

HPC-VLAANDEREN IN HET EUROPESE SUPERCOMPUTING ECOSYSTEEM

Annie Cuyt
e.a.



KVAB STANDPUNTEN

87

Koninklijke Vlaamse Academie van België
voor Wetenschappen en Kunsten - 2024

HPC-VLAANDEREN IN HET EUROPESE SUPERCOMPUTING ECOSYSTEEM



KVAB Press

KVAB STANDPUNTEN

87

Concept cover: Francis Strauven
Ontwerp cover: Charlotte Dua
Afbeelding: Shutterstock

De tekening van het Paleis der Academiën is een reproductie van het originele perspectief van Charles Vander Straeten in 1823. Jozef Cantré ontwierp het logo van de KVAB in 1947.

De KVAB Standpunten worden gepubliceerd door de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten, Hertogsstraat 1, 1000 Brussel.
info@kvab.be - www.kvab.be

HPC-VLAANDEREN IN HET EUROPESE SUPERCOMPUTING ECOSYSTEEM

Annie Cuyt

Hans De Winter

Niel Hens

Charles Hirsch

Johan Meyers

Stefaan Poedts

Kevin Van Geem

Veronique Van Speybroeck



Gedeeltelijke reproductie is toegelaten mits uitdrukkelijke bronvermelding.
Partial reproduction is permitted provided the source is mentioned.
Aanbevolen citeerwijze: Annie Cuyt, Hans De Winter, Niel Hens, Charles Hirsch, Johan Meyers, Stefaan Poedts, Kevin Van Geem, Veronique Van Speybroeck, *HPC-Vlaanderen in het Europese supercomputing ecosysteem*, KVAB Standpunt 87, 2024.

© Copyright 2024 KVAB
D/2024/0455/02
ISBN 9789065692283

Drukkerij Universa

HPC-Vlaanderen in het Europese supercomputing ecosysteem

INHOUD

Voorwoord.....	11
1. Motivatie	12
1.1 Maatschappelijke impact.....	13
1.2 Het Europese landschap	14
2. Het Vlaamse HPC-ecosysteem: stand van zaken	16
2.1 De VSC-structuur.....	17
2.2 Tier-2: de lokale infrastructuur	18
2.3 Tier-1 compute: de regionale infrastructuur.....	19
2.4 Tier-1 cloud en data	20
2.5 Tier-0: de Europese dimensie.....	20
2.6 VSC-budget	22
2.7 SWOT-analyse	23
3. Strategische onderzoeksgebieden	25
3.1 Plasma-astrofysica	25
3.2 Moleculair modelleren van functionele nanomaterialen	27
3.3 Besmettelijke ziekten	30
3.4 Geneesmiddelenonderzoek.....	32
3.5 Stromingsmodellen	35
3.6 Windmolenparken	38
3.7 Duurzaamheid in de chemische technologie.....	39
3.8 Kunstmatige intelligentie	42
4. Reflecties voor de toekomst	45
4.1 Wat zijn de nieuwe hardware-evoluties?.....	45
4.2 Wat zijn de organisatienoden?	46
4.3 Wat zijn de financieringsnoden?.....	47
4.4 Wat zijn de opleidingsnoden?	48
4.5 Wat is de industriële verwevenheid?	49
Conclusie	50
Referenties	52

Samenvatting

Een eerste Standpunt, "High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen", werd in 2008 gepubliceerd en vormde een belangrijke steun voor de evolutie en de financiering van het huidige Vlaams Supercomputer Centrum (VSC). Ruim 15 jaar later was de KVAB van mening dat het moment aangebroken was om opnieuw over de relatie tussen Vlaanderen en het HPC-landschap te **reflecteren**. Sinds 2008 is het HPC-landschap sterk geëvolueerd: **de participatie in Europese initiatieven is belangrijk geworden en ze loont!**

Bovenop de Tier-2 HPC infrastructuur op de campussen van de Vlaamse academische associaties en de regionale Vlaamse Tier-1 HPC infrastructuur, wordt de participatie in Europese Tier-0 infrastructuur almaar belangrijker en financieel interessanter. Vanuit de huidige situatie moet VSC evolueren naar een *high end computing* centrum dat tegen het einde van dit decennium een belangrijke plaats inneemt in het Europese HPC-ecosysteem.

Naar de toekomst toe verwacht men dat HPC-**infrastructuur** zeer **modulair** wordt. Voor (grotendeels academische) RDI-activiteiten moet daarmee een **heteroog publiek** van onderzoekers uit **diverse domeinen** bediend worden. Computersimulaties vormen immers een onlosmakelijk en essentieel element in de wetenschappelijke ontwikkeling en belangrijke sectoren zijn afhankelijk van de huidige evolutie naar alsmaar grotere computercapaciteit.

We vermelden hierbij onder andere de voorspelling van het **ruimteweer**, de ontwikkeling van nieuwe **nanomaterialen**, verspreidingsmodellen voor **besmettelijke ziekten**, nieuw **geneesmiddelenontwerp**, geavanceerde **stromingsmodellen** voor de lucht- en ruimtevaart en de transport- en energiesector, de ontwikkeling van grootschalige **windparken** en **duurzame chemie**.

Voor de organisatie van het VSC bespreken we vier modellen: het huidige **gedistribueerde** model, een meer **gecentraliseerd** beheer, het **inhuren** van de rekenkracht bij een groot datacenter en een **Europese** joint venture op Tier-1 niveau.

Spijtig genoeg functioneert het VSC nog altijd grotendeels op projectmatige basis, zonder voldoende gegarandeerde recurrente financiering vanwege de Vlaamse overheid. De **financiering** voor die infrastructuur, voor het beheer ervan en de gebruikersondersteuning moet dringend **geïndexeerd** worden, uitgebreid worden met een **Tier-0 luik** en **recurrent** worden op alle niveaus, van Tier-2, over Tier-1 tot en met Tier-0.

Niet in het minst wordt er ook gepleit om aan te sluiten bij een **HPC-master**-initiatief!

Executive summary

This document came about on the initiative of the Royal Flemish Academy of Belgium for the Sciences and Arts (KVAB). A first position paper on "High Performance Computing (HPC) in Flanders" was already published in 2008 and significantly supported the evolution and funding of the current Flemish Supercomputing Centre (VSC).

Over 15 years later, the KVAB felt that the time had come to reflect again on **the relationship between Flanders and the HPC landscape**. After all, the VSC still operates largely on a project basis, without sufficient guaranteed recurrent funding from the Flemish government.

Since 2008, the HPC landscape has also evolved significantly: participation in European initiatives has become important and it pays off! In the future, we will have to find a balance between Flemish sovereignty and European participation for the resources to be invested.

Consequently, a writing group was set up within the KVAB (Annie Cuyt, Niel Hens, Charles Hirsch, Veronique Van Speybroeck), complemented by important scientific HPC users in academic Flanders (Hans De Winter, Johan Meyers, Stefaan Poedts, Kevin Van Geem). The writing group met in the academic year 2023-2024 under the leadership of Annie Cuyt, who has been involved in the Flemish governmental HPC initiative since 2004 and co-founded the VSC. Furthermore, Stefan Becuwe and Walter Lioen were called upon for detailed information regarding the European landscape on the one hand and the organisation in the neighbouring Netherlands on the other.

The text is by no means an evaluation of the current VSC. The intention is to be reflective, after 15 years of functioning. The text also complements existing administrative information, such as annual reports and multiannual plans, with a strong scientific motivation for the funding that is needed and requested.

The three keywords in this paper are:

- **reflection** on the current Flemish HPC landscape, especially with a view to the future,
- **Europe**, with which HPC cooperation pays off and is becoming increasingly important,
- **recurrent funding**, to guarantee the continued existence and growth of VSC.

From the current situation, VSC needs to evolve into a High End Computing centre that has an important place in the European HPC ecosystem by the end of this decade. The necessary and recurrent funding for this should be provided for all tiers, Tier-2 on university campuses, Tier-1 regionally and Tier-0 supranationally.

Computer simulations are an inseparable and essential element in scientific development and important sectors depend on the current evolution towards ever-increasing computing power. We are thinking of areas such as:

- space weather prediction to ensure the reliability of our technological infrastructure;
- molecular modelling from the atomic scale of nanomaterials with the right function for the right application;
- computational modelling to understand, manage and mitigate the spread of infectious diseases;
- computational drug design and comprehensive molecular dynamics simulations;
- advanced flow models with applications in aerospace, automotive and energy transformation;
- simulation of the physics of the interaction of large-scale wind farms with the atmospheric boundary layer;
- the development of sustainable chemical technology, in which renewable energy and circularity thrive.

Going forward, **HPC infrastructure** is expected to become highly modular. For (largely academic) RDI activities, this **should serve a heterogeneous audience of researchers** from various fields.

For managing that infrastructure, we discuss four models: the current distributed model, a more centralised management, hiring the computing power from a large data centre and a European joint venture at Tier-1 level.

Funding for that infrastructure, for its management and user support urgently needs to be indexed in accordance with the inflation, extended to include a Tier-0 component and recurrent at all levels, from Tier-2, through Tier-1 to Tier-0.

Not least, it also advocates **joining an HPC master initiative!**

Voorwoord

Dit document kwam tot stand op initiatief van de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten (KVAB). Een eerste Standpunt, "High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen", werd in 2008 gepubliceerd en vormde een belangrijke steun voor de evolutie en de financiering van het huidige Vlaams Supercomputer Centrum (VSC).

Ruim 15 jaar later was de KVAB van mening dat het moment aangebroken was om opnieuw over de relatie tussen Vlaanderen en het HPC-landschap te reflecteren. Het VSC functioneert immers nog altijd grotendeels op projectmatige basis, zonder voldoende gegarandeerde recurrente financiering vanwege de Vlaamse overheid.

Met dat doel werd in de schoot van de KVAB een schrijfgroep opgericht (Annie Cuyt, Niel Hens, Charles Hirsch, Veronique Van Speybroeck), aangevuld met belangrijke wetenschappelijke HPC-gebruikers in academisch Vlaanderen (Hans De Winter, Johan Meyers, Stefaan Poedts, Kevin Van Geem). De schrijfgroep vergaderde in het academiejaar 2023-2024 onder leiding van Annie Cuyt, die sinds 2004 betrokken is bij het centraal Vlaamse HPC-initiatief en mee aan de wieg van het VSC stond. Verder werd voor gedetailleerde informatie over het Europese landschap enerzijds en de organisatie in het buurland Nederland anderzijds een beroep gedaan op Stefan Becuwe en Walter Lioen.

De tekst is geenszins een evaluatie van het huidige VSC. De bedoeling is aan reflectie te doen, na 15 jaar functioneren. Ook vult dit Standpunt bestaande administratieve informatie aan, zoals jaarverslagen en meerjarenplannen, met een krachtige wetenschappelijke motivatie voor de financiering die nodig is en gevraagd wordt.

Sinds 2008 is het HPC-landschap sterk geëvolueerd: **de participatie in Europese initiatieven is belangrijk geworden en ze loont!** In de toekomst zal men voor de te investeren middelen een balans moeten vinden tussen Vlaamse soevereiniteit en Europese participatie.

We danken de KVAB voor haar logistieke steun bij de totstandkoming van deze Standpunttekst, en alle collega's van de Vlaamse academische associaties die bereidwillig hun medewerking verleenden.

De reeks Standpunten van de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten draagt bij tot een wetenschappelijk onderbouwd debat over actuele maatschappelijke en artistieke thema's. De auteurs, leden en werkgroepen van de Academie, schrijven in eigen naam, onafhankelijk en met volledige intellectuele vrijheid. De goedkeuring voor publicatie door één of meerdere Klassen van de Academie waarborgt de kwaliteit van de tekst. Dit Standpunt werd goedgekeurd voor publicatie door de Klasse van de Natuurwetenschappen op 17 mei 2024.

Annie Cuyt
18 mei 2024

1. Motivatie

De term *high performance computing* (HPC) refereert aan zeer performante computersystemen met reusachtig veel rekenkracht, die zeer complexe en veeleisende problemen oplossen. De term is onlosmakelijk verbonden met wetenschappelijk onderzoek en hoogwaardige industriële toepassingen, meer bepaald met de zogenaamde computationele wetenschappen in de brede betekenis van het woord. De waaier gaat van het testen van virtuele prototypes in verschillende ingenieurstoepassingen tot de analyse en bewerking van enorme datasets.

Kenmerkend voor de HPC-organisatie in alle landen is een piramidale structuur, met aan de basis lokale HPC-installaties van kleinere schaal op universitaire campussen (Tier-2) en daarbovenop regionale HPC-centra met een hogere capaciteit (Tier-1). Het hoogste (Tier-0) niveau bestaat uit Europese HPC-installaties die met elkaar verbonden zijn door een Europees hogesnelheidsnetwerk.

In 2008 publiceerde de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten (KVAB) het Standpunt "High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen" [1]. Daarin pleitte de KVAB voor de oprichting van een centraal HPC-centrum dat beheerd werd door een onafhankelijk orgaan. Dit waren in het kort de componenten en doelstellingen:

1. een **versterking van de bestaande lokale computerparken** op de universitaire campussen, waarop het piramidale HPC-systeem rust;
2. de oprichting van een **HPC-centrum op Vlaams niveau** dat rekenkracht aanbiedt van een of twee grootteorden meer dan de lokale clusters;
3. een vlotte toegankelijkheid voor en **ondersteuning van de gebruikers** bijparalellisatie, implementatieproblemen, pre- en post-processing;
4. **centraal beheer door een onafhankelijk orgaan** om een verdeling van de verantwoordelijkheden en bijkomende problemen te vermijden;
5. **advies** bij de aankoop van de kleinere lokale universitaire clusters en **integratie** in het grotere Europese HPC-landschap.

Zo'n 15 jaar later stellen we vast dat er een Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) werd opgericht. Spijtig genoeg moeten we daaraan toevoegen dat niet alle doelen werden gerealiseerd.

Het VSC is een gedistribueerd opzet waarin elke Vlaamse associatie van een universiteit en hogescholen participeert en met bijgevolg een gedeelde verantwoordelijkheid. De Tier-1 cluster wordt beurtelings gehuisvest in een van de universitaire datazalen die daarvoor geschikt zijn. Ook de ondersteuning van de gebruikers is gedistribueerd georganiseerd: elke academische associatie heeft daarvoor een wijk, het zogenaamde *single point of contact* (SPOC). De VSC-personeelsleden zijn actief op de verscheidene campussen, zowel voor het beheer van de computercluster als voor de ondersteuning van de gebruikers.

Deels is deze gedistribueerde aanpak historisch te verklaren. De lokale computerparken op de universitaire campussen werden inderdaad beter uitgebouwd en de Vlaamse regering voorzag ook in recurrente financiering van hun uitrusting, werking en personele ondersteuning. Maar de uitrusting, werking en personele ondersteuning op het regionale niveau worden nog steeds projectmatig gefinancierd. De huidige Tier-1 financiering loopt af eind 2025. Het VSC-meerjarenplan loopt tot eind 2027.

Hopelijk kan ook na 2025 en 2027 het VSC-project voortgezet worden, en wel met een **gegarandeerd en recurrent jaarlijks budget voor de activiteiten op alle vlakken: lokaal, regionaal en Europees**. Dat laatste en minst ontwikkelde aspect van het VSC-project wordt in dit document nader toegelicht.

1.1 Maatschappelijke impact

High performance computing heeft een aanzienlijke maatschappelijke impact op verschillende gebieden. HPC-systemen stellen onderzoekers in staat om complexe problemen te modelleren, simulaties uit te voeren en grote hoeveelheden gegevens te analyseren. Dit heeft geleid tot doorbraken op domeinen zoals klimaatmodellering, geonomanalyse, materiaalwetenschappen, astrofysica enz.

HPC speelt ook een cruciale rol in de gezondheidszorg, waar het wordt gebruikt voor het analyseren van medische beelden, het modelleren van de verspreiding van ziektes, het ontwikkelen van nieuwe geneesmiddelen en behandelingen, en het personaliseren van medische zorg op basis van genetische informatie.

HPC-systemen stellen ingenieurs en ontwerpers in staat om complexe modellen te creëren, zoals structurele analyses, stromingsdynamica, het ontwikkelen van functionele nanomaterialen en hun chemische processen en andere simulaties die nodig zijn voor de ontwikkeling van nieuwe materialen, producten, gebouwen, voertuigen enz. Dit helpt bij het verbeteren van de efficiëntie, het verminderen van de ontwikkelingskosten en het verkorten van de ontwikkelingstijd.

De HPC-infrastructuur is van cruciaal belang voor het ontwikkelen van functionele nanomaterialen voor duurzame chemische conversies. Door het ontwikkelen van materialen met de juiste functie voor de juiste toepassing zullen wij als maatschappij in staat zijn om de toekomstige uitdagingen aan te gaan inzake het verkleinen van onze ecologische voetafdruk.

HPC wordt gebruikt voor het modelleren van complexe systemen, zoals weersvoorspellingen en klimaatmodellen, en voor het ontwerpen van duurzame energiesystemen. Het draagt bij aan het begrijpen van de impact van menselijke activiteiten op het milieu en het ontwikkelen van oplossingen voor milieukwesties.

In de financiële sector wordt HPC gebruikt voor het analyseren van marktgegevens, het uitvoeren van risicoanalyses, het optimaliseren van handelsstrategieën en het detecteren van frauduleuze activiteiten. Het helpt bij het nemen van snelle beslissingen en het beheer van financiële risico's.

HPC-technologieën spelen een rol in het verbeteren van onderwijs en opleiding op alle niveaus. Ze stellen studenten en onderzoekers in staat om toegang te krijgen tot geavanceerde tools en resources voor onderzoek en leren.

Kortom, HPC heeft een brede maatschappelijke impact en draagt bij aan vooruitgang op verschillende gebieden, en wel door het mogelijk maken van complexe berekeningen, simulaties en analyses die anders niet haalbaar zouden zijn.

1.2 Het Europese landschap

Na de oprichting van de EuroHPC Joint Undertaking in 2018 is het Europese landschap sterk veranderd. Naast de gedeeltelijke financiering vanuit Europa van mid-range, petaschaal, pre-exaschaal en exaschaal machines, staan ook quantum computing en specifieke infrastructuur voor artificial intelligence (AI) en industrie op de kaart, net zoals de ontwikkeling van eigen componenten of software om zo te komen tot een volwaardig Europees ecosysteem.

Tabel 1.1 biedt een overzicht van de door EuroHPC gefinancierde en operationele machines.

machine	land	rekenkracht (Pflops)	kenmerken	CAPEX
LUMI	FI	386,00	AMD CPU en AMD GPU	€ 144,5M
Leonardo	IT	246,54	Intel CPU en NVIDIA GPU	€ 120,0M
MareNostrum 5	ES	178,30	Intel CPU en NVIDIA GPU	€ 151,4M
Meluxina	LU	12,81	AMD CPU, NVIDIA GPU en Intel FPGA	€ 30,4M
Karolina	CZ	9,59	AMD CPU en NVIDIA GPU	€ 15,0M
Discoverer	BG	4,52	AMD CPU	€ 11,5M
Vega	SI	6,92	AMD CPU en NVIDIA GPU	€ 17,2M
Deucalion	PT	7,22	A64FX, AMD CPU en NVIDIA GPU	€ 20,0M

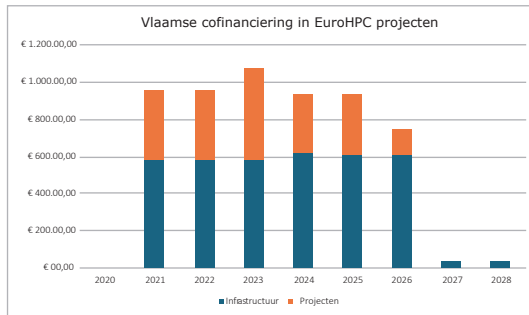
Tabel 1.1: Geïnstalleerde en operationele EuroHPC-machines de dato maart 2024.

In de nabije toekomst wordt JUPITER de eerste EuroHPC exaschaal supercomputer. Het systeem wordt geïnstalleerd op de campus van het Forschungszentrum Jülich in Duitsland. Daarnaast worden nog *mid-range* machines geïnstalleerd: Daedalus (GR), Levente (HU), CASPIR (IE) en EHPCL (PL).

Al deze machines zijn deels gefinancierd door een (consortium van) land(en) en deels door EuroHPC. In ruil krijgt Europa een evenredig aandeel in de beschikbare rekentijd, waarvoor onderzoekers via competitieve oproepen aanvragen kunnen indienen.

Voor de gebruikers zijn er ook nog de specifieke projectoproepen. Een of meer Vlaamse universiteiten nemen deel of hebben deelgenomen aan de Centres of Excellence (CoE) SPACE en MultiXscale, EuroCC of specifieke projecten, zoals DEEP-SEA, TIME-X, EPICURE... Er is ook de deelname van België aan de LUMI en LUMI-Q consortia, die besproken wordt in sectie 2.5.

De meeste van de goedgekeurde projecten in deze projectoproepen vereisen 50% **co-financiering door het deelnemende land**. In het verleden werd steeds getracht om dit ad hoc in orde te brengen, wat niet meteen getuigt van een gestructureerde aanpak. Gezien het steeds toenemende belang van zulke Europese projecten is het belangrijk dat de Vlaamse regering specifieke budgetten oormerkt voor zulke oproepen. Terzijde merken we op dat, in tegenstelling tot andere Europese centra, het VSC in zijn huidige structuur als centrum niet kan deelnemen aan die oproepen. Vanuit Vlaanderen kunnen momenteel enkel de universiteiten en de associaties met de hogescholen participeren. Hierdoor mist het VSC **visibiliteit op de Europese kaart**.

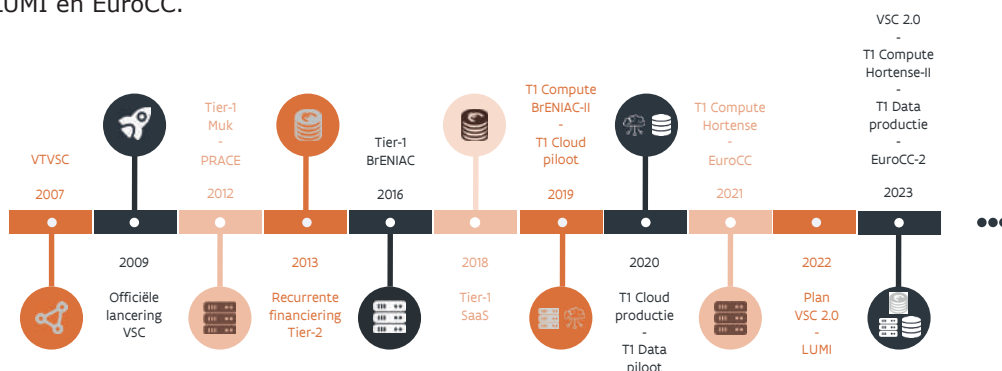


Figuur 1.1: Vlaamse cofinanciering, opgesplitst tussen infrastructuur (LUMI en LUMI-Q) en projecten.

2. Het Vlaamse HPC-ecosysteem: stand van zaken

Het gebruik van HPC is wereldwijd op alle domeinen verspreid: bij overheden, in de academische wereld en in vrijwel alle industrieën en sectoren. HPC is de motor die de steeds sterker geconnecteerde digitale economie aandrijft. HPC is bijzonder geschikt voor taken die reken- en/of data-intensief zijn, zoals taken waarbij een groot aantal complexe berekeningen snel en op enorme datasets moet worden uitgevoerd.

Het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC) dankt zijn bestaan mede aan de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunst, die in 2008 het belang van simulaties in silico voor wetenschap en technologie onder de aandacht bracht. Op dat moment was er reeds Tier-2 infrastructuur voor breed gebruik geïnstalleerd aan de universiteiten van Antwerpen, Gent en Leuven. In de voorbije 15 jaar is het belang van rekenkracht sterk toegenomen en vandaag de dag is het zelfs onontbeerlijk om als regio competitief te blijven op tal van expertisedomeinen in wetenschap en technologie. Deze tendens wordt versterkt door innovaties in onder meer artificial intelligence en het Internet of things (IoT), en door steeds groter wordende datasets in klimaatonderzoek, deeltjesfysica en genetica. Vanwege deze evolutie werd in 2018, naar aanleiding van een impulsfinanciering van de Vlaamse overheid voor het regionale Tier-1 niveau, de scope van het VSC verbreed. Naast rekenkracht werd ook ingezet op storage voor grote, actief gebruikte datasets, en op cloud gebaseerde toepassingen. Intussen werd het VSC ook actief in een Europese context met zijn deelname aan o.a. SESAME Net, PRACE, LUMI en EuroCC.



Figuur 2.1: Historische schets: het VSC.

Parallel met deze evolutie is ook de governance van het VSC meegegroeid. Zo zitten sinds begin 2020 naast vertegenwoordigers van de associaties van universiteiten en hogescholen, ook vertegenwoordigers van de Vlaamse Wetenschappelijke Instellingen (VWI's), de Strategische Onderzoekcentra (SOC's) en het departement Economie, Wetenschap en Innovatie (EWI), alsook van de gebruikers, de industrie en de VSC-medewerkers zelf mee aan tafel om het VSC-beleid uit te stippelen.

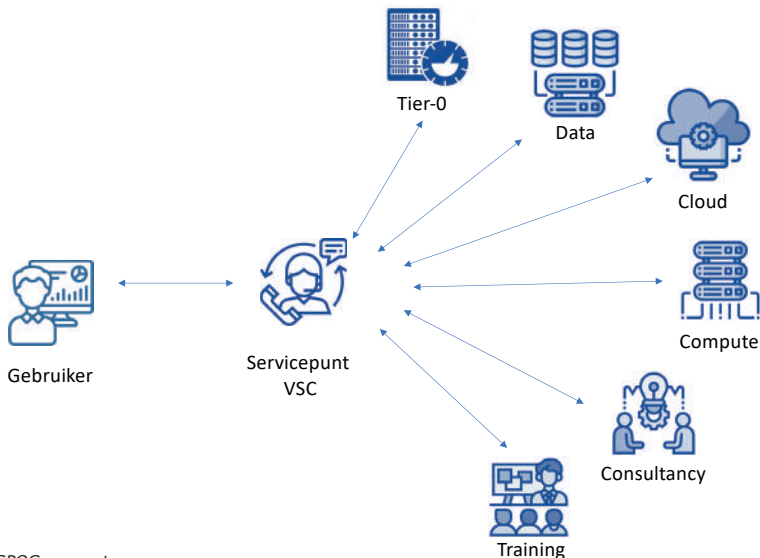
Tegelijkertijd is het VSC een virtuele, decentrale organisatie gebleven, die onder toezicht staat van FWO-Vlaanderen. Het contact met de gebruikers verloopt via servicepunten die ingebed zijn in elk van de Vlaamse associaties van een universiteit en hogescholen. Van het beheer neemt elk van de associaties een deel voor zich, volgens de onderlinge afspraken.

Vandaag staat het VSC voor een nieuwe uitdaging. Een toekomstgerichte en duurzame uitbouw is noodzakelijk om de gebruikers te kunnen blijven ondersteunen in hun nood aan rekenkracht en om Vlaanderen competitief te houden in een snel evoluerende, op big data gebaseerde wetenschappelijke en technologische wereld. Terzelfdertijd wordt onder impuls van de Europese Commissie via de EuroHPC Joint Undertaking sterk ingezet op zeer grote rekenkracht, voornamelijk in de vorm van een Europees (pre-) exaschaal Tier-0 niveau, maar ook op de eigen ontwikkeling van hardware technologie, niet het minst vanuit geopolitieke strategische overwegingen. **Vanuit de huidige situatie moet VSC evolueren naar een high end computing centrum dat tegen het einde van dit decennium een belangrijke plaats inneemt in het Europese HPC-ecosysteem.**

2.1 De VSC-structuur

Zoals reeds vermeld, is het VSC een virtuele organisatie die decentraal opgebouwd is en geleid wordt. In wat volgt verwijzen we enerzijds naar de vijf Vlaamse associaties van een universiteit en hogescholen (AUH) die het VSC belichamen, en anderzijds naar de vier hubs die rekenapparatuur huisvesten. De associaties zijn (in alfabetische volgorde): de AUH Antwerpen, de Universitaire Associatie Brussel, de Associatie Universiteit Gent, de Associatie KU Leuven en de AUH Limburg. De eerste vier zijn ook VSC-hubs. Het was bij de start evident dat het VSC georganiseerd werd in die lokale hubs binnen de universiteiten.

Qua frontoffice adresseert het VSC de gebruikers in een SPOC-concept en qua backoffice worden de te leveren diensten en taken toegewezen aan de associaties.



Figuur 2.2: SPOC-concept.

De kernmissie van het VSC is infrastructuur en ondersteuning aan te bieden voor technisch-wetenschappelijk rekenen, en dat aan alle activiteiten op het vlak van Research, Development and Innovation (RDI) in Vlaanderen. Een belangrijke strategische doelstelling van het VSC is dat het centrum de gebruikers faciliteert om hun onderzoek en ontwikkelingen naar een hoger niveau te tillen. De gebruikers worden gestimuleerd en begeleid om gestaag en op een efficiënte manier het rekenniveau te verleggen van hun desktop naar de lokale Tier-2, de regionale Tier-1 en uiteindelijk de Europese Tier-0 infrastructuur. Omdat de toegang tot de laatste twee niveaus competitief en projectmatig is – het gaat om de toekenning van merkelijk grotere aantallen node-uren – bieden de VSC-medewerkers in dit proces ondersteuning bij het formuleren van de projectaanvragen. De beschikbare infrastructuur moet op alle niveaus door de gebruikers immers zo efficiënt mogelijk gebruikt worden.

Het personeel en de financiële middelen worden verdeeld over de associaties. Hierbij dienen we een onderscheid te maken tussen Tier-2 middelen en Tier-1 middelen. Aangezien Tier-1 middelen regionale in plaats van lokale infrastructuur betreffen, worden ze in hun geheel toegewezen aan die associatie die de verantwoordelijkheid voor die infrastructuur en diensten op zich neemt.

2.2 Tier-2: de lokale infrastructuur

Het Tier-2 niveau bestaat uit de lokale rekenplatformen van de VSC-hubs in Leuven, Antwerpen, Gent en Brussel. Deze vier platformen bieden zowel infrastructuur als diensten aan die primair gericht zijn op de lokale onderzoeksgemeenschap, maar die ook openstaan voor alle VSC-gebruikers. De Tier-2 infrastructuur biedt een laagdrempelig platform aan, zodat onderzoekers kunnen proberen en leren. Alle Tier-2 platformen moeten dus vlot toegankelijk zijn voor alle VSC-gebruikers en een uniforme gebruikservaring aanbieden. De VSC-hubs maken afspraken over wat onderdeel is van de uniforme gebruikservaring (en wat niet) en implementeren dit ook.

Qua infrastructuur is op Tier-2 niveau een mix van Intel- en AMD-processoren beschikbaar, uitgerust met een beschikbaar geheugen dat schommelt tussen 96 GB en 2 TB. Daarenboven zijn er ruime storage-mogelijkheden, zowel voor tijdelijke *scratch* als langetermijnopslag van data. De *compute nodes* zijn met mekaar verbonden via een snelle *interconnect*, waarvan de keuze per aankoop kan verschillen omdat de *interconnect* evolueert. Daarenboven zijn op elke hub GPU-acceleratoren beschikbaar, zij het in een kleinere hoeveelheid dan de traditionele, al vermelde CPU-processoren. De systemen worden zeer intensief gebruikt: de bezettingsgraad bedraagt minstens 80%.

Doordat het Tier-2 niveau is ingebed in een universiteit, heeft elke VSC-hub een eigen structuur:

- Aan de KU Leuven is de VSC-hub, die ook het Tier-2 platform uitbaat en ondersteunt, opgenomen binnen de centrale ICT-dienst ICTS en zijn verschillende teams.
- Het Tier-2 platform van de UAntwerpen wordt beheerd door de kernfaciliteit CalcUA, met een eigen dagelijks bestuur en stuurgroep, en een bijbehorende staf.
- Het Tier-2 platform van de UGent maakt sinds kort eveneens deel uit van het centrale IT-departement, terwijl het voordien een HPC-specifieke groep was.
- Het Tier-2 platform van de VUB valt onder de verantwoordelijkheid van de Scientific Data & Compute afdeling van het centrale IT-departement.

2.3 Tier-1 compute: de regionale infrastructuur

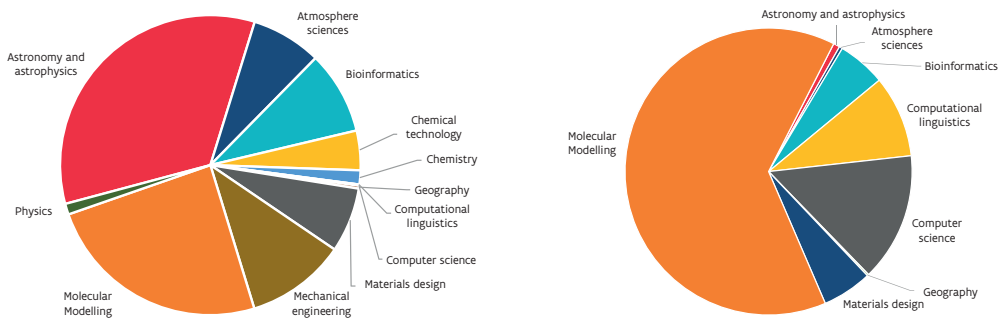
De Tier-1 omgeving wordt over de universiteiten heen gezamenlijk geëxploiteerd voor het brede Vlaamse RDI-landschap in de academische wereld, de overheid en de industrie. Deze omgeving wordt aangewend voor workloads die op een Tier-2 omgeving niet haalbaar zijn, omdat de workload te groot of te tijdkritisch is. Onderzoeksdomeinen die heel rekenintensief zijn, kunnen via Tier-1 evolueren naar Tier-0 gebruik.

De toegang tot de Tier-1 resources wordt op een competitieve manier georganiseerd, omdat de gebruikers zich moeten realiseren dat deze machine van een andere grootteorde is en dat zij bijgevolg moeten aantonen dat ze de infrastructuur voldoende efficiënt gebruiken. De beslissingen over investeringen en exploitatiemodellen worden in overleg met alle partners genomen. De Tier-1 infrastructuur wordt geïnstalleerd in datacentra die voldoen aan vooraf bepaalde normen die zijn gebaseerd op industriestandaarden. Op Tier-1 niveau beschikt Vlaanderen sinds 2022 over Hortense te Gent, de opvolger van BrENIAC in Leuven.

cluster	nodes	processor	geheugen	lokale schijf	interconnect
Hortense	294	2 x 64 core AMD EPYC 7H12	256 GB	480 GB	HDR-100
	42	2 x 64 core AMD EPYC 7H12	512 GB	480 GB	HDR-100
	384	2 x 64 core AMD EPYC 7763	256 GB	480 GB	HDR-100
	20	2 x 24 core AMD EPYC 7402; 4 x NVIDIA A100 GPU	256 GB; 40 GB (GPU)	480 GB	HDR-100
	20	2 x 24 core AMD EPYC 7402; 4 x NVIDIA A100 GPU	256 GB; 80 GB (GPU)	480 GB	HDR-100

Tabel 2.1: Tier-1 infrastructuur de dato januari 2024.

Vermits de toegang tot de regionale Tier-1 infrastructuur wordt toegekend op competitieve basis, na het indienen van een projectaanvraag, beoordeelt een Tier-1 Allocation Board (TAB) drie keer per jaar in haar vergadering de ingediende projecten. De leden van de TAB zijn allen geaffilieerd met buitenlandse rekencentra.



Figuur 2.3: Toegekende VSC Tier-1 rekentijd in 2022 per wetenschappelijk domein, verdeeld over CPU (links) en GPU (rechts).

Net zoals bij andere HPC-centra in Europa zijn de domeinen chemie, fysica, technologie en lifesciences bij de projecten goed vertegenwoordigd. In figuur 2.3 is de Tier-1 verdeling per wetenschappelijk domein overgenomen uit het VSC-jaarverslag 2022 [2].

2.4 *Tier-1 cloud en data*

De Tier-1 supercomputing infrastructuur in Vlaanderen heeft zich tot 2018 vooral geconcentreerd op infrastructuur met een grote reken capaciteit die ten dienste stond van het brede Vlaamse onderzoekslandschap. Het verbreden en meer toegankelijk maken van het VSC-aanbod bleek wenselijk om de investeringen in de rekeninfrastructuur nog beter te laten renderen. Het model dat de University of Cambridge hanteerde om met haar Cambridge Service for Data Driven Discovery (CSD3) exact hetzelfde doel te bereiken, diende als inspiratie en richtpunt.

Als gevolg van deze overweging koos het VSC dan ook voor een drieledige strategie, met naast compute ook een focus op het uitbouwen van een cloud- en data-aanbod. De cloudfaciliteiten zijn uitgebouwd door de hub in Gent, de datadiensten door de hub in Leuven.

2.5 *Tier-0: de Europese dimensie*

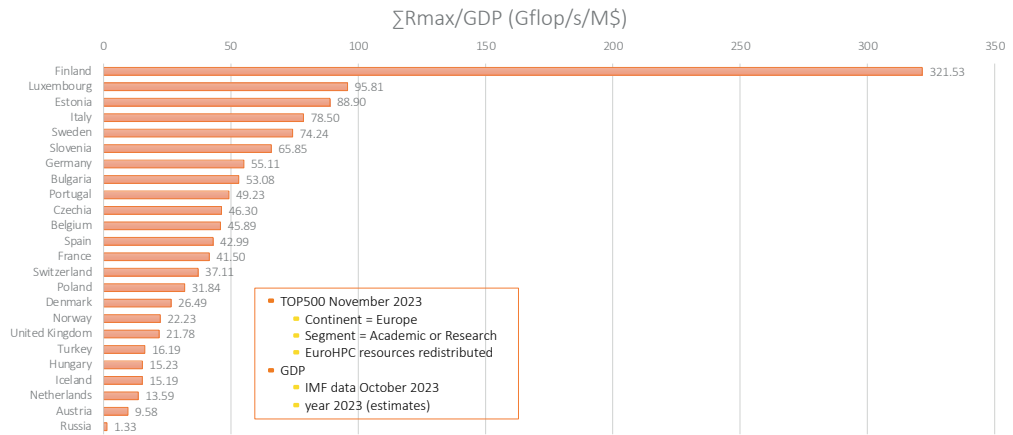
Europa versterkt de focus op HPC. Terwijl er voordien enkel sprake was van een aantal sterke HPC-centra (CSC, CINECA, GENCI, GCS, BSC...), met PRACE als Europees aanspreekpunt, wordt nu dankzij EuroHPC en EuroCC samenwerking door de landen en regio's de norm.

EuroHPC bundelt Europese inspanningen om een HPC-ecosysteem van wereldklasse te ontwikkelen. Twee van de projecten waarbij Vlaanderen betrokken is, zijn LUMI en EuroCC. LUMI is een van de drie Europese pre-exaschaal supercomputers en is gebouwd in Finland. De capaciteit die hierdoor beschikbaar komt, opent nieuwe mogelijkheden voor onderzoekers in Vlaanderen. EuroCC is het project rond de National Competence Centres. Vlaamse universiteiten werken in EuroCC mee aan een verscheidenheid aan taken (zie <https://www.enccb.be/>). Daarnaast is er ook de deelname aan LUMI-Q, een van de toekomstige kwantumcomputers in Europa.

Een van de doelstellingen van Europa is onderzoekers de mogelijkheid bieden zich voor te bereiden richting exaschaal. De toegang tot LUMI biedt aan Vlaamse onderzoekers hiertoe een unieke opportuniteit. In een notendop samengevat biedt de LUMI-infrastructuur 2978 GPU nodes (met 4 GPU's elk), 2048 CPU nodes (met 2 CPU's elk), een partitie met zogenaamde large memory nodes, een partitie voor visualisatie en 117 PB aan opslagcapaciteit, verspreid over drie soorten opslagsystemen.

We merken op dat de laatste notering van Vlaanderen in de TOP500 dateert van juni 2017 (BrENIAC). De enige Belgische supercomputer in de huidige lijst (november 2023) staat op plaats 162 en wordt beheerd door het Waalse Cenaero. Maar als we de participatie van Vlaanderen, het Brussels Hoofdstedelijk Gewest en Wallonië in het LUMI EuroHPC-project in rekening brengen, dan is de score van België vergelijkbaar met andere EU-landen in de omgeving. Samenwerken om te beschikken over voldoende rekenkracht loont dus. Figuur 2.4, die dit illustreert, heeft enige uitleg.

European TOP500 performance vs GDP 2023



Figuur 2.4: Verhouding beschikbare rekenkracht t.o.v. BNP (grafiek gemaakt en aangeleverd door SURF).

In figuur 2.4 drukken we de nationaal beschikbare rekenkracht voor RDI uit in GFlop/s en het BNP in miljoen \$. In elke berekening van de nationale rekenkracht is het EuroHPC-aandeel van het betreffende land opgenomen, naast de infrastructuur die onder de noemer academisch of onderzoek valt. Vermits de supercomputer van Cenaero onder industrie valt, is die niet mee opgenomen in bovenstaande figuur. Voor Finland is ook enkel het nationale Finse aandeel opgenomen, niet de volledige LUMI-rekenkracht. De Europese landen worden verder gerangschikt volgens dalende ratio rekenkracht/BNP. Hieruit blijkt duidelijk dat **de participatie in een Europees HPC-initiatief een dusdanige hoeveelheid rekenkracht oplevert dat het toevoegen van de Vlaamse Tier-1 machine aan de TOP500-gegevens de positie van België in de rangschikking niet significant wijzigt.**

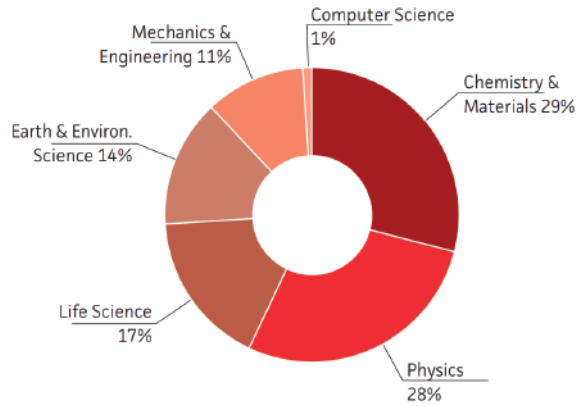
Het gebruik en de toepassing van HPC zijn ook al vrij wijdverspreid in de Europese industrie. HPC is een integraal onderdeel van bedrijfsprocessen geworden. Met name in industriële sectoren, zoals de auto-industrie, lucht- en ruimtevaart, defensie, biowetenschappen en milieu/duurzame energie, is HPC noodzakelijk gebleken voor verdere innovatie en economische groei. De invoering van HPC door kmo's verloopt ondanks EU-projecten als SESAME Net en FF4EuroHPC veel trager dan bij grote bedrijven en/of start-ups.

Wat de verdeling van de rekentijd over de disciplines betreft, volgt het VSC zeer goed de Europese trends. De grootste gebruikers zijn overal onderzoekers uit de chemie en de fysica, gevolgd door onderzoekers uit technologische toepassingen en de lifesciences. In figuur 2.5 kan men figuur 2.3 vergelijken met de verdeling van de rekentijd over de wetenschappelijke disciplines in de toonaangevende centra CINECA te Italië en CSCS te Zwitserland.

Een doordachte deelname aan Europese projecten kan het VSC in de kijker plaatsen en tegelijk een win-winsituatie creëren: Europese visibiliteit, kennisopbouw en kennisuitwisseling met centra in andere landen, en de creatie van toegevoegde waarde voor de academische wereld, overheid en industrie in Vlaanderen.



CINECA (Italië) (2020)



CSCS (Zwitserland) (2022)

Figuur 2.5: Verdeling uitgevoerde projecten per wetenschappelijk domein [3], [4].

2.6 VSC-budget

Wanneer dit Standpunt wordt geschreven, beschikt het VSC over in totaal **35 VTE's**, gefinancierd door de overheid, voor de uitvoering van de **Tier-2, Tier-1 compute-, cloud- en data-activiteiten**, inclusief de overkoepelende RDI en marketingactiviteiten. De benodigde VTE's voor het systeembeheer van de Tier-1 machine zijn continu gespreid over twee locaties: terwijl de rekenactiviteiten op de ene Tier-1 cluster in datazaal A op een bepaalde locatie uitlopen, wordt de volgende Tier-1 cluster aangekocht en op een andere locatie opgebouwd in datazaal B.

Het door de Vlaamse regering toegekende budget voor de bij de bovenstaande activiteiten behorende **uitrusting en werking (exclusief personeel) bedraagt op jaarbasis zo'n 9M euro**.

Hieraan voegen de academische associaties en ook het Fonds voor Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen (FWO), nog heel wat ondersteuning in kind toe.

Voor de **Tier-0 activiteiten** van het VSC zijn nog **extra 3 VTE's** voorzien op het huidige **Vlaamse** projectbudget, wat het totaal aantal personeelsleden gefinancierd door Vlaanderen op 38 VTE's brengt.

Ook neemt het VSC deel aan een **klein aantal Europese initiatieven**, zoals de National Competence Centres en de LUMI- en LUMI-Q-participaties, die **voor de helft extern gefinancierd** worden.

Inclusief in de Vlaamse bijdrage aan het pre-exaschaal **LUMI-project** is nog **0,5 VTE** met standplaats in Vlaanderen gefinancierd, voor het LUMI User Support Team.

Tabel 2.2 brengt een overzicht van de vermelde personeelsmiddelen en de budgetten voor uitrusting en werking.

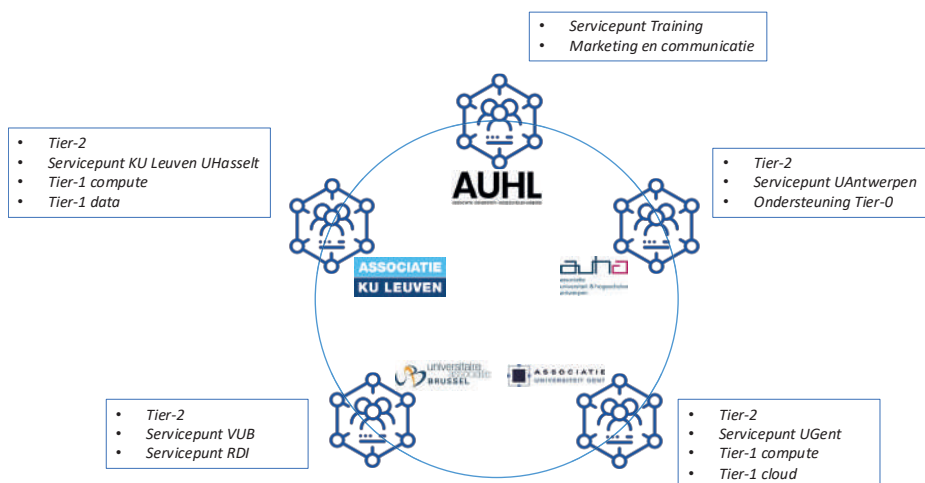
	VTE	werking/uitrusting
Tier-2	23	€ 4M
Tier-1	12	€ 5M
Tier-0	3	€ 1M
	38	€ 10M

Tabel 2.2: Vlaamse VSC-financiering anno 2024 (afgeronde bedragen).

Let wel dat enkel de Tier-2 middelen (23 VTE en de bijhorende +/- 4M euro uitrustings- en werkmiddelen) recurrent ondersteund worden en alle andere middelen toegekend worden op projectmatige basis.

2.7 SWOT-analyse

In figuur 2.6 wordt schematisch weergegeven hoe in de VSC-backoffice anno 2023 de verantwoordelijkheden verdeeld zijn. We bekijken aan de hand daarvan de sterktes, zwaktes, opportuniteiten en bedreigingen.



Figuur 2.6: Organisatie van de verantwoordelijkheden, 2023.

De nabijheid en de inbedding van de VSC-infrastructuur en het ondersteunend personeel in de universiteiten is zeker een grote **sterkte**. Verschillende bevestigingen en doorlichtingen van het VSC bevestigen dat. In vergelijking met verschillende andere landen scoort het VSC ook goed op het vlak van het industrieel gebruik. Het betreft hier nooit zogenaamde productie omdat het VSC-ondersteuningsmodel dat niet ambieert, maar steeds verkennend onderzoek in development en innovation.

Dat de meeste VSC-gebruikers pas kennismaken met HPC en aanverwante high end computing aspecten aan het einde van of na hun masteropleiding, wordt duidelijk als een **zwakte** ervaren. Dit leidt ook tot een verlies aan efficiëntie in het gebruik van de infrastructuur. Ook wordt de decentrale gebruikersondersteuning vermeld, omdat die op verschillende vlakken de communicatie bemoeilijkt en leidt tot een verlies aan efficiëntie in het begeleiden van de gebruikers.

Het feit dat alle Vlaamse associaties aan het VSC-project deelnemen creëert **opportu-niteiten** en vermijdt dat middelen ergens gepolariseerd worden. Gelijkaardige succesvolle initiatieven zijn Flanders Make, VIB... De deelname van Vlaanderen aan het pre-exaschaal LUMI-initiatief en het kwantum LUMI-Q-initiatief opent duidelijk ook de deur naar een meer doorgedreven Europese participatie van het Vlaamse HPC-project.

Een duidelijke **bedreiging** vormt het gegeven dat het VSC nog steeds grotendeels projectmatig functioneert. Enkel de (nog steeds niet geïndexeerde) Tier-2 middelen zijn door de Vlaamse regering recurrent gegarandeerd. De Tier-1 middelen voor de ondersteuning op het regionale niveau, zowel voor personeel als uitrusting en werking, lopen af eind 2025. Voor de ondersteuning van Vlaamse onderzoekers op het Tier-0 niveau wordt alleen in 3 VTE's voorzien. Er zijn geen Tier-0 werkingsmiddelen.

Zonder de garantie van Vlaamse recurrente financiering op alle niveaus, zowel Tier-2 en Tier-1 als Tier-0, zal het Vlaamse HPC-project uiteindelijk ophouden te bestaan!

3. Strategische onderzoeksgebieden

Computersimulaties zijn een essentieel element in de verdere wetenschappelijke ontwikkeling. Belangrijke sectoren zijn afhankelijk van de huidige evolutie naar alsmaar grotere computercapaciteit. Tijdens een aantal rondetafelgesprekken die in 2024 gevoerd werden met de grotere VSC-gebruikers kwamen de onderwerpen en aspecten aan bod die we hieronder overlopen.

3.1 *Plasma-astrofysica*

Ruimteweer wordt aangedreven door de dynamische aard van onze zon en beïnvloedt de omstandigheden van onze ruimteomgeving. Het brengt aanzienlijke uitdagingen en potentiële risico's met zich mee voor talrijke technologische systemen en menselijke activiteiten. De studie en het begrip van ruimteweefenomenen zijn essentieel voor het beschermen van onze infrastructuur, het optimaliseren van satellietoperaties, het waarborgen van de veiligheid van astronauten en het maximaliseren van de voordelen van ruimteverkenning. In deze context komt het gebruik van high performance computing naar voren als een transformerend hulpmiddel met een enorm potentieel voor het bevorderen van onze kennis en voorspellende mogelijkheden op het gebied van ruimteweeronderzoek.

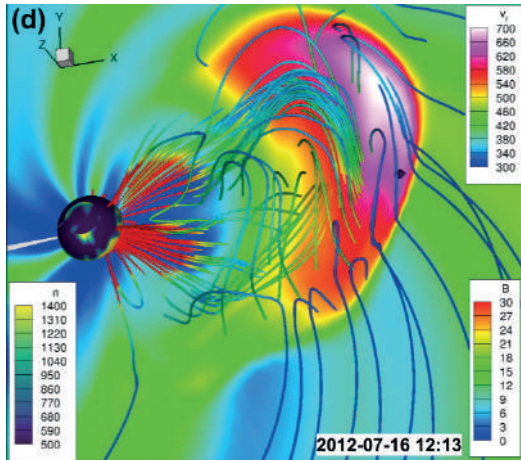
Het belang van HPC voor ruimteweer is meervoudig.

Ongekende rekenkracht. De complexiteit en omvang van ruimteweefenomenen vereisen uitgebreide rekenkracht voor modellering, simulaties en data-analyse. HPC-systemen bieden ongeëvenaarde verwerkingsmogelijkheden, waardoor wetenschappers de ingewikkelde fysica en wiskunde die ten grondslag liggen aan ruimteweefenomenen kunnen aanpakken. De mogelijkheid om enorme hoeveelheden gegevens te verwerken en geavanceerde simulaties uit te voeren stelt HPC-onderzoekers in staat ingewikkelde interacties tussen zonneactiviteit, de magnetosfeer, de ionosfeer en de atmosfeer van de aarde te onderzoeken, waardoor waardevolle inzichten tot stand komen in de fundamentele mechanismen die ruimteweergebeurtenissen aandrijven.

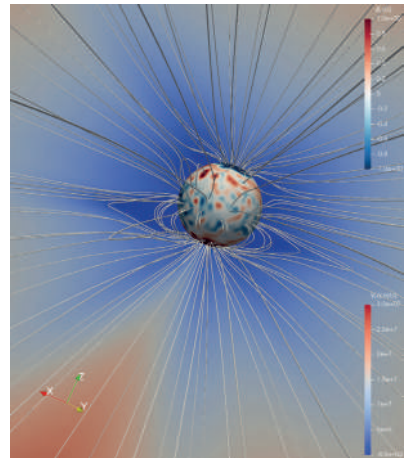
Verbeterde voorspellingen. Nauwkeurige voorspellingen en tijdige waarschuwingen zijn van cruciaal belang voor het verzachten van de potentiële impact van ruimteweer op verschillende sectoren, waaronder telecommunicatie, elektriciteitsnetwerken, luchtvaart en satellietnavigatie. HPC stelt onderzoekers in staat geavanceerde modellen te ontwikkelen die de dynamische aard van het ruimteweer kunnen vastleggen en de effecten ervan met grotere precisie kunnen voorspellen. Door enorm veel observatiegegevens te assimileren en complexe simulaties uit te voeren kunnen HPC-systemen betrouwbare voorspellingen genereren, waardoor belanghebbenden proactieve maatregelen kunnen nemen om kritieke infrastructuur te beschermen, operaties te optimaliseren en de veiligheid van ruimtemissies te garanderen.

Realtime gegevensverwerking en -analyse. Ruimteweergebeurtenissen kunnen zich snel voordoen, waardoor realtime monitoring, gegevensverwerking en analyse nodig zijn om effectief te kunnen reageren. HPC-platformen maken de efficiënte verwerking mogelijk van grote hoeveelheden realtime ruimteweergegevens die worden verzameld door observatoria op de grond, satellieten en andere sensoren. Door gebruik te maken

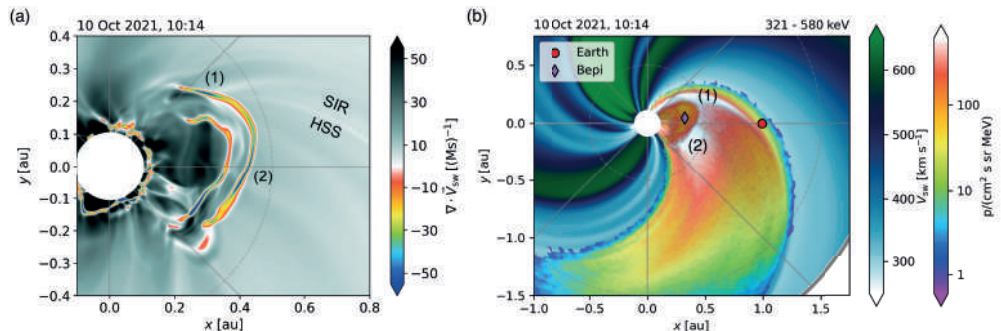
van geavanceerde algoritmen en parallelle computertechnieken vergemakkelijkt HPC de snelle extractie van waardevolle informatie uit enorme datasets, waardoor wetenschappers en besluitvormers de zich ontwikkelende weersomstandigheden in de ruimte kunnen beoordelen en snel een weloverwogen oordeel kunnen vormen.



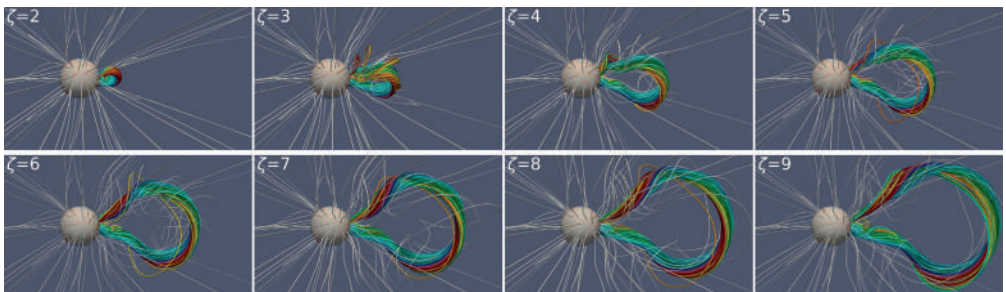
Figuur 3.1: Snapshot van de 3D visualisatie van de EUHFORIA simulatie van de CME die uitbarstte op 12 juli 2012 [5].



Figuur 3.2: Reconstructie van de zonnecorona op 1 augustus 2008 voor het GONG synoptische magnetogram met het globale zonnecoronamodel COCONUT [6].



Figuur 3.3: (a) Snapshot van de divergentie van de gemodelleerde zonnwindsnelheid in het equatoriale vlak, en (b) van de gemodelleerde zonnwindsnelheid en protonintensiteiten op 10 oktober 2021 om 10:14 UT [7].



Figuur 3.4: Visualisatie van alle fluxtubes gemodelleerd in de zonnewind, gereconstrueerd a.d.h.v. een magnetogram tijdens de zonneactiviteit op de fysische tijd $t = 1:2$ h [8].

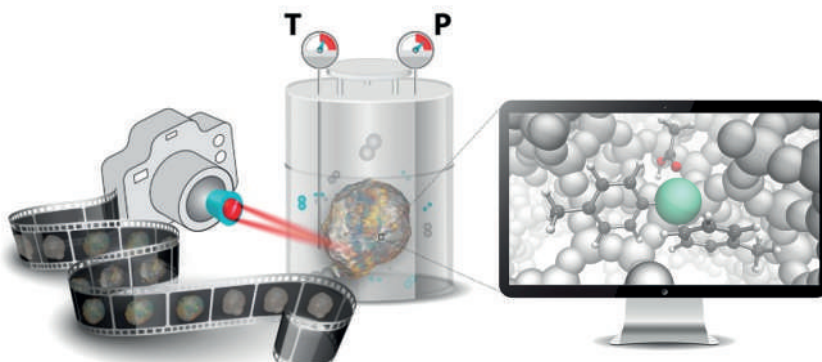
Bevordering van fundamenteel inzicht. HPC helpt niet alleen bij het voorspellen van het ruimteweer, maar vergemakkelijkt ook doorbraken in ons fundamentele begrip van de ruimtefysica. Complexe simulaties uitgevoerd op HPC-systemen zijn nuttig bij het ontrafelen van de ingewikkelde wisselwerking tussen magnetische velden, plasmadynamica en energieoverdrachtsmechanismen, en ze werpen licht op de onderliggende processen die ruimteweerfenomenen aansturen. De mogelijkheid om deze verschijnselen met hoge resolutie te simuleren en te visualiseren stelt wetenschappers in staat om hypothesen te testen, verschillende scenario's te verkennen en diepere inzichten te verwerven in de fysica van ruimteweer. Dat leidt tot de ontwikkeling van meer nauwkeurige modellen en verbeterde voorspellingsmogelijkheden.

De integratie van high performance computing in ruimteweeronderzoek zorgt voor een paradigmaverschuiving die een revolutie teweegbrengt in ons vermogen om het gedrag van dit dynamische systeem te begrijpen en te voorspellen. **Met ongekende rekenkracht, verbeterde voorspellende mogelijkheden, realtime gegevensverwerking en samenwerkingsmogelijkheden stelt HPC wetenschappers en belanghebbenden in staat om aan de uitdagingen van het ruimteweer het hoofd te bieden, waardoor de veiligheid en de betrouwbaarheid van onze technologische infrastructuur worden gewaarborgd en het volledige potentieel van ruimteverkenning wordt ontsloten.** Het omarmen van en investeren in high performance computing zijn beide cruciaal voor het verleggen van de grenzen van ons begrip en het effectief beperken van de risico's die met ruimteweerfenomenen gepaard gaan.

3.2 *Moleculair modelleren van functionele nanomaterialen*

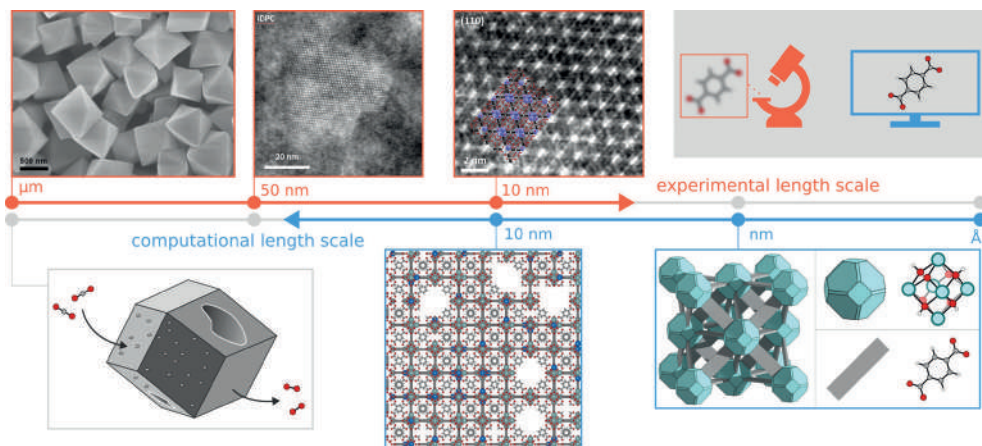
Onze samenleving wordt geconfronteerd met belangrijke uitdagingen, zoals: hoe zorgen voor een betaalbaar en schoon energiesysteem zonder toekomstige generaties in gevaar te brengen, hoe onze beperkte natuurlijke hulpbronnen beschermen, hoe milieuvervuiling tegengaan en de klimaatverandering beperken. Deze uitdagingen vergen innovatieve technologische oplossingen waarin functionele nanomaterialen een centrale rol spelen. Voorbeelden hiervan zijn materialen die CO₂ omzetten in chemicaliën die we in ons dagelijks leven gebruiken of die zonlicht op een efficiënte manier omzetten in nuttige energiedragers.

Gezien hun essentiële rol bij toepassingen bestaat een belangrijke uitdaging uit het vinden van **materialen met de juiste functie voor de juiste toepassing**. De uitdaging is groot, omdat nanomaterialen die in toepassingen worden gebruikt heel complex zijn, waardoor het erg moeilijk is een causaal verband te leggen tussen het ontwerp op nanoschaal en de waargenomen macroscopische functie. Materialen die in toepassingen worden gebruikt, zijn nooit perfect, ze vertonen defecten op verschillende lengteschalen die hun functionaliteit in grote mate beïnvloeden. Defecten kunnen lokaal zijn, maar ze kunnen zich ook uitstrekken tot tientallen nanometers of zelfs tot de mesoschaal [9]. Bovendien is het gedrag van het materiaal kritisch afhankelijk van de omstandigheden waarin het zijn werk doet. Een iets andere temperatuur, druk of toevoeging van water kan een grote invloed hebben op hun functie. Opvallende voorbeelden zijn te vinden in de katalyse, waar katalysatoren volledig inactief kunnen worden of een compleet andere productdistributie kunnen vertonen, afhankelijk van de werkingscondities. In die zin worden katalysatoren soms vergeleken met enzymen die een aan-uitgedrag vertonen.



Figuur 3.5: Experimenten en simulaties komen samen. Gebaseerd op [10] met toestemming van *Frontiers*, copyright 2021. Simulatie van vormselectieve C-H-activatie van aromatische biarylvverbindingen gebruikmakend van moleculair palladium in zeolieten. Onderzoek gepubliceerd in *Nature Catalysis* [11].

Moleculaire modellering waarin men start vanuit de atomaire schaal heeft het potentieel dat het de **ontdekkingsketen van materialen drastisch verkort**, omdat het idealiter kan voorspellen hoe materialen op moleculaire schaal moeten worden aangepast om het gewenste macroscopische functionele gedrag te verkrijgen. Een dergelijke ambitieuze vraagstelling vereist een modelbenadering die in staat is om de materialen zo goed mogelijk na te bootsen als hun opstelling in realistische experimenten. In de laatste decennia zijn modelleringstools drastisch geëvolueerd van een verklarend hulpmiddel voor experimentele observaties naar voorspellende modellering, in nauwe synergie met experimentele groepen. Met de huidige technieken kunnen we fasetransformaties van flexibele materialen die gebruikt worden voor gasopslag, met klassieke krachtvelden simuleren, waarbij het dynamisch gedrag van een miljoen aantal atomen wordt gevolgd. Zo'n groot aantal atomen is nodig als we een echt kristaldeeltje willen simuleren met afmetingen die variëren van tientallen nanometers tot de microschaal. Dankzij de beschikbaarheid van zeer krachtige computers en zeer geavanceerde methoden is het recent mogelijk geworden om een katalytische reactie on the fly te simuleren in de poriën van een zeoliet, in aanwezigheid van water en met behulp van kwantummechanische methoden. Dergelijke simulaties waren een tiental jaar geleden nog ondenkbaar. Voor toepassingen waarin kwantummechanische accuraatheid vereist is, is vandaag de dag het aantal atomen dat gesimuleerd kan worden nog steeds beperkt tot ongeveer duizend. Dit is een grote vooruitgang ten opzichte van een paar jaar geleden, maar het is nog steeds te beperkt om theorie en experiment direct met elkaar te kunnen vergelijken. De enorme evolutie in het gebied van de moleculaire modellering was mogelijk dankzij de systematische toename van krachtiger computerinfrastructuur, in combinatie met de ontwikkeling van zeer innovatieve theoretische en numerieke algoritmen. De genoemde voorbeelden tonen wat er bereikt kan worden met veel computerkracht, massieve parallelisatie, het gebruik van GPU's, speciale software- en hardware-architecturen en (vooral) innovatieve methoden en algoritmen.



Figuur 3.6: Bovenaan, van links naar rechts experimentele beelden van UiO-66: Scanning Electron Microscopy (SEM) beeld overgenomen uit ACS Catalysis [12] met toestemming van ACS publications, copyright 2018; low dose Scanning Transmission Electron Microscopy (STEM) beeld dat de roosterstructuur weergeeft; low dose STEM-beeld dat de linkers weergeeft. Beide afbeeldingen werden gemaakt door de EMAT-groep van UAntwerpen. Onderaan, van rechts naar links: organische en anorganische bouwblokken van UiO-66 en zijn roosterstructuur; willekeurig gegenereerde defecten in een structuur van ca. 25.000 atomen (eerste resultaten vanuit het CMM van UGent); schematische weergave van een MOF-kristaldeeltje met puntdefecten en mesoporïën, waarlangs gastmoleculen kunnen binnendringen.

Ondanks deze vooruitgang bestaat er nog steeds een **enorme kloof tussen de lengte- en tijdschalen** van de experimentele waarnemingen en de systemen die we op nanoschaal kunnen simuleren, zelfs met de krachtigste HPC-infrastructuur die tegenwoordig beschikbaar is. Momenteel betreden we het tijdperk van exaschaal rekenen met supercomputers die 10^{18} bewerkingen per seconde kunnen uitvoeren [13]. De eerste exaschaal computers zijn op verschillende continenten al geïnstalleerd. Binnen Europa verkennen onderzoekers volop de mogelijkheden van pan-Europese pre-exaschaal supercomputers zoals LUMI, die vanaf de herfst van 2021 geleidelijk beschikbaar is gekomen. In 2024 beginnen ze met de bouw van de eerste exaschaal supercomputer JUPITER. De beschikbaarheid van een dergelijke krachtige computerinfrastructuur biedt grote mogelijkheden op het gebied van materiaalkunde, maar brengt ook grote uitdagingen met zich mee. Om deze zeer krachtige computers te integreren in het ecosysteem van materiaalmodellering zullen grote programmeer- en codeerinspanningen nodig zijn om codes aan te passen of nieuwe te ontwikkelen en zo de kracht van deze HPC-systemen efficiënt te benutten. In de VS is in sommige nationale laboratoria al flink geïnvesteerd in het hercoderen en herprogrammeren van software voor materialen, zodat die toepasbaar is op de nieuwe exaschaal machines.

Dankzij grote investeringen in krachtige HPC-systemen en de ontwikkeling daarvan zullen de innovaties op het gebied van materiaalkunde nieuwe hoogten bereiken. Samen met de ontwikkeling van nieuwe methodes kan modellering meer een voorspellend hulpmiddel worden, waardoor het aantal dure laboratoriumexperimenten sterk gereduceerd kan worden. Om dit mogelijk te maken moet de **kloof tussen experimentele waarnemingen en modellering** verder worden verkleind. Een belangrijk ingrediënt in de modelleringsketen is de nauwkeurige voorspelling van de energieën van het nanomateriaal, en dit voor systemen met miljoenen atomen. Met de huidige methoden, die gebaseerd zijn op density functional theory (DFT), zijn dergelijke modelexperimenten zeker niet mogelijk, zelfs niet met de beschikbaarheid van de krachtigste HPC-systemen. DFT

bracht aan het eind van de twintigste eeuw een revolutie teweeg op het gebied van chemie en materiaalmodellering door kwantummechanische simulaties van systemen met een steeds grotere omvang mogelijk te maken, met een veel grotere nauwkeurigheid in vergelijking met golf functie gebaseerde methoden. De revolutie die DFT teweegbracht op het gebied van computationele chemie was enorm en leidde in 1998 tot de Nobelprijs voor Scheikunde voor Walter Kohn "for his development of the density functional theory" en John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry" [14]. Ondanks deze successen lopen we momenteel tegen de grenzen van DFT aan om verder te kunnen opschalen naar langere lengte- en tijdschalen. Met DFT kunnen we lengteschalen in de orde van nanometers en tijdschalen bij moleculaire dynamica-simulaties in de orde van honderden picoseconden bereiken. Momenteel voltrekt zich een nieuwe revolutie binnen het gebied van de computationele materiaalkunde door de opgang van machine learning (ML) technieken. In plaats van de Schrödingervergelijking systematisch op te lossen wordt een numerieke potentiaal, in vaktermen machine learning potentials (MLP), getraind op basis van trainingdata, waarvoor het kwantummechanisch systeem wel accuraat werd opgelost. Machine learning potentials maken zeer snel hun intrede in het gebied van de nanogestructureerde materialen en bieden de mogelijkheid om de haalbare lengte- en tijdschalen substantieel uit te breiden met behoud van kwantumnauwkeurigheid. Er wordt verwacht dat we binnen afzienbare tijd in staat zullen zijn om de kloof tussen theorie en experiment effectief te overbruggen.

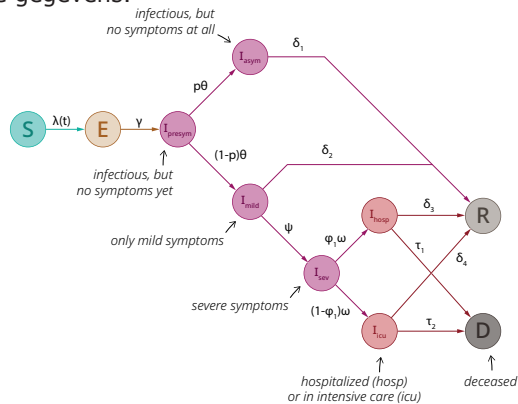
Om het volledige potentieel van deze methode te benutten moet een **efficiënte heterogene computeropstelling** worden gerealiseerd met een optimaal gebruik van klassieke (CPU) en grafische (GPU) processoren voor specifieke taken in de materiaalmodelleringketen. Er zal een enorme hoeveelheid gegevens worden gegenereerd, waarvan het beheer en de efficiënte exploitatie in geavanceerde AI-modellen ook grote uitdagingen zullen vormen.

Om verdere vooruitgang te boeken op het gebied van functionele nanomaterialen en het nastreven van een voorspellende modelleringsketen is in ieder geval een **multidisciplinaire aanpak nodig**, waarbij ideeën uit verschillende onderzoeksgebieden samenkomen, zoals de fysica, computerwetenschappen en chemie. **De beschikbaarheid van krachtige HPC-systemen en goed opgeleide computerwetenschappers om deze complexe infrastructuur en hun software te beheren is een must om toekomstige innovaties in de zoektocht naar nieuwe materialen te ontsluiten.**

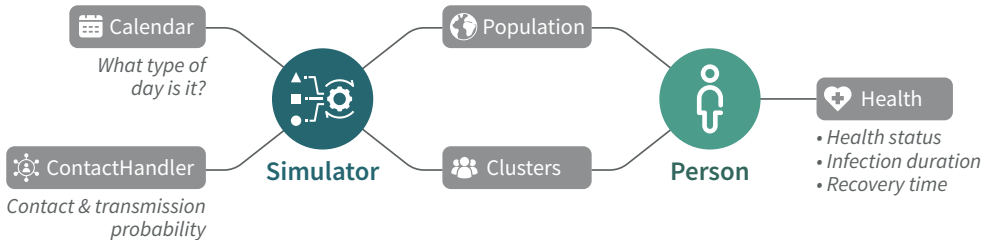
3.3 *Besmettelijke ziekten*

Besmettelijke ziekten hebben een aanzienlijke impact op de volksgezondheid en de menselijke samenleving. De COVID-19-pandemie illustreerde de omvang van de maatschappelijke gevolgen van wereldwijde uitbraken van besmettelijke ziekten. Het beheersen van toekomstige epidemische noodsituaties en het verminderen van hun economische en sociale last zullen nog uitdagender worden door maatschappelijke trends, waaronder de toenemende en dichtbevolkte verstedelijking, de verhoogde lokale en wereldwijde mobiliteit, een overwegend oudere en immuun-gecompromitteerde bevolking en (her)opkomende pathogenen als gevolg van klimaatverandering. Deze trends zullen naar verwachting in de toekomst voortduren.

Computationale modellen spelen een cruciale rol in onze inspanningen om de **verspreiding van besmettelijke ziekten te begrijpen, beheren en beperken**. Ze bieden een krachtig hulpmiddel om de mechanismen waarmee ziekten zich verspreiden te bestuderen, een gevarieerde reeks interventies te evalueren die gericht zijn op het voorkomen en beheersen van pandemieën en de impact van individueel gedrag en overheidsbeleid op de beheersing van besmettelijke ziekten te onderzoeken. Bovendien worden computationele modellen steeds belangrijker vanwege ethische overwegingen en het ontbreken van uitgebreide gegevens.



Figuur 3.7: Een SEIR-model voor SARS-CoV-2: infectie met SARS-CoV-2 verschuift een vatbare (S) persoon naar een blootgestelde (E) status. Zodra mensen vervolgens zelf besmettelijk worden, behoren ze tot een presymptomatische categorie (I_{presym}). Zowel E als I_{presym} omvatten de incubatieperiode waartussen een persoon al geïnfecteerd is, maar (nog) geen symptomen vertoont. Sommigen blijven asymptomatisch (I_{asym}). Anderen ontwikkelen milde (I_{mild}) of ernstige (I_{sev}) symptomen [15].



Figuur 3.8: Een visualisatie van het open source individu-gebaseerde model STRIDE om de verspreiding van het griepvirus in te schatten. Centraal in het model staat het individu, in het diagram weergegeven als Person, met een bepaalde leeftijd en gezondheidsstatus. Elk individu maakt deel uit van een aantal Clusters: een huishouden, een school en/of werkplek. Elk cluster beschrijft een groep waarvan de leden elkaar volgens een bepaalde leeftijdsafhankelijke frequentie ontmoeten en daardoor een bepaalde kans hebben om elkaar te besmetten [15].

Traditioneel waren modellen van besmettelijke ziekten voornamelijk theoretisch van aard. De beschikbaarheid van gegevens en de toegang tot high performance computing hebben ter zake echter een nieuw tijdperk ingeluid. Onderzoekers wenden zich nu tot grote datasets en grootschalige en rekenintensieve modellen om beleidsmakers te ondersteunen tijdens epidemische noodsituaties. Hiervoor hebben we veel rekenbronnen nodig. HPC staat aan het front van deze paradigmaverschuiving. Belangrijke vooruitgang in het modelleren van besmettelijke ziekten via HPC omvat de volgende elementen.

Parallel computing. High performance computing stelt onderzoekers in staat om rekening te houden met de inherente stochastische aard bij het overwegen van talrijke interventiestrategieën tegelijkertijd. Deze mogelijkheid is cruciaal om de complexe dynamiek van de ziekteverspreiding te begrijpen.

GPU computing. Grafische processoren hebben de modellering van besmettelijke ziekten nog verder gerevolutioneerd door de schaal van parallelisatie te vergroten en wetenschappers in staat te stellen enkele van de vereenvoudigende aannames los te laten die in meer klassieke wiskundige modellen zijn gemaakt. Deze verbetering leidt tot meer nauwkeurig modelleren.

Gekoppelde modellen. Modellering van besmettelijke ziekten beperkt zich niet langer tot epidemiologische factoren. Het integreert nu verschillende modelleringskaders, waaronder demografische microsimulatiemodellen, klimaatmodellen, mobiliteitsmodellen en immunologische modellen van de gastheer zelf. High performance computing ondersteunt de integratie van nieuwe gegevensbronnen, zoals genomische en mobiliteitsgegevens, waardoor de modellen uitgebreider worden en op gegevens gebaseerd zijn.

Deze vooruitgang is uitdagend vanwege de rekenkundige complexiteit en problemen met gegevensbeschikbaarheid. Desalniettemin is HPC een veelbelovende weg, waardoor de ontwikkeling van meer uitgebreide modellen voor de overdracht van besmettelijke ziekten mogelijk is. Door het gebruik van deze modellen kan men studies ontwerpen die de essentiële gegevens verzamelen om deze modellen beter te informeren.

De nauwkeurigheid van epidemiologische modellen en het vermogen om ze aan gegevens te kalibreren zorgen ervoor dat hun voorspellingen nauw aansluiten bij situaties in de echte wereld, waardoor beleidsmakers goed geïnformeerde beslissingen kunnen nemen.

Bovendien verlegt de toepassing van kunstmatige intelligentie, zoals reinforcement learning, de grenzen van de modellering van besmettelijke ziekten verder, verbetert het besluitvormingsprocessen en stelt het ons in staat om effectief te reageren op uitbraken.

HPC is van essentieel belang voor de modellering van besmettelijke ziekten, vooral in het licht van maatschappelijke trends en uitdagingen. Door de voortdurende vooruitgang in dit vakgebied zijn we beter in staat om aan de enorme dreiging van toekomstige pandemieën het hoofd te bieden.

3.4 *Geneesmiddelenonderzoek*

HPC heeft zich de jongste jaren ontpopt als een transformerende kracht op het gebied van computationeel geneesmiddelenontwerp en moleculaire dynamica. Door geavanceerde rekenmethodes te combineren met de enorme rekenkracht van supercomputers kunnen wetenschappers tegenwoordig de fijne kneepjes van moleculaire interacties tussen eiwitten en geneesmiddelen met ongekende precisie ontrafelen.

In de zoektocht naar nieuwe geneesmiddelen vereist de complexe aard van biologische systemen een complementaire mix van experimentele en computationele benaderingen. HPC stelt wetenschappers in staat om het moleculaire gedrag op atomair niveau

te simuleren. Moleculaire dynamicasimulaties, aangedreven door supercomputers, zijn een atomaire lens in de beweging, interacties en de structurele aspecten van moleculen. Dit vermogen is van vitaal belang bij het begrijpen van het steeds meer uitdagende landschap van biologische macromoleculen, zoals eiwitten en nucleïnezuren, die de kern vormen van de ontwikkeling van medicijnen.

Supercomputers spelen een onmiskenbare rol bij het ontcijferen van medicijn/receptor-interacties, het voorspellen van bindingsaffiniteiten en het beoordelen van de stabiliteit van potentiële kandidaat-geneesmiddelen. Deze simulaties leiden niet alleen tot het ontwerp van innovatieve verbindingen, maar vergemakkelijken ook de optimalisatie van bestaande medicijnen, waardoor bijwerkingen worden verminderd en de werkzaamheid wordt verbeterd. **De efficiëntie en de snelheid van supercomputertoepassingen in deze simulaties betekenen een paradigmaverschuiving, waarbij de benodigde tijd en middelen aanzienlijk worden gereduceerd in vergelijking met traditionele experimentele methodologieën.**

Bovendien spelen supercomputers een belangrijke rol op het gebied van virtuele screening, waardoor enorme databanken met chemische verbindingen computationeel kunnen worden doorzocht om potentiële kandidaat-geneesmiddelen te identificeren. Dit screeningsproces met een hoge doorvoer versnelt de identificatie van veelbelovende verbindingen aanzienlijk en biedt een gestroomlijnde en automatiseerbare route in de complexe doolhof van de ontdekking van medicijnen.

De behoefte aan supercomputers op het gebied van computationeel *drug design* en moleculaire dynamica wordt gedreven door de inherente complexiteit van biologische systemen en de ingewikkelde aard van moleculaire interacties. Er zijn een aantal belangrijke redenen waarom superrekenkracht cruciaal is.

Simulaties op atomair niveau. Biologische processen vinden plaats op atomair en moleculair niveau. Supercomputers stellen onderzoekers in staat om simulaties uit te voeren die deze interacties met ongekende resoluties modelleren. Inzien hoe atomen en moleculen bewegen en op elkaar inwerken is essentieel om het gedrag van biologische macromoleculen, zoals proteïnen en nucleïnezuren, te begrijpen.



Figuur 3.9: Supercomputers worden gebruikt om de interactie van geneesmiddelen en hun eiwitargets te berekenen. Door de dynamiek van het ligand na te bootsen krijgen onderzoekers een gedetailleerd inzicht in de moleculaire processen die plaatsvinden wanneer het ligand zich bindt aan het eiwit.

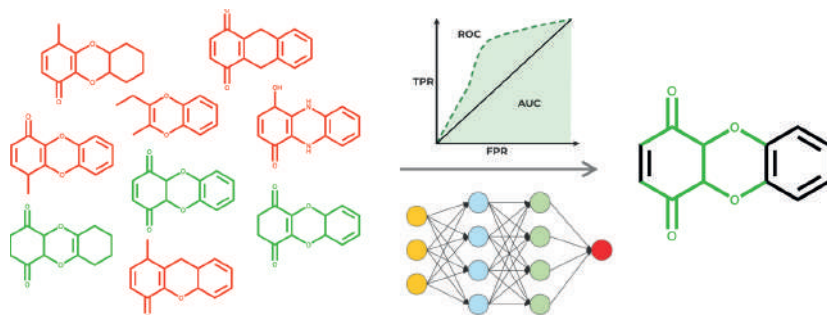
Moleculaire dynamicsimulaties. Supercomputers zijn essentieel voor het uitvoeren van uitgebreide moleculaire dynamicsimulaties. Daarin worden de bewegingen van atomen en moleculen in functie van de tijd gevolgd, wat inzicht geeft in het dynamische gedrag van biologische structuren. Supercomputers maken langere en meer nauwkeurigere simulaties mogelijk, waarin de subtiele veranderingen die optreden tijdens complexe processen worden vastgelegd.

Virtuele screening op grote schaal. Bij het zoeken naar medicijnen worden vaak enorme bibliotheken van chemische verbindingen gescreend om potentiële kandidaten voor verder onderzoek te identificeren. Supercomputers blinken uit in high throughput virtuele screening, waardoor een groot aantal verbindingen snel kan worden geëvalueerd. Deze computerefficiëntie versnelt de identificatie van veelbelovende kandidaat-geneesmiddelen en verkort de tijd die nodig is voor de eerste screening aanzienlijk.

Precisie in interacties tussen geneesmiddelen en doelwitten. Supercomputerkracht is essentieel voor het nauwkeurig kunnen voorspellen en bestuderen van interacties tussen geneesmiddelen en doelwitten met behulp van vrije energie-perturbatieberekeningen. Door de binding van potentiële kandidaat-geneesmiddelen aan specifieke biologische doeleiwitten te simuleren kunnen onderzoekers de bindingsaffiniteit beoordelen, de stabiliteit van complexen voorspellen en verbindingen optimaliseren voor een verbeterde werkzaamheid. Dit precisieniveau is niet haalbaar zonder de rekencapaciteit van supercomputers.

Kwantummechanische berekeningen. In bepaalde scenario's voor het ontwerpen van medicijnen, vooral wanneer het gaat om kleine moleculen die een covalente interactie maken met het eiwit, schieten traditionele rekenmethoden tekort. Supercomputers zijn cruciaal voor het uitvoeren van kwantummechanische / moleculair mechanische (QM/MM) berekeningen, waardoor onderzoekers zich kunnen verdiepen in de kwantumeigenschappen van moleculen en inzicht kunnen krijgen in elektronische structuren, de vorming van chemische bindingen en energetische overgangstoestanden.

Integratie van gegevensanalyse en machinaal leren. Supercomputers vergemakkelijken de analyse van enorme datasets die afkomstig zijn van experimentele en computationele onderzoeken. De integratie met algoritmen voor machinaal leren maakt het mogelijk om patronen, trends en potentiële correlaties in deze datasets te identificeren. Deze datagestuurde aanpak verbetert de efficiëntie van processen voor het ontdekken van medicijnen door onderzoekers toe te leiden naar meer veelbelovende wegen.



Figuur 3.10: De eigenschappen van biljoenen moleculen kunnen door supercomputers snel worden geëvalueerd en toegepast bij de zoektocht naar nieuwe medicijnen. De wisselwerking tussen chemo-informatica en deep learning is hierbij essentieel.

Als we naar de toekomst kijken, belooft de evolutie van supercomputers in computationeel geneesmiddelenontwerp en moleculaire dynamica nieuwe hoogten te bereiken. Een prominente ontwikkeling betreft de integratie van algoritmen voor kunstmatige intelligentie en machinaal leren met supercomputermogelijkheden. AI-gestuurde benaderingen bieden een ongeëvenaarde efficiëntie bij het analyseren van enorme datasets, het identificeren van subtiele patronen in moleculaire interacties en het met een verhoogde nauwkeurigheid voorspellen van potentiële kandidaat-geneesmiddelen.

Een ander transformatief traject is het opkomende gebied van quantum computing. Hoewel kwantumcomputers nog in de kinderschoenen staan, zou hun potentieel om complexe problemen exponentieel sneller op te lossen dan klassieke computers, een revolutie teweeg kunnen brengen in moleculaire simulaties. Kwantumcomputers kunnen nieuwe dimensies openen in het begrijpen van moleculaire interacties, waardoor simulaties met een ongekende nauwkeurigheid en complexiteit mogelijk worden. Samenwerking tussen onderzoekers en computerwetenschappers is cruciaal om het volledige potentieel van supercomputers voor het ontwerpen van medicijnen te benutten. Interdisciplinaire samenwerking, waardoor expertise in biologie, chemie en computerwetenschappen wordt gecombineerd, zal leiden tot innovatieve methodologieën en tools die de rekenkracht van supercomputers benutten voor een meer effectieve ontdekking van medicijnen.

De conclusie is dat het belang van supercomputers op het gebied van computationeel geneesmiddelenontwerp en moleculaire dynamica niet kan worden overschat. **De huidige toepassingen hebben de ontdekking van medicijnen al aanzienlijk versneld. De integratie van opkomende technologieën belooft in de toekomst een nog grotere impact te hebben.** Naarmate supercomputing zich verder ontwikkelt, kunnen onderzoekers een grotere nauwkeurigheid, efficiëntie en nieuwe inzichten in de complexe wereld van moleculaire interacties verwachten, wat uiteindelijk de weg vrijmaakt voor de ontwikkeling van veiligere en meer effectieve geneesmiddelen. De symbiotische relatie tussen rekenkracht en wetenschappelijk vernuft zal het landschap van de ontdekking van medicijnen veranderen op tot voor kort ondenkbaar geachte manieren.

3.5 *Stromingsmodellen*

De evolutie in high performance computing (HPC) heeft een aanzienlijke invloed gehad op de ontwikkeling van computational fluid dynamics (CFD). CFD heeft een brede waaier aan toepassingen, van aerodynamica in de lucht- en ruimtevaart, de automobielsector en energietransformatie, tot weermodellering en simulaties van oliebronnen. De vraag naar nauwkeurige en gedetailleerde simulaties, in combinatie met de vooruitgang in HPC, heeft de ontwikkeling van CFD door de jaren heen ondersteund.

Aan het begin van deze eeuw deed cluster computing zijn intrede in CFD. Deze architectuur bood schaalbaarheid en flexibiliteit, waardoor organisaties HPC-systemen konden bouwen die konden worden afgestemd op de specifieke behoeften van CFD-simulaties. Supercomputers die in staat zijn biljarden berekeningen per seconde (petaflops) uit te voeren, kwamen beschikbaar. Dit maakte simulaties mogelijk met een ongekend niveau van gedetailleerdheid en nauwkeurigheid, met name in sectoren zoals de lucht- en ruimtevaart, waarin complexe vloeistofdynamica een cruciale rol speelt. Nu worden ook

GPU's meer en meer gebruikt voor algemene berekeningen. Dit zorgt voor een enorme toename aan rekenkracht en snelheid voor bepaalde algoritmen en simulaties, zoals die in CFD.

De beschikbaarheid van gevorderde HPC heeft niet alleen gezorgd voor meer nauwkeurige simulaties, maar heeft onderzoekers ook in staat gesteld om grotere en meer complexe problemen aan te pakken. Dat is essentieel voor het ontwikkelen van oplossingen voor technische uitdagingen uit de echte wereld. Naarmate de technologie blijft evolueren, zal de rol van HPC in de toekomst van CFD nog belangrijker worden.

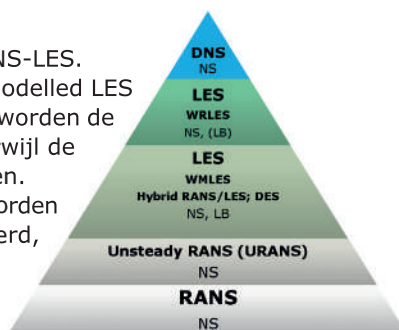
Bij numerieke simulaties van stroming heeft de belangrijkste uitdaging te maken met turbulentie. Turbulentie is een lokale onstabielheid van de stroming met een stochastisch karakter, waardoor het fenomeen praktisch onvoorspelbaar wordt. Er is ook turbulentie aanwezig in de overgrote meerderheid van stromingen die we in de natuur of in de technologie terugvinden.

In de courante CFD-praktijk wordt turbulentie uitgemiddeld en de voorspellingen van het Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) model zijn in relatief korte rekentijden berekenbaar met de huidige computerinfrastructuur. Maar de turbulentiemodellen gekoppeld aan de Navier-Stokes vergelijkingen zijn maar beperkt nauwkeurig en de limieten worden met de dag problematischer voor een gevorderd ontwerp in bepaalde industriële componenten zoals vliegtuigen en vliegtuigmotoren, auto's, gas- en windturbines of klimaatvoorspellingen en andere. Geen enkel RANS-model is in staat om afgescheiden stromingen met de vereiste nauwkeurigheid te verwerken.

Om een hoger niveau aan nauwkeurigheid en betrouwbaarheid van de CFD-simulaties te bereiken is het essentieel de turbulente fluctuaties rechtstreeks te berekenen in ruimte en tijd. Afhankelijk van het Reynoldsgetal zijn talrijke opties beschikbaar, die wel allemaal aanzienlijk meer HPC-resources vereisen dan RANS. We overlopen ze bottom-up, naargelang van de vereiste rekenkracht.

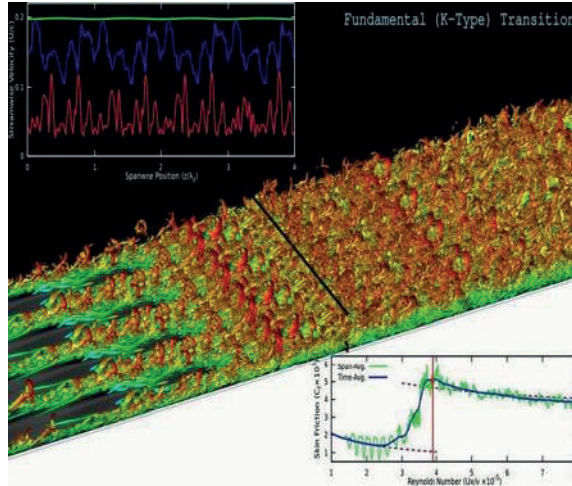
De belangrijkste modellen zijn:

- Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS).
- Detached Eddy Simulation (DES) en hybride RANS-LES.
- Large Eddy Simulations (LES), waaronder Wall Modelled LES (WMLES) en Wall Resolved LES (WRLES). In LES worden de grote-schaal-turbulenties direct gesimuleerd, terwijl de kleinere-schaal-turbulenties gemodelleerd worden.
- Direct Numerical Simulations (DNS). Met DNS worden alle schalen van turbulentie rechtstreeks gesimuleerd, zonder enige vorm van turbulentiemodellering. Hierdoor kunnen de kleinste details van de stroming worden vastgelegd.

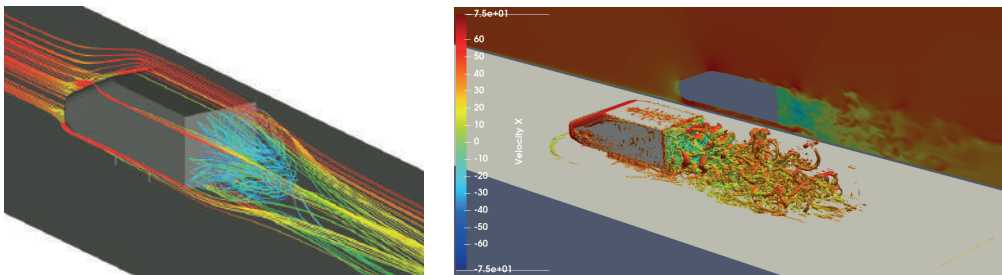


Kenmerkend voor LES is dat de turbulentie wordt gefilterd om alleen de grote wervels te simuleren. Kleine wervels worden gemodelleerd door subroostermodellen. LES vereist een grove resolutie van het rooster voor de directe simulatie van grote wervels, en een fijne resolutie voor de modellering van kleinere turbulenties. Deze methode wordt vaak toegepast in technische en ingenieursgerichte simulaties, vooral waar turbulente stromingen belangrijk zijn, zoals atmosferische stromingen, verbrandingskamers en turbulentie in pijpleidingen.

LES is minder rekenintensief dan DNS, omdat het modelleren van kleine-schaal-turbulenties minder nauwkeurig is dan het direct simuleren ervan. In DNS wordt geen gebruik gemaakt van subroostermodellen: alle turbulentieschalen worden direct opgelost. DNS vereist een zeer fijne roosterresolutie om turbulentie op alle schalen vast te leggen, wat leidt tot een hoge rekenintensiteit. Hiervoor is het gebruik van exaschaal supercomputers vereist. DNS wordt vaak gebruikt in fundamenteel wetenschappelijk onderzoek en voor het begrijpen van de basisprincipes van turbulentie. Het biedt de hoogst mogelijke nauwkeurigheid in turbulentiesimulaties, maar vereist met dat doel een zeer dure rekeninfrastructuur.



Figuur 3.11: WRLES-simulatie (links) (bron: Cadence Design Systems Belgium) en snapshot van DNS-simulatie op een vlakke plaat, inclusief laminair-turbulente transitie (rechts) [16].



Figuur 3.12: RANS en WRLES: twee visies van dezelfde realiteit (bron: Cadence Design Systems Belgium).

Wat zijn de HPC-vereisten voor de meest accurate WRLES/DNS?

Talrijke analyses, waaronder [17], [18] en diverse presentaties van Spalart en Strelets, werden gepubliceerd over de roosterpuntvereisten voor WRLES en DNS. Deze schattingen zijn gebaseerd op aannames over het aantal roosterpunten per kubus en schattingen van tijdstappen die uitgaan van expliciete tijdtintegratie.

Volgens Spalart en Strelets [19] zouden ongeveer 6 miljoen kubussen nodig zijn voor een vliegtuigvleugel. Op een vleugel met hoge lift en met drie aanvalsboorden loopt het op tot 20 miljoen kubussen. Uitgaande van 20^3 vrijheidsgraden per kubus leidt dit tot 160 miljard punten enkel voor de grenslaag, zo'n 10^4 tijdstappen niet meegerekend.

Men ambieert hierbij een resultaat dat nauwkeurig is tot op minstens vier decimalen. De wens is om CFD te revolutioneren door simulaties met een ongekend detailniveau mogelijk te maken, waardoor meer nauwkeurige voorspellingen mogelijk zijn op verschillende wetenschappelijke en technische terreinen.

De conclusie is echter dat zelfs de exaschaal computers niet krachtig genoeg zullen zijn voor DNS-simulaties op een volledige configuratie.

3.6 Windmolenparken

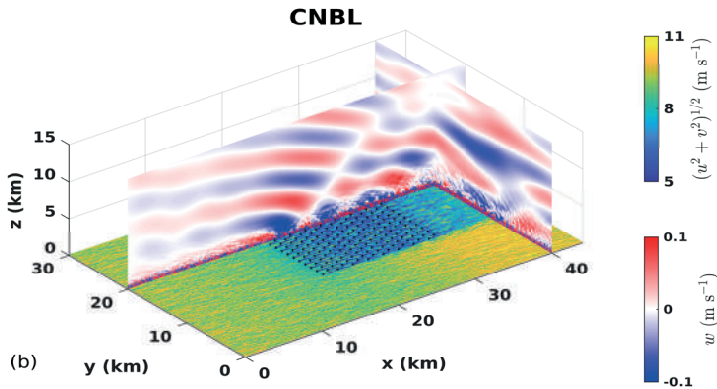
Windenergie speelt een belangrijke rol in het plan van Europa om klimaatneutraal te zijn tegen 2050. Daarbij wordt als doel gesteld om 320 GW aan offshore windparken te installeren, een tienvoud van het huidige geïnstalleerde vermogen op zee. Terzelfdertijd worden windturbines steeds groter: de meest recente prototypes hebben een capaciteit van 16 MW, met een rotordiameter van 260 m en een tiphoogte van ongeveer 280 m. Deze turbines worden offshore in grote parken samengebracht, met een capaciteit van 1 tot 2 GW. Op deze schaal leidt de **interactie van grote windparken met de atmosfeer** tot grote planningonzekerheid. De fysica van de atmosferische grenslaag en zijn interactie met grote windparken is zeer complex en ook op regionale schaal is er grote onzekerheid rond het toekomstige windklimaat, aangezien het zog van grote windparken zich over een afstand van 50 km stroomafwaarts kan uitstrekken.

Experimenten op een dergelijke schaal en op zee zijn zeer duur en arbeidsintensief. Daar komt bij dat het meten van het windveld niet eenvoudig is en doorgaans beperkt blijft tot puntmetingen. Windparken zelf vergen investeringen van verschillende miljarden euro's met complexe financierings- en verzekeringsmechanismen, zodat experimenten die afwijken van hun routine-uitbating, zoals rond parkcontrole, zeer moeilijk zijn om op te zetten.

In deze context spelen supercomputers een steeds belangrijker rol, door een omgeving te creëren waarin onderzoeksideeën virtueel getest en verbeterd kunnen worden. Daarvoor worden diverse simulaties uitgevoerd: zowel weer- en klimaatsimulaties op regionale schaal, zoals in het Noordzeebekken, als meer gedetailleerde simulaties van de stroming rond de individuele turbines in grote parken tot en met, verder uitvergroot, simulaties van de stroming rondom de turbinebladen en de directe interactie met de structurele belasting van bladen en toren.

Deze HPC-simulaties worden op verschillende manieren ingezet:

1. voor het **ontwikkelen en testen van snellere ontwerpmodellen** van turbines en windmolenparken,
2. voor het **virtueel testen van nieuwe concepten** en ideeën zoals voor parkcontrole,
3. voor het **analyseren, via data-assimilatie**, van uitgebreide en dure meetcampagnedata die uit verschillende bronnen samengebracht worden (SCADA, lidar-metingen...),
4. en voor het ontwikkelen van **nieuwe fysische inzichten** in de interactie van windparken met hun omgeving.



Figuur 3.13: Atmosferische zwaartekrachtgolven geïnduceerd door een windpark in simulaties uitgevoerd op VSC-infrastructuur. Het horizontaal vlak toont de horizontale snelheid op turbinenaafhoogte; verticale vlakken tonen de verticale snelheid. De kleine schijfjes in de figuur staan voor DTU 10 MW turbines [20].

In de toekomst zal het belang van HPC voor windenergie enkel toenemen. Dit zal een belangrijke rol spelen in een innovatie die er in de komende decennia voor moet zorgen dat onze **transitie naar een duurzaam energiesysteem sociaal en economisch draagbaar** blijft, met lage energiekosten en een minimale impact op mens en omgeving.

3.7 Duurzaamheid in de chemische technologie

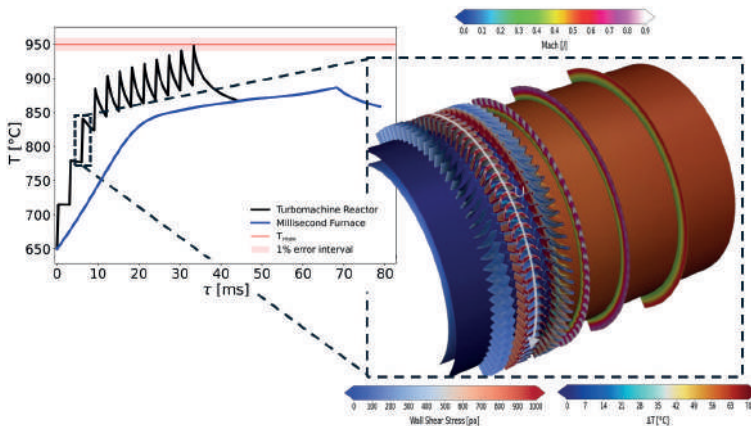
Onze maatschappij staat voor enorme uitdagingen. **Klimaatverandering** vereist een gecoördineerde aanpak en vergt een drastische verandering in hoe we denken en handelen. Het is duidelijk dat onze huidige samenleving een nieuwe economische visie moet ontwikkelen waarin **hernieuwbare energie en circulariteit** gedijen. Hier is een cruciale rol weggelegd voor de (petro)chemische industrie. Zij heeft de sleutel in handen om de basisbouwstenen waarop onze huidige maatschappij gestoeld is op een circulaire en duurzame manier te produceren, door veranderingen aan te brengen in processen en/of grondstoffen. Alleen op die manier kan ervoor gezorgd worden dat onze samenleving tegen 2050 koolstofneutraal wordt.

Alvorens deze chemische industrie daadwerkelijk de drijvende kracht kan worden van een duurzame samenleving, moet zij zelf CO₂-neutraal worden [21]. Op dit moment veroorzaakt de wereldwijde (petro)chemische industrie jaarlijks 1,24 Gton CO₂-uitstoot, meer dan 18% van alle industriële broeikasgasemissies. Ongeveer de helft van dit energieverbruik komt van slechts zeven basischemicaliën. Het herontwerpen van hun productieprocessen kan wereldwijd de CO₂-uitstoot jaarlijks met 680 Mton verminderen, een reductie met meer dan 54% [22]. Ondanks de voordelen aarzelt de industrie om te veranderen vanwege de hoge kosten, langdurige ontwikkelingstijden, geopolitieke onzekerheid en de huidige stand van de technologie.

Om de vooruitgang te sturen en in een ongekend tempo kennis op te bouwen is het gebruik van supercomputers onmisbaar. Zij laten toe om op een kosten- en tijdsefficiënte manier onontgonnen territoria te ontdekken voor het ontwikkelen van nieuwe scheidingprocessen en reactortechnologieën met behulp van CFD-simulaties,

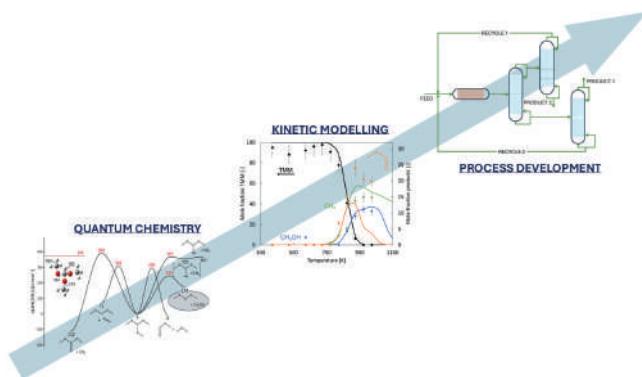
en het chemisch gedrag van hernieuwbare chemicaliën via kwantumchemische berekeningen. Dit kan gecombineerd worden met het gebruik van AI voor het optimaliseren van productieprocessen.

Reactorontwikkelingen. In de zoektocht naar duurzame en efficiënte chemische processen wordt elektrificatie steeds meer erkend als een cruciale strategie. Het gebruik van hernieuwbare stroom als energiebron, in plaats van fossiele brandstoffen, kan de uitstoot van broeikasgassen drastisch verminderen. Door middel van CFD-simulaties kunnen onderzoekers nieuwe reactorontwerpen ontwikkelen die optimaal gebruikmaken van elektrische energie. Bovendien stellen supercomputers onderzoekers in staat om de interacties tussen procesparameters te begrijpen en te optimaliseren, waardoor nieuwe technologieën ontwikkeld worden die aanzienlijk betere prestaties leveren dan wat met de huidige state of the art mogelijk is [23]. Deze stimulans, die alleen mogelijk is door de voortdurende toename van de rekeninfrastructuur, zet de industrie er extra toe aan om deze revolutionaire technologieën in een versneld tempo te onderzoeken en te implementeren.



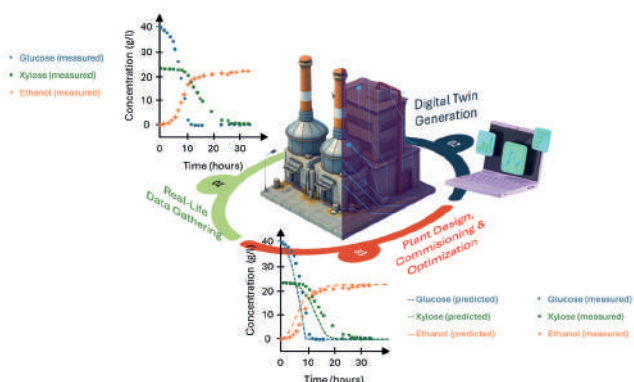
Figuur 3.14: Een revolutionaire, elektrisch aangedreven chemische reactor, geïnspireerd op turbomachines, voor de defossilisatie van de (chemische) procesindustrie, specifiek gericht op de stoomkraakindustrie waarbij de millisecond furnace als de huidige state of the art wordt beschouwd [23]. De draairichting wordt aangegeven met een witte pijl, en de vloeistofstroom gaat van links naar rechts. De ontwikkeling en optimalisatie van dit reactor design waren alleen mogelijk dankzij het gebruik van supercomputers.

Kwantumchemische berekeningen. De overgang naar een circulaire economie legt een grote tekortkoming van de huidige kinetische modellen bloot [24]. De complexiteit van nieuwe grondstoffen maakt dat de beschikbare kinetische modellen voor fossiel gebaseerde grondstoffen met een beperkte hoeveelheid componenten vaak te wensen overlaten op het vlak van nauwkeurigheid. Om deze kloof te dichten moeten computationeel veeleisende kwantumchemische berekeningen uitgevoerd worden. Die zijn essentieel om thermodynamische eigenschappen en reactiesnelheidscoëfficiënten nauwkeurig vast te stellen, wat vervolgens gebruikt kan worden om gedetailleerde kinetische modellen te ontwikkelen. Deze modellen zijn op hun beurt cruciaal voor het ontwikkelen en optimaliseren van chemische processen voor de productie van duurzame chemicaliën (bv. e-methaan, e-methanol) en brandstoffen, zoals biodiesel en oxymethyleenethers [25].



Figuur 3.15: Kwantumchemische voorspellingen worden gebruikt voor de constructie van potentiële energieoppervlakken om nieuwe kinetische modellen te ontwikkelen voor bijvoorbeeld trimethoxymethaan (TMM), een oxymethyleen ether, en om het procesontwerp van deze alternatieve en duurzame brandstof te ondersteunen.

Kunstmatige intelligentie. AI speelt een essentiële rol in de transformatie van de chemische technologie, en wel door complexe relaties te ontrafelen in datasets die zonder de toenemende kracht van supercomputers onmogelijk te analyseren waren. Een voorbeeld hiervan is het voorspellen van moleculaire eigenschappen en het optimaliseren van reacties. Dit draagt bij aan een efficiënter gebruik van alternatieve grondstoffen [26], waardoor traditionele petroleumconversies worden verminderd en de uitstoot van broeikasgassen en watervervuiling afnemen. Met behulp van geavanceerde algoritmen en supercomputers kunnen we sneller innovaties realiseren en processen optimaliseren, waardoor de integratie van kunstmatige intelligentie een multidisciplinaire aanpak biedt en nieuwe onderzoeksmogelijkheden opent. Bovendien kunnen digitale tweelingen worden ingezet om virtuele modellen van chemische processen te creëren, waardoor in realtime inzicht verkregen kan worden in de prestaties en efficiëntie, en we dus op een kostenefficiënte manier verbeteringen kunnen testen voor ze in de praktijk worden geïmplementeerd. Dit maakt van kunstmatige intelligentie niet alleen een essentieel onderdeel van de toekomst van duurzame chemie, maar ook een cruciaal instrument voor het vormgeven van een meer duurzame wereld.



Figuur 3.16: Generatie van digitale tweelingen voor het realtime ontwerp, operatie en procesoptimalisatie van een bio-ethanolinstallatie (gegevens gebruikt uit [24]).

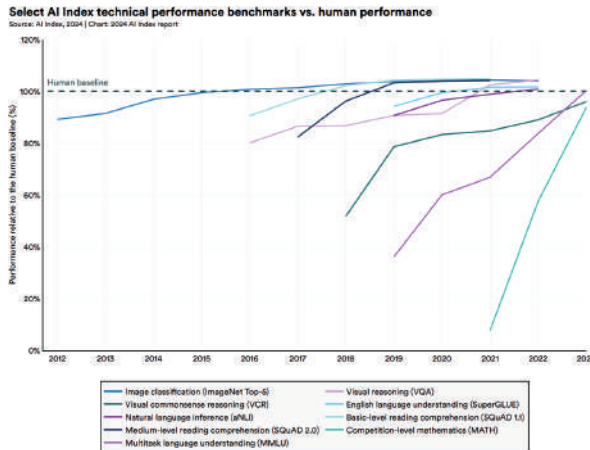
3.8 *Kunstmatige intelligentie*

De toenemende wisselwerking tussen AI en HPC wordt steeds kritischer voor het stimuleren van significante wetenschappelijke vooruitgang. Terwijl een groot deel van het publiek, vooral met de komst van generatieve AI, zich op de commerciële toepassingen richt, ligt het ware potentieel van AI in het vermogen om complexe wetenschappelijke uitdagingen aan te pakken.

Wetenschappelijke vooruitgang en AI. Vandaag de dag stellen AI-technieken domeinexperts in staat om enorme hoeveelheden gegevens te verwerken en te analyseren, waardoor wetenschappelijk onderzoek van gedaante verandert. Vrijwel elk onderzoeksgebied zal AI-algoritmen gebruiken om vragen te beantwoorden die grotendeels ontoegankelijk blijven voor traditionele onderzoeksmethoden: geneesmiddelenontdekking, computervisie en genomics zijn slechts enkele voorbeelden. In 2022 begon AI wetenschappelijke ontdekkingen te bevorderen en in 2023 werden nog meer belangrijke wetenschapsgerelateerde AI-toepassingen gelanceerd: van AlphaDev, dat algoritