

**REGLEMENT BETREFFENDE
AANVRAGEN
VOOR HET GEBRUIK VAN HET
VLAAMSE TIER-1 SUPERCOMPUTING
PLATFORM**

Van toepassing vanaf 1 januari 2019

DEEL I. INLEIDENDE BEPALINGEN

§ 1 – Definities

Voor de toepassing van dit reglement wordt verstaan onder:

1. **Aanvraag:** een aanvraag van rekentijd en schijfopslagcapaciteit voor het uitvoeren van rekenopdrachten op de Tier-1 compute, buiten het geval van een Starting Grant aanvraag;
2. **Aanvrager:** een Onderzoeker die een Aanvraag indient;
3. **Nodedag:**
 - a. eenheid van rekentijd, overeenkomend met één volledige node (28 cores) op de tweede Vlaamse supercomputer, geïnstalleerd aan de KU Leuven in 2016, gedurende 24 uur,
 - b. een Tier-1 compute node wordt altijd volledig aangerekend, onafhankelijk van de mate waarin de resources (cores/geheugen/...) gebruikt worden.
4. **Onderzoeker:** een natuurlijke persoon die in het kader van een statutaire aanstelling of benoeming, een arbeidsovereenkomst, een aannemingsovereenkomst, een onderzoeksbeurs, een vrijwillige medewerking of een medewerking als student, onderzoek verricht aan een Publieke Onderzoeksinstituting;
5. **Publieke Onderzoeksinstituting:**
 - a. een universiteit in de Vlaamse Gemeenschap,
 - b. een hogeschool in de Vlaamse Gemeenschap,
 - c. een onderzoeksinstituut onder het gezag of het toezicht van een universiteit of een hogeschool, zoals een bijzonder universitair instituut, vermeld in artikel 169quater van het decreet van 12 juni 1991 betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap,
 - d. een universitair ziekenhuis, vermeld in artikel 4 van de wet op de ziekenhuizen en andere verzorgingsinrichtingen, gecoördineerd op 10 juli 2008,
 - e. de Vlaamse strategische onderzoeksinstitutingen
 1. Vlaams Instituut voor Biotechnologie (VIB);
 2. imec;
 3. Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek (VITO);
 4. Flanders Make;
 - f. een instelling voor postinitieel onderwijs;
 - g. een steunpunt voor beleidsrelevant onderzoek als vermeld in artikel 169bis van het decreet van 12 juni 1991 betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap;
 - h. het Expertisecentrum Onderzoek en Ontwikkelingsmonitoring, vermeld in artikel VI.9.19 van het decreet van 19 maart 2004 betreffende de rechtspositieregeling van de student, de medezeggenschap in het hoger onderwijs, de integratie van bepaalde afdelingen van het hoger onderwijs voor sociale promotie in de hogescholen en de begeleiding van de herstructurering van het hoger onderwijs in Vlaanderen;
 - i. onderzoeksinstitutingen waarvan de werking geheel of gedeeltelijk gefinancierd of gesubsidieerd wordt door de Vlaamse Gemeenschap of het Vlaamse Gewest;

- j. een onderzoeksinstituut onder het gezag of het toezicht van de Vlaamse overheid, vermeld in artikel 169quater van het decreet van 12 juni 1991 betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap,
 - k. onderzoeksinstellingen waarvan de werking geheel of gedeeltelijk gefinancierd of gesubsidieerd wordt door het Federaal Wetenschapsbeleid
 - l. een onderzoeksinstituut of een instelling onder het gezag of het toezicht van de Federale overheid
6. **Starting Grant:** de mogelijkheid om Tier-1 compute uit te proberen voor het uitvoeren van een benchmark of software tests, om een toekomstige Aanvraag te kunnen voorbereiden;
 7. **Tier-1 compute:** de tweede Vlaamse supercomputerinfrastructuur, geïnstalleerd aan de KU Leuven; tevens de compute component van het Vlaamse Tier-1 supercomputing platform
 8. **Tier-1 data:** de data component van het Vlaamse Tier-1 supercomputing platform
 9. **Tier-1 cloud:** de cloud component van het Vlaamse Tier-1 supercomputing platform
 10. **Wachtrij:** de lijst van opdrachten die wachten om te worden uitgevoerd;
 11. **Wall clock tijd:** de tijd die verstrijkt volgens de gewone klok tussen het begin en het einde van een (deel)opdracht.
 12. **SCRATCH:** tijdelijke snelle opslag die gebruikt wordt voor opslag van input data nodig voor berekeningen of output data als resultaat van berekeningen. Deze opslag heeft geen back-up regime. Data die verwijderd werd, kan niet worden hersteld.
 13. **Standaardquota:** de maximale hoeveelheid "SCRATCH" schijfopslag die voor één aanvraag beschikbaar is op Tier-1 compute, alsook een bovengrens voor het totaal aantal bestanden dat één aanvraag kan aanmaken;

DEEL II. REGULIERE AANVRAGEN

Hoofdstuk 1. Toepassingsgebied en institutionele bepaling

§ 2 – Toepassingsgebied

(1) Dit deel regelt met ingang van 1 januari 2019 de indiening en de behandeling van Aanvragen voor rekentijd en schijfopslag op Tier-1 compute, evenals de uitvoering van ingewilligde Aanvragen.

(2) Aanvragen die zijn ingediend voor 1 januari 2019 worden behandeld en uitgevoerd overeenkomstig de reglementering die gold op het ogenblik van de indiening van de Aanvraag.

§ 3 – Evaluatiecommissie

(1) De raad van bestuur van het FWO delegeert de beslissingsbevoegdheid omtrent Aanvragen aan een Evaluatiecommissie, die werkzaam is onder het gezag van de raad van bestuur.

(2) De Evaluatiecommissie toetst Aanvragen aan de ontvankelijkheidscriteria, vermeld in § 4, en, voor zover zij ontvankelijk zijn, aan de beoordelingscriteria, vermeld in § 5.

(3) De Evaluatiecommissie is samengesteld uit:

1. ten minste drie door de raad van bestuur aangewezen deskundigen die niet in de Vlaamse Gemeenschap werkzaam zijn en beschikken over een ruime ervaring op het vlak van het gebruik van grote reken capaciteit;
2. een vertegenwoordiger van het FWO.

(4) De leidend ambtenaar van het FWO en de HPC-coördinatoren van de Vlaamse universiteiten kunnen als waarnemers worden uitgenodigd om aan de vergaderingen van de Evaluatiecommissie deel te nemen.

(5) Het secretariaat van de Evaluatiecommissie wordt waargenomen door het FWO, vermeld in (3), 2.

Hoofdstuk 2. Toetsingsgronden

§ 4 – Ontvankelijkheidscriteria

(1) Een Aanvraag wordt door een Aanvrager elektronisch ingediend bij het FWO aan de hand van een standaardaanvraagformulier, toegevoegd in bijlage 1 en ook beschikbaar op <https://www.vscentrum.be/en/access-and-infrastructure/project-access-tier1>. Het

standaardaanvraagformulier wordt ingevuld en ingediend via het online EasyChair platform <https://www.easychair.org/conferences/?conf=tier1>, overeenkomstig de instructies, terug te vinden onder <https://www.vscentrum.be/en/access-and-infrastructure/project-access-tier1#easychair>.

(2) Een Aanvraag betreft tenminste het equivalent van 500 Nodedagen en ten hoogste het equivalent van 5.000 Nodedagen. Mits motivering kan de bovengrens van 5.000 Nodedagen overschreden worden.

(3) De wetenschappelijke kwaliteit van het betrokken onderzoeksproject, die getoetst wordt:

- a. in het kader van een lopend onderzoeksproject door de beoordelingscommissie, ingesteld door de universiteit, het onderzoeksinstituut of het strategisch onderzoekscentrum, of door een extern financieringsagentschap;
- b. indien niet in het kader van een lopend onderzoeksproject, door een verklaring van de betrokken instelling waarin het voorgesteld onderzoek goedgekeurd wordt.

(4) De Wall clock tijd van de verschillende deelopdrachten die in een Aanvraag worden beschreven, bedraagt ten hoogste 72 uur; de Aanvrager geeft desgevallend aan welke herstartmogelijkheden voorhanden zijn voor deeltaken die meer dan 72 uur Wall clock tijd innemen.

(5) De Standaardquota voor een aanvraag bedraagt voor "SCRATCH" schijfopslag 2 TiB en voor het totaal aantal bestanden 200.000, behoudens indien een bijzondere motivering voor het overschrijden van deze grenzen aan de Aanvraag wordt toegevoegd. "SCRATCH" schijfopslag wordt steeds aangevraagd:

1. in een veelvoud van een TiB voor de opslag,
2. in een veelvoud van 100.000 voor het aantal bestanden, en
3. voor de totale looptijd van de Aanvraag.

(6) Een standaard Linux HPC-softwarestack is beschikbaar op Tier-1 compute. Indien nodig kan bijkomende (Linux) software worden geïnstalleerd, overeenkomstig de bepalingen in § 16.

(7) De Aanvraag maakt inzichtelijk:

1. welke software gebruikt zal worden;
2. dat de benodigde software, die door de Aanvrager zelf moet worden bekostigd:
 - a. rechtsgeldig geïnstalleerd mag worden op Tier-1 compute, en
 - b. rechtsgeldig gebruikt mag worden door de Aanvrager en de door de Aanvrager gemandateerde personen;
3. dat de eventueel benodigde licenties geldig zijn voor gebruik op Tier-1 compute en volstaan om de aangevraagde reken capaciteit te dekken.

(8) Aanvragen worden in het Engels opgesteld.

(9) De vormen en vereisten, bepaald in (1) tot en met (8), zijn voorgeschreven op straffe van onontvankelijkheid.

§ 5 – Beoordelingscriteria

Ontvankelijke Aanvragen worden beoordeeld aan de hand van de aspecten vermeld in het aanvraagformulier, zoals:

1. de gestaafde ervaring van de Aanvrager op het vlak van het gebruik van Tier-0-, Tier-1- en/of Tier-2-rekeninfrastructuur;
2. de technische uitvoerbaarheid van de rekenopdracht, die getoetst wordt aan de hand van:
 - a. de motivering van de redenen waarom Tier-1 compute de aangewezen computer is om de voorgestelde rekenopdracht uit te voeren;
 - b. het aantal gevraagde nodes/cores per rekentaak, met een opdeling van de rekestijd in deeltaken met aanduiding van de sequentie van de deeltaken en de geraamde Wall clock tijd;
 - c. het eventuele gebruik van parallellisatie (Open MP, MPI, OpenMP + MPI (hybride), worker framework, atools, ...) en de parallele efficiëntie van de uitgevoerde taken;
 - d. het geschatte geheugengebruik van een rekentaak;
 - e. de vereisten voor schijfopslag op de Tier-2 "HOME" en "DATA" volumes en het Tier-1 compute "SCRATCH" volume (geschatte volume in GiB en het totaal aantal bestanden) tijdens de uitvoering van de rekestaken.

Hoofdstuk 3. Toetsingsprocedure

§ 6 – Remediëringmogelijkheid

De Evaluatiecommissie kan een Aanvrager verzoeken om de Aanvraag te verduidelijken of aan te passen. Die remediëringmogelijkheid kan niet dienen om de leemten van een onvolledige of vage aanvraag op te vangen.

§ 7 – Cut-off data

(1) Voor de aanvang van elk kalenderjaar stelt de Evaluatiecommissie een beoordelingskalender op met een aantal cut-off data. Voor 2019 zijn de cut-off data: 4 februari, 3 juni en 7 oktober.

(2) In uitzonderlijke gevallen kan de Aanvrager in een Aanvraag een gemotiveerd verzoek opnemen, waarin inzichtelijk wordt gemaakt waarom niet gewacht kan worden tot een volgende cut-off datum. De voorzitter van de Evaluatiecommissie of diens plaatsvervanger beoordeelt binnen de vijf werkdagen het hoogdringend karakter van de Aanvraag en stelt de Aanvrager via het meest gereede communicatiemiddel in kennis van zijn beslissing. Indien het hoogdringend karakter van de Aanvraag erkend wordt, wordt de Aanvraag verder beoordeeld overeenkomstig dit hoofdstuk, met dien verstande dat voor de toepassing van § 8 de beslistermijnen een aanvang nemen vanaf de datum van de erkenning van de hoogdringendheid.

§ 8 – Beslistermijnen

De Evaluatiecommissie neemt haar beslissing over Aanvragen binnen een ordetermin van 30 dagen na de cut-off datum die volgt op de datum van indiening van de Aanvraag.

§ 9 – Modaliteiten van de beslissing

(1) In het kader van het globale beheer van de Tier-1 compute kan de Evaluatiecommissie gemotiveerd beslissen slechts een gedeelte van de aangevraagde rekentijd en schijfopslagcapaciteit toe te kennen of per cut-off datum het aantal goedgekeurde Aanvragen ingediend door Aanvragers die werkzaam zijn in dezelfde wetenschappelijke subdisciplines te beperken.

(2) De Evaluatiecommissie bepaalt voor elke ingewilligde Aanvraag de periode waarbinnen de toegekende Nodedagen dienen te worden gebruikt.

(3) De Evaluatiecommissie wijst aan elke Aanvrager opslagcapaciteit toe volgens de Standaardquota. De Standaardquota kunnen enkel op grond van een bijzondere motivering overschreden worden, overeenkomstig §4, (5).

(4) Eenmaal drie maanden van de toegekende periode (overeenkomstig §9 (2)) is verstreken, verliest de Aanvrager 20% van het initieel toegekende aantal Nodedagen voor zover deze nog niet waren verbruikt.

(5) De gecombineerde aanvragen van instellingen behorende tot categorieën k en l (overeenkomstig §1 (5)), kunnen maximaal 10% van de totaal beschikbare rekentijd per aanvraagronde toegekend krijgen.

§ 10 – Kennisgeving van de beslissing

- (1) De beslissing van de Evaluatiecommissie over de Aanvraag wordt door het FWO per e-mailbericht binnen een ordetermin van 10 dagen na de beslissing van de Evaluatiecommissie bezorgd.
- (2) De toekenning van een Aanvraag wordt in het jaarverslag van het Vlaams Supercomputercentrum (VSC) bekendgemaakt.

Hoofdstuk 4. Beroepsprocedure

§ 11 – Beroepsmodaliteiten

(1) De Aanvrager die oordeelt dat de beslissing van de Evaluatiecommissie aangetast is door een schending van een geschreven of ongeschreven rechtsregel of algemeen rechtsbeginsel, kan tegen de beslissing een administratief beroep instellen bij de raad van bestuur van het FWO.

(2) Het beroep wordt ingesteld binnen een vervaltermijn van vijf dagen die ingaat de dag na deze van de verzending, vermeld in § 10 (1).

(3) Het beroep wordt ingesteld door middel van een ondertekend en gedagtekend beroepschrift dat op straffe van onontvankelijkheid per aangetekend schrijven wordt ingediend bij de raad van bestuur. Het bevat minstens de identiteit van de betrokken Aanvrager, de bestreden beslissing(en) en een feitelijke omschrijving van de ingeroepen bezwaren. De Aanvrager verstuurt tezelfdertijd een elektronische versie van het beroepschrift ten titel van inlichting via e-mail aan het FWO (fwo@fwo.be). Als datum van het beroep geldt de datum van postmerk van de aangetekende zending.

§ 12 – Behandeling van het beroep

(1) De raad van bestuur behandelt het beroep op stukken. Hij kan evenwel elkeen van wie hij de aanwezigheid nuttig acht voor de behandeling van het dossier, uitnodigen om te worden gehoord.

(2) De raad van bestuur is ertoe gerechtigd alle stukken en inlichtingen op te vragen of in te winnen die hij nuttig acht voor de behandeling van het beroep.

(3) De raad van bestuur kan de adviezen inwinnen die hij nuttig acht voor de behandeling van het beroep.

§ 13 – Relativiteitsregel

Een besluit waartegen beroep is ingesteld, kan, ondanks schending van een geschreven of ongeschreven rechtsregel of algemeen rechtsbeginsel, door de raad van bestuur in stand worden gelaten indien aannemelijk is dat de belanghebbenden daardoor niet zijn benadeeld.

§ 14 – Beslissing

Indien het beroep ontvankelijk is, vindt op grondslag daarvan een heroverweging van het bestreden besluit plaats. Voor zover de heroverweging daartoe aanleiding geeft, herroept de raad van bestuur het bestreden besluit en neemt het voor zover nodig in de plaats daarvan een nieuw besluit. De beslissing wordt bekendgemaakt door toezending of uitreiking aan degenen tot wie zij is gericht.

Hoofdstuk 5. Bepalingen aangaande de uitvoering van ingewilligde aanvragen

§ 15 – Technische problemen

Te allen tijde kunnen de personeelsleden van de KU Leuven die belast zijn met de Technische Exploitatie van de Tier-1 compute, de uitvoering van een ingewilligde Aanvraag afbreken indien deze aanleiding geeft tot technische problemen. De Aanvrager wordt van deze beslissing en van een korte bijhorende toelichting in kennis gesteld per e-mailbericht.

§ 16 – Ondersteuning

Indien een ingewilligde Aanvraag noopt tot het gebruik van software die nog niet beschikbaar is op de Tier-1 compute, dan kan de Aanvrager voor de installatie een beroep doen op de ondersteuning van de personeelsleden van de KU Leuven die belast is met de technische exploitatie van de Tier-1 compute, met behoud van de toepassing van § 4, (5 en 6). De KU Leuven zal redelijke inspanningen leveren om in te gaan op de vraag tot ondersteuning, zonder dat sprake kan zijn van enige resultaatsverbintenis. De personeelsleden van de KU Leuven die belast zijn met de technische exploitatie van de Tier-1 compute grijpen nimmer in op de code van de software zelf.

DEEL III. STARTING GRANT AANVRAGEN

§ 17 – Toepassingsgebied

(1) Dit deel regelt met ingang van 1 januari 2019 de indiening, de behandeling en de opvolging van Starting Grant aanvragen.

(2) Starting Grant aanvragen die zijn ingediend voor 1 januari 2019 worden behandeld en uitgevoerd overeenkomstig de werkwijze die gold op het ogenblik van de indiening van de Aanvraag.

§ 18 – Algemene principes

(1) Een Starting Grant wordt toegekend voor een maximale omvang van 500 Nodedagen. De maximale periode om de toegekende rekentijd te gebruiken is vier maanden.

(2) Een Starting Grant is persoonlijk en kan niet gedeeld worden met andere onderzoekers dan diegene waaraan de Starting Grant verstrekt wordt.

(3) Starting Grant aanvragen kunnen doorlopend worden ingediend.

§ 19 – Procedure en opvolging

(1) Een Starting Grant aanvraag wordt door een Aanvrager elektronisch ingediend bij de Tier-1 compute site, met een kopie aan de HPC-coördinator van de eigen instelling, aan de hand van een standaardaanvraagformulier, toegevoegd in bijlage 2, en ook beschikbaar op <https://www.vscentrum.be/en/access-and-infrastructure/tier1-starting-grant>.

(2) De aanvraag wordt op validiteit beoordeeld door de HPC-coördinator op de Tier-1 compute site.

(3) Na goedkeuring geeft de HPC-coördinator op de Tier-1 compute site toegang en rekentijd aan de Onderzoeker. Indien de aanvraag niet wordt goedgekeurd, wordt een antwoord gestuurd naar de aanvrager met een verantwoording voor de beslissing.

(4) De toekenning van een Starting Grant wordt in het jaarverslag van het Vlaams Supercomputercentrum (VSC) bekendgemaakt.

Deel IV. GEMEENSCHAPPELIJKE BEPALINGEN

§ 20 – Procedure en opvolging

Dit deel omvat bepalingen die gemeenschappelijk zijn aan de behandeling en opvolging van (reguliere) Aanvragen en aan Starting Grant aanvragen.

§ 21 – Exoneratieclausules

(1) Het FWO en de KU Leuven kunnen in geen geval aansprakelijk gesteld worden voor de schade aan personen of goederen die rechtstreeks of onrechtstreeks het gevolg is van de uitvoering van een ingewilligde Aanvraag of een Starting Grant aanvraag. De betrokken Onderzoeker vrijwaart het FWO en de KU Leuven tegen elke vordering tot schadevergoeding door schadelijders in dit verband.

(2) Het FWO en de KU Leuven kunnen op geen enkele manier aansprakelijk worden gesteld indien het gebruik van **Tier-1 compute** schade van wat voor type dan ook zou veroorzaken aan een Onderzoeker.

(3) Het FWO en de KU Leuven kunnen in geen geval aansprakelijk gesteld worden voor de niet-uitvoering of de gedeeltelijke niet-uitvoering van een ingewilligde Aanvraag of Starting Grant aanvraag om enige technische reden of enig technisch falen, eigen aan **Tier-1 compute**. De betrokken Onderzoeker vrijwaart het FWO en de KU Leuven tegen elke vordering tot schadevergoeding door schadelijders in dit verband.

(4) Indien de KU Leuven ingaat op een vraag tot ondersteuning in de zin van § 16, dan kan de Aanvrager het FWO en de KU Leuven of het FWO nimmer aansprakelijk stellen in het geval de software niet geïnstalleerd kan worden, of indien de uitvoering van de Aanvraag hierdoor vertraging heeft opgelopen. Evenmin zal enige vorm van compensatie (geldigheidstermijn, hoeveelheid toegekende rekentijd, ...) mogelijk zijn.

(5) Een Onderzoeker is als enige verantwoordelijk voor de tijdige planning en verzending van rekentaken naar de Wachtrij. Wachttijden als gevolg van de rekentaken van andere gebruikers kunnen nimmer worden ingeroepen als justificatie voor niet- of gedeeltelijke uitvoering van een ingewilligde Aanvraag of Starting Grant aanvraag. Evenmin zal enige vorm van compensatie (geldigheidstermijn, hoeveelheid toegekende rekentijd, ...) mogelijk zijn.

§ 22 – Confidentialiteit

(1) Behoudens met betrekking tot de abstract die bij de Aanvraag wordt gevoegd (tenzij de Aanvrager aangeeft dat ook deze onderhevig is aan een confidentialiteitsclausule), verbindt het FWO zich ertoe de Aanvragen strikt vertrouwelijk te behandelen en deze noch geheel noch gedeeltelijk, in welke vorm ook, rechtstreeks of onrechtstreeks aan derden mee te delen, over te maken of te openbaren behalve in het

kader van de beoordeling van de Aanvragen. In dat geval zal het FWO zich ertoe verbinden die derde dezelfde confidentialiteitsverplichting als deze vervat in dit artikel te onderschrijven.

(2) Het FWO en de KU Leuven verbinden zich ertoe de data die gedeponneerd of gegenereerd wordt op de "SCRATCH" partitie van Tier-1 compute in het kader van de Aanvraag strikt vertrouwelijk te behandelen en deze noch geheel noch gedeeltelijk, in welke vorm ook, rechtstreeks of onrechtstreeks aan derden mee te delen, over te maken of te openbaren.

(3) Eenzelfde confidentialiteit wordt in acht genomen nopens Starting Grant aanvragen.

§ 23 – Dataretentie

Het FWO en de KU Leuven behouden zich het recht om het volume op de "SCRATCH" partitie van de Onderzoeker te wissen zonder back-up, eens de periode is verlopen waarbinnen de toegekende Nodedagen dienen te worden gebruikt.

Het FWO en de KU Leuven kunnen op geen enkele manier aansprakelijk worden gesteld voor dataverlies op de "SCRATCH" partitie om enige technische reden of enig technisch falen, eigen aan de Tier-1 compute.

§ 24 – Vermelding

Bij de publicatie van resultaten van onderzoek waarbij gebruik gemaakt wordt van het Tier-1 supercomputing platform worden het Vlaams Supercomputercentrum (VSC) en het FWO vermeld:

De infrastructuur en dienstverlening gebruikt in dit werk werd voorzien door het VSC (Vlaams Supercomputer Centrum), gefinancierd door het FWO en de Vlaamse overheid.

The resources and services used in this work were provided by the VSC (Flemish Supercomputer Center), funded by the Research Foundation - Flanders (FWO) and the Flemish Government.

DEEL V. BEKENDMAKING, EVALUATIE EN AANPASSING

§ 25 – Bekendmaking

Dit reglement wordt gelijktijdig bekendgemaakt op de websites van het Vlaams Supercomputercentrum en van het FWO.

§ 26 – Evaluatie

Jaarlijks, uiterlijk na de beslissing over de aanvragen in het kader van de derde cut-off datum, beoordeelt de Evaluatiecommissie de toepassing van het reglement en rapporteert zij hierover aan de raad van bestuur van het FWO, waarbij een aantal voorstellen tot bijstelling kunnen worden geformuleerd.

§ 27 – Aanpassing

De raad van bestuur van het FWO kan het reglement bijstellen waarbij het aangepast reglement in werking treedt minstens 4 weken voor de volgende cut-off datum.

Bijlagen:

- Bijlage 1 – Standaardaanvraagformulier
- Bijlage 2 – Aanvraagformulier Starting Grant

Application form: Compute component of the Flemish Tier-1 supercomputing platform

Title of the application (mention EasyChair code, e.g. 2018-XX, if this is a resubmission/continuation from an earlier Tier-1 proposal):

Applicant name, first name:

Institution:

Research group / department:

E-mail address:

VSC id of all mandated persons, separated by commas:

Total computing time that is applied for, in node days:

Total scratch disk storage that is applied for (in GiB) and number of files:

List of simulation codes and their version numbers:

This application should not exceed 18 pages, excluding possible appendices (confirmation letter of financing institution, software license, etc.) which may be considered by the Tier-1 Allocation Board.

1. Research project within the framework of which computing time is applied for.
 - Title
 - Promotor(s) and their e-mail address
 - If available, IWETO or FRIS link
 - Financing institution or channel (FWO, BOF, VLAIO, EU, etc.).
 - Attach the confirmation letter as enclosure.
 - Attach a letter of approval of your own institution in case the project has not gone through a scientific approval process.

2. Describe your research project in short (try to use layman's terms as much as possible). Explicitly mention the scientific questions that you are planning to address and the overall scientific goals of the project. (max. 1 A4 in Arial 12)

3. Persons mandated by the Applicant to compute on the Tier-1 within the framework of the present project. Please provide for every person:
 - Name, first name
 - VSC id
 - Institution
 - Research group / department
 - Experience with using particular HPC resources (i.e. Tier-0/Tier-1/Tier-2 infrastructure) in Belgium and abroad. Specify both the name of infrastructure and number of years it was used.

4. Why does this project need to run on a Tier-1 system? Select appropriate checkbox:
 - It requires resources (#nodes, #cores, memory, interconnect, storage) that are not available on Tier-2 systems.
 - The total runtime for the project (e.g. due to number of jobs, job turnaround time) would be prohibitively large on Tier-2 systems.
 - Other reason, please specify.

5. Provide information for each software package that will be used.
 - If centrally installed on Tier-1, state the module name.
 - If not open source software, state that the associated license can be validly used by all mandated users on Tier-1. Add a copy of the signed license to this application.

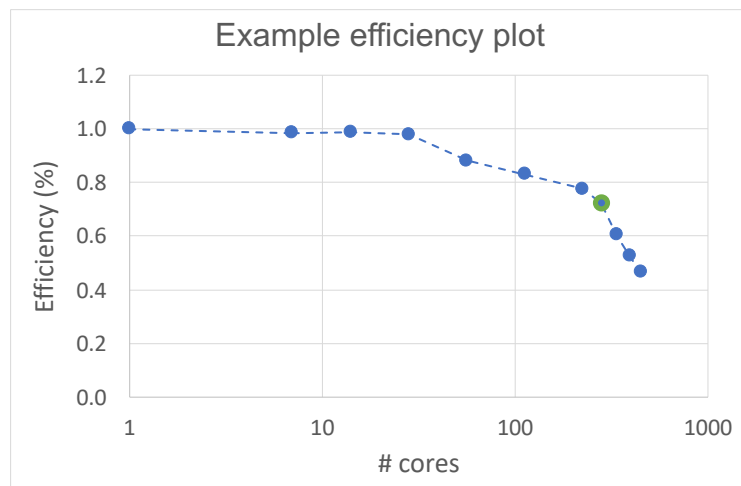
6. Provide the results of parallel efficiency tests for each software package that will be used.
- Perform these tests on Tier-1 BrENIAC (using, e.g., a Starting Grant).
 - Use system/problem sizes that closely reflect those of the intended computational tasks (e.g., same mesh size, actual molecular system, similar I/O pattern, same communications patterns, etc.). If a different system/problem size is used in the tests, describe how it relates to the problem size in the application. State if I/O has been included in the tests. For example, simply run your application tasks for a limited number of iterations.
 - Lists the results in a table and plot efficiency versus number of cores using a log scale x-axis (see example Table 1 and Plot 1).
 - Start the scaling tests of your code using the smallest number of cores possible. If possible, the baseline is using 1 core on a dedicated node. If not possible, explicitly state why.
 - Wall clock times are preferably obtained by averaging the timing results of several similar simulations for each node/core configuration. This is required when task farming single-node/core jobs that vary significantly in run time. In that case, give an indication of variation (e.g. standard deviation). Otherwise, report the minimum time of at least three separate runs.
 - Explain anomalies in plot and table.
 - Clarify, on the basis of the parallel efficiency plot and table, which number of nodes and cores you plan to use for your computational tasks (cf. Section 7) and explain why.

Example Table 1

Number of nodes	Total number of cores	Wall clock time (s)	Speedup (w.r.t. baseline)	Efficiency
$A_{baseline}$	$B_{baseline}$	$C_{baseline}$	1.00	1.00
A1	B1	C1	$C_{baseline}/C1$	$(B_{baseline} * C_{baseline}) / (B1 * C1)$
A2	B2	C2	$C_{baseline}/C2$	$(B_{baseline} * C_{baseline}) / (B2 * C2)$
<i>Baseline = minimal configuration with which your computational task can be carried out on Tier-1.</i>				
<i>Wall clock time is difference between start/end of the computational task, including any I/O operations as part of that task.</i>				

Number of nodes	Total number of cores	Wall clock time (s)	Speedup (w.r.t. baseline)	Efficiency
1	1	4000	1.00	1.00
1	7	580	6.90	0.99
1	14	289	13.84	0.99
1	28	146	27.40	0.98
2	56	81	49.38	0.88
4	112	43	93.02	0.83
8	224	23	173.91	0.78
10	280	19.8	202.02	0.72
12	336	19.7	203.05	0.60
14	392	19.4	206.19	0.53
16	448	19.2	208.33	0.47

Example Plot 1



The optimal number of cores in this example is 280, as parallel efficiency quickly drops below 70% when more cores are used.

7. Justify the number of node days and storage volume requested.

Describe your planned computational tasks and the sequence in which these tasks will be performed. Start from the example in Table 2 and adjust it for your project.

Provide additional descriptions for the computational tasks listed in the table. Resource estimates (wall clock time, number of nodes/cores, memory, storage) should be based on the results of actual calculations on BrENIAC (via, e.g., a Starting Grant) for system/problem sizes that match closely those of the intended computing tasks (e.g., same mesh sizes, actual molecular system, same I/O pattern, same amount of communications, etc.). If you plan to run the tasks concurrently, mention this in the description, so you can specify the correct total amount of scratch space that you need.

NB after 3 months of the allocation time have passed, you will lose 20% of the initially granted node days, if that 20% has not been used. (cf. regulations, § 9)

Example Table 2

Computational task	Node day calculation				Number of CPU cores per job	Memory usage (GiB) per node per job	OpenMP / MPI / OpenMP + MPI (hybrid) / worker framework / atools / etc.	Storage volume estimate	
	Number of such jobs	Wall clock time (in days) per job	Number of Tier-1 nodes per job	Total node days per task				Tier-2 DATA/HOME volume (GiB) + number of files	Tier-1 SCRATCH volume (GiB) + number of files
Task <ul style="list-style-type: none"> • software X • parameters/conditions 1-... • system/mesh size • molecular system(s) • ... 	A	B	C	= A x B x C					
Task example CP2K <ul style="list-style-type: none"> • CP2K – molecular dynamics • 100 ns runs • PBE functional • 1 -> 5 water molecules 	5	2	10	100	280	64	MPI	0 GiB 0 files	100 GiB 5000 files
Task example worker <ul style="list-style-type: none"> • MDTraj – postprocessing • 5000 files 	10000	0.021	0.0357 (1/28)	8 (7.86 rounded)	1	3 (84 GiB for 28 jobs in one node)	worker framework	1000 GiB 10000 files	100 GiB 5000 files
				Sum of nodedays needed = ...					Total SCRATCH volume that is applied for + number of files = ...
<i>Important information:</i>		Note that 3 days is the maximal wall clock time for any job.	Number of nodes may be fractional.			Maximum memory = 128 GiB/node. Larger 256 GiB/node nodes are also available upon motivated request.			

The example CP2K task needs to run 5 times, for a molecular system containing 1 to 5 water molecules. Based on timing runs on Tier-1 BrENIAC, we found that one such job runs for 2 days on 10 nodes, using all the cores (28) in the node. The job needs 64 GiB RAM in each node and produces 20 GiB of SCRATCH storage (1000 files). Since the 5 jobs (for the 5 listed molecular systems) will be run concurrently, $5 \times 20 \text{ GiB} = 100 \text{ GiB}$ of scratch disk space is required (and $5 \times 1000 = 5000$ files) for the entire task.

File postprocessing with the MDTraj tool is done in the example worker task, where 10000 jobs need to run on 5000 files on the SCRATCH volume to generate 10000 files on the Tier-2 DATA volume. Each job runs on 1 core. Based on 5 timing runs on Tier-1 BrENIAC, we found that the job duration varies between 25 and 28 minutes, and memory usage is 3 GiB at most. To be on the safe side, we foresee 30 minutes per job (0.021 days). 28 jobs will be packed on a single node using the worker framework, so 28 jobs require 1 full BrENIAC node for 30 minutes. For the entire task, 7.86 node days are required, which we have rounded up to 8 node days.

8. Describe how you will manage the workflow and the resources requested in the period during which the task is to be performed. What usage pattern do you anticipate (similar usage on monthly basis, bursts, etc.)?

In case you will launch a large number of (single-node) computational tasks, as in High Throughput Computing, describe how you will manage your jobs. Will you make use of a task/workflow manager, such as the worker framework, atools or something similar?

Please present how you will manage your data. Describe how the transfer of files to/from BrENIAC will be managed, if data reduction and/or compression of files will be performed. If available, provide information about IOPS.

9. List the computing time allocations granted to the research group(s) of this research project during the past two years, on the Flemish Tier-1 systems, as well as other Tier-1 and Tier-0 systems. Also, describe the scientific output obtained within the framework of the granted computing time. DOI links are sufficient.

Please consult your local support when you are preparing a Tier-1 application:
Associatie KU Leuven: hpcinfo@kuleuven.be
Associatie Universiteit Gent: hpc@ugent.be
Associatie Universiteit Hogescholen Antwerpen: hpc@uantwerpen.be
Associatie Universiteit Hogescholen Limburg: geertjan.bex@uhasselt.be
Universitaire Associatie Brussel: hpc@vub.be
For the other institutions: caroline.volckaert@fwo.be

Starting Grant Application form: Compute component of the Flemish Tier-1 supercomputing platform

Title of the application:

Applicant name, first name:

Institution:

Research group / department:

E-mail address:

VSC id of the applicant:

Disclaimer

Allocated computing time on Tier-1 for a Starting Grant is **500** nodedays at most, allocated for a period of **4** months. Total disk storage should not surpass 250 GiB. Allocated time is granted only to the applicant and can never be transferred to anyone else.

1. Motivate your application: why specifically do you want a Starting Grant?
2. Provide information for each software package that will be used.
 - If centrally installed on Tier-1, state the module name.
 - If not open source software, state which license makes installation and use by all mandated users valid on Tier-1. Add a copy of the signed license to this application.

- If not centrally installed, provide compilation instructions: software website, toolchain used, compilers, versions, easyconfig file for EasyBuild, ...
3. Short description of the computing tasks, the software tools required, expected disk storage and memory usage. Please specify if applicable:
- whether these computing tasks use diversification (OpenMP, MPI, OpenMP + MPI (hybrid), ...)
 - the estimated memory use of a computing task (maximum 256 GiB/node)
 - the requirements for disk storage (estimated volume in GiB and the total number of files)

Please keep in mind to gather all data required for the efficiency table and description of the computational tasks when applying for a regular Tier-1 compute allocation later on.

Send the completed Starting Grant application form to the relevant e-mail address below.
Associatie KU Leuven: hpcinfo@kuleuven.be
Associatie Universiteit Gent: hpc@ugent.be
Associatie Universiteit Hogescholen Antwerpen: hpc@uantwerpen.be
Associatie Universiteit Hogescholen Limburg: geertjan.bex@uhasselt.be
Universitaire Associatie Brussel: hpc@vub.be
For the other institutions: caroline.volckaert@fwo.be