%
VUB	Alex Domingo Toro	100,00%
VUB	Cintia Willemyns	100,00%
VUB	Jan Turek	100,00%
VUB	Samuel Moors	100,00%
VUB	Stéphane Gérard	100,00%
VUB	Ward Poelmans	80,00%
VUB	Olivier Devroede	20,00%
VUB	Michael De Corte	15,00%
VUB	Bernadette Van Gansbeke	10,00%
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	Anke Versaen	5,00%
VUB	Jonathan Ntumba Kanyinda	5,00%
VUB	Karin Voets	5,00%
VUB	Jan Paredis	3,00%
UHasselt	Geert Jan Bex	100%
UHasselt	Rafal Al-Takreeti	100%

Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
CFD based optimization of post-plasma catalysis in different triply periodic minimal surface (TPMS) geometries	Rosa, Victor	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT) Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Characterizing the impact of strain on the vibrational sidebands of optical centers in diamond	Vanpoucke, Danny	Hasselt University	Institute for Materials Research (IMO-IMOMEC)
Unlocking the Secrets of Solar Energetic Particles: A Multifaceted Approach Using EUHFORIA and PARADISE	Niemela, Antonio; Prat, Roger; Wijzen, Nicolas	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
Vibrational spectroscopy of nanoporous materials with machine learning potentials	Temmerman, Wim	UGent	Center for Molecular Modeling
ProtConf2024: Exploration of protein conformational space.	Bickel, David	VUB	Bio2Byte / DBIT
Magnetohydrodynamic simulations of the dust destruction by supernova shocks in a turbulent medium	Scheffler, Tassilo	UGent	DustOrigin / Department of Physics & Astronomy
Dynamo's in accretion disks: How can a corona form in a thin disk?	lorenzo.kuchler; bartrip-perda; thomas.hertog; daniel.mayerson	KU Leuven	theoretical physics group, physics department
Defects in amorphous metal oxide semiconductors: investigation at many body perturbation theory level	van Setten, Michiel	imec	msh
Unsteady computational fluid dynamics reactor design to accelerate the electrification of steam cracking.	Bonheure, Mike	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT); Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Advanced 3D modelling of the solar corona with COCONUT and coupling with space weather forecasting simulations	Linan, Luis	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Understanding the structural properties of amorphous ZIF-4 states through strain engineering	Rogge, Sven	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
The PDMR charge cycle for group IV vacancies and NiV defects in diamond	Claes, Joshua	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT), Department of Physics
Forming merging double compact objects with stable mass transfer	Picco, Annachiara	KU Leuven	Department of Physics and Astronomy
Evaluating the role of zeolite acidity on elementary reactions for alkene cracking.	Pieter Cnudde, Veronique Van Speybroeck, Massimo Bocus, Jenna Mancuso and Wim Temmerman	UGent	Center for Molecular Modeling
Next Level Flemish Speech Recognition - Flemish Speech Recognition At Scale v2.0	Jakob Poncelet	KU Leuven	Electrical Engineering ESAT – PSI, Speech Processing group
Designing and characterization of novel electrolyte for lithium-ion and sodium-ion batteries	Mesfin Haile Mamme and Mats Meeusen	VUB	Electrochemical and Surface Engineering Research group (SURF)
Real-world object-centric representation learning	Nikola Đukić	KU Leuven	Processing Speech and Images (PSI) / Department of Electrical Engineering (ESAT)
Electron-Phonon coupling in ultrathin Silicon channels	Cristian Rebolledo Espinoza	imec / KU Leuven	TCAD/TSE/STS // // Laboratory for Semiconductor Physics/ Faculty of Sciences
Parameterizing Strain in Tight-Binding Models for Transition Metal Dichalcogenides	Bert Jorissen	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT), Department of Physics
Investigating Water Splitting Reaction through Molecular Dynamics Simulations and Machine Learning Potential	Kuber Singh Rawat and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Strain engineering the phase stability in metal-organic frameworks and metal halide perovskites.	Nils Clovin and Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
Kinetic plasma processes in accretion disks around black holes	Fabio Bacchini and Evgeny Gorbunov	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
A PiC-driven odyssey into collisionless shocks and solar energetic particles	Fabio Bacchini and Nicolas Wijzen	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Scaling Failure-Free Representation Learning	Emanuele Sansone	KU Leuven	PSI (Processing Speech and Images) / ESAT (Electrical Engineering Department)
Dust destruction in clumpy supernova remnants	Florian Kirchschrager, Nina Sartorio, Ilse De Looze, Franziska Schmidt and Mike Barlow	UGent	Physics and Astronomy

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Iterative scheme for Collective variable discovery for Cesium Lead Iodide	David Devoogdt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Ab-initio prediction of Fe-Si-X phase diagram	Nikitha Srinivasan and Stefaan Cottenier	UGent	Center for Molecular Modelling
Ab initio investigation of interface formations in all-solid state lithium-ion batteries	Nicolas Lannoy	VUB	Electrochemistry and Surface Engineering (SURF) Research Group / Materials and Chemistry (MACH) / Faculty of Engineering
In-depth characterization of the water uptake mechanism of flexible water harvesting metal-organic frameworks by means of machine learning potentials.	Ruben Goeminne, Siddharth Ravichandran and Bernd Schmidt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Machine Learning Potentials for Large-Scale, Reactive Modelling of Zeolite Nucleation from Hydrated Silica Ionic Liquids	Loic Dumortier, Jelle Vekeman and Toon Verstraeten	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Creation of a Dutch social media language model for irony detection in Dutch social media data.	Aaron Maladry, Pranaydeep Singh, Els Lefever and Véronique Hoste	UGent	Language and Translation Technology Team (LT3) / Department of Translation, Interpreting and Communication.
Characterizing the superconducting properties of transition metal dichalcogenide heterobilayers from first principles	Jonas Bekaert	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT), Department of Physics
Conditional Generation of High-Resolution Realistic Videos and	Mingxiao Li	KU Leuven	Language Intelligence & Information Retrieval Lab(LIIR) / Department of Computer Science
CO2 hydrogenation paths	Rolando Saniz and Bart Partoens	KU Leuven	Physics Department
Multimodal Large Language Models	Teodora Popordanoska and Gorjan Radevski	KU Leuven	PSI-VISICS / ESAT
Photo-thermo-structural characterisation of mono- and bimetallic Au and Ag nanoparticles	Jovana Vlahovic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory, Department of Physics
Parameter efficient adaptation of large vision models	Abhishek Jha	KU Leuven	PSI/ESAT
Theoretical characterization of black TiO2	Selma Mayda Bacaksiz	UAntwerpen	EMAT / Department of Physics
Tailoring ferroelectricity in twisted bilayer boron nitride by advanced predictive modelling	Wilson Nieto	UAntwerpen	Condensed Matter Theory / Department of Physics
How relativistic particles shine in astrophysical plasma turbulence	Daniel Groselj and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Designing LLMs for the scRNA-seq domain	Gaetan De Waele, Willem Waegeman and Gerben Menschaert	UGent	Department of mathematical modeling & Data Analysis
Computational characterization of interlayer exciton states in multilayer transition metal dichalcogenides	Cem Sevik and Milorad Milosevic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory Group / Physics
Investigating the adsorption properties of metal-organic frameworks for applications in olefin/paraffin separation and detection of volatile organic compounds in air.	Siddharth Ravichandran, Ruben Goeminne and Bernd Schmidt	UGent	Center for Molecular Modeling/ EA17
Observation to the reaction and diffusion behaviours of ketene in zeolite by ab initio molecular dynamics simulations	Wei Chen and Veronique Van Speybroeck	UGent	Center for Molecular Modeling
CFD-DEM simulations of a plasma assisted fluidized bed powder coating process.	Pedro Martin Salvador	UGent	pharmaceutical engineering research group
Hydrogen penetration through general alloyed iron surfaces as a precursor to hydrogen embrittlement in steel	Lukas Meier and Stefaan Cottenier	UGent	Center for Molecular Modeling
Investigation of re-entry vehicle with MHD heat shield with in-house CFD solver.	Vatsalya Sharma	KU Leuven	Centre for Mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Kinetic turbulence in the accretion disk of black holes	Evgeny Gorbunov and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
"Large-Eddy Simulations of thermally-induced secondary motions in the stably stratified atmospheric boundary layer with subsidence"	Thijs Bon, Johan Meyers and Steven Vandenbrande	KU Leuven	Turbulent Flow Simulation and Optimization, Department of Mechanical Engineering
The effect of electric fields on plasma instabilities in tokamaks via Particle-in-Cell (PIC) simulations	Jincai Ren, Giovanni Lapenta and Rony Kepkens	KU Leuven	Department of Mathematics, Centre for Mathematical Plasma Astrophysics

Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Can LLMs Learn by Teaching? A Preliminary Study	Zifu Wang	KU Leuven	ESAT-PSI
Passive control of crossflow by means of small, discrete roughness elements.	Emilio López Figueiras and Jure Oder	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Aeronautics and Aerospace Department
Bright flares from the supermassive black hole in the Galactic Center	Bart Ripperda, Fabio Bacchini and Daniel Mayerson	University of Toronto, KU Leuven, KU Leuven	Canadian Institute for Theoretical Astrophysics Centre for mathematical Plasma Astrophysics, Department of Mathematics theoretical physics group, physics department
Catch the Heat: design of new materials for heat batteries	Zhaochun Liu, Frederik Tielens and Ionut Tranca	VUB	Materials Modelling Group, Department of General Chemistry (ALGC)
Fully Kinetic Modeling of Novel Switchback Observations	Luca Pezzini and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Exploration of protein conformational space	David Bickel, Danh Bui and Wim Vranken	VUB	Bio2Byte / DBIT
3D particle-in-cell simulations of the stratified magnetorotational instability (MRI)	Astor Sandoval and Fabio Bacchini	KU Leuven	Department of Physics/Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Modelling kinetic instabilities at the Earth's magnetosphere	Silvia Ferro and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
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
Evaluating shock wave generated by colliding plasma beams versus moving pistons using Particle-in-Cell simulations	Nicolas Wijssen and Fabio Bacchini	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA)	Department of Mathematics
Electrothermal Fluidized Beds for Non-oxidative coupling of methane : Hydrodynamic and Heat Transfer	Hamed Hoorijani, Kevin Van Geem, Yi Ouyang and Mike Bonheure	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT), Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Conformational dynamics of membrane proteins	Alen Thykkoottathil Mathew, Ahmadreza Mehdipour and Mina Ebrahimi	UGent	Center for Molecular Modelling
Computational microscopy of Heme flipping by a bacterial ABC transport system	Mina Ebrahimi, Alen Mathew and Ahmad Reza Mehdipour	UGent	Center for Molecular Modelling
Ab Initio Molecular Dynamics study of the ionic tracer diffusivities as a function of temperature and composition in pyrometallurgical CaO-Al2O3-SiO2 and CaO-Al2O3-SiO2-Cu2O slags.	Hélène Verbeeck, Nele Moelans and Dirk Lamoen	KU Leuven	Structural Materials (SCALINT), Department of Materials Engineering
Study the Interface between Calcium Oxalate and Hydroxyapatite at molecular Level	Yuheng Zhao, Frederik Tielens and Ionut Tranca	VUB	ALGC material modelling group
Fully kinetic simulations of the interaction between turbulent solar wind and Earth's bow shock	Jia Nan	KU Leuven	Centre for Mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Analysis of wind farm wakes, gravity waves, low-level jets, and blockage effects of offshore wind farms in the North Sea	Wim Munters, Simone Gremmo and Alexandros Palatos-Plexidas	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Department of Environmental and Applied Fluid Dynamics, Research Expertise Group on Wind Energy & Environmental Flows
Design of V-doped ZSM-5 Structures for Oxidative Dehydrogenation of Propane	Dilan Tunçer	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT) under Prof. Mark Saeys research group, Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering
Fine-grained Video Understanding	Zhan Tong	KU Leuven	PSI / ESAT
Accelerating atomistic simulations of intracrystalline diffusion in methanol-to-hydrocarbon catalysts	Jenna Mancuso, Pieter Cnudde, Massimo Bocus and Wim Temmerman	UGent	Center for Molecular Modeling
Exploring the reactivity of metal single-atoms in solid micellar catalysts	Sara Santos, Konstantijn Rommens and Dilan Tunçer	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT) under Prof. Mark Saeys research group, Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Domain Wall Simulations	Aäron Rase and Alberto Mariotti	VUB	TENA / Department of Physics
Development of Cobalt Machine Learning Potentials for CO2 hydrogenation to Jet Fuel	Konstantijn Rommens, Sara Santos and Dilan Tuncer	UGent	Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering Laboratory for Chemical Technology (LCT), Mark Saeys group
Dust evolution of a Milky Way-like galaxy based on cosmological zoom-in simulation	Kosei Matsumoto	UGent	SKIRT/ Department of Physics and Astronomy
Application form: Compute component of the Flemish Tier-1 supercomputing platform (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
First-principles radiative kinetic simulations of turbulent black-hole coronae	Daniel Groselj and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Atomic-scale investigations of reactivity indices of lignin polymers	Emerick Guillaume, Pauline Castenetto and Danny E. P. Vanpoucke	Hasselt University	Material Chemistry
Magnetic exchange interaction prediction using first-principle and machine-learning methods (DFT-ML)	Cihan Bacaksiz	UAntwerpen	CMT / Department of Physics
Investigating the stability of substituted CsPbI3	Tom Braeckvelt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
DFT study of the purification of waters contaminated by drug residues based on amorphous silica hydrated (MCM41): case of aspirin, carbamazepin, diazepam, diclofenac and paracetamol.	AMANDJIGBETO Mireille	VUB	Eenheid Algemene Chemie (ALGC), Materials Modelling Group/NSE (Natural Sciences and (Bioscience) Engineering
Investigation of the interactions of simultaneous diffusion of light hydrocarbons in metal-organic frameworks for application in olefin/paraffin separation.	Bernd Schmidt and Sidharth Ravichandran	UGent	Center for Molecular Modeling/ EA17
CFD-DEM of magnetically assisted fluidized bed reactor for super dry reforming process	Balamurugan Deiven-dran	UGent	Laboratory for Chemical Technology (LCT), Department of Materials, Textiles and Chemical Engineering (EA11)
Conjugate heat transfer (CHT) simulation and bayesian optimization of spin freezing process	Isar Charmchi	UGent	Pharmaceutical Engineering Research Group (PharmaEng), Department of Pharmaceutical Analysis
Investigating magnetic reconnection around black holes	Jesse Vos and Fabio Bacchini	Vos; Radboud University (NL) & KU Leuven (starting November) Bacchini; KU Leuven	KU Leuven: Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics Radboud University: Institute for Mathematics, Astrophysics and Particle Physics; Department of Astrophysics
More realistic accretion models for the supermassive black hole in the Galactic Center	Bart Ripperda, Fabio Bacchini and Daniel Mayerson	University of Toronto, KU Leuven, KU Leuven	Canadian Institute for Theoretical Astrophysics Centre for mathematical Plasma Astrophysics, Department of Mathematics theoretical physics group, physics department
Magnons in moiré heterobilayers	Maarten Soenen	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT) / Department of Physics
Simulating the forced intrusion of water in zeolitic imidazolate frameworks by combining machine learning potentials and umbrella sampling	Jelto Neiryck and Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modeling, Department of Applied Physics (EA17)
Modelling the influence of temperature and pressure on large-scale amorphization in ZIF-4	Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
Modelling particle dynamics at the Earth's magnetosphere	Silvia Ferro and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Retrieval-based Machine Translation with Large Language Models	Thomas Moerman, Arda Tezcan and Els Lefever	UGent	Language Technology and Translation Team (LT3) / Department of Translation, Interpreting and Communication
Steady-state turbulence simulations driven by magnetorotational instability	Evgeny Gorbunov and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Computing Proposal: The Role of Magnetic Reconnection in Particle Energization	Nadja Reisinger and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics



Tier-1 Compute

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
EVERBLUE	Andrea Bresciani and Matilde Fiore	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Environmental and Applied Fluid Dynamics
Understanding guest-induced transitions from crystalline to disordered forms of MOF-5(CX)	Thomas Nicholas and Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
Application of computing project on the Flemish Tier-1 supercomputing platform: Fully kinetic simulations of the switchback boundary as a rotational discontinuity	Rong Lin and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for Mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Full Kinetic Modeling of Extreme Anisotropic Proton-Beam Instabilities Based on Parker Solar Probe Observations	Luca Pezzini and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Structure-property relations in magnetic nanoparticles for hyperthermia applications	Jonathan Leliaert, Elizabeth Martin Jefremovas and Lisa Calus	UGent	Dept. of Solid State Sciences
Exploring Large-Scale Neural Network Architectures for Multi-Spectral Remote Sensing with Flemish Biological Valuation Maps.	Mingshi Li	KU Leuven	Electrical engineering department, ESAT
Probing the dynamics of strain fields in disordered metalorganic frameworks and metal halide perovskites	Nils Clovin and Sven Rogge	UGent	Center for Molecular Modeling (EA17)
Three-Dimensional Modelling of Turbulence in Space Plasmas	Harikrishnan Aravindakshan and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Optimizing Parameter Efficiency in Multimodal Generative Models for Cross-Domain Tasks	Wei Sun and Tingyu Qu	KU Leuven	Language Intelligence and Information Retrieval Lab, Declarative Languages and Artificial Intelligence section / Department of Computer Science
Leveraging Multi-Task Learning for Next-Level Flemish Speech Recognition	Bastiaan Tamm, Jakob Poncelet and Hugo Van Hamme	KU Leuven	Electrical Engineering ESAT – PSI, Speech Processing group
Electronic Structure Calculation on Colloidal Quantum Dots	Zeger Hens and Norick De Vlaeynck	UGent	Physics and Chemistry of Nanostructures / Department of Chemistry
DFT-quality adsorption isotherms of water in Brønsted-acidic zeolites	Massimo Bocus, Pieter Cnudde, Jenna Mancuso and Wim Temmerman	UGent	Center for Molecular Modeling
Numerical modelling of a superconducting neuron	Leonardo Rodrigues Cadotrim	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT) / Department of Physics
Using advanced molecular dynamics to study drug binding into membrane proteins	Warre Dhondt and Ahmad Reza Mehdipour	UGent	Center for Molecular Modeling
ReinWeb: A large, highly filtered dataset for training Dutch Language Models	Bram Vanroy	KU Leuven	Computational and Formal Linguistics (ComForT)
Control of magnetic states in a Ni-halide monolayer with in-plane strains	Ali Ghosavand and Milorad Milosevic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory (CMT)/ Department of Physics
Machine learning fluid closures for kinetic processes in plasmas	George Miloshevich	KU Leuven	Centre for Mathematical Plasma-Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Conformational dynamics of Covid Spike protein: Effects of glycosylation and nanobody interactions	Alen Thykkoottathil Mathew and Ahmadreza Mehdipour	UGent	Center for Molecular Modelling / Department of Applied Physics
Tackling Multimodal Competition in Multimodal Supervised Deep Learning	Konstantinos Kontras, Maarten De Vos and Christos Chatzichristos	KU Leuven	STADIUS - ESAT
Application to the Compute component of the Tier-1 supercomputing platform for Combining Regional Downscaling Expertise in Belgium II	Inne Vanderkelen, Fien Serras, Wouter Lampaert and Nicole P. M. Van Lipzig	KU Leuven	Regional Climate Studies / Department of Earth and Environmental Sciences
Ferroelectricity in covalently functionalized Ferromagnetic Fe3GeTe2 monolayer	Xiaoyan Miao	UAntwerpen	Condensed Matter Theory group (CMT) / Department of Physics
Computational microscopy of Heme flipping by a bacterial ABC transporter	Mina Ebrahimi, Ahmad Reza Mehdipour and Alen T. Mathew	UGent	Center for Molecular Modelling

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Application Tier-1 Hortense, Ocotober 2024, López Figueiras, Emilio vsc46149	Emilio López Figueiras and Jure Oder	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Aeronautics and Aerospace Department
High-Performance Simulations of Energetic Particle Dynamics in Flux-Rope Coronal Mass Ejections	Nicolas Wijzen, Edin Husidic and Myrthe Flossie	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
Iterative scheme for Collective variable discovery for Cesium Lead Iodide	David Devoogdt and Tom Braeckvelt	UGent	Center for Molecular Modeling / EA17
Air-quality foundation Large Spatiotemporal Models (LSM) for Belgium and Europe	Konstantinos Theodorakos	KU Leuven	ESAT-STADIUS / Electrical engineering
Photo-thermo-structural characterisation of mono- and bimetallic Au and Ag nanoparticles	Jovana Vlahovic	UAntwerpen	Condensed Matter Theory, Department of Physics
Domain-adaptation of Dutch language models for non-normative Dutch	Aaron Maladry, Florian Debaene, Pranaydeep Singh, Els Lefever and Veronique Hoste	UGent	Language and Translation Technology Team (LT3) / Department of Translation, Interpreting and Communication
Catch the Heat: design of new materials for heat batteries	Zhaochun Liu, Ionut Tranca and Frederik Tielens	VUB	Materials Modelling Group, Department of General Chemistry (ALGC)
Benchmarking of pool-type fast reactor thermal-hydraulics through a simplified core modelling	Silvania Lopes, Lilla Koloszar and Matilde Fiore	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Environmental and Applied Fluid Dynamics Department
VASCCO - Validation of Solar wind, Coronal mass ejections and COronal models	Antonio Niemela, Brenda Dorsch, Angelos Valentino, Francesco Carella and Ketaki Deshpande	KU Leuven, Royal Observatory of Belgium	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Dept. of Mathematics
Combined spectroscopic study of cholesterol crystals	Fileto Rodríguez, Frederik Tielens and Ionut Tranca	VUB	ALGC/Department of Chemistry
Natural convection of liquid metal in a differentially heated cavity with solid copper and steel walls	Jure Oder, Lilla Koloszar and Szilveszter Feher	von Karman Institute for Fluid Dynamics	Environmental and Applied Fluid Dynamics Department
Exploring the multi-messenger connection in turbulent coronae of supermassive black holes using kinetic plasma simulations	Daniel Groselj and Fabio Bacchini	KU Leuven	Centre for mathematical Plasma Astrophysics (CmPA), Department of Mathematics
Development and application of an advanced Replica Exchange-based Molecular Dynamics methodology for quantifying adsorption equilibria	Kenno Vanommeslaeghe	VUB	Analytical Chemistry, Applied Chemometrics and Molecular Modelling (FABI)



Tier-1 Data

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
Linking genotype and phenotype through long-read multiomics reveals somatic tissue heterogeneity and evolution	Demeulemeester, Jonas	VIB KU Leuven	Laboratory of Integrative Cancer Genomics, VIB-KU Leuven Center for Cancer Biology (CCB) and Department of Oncology, KU Leuven
The evolutionary genomics of Lassa Virus virulence and persistence	Joon Klaps	KU Leuven, Rega Institute.	Evolutionary and Computational Virology/ Department of Microbiology, Immunology and Transplantation
Understanding inherited and acquired genetic variation in Parkinson's disease	Voet Thierry	KU Leuven	Laboratory of Reproductive Genomics, Department of Human Genetics, KU Leuven
Enhancing data management with useGalaxy.be	De Geest, Paul	VIB	VIB Data Core / ELIXIR Belgium
Long Read Sequencing for the detection of methylation changes in patients with developmental disorders.	Vermeesch Joris	KU Leuven	Laboratory of Cytogenetics and Genome Research, Center for Human Genetics
M3-BIORES Video data for animal behaviour analysis	Slootmans, Jens	KU Leuven	Department of Biosystems, A2H, M3-BIORES
Multi-omic analyses of cell-free nucleic acids	CHE, Huiwen	KU Leuven	Laboratory for Functional Epigenetics / Centre for Human Genetics

Tier-1 Cloud

Titel	Aanvrager	Instelling	Afdeling
PLAZA Cloud	Van Bel, Michiel	VIB / UGent	Department of Plant Biotechnology and Bioinformatics, VIB center for Plant Systems Biology"
Research groups Mycology SEB lab server	Asselman Pieter	UGent	Research groups Mycology, SEB in Dpt. Biology (WE11)
Tier 1 Cloud Project Application	Lu, Tan	VUB	DIMA
UseGalaxy.be: The Belgian Galaxy instance	De Geest, Paul	VIB	VIB DataCore / ELIXIR
Pulsar: The Belgian Pulsar Instance	De Geest, Paul	VIB	VIB Data Core / ELIXIR Belgium
Lifewatch Data Cloud	Hernandez Francisco	VLIZ	/
Renewal VSC Tier1 Cloud component application project gpr_cloud_00013	De Pelseneer, Kevin	VIB	Elixir BE
Bio2Byte online services on VSC Cloud platform	Díaz Adrián, Vranken Wim	VUB	Bio2Byte (https://bio2byte.be)
LM-UGent bioinformatics lab server (renewal VSC_Starting_2022_004)	Depoorter, Eliza	UGent	Laboratory of Microbiology (LM-UGent), department of Biochemistry and Microbiology (WE10)





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
Wim Vanroose, Stefan Becuwe
Johan Van Camp, Ewald Pauwels
Geert Jan Bex
Stefan Weckx, Ward Poelmans
Caroline Volckaert

Creatie en vormgeving

Rafal Al-Tekreeti

Uitgegeven in juni 2025

DISCOVER VSC



vscentrum.be

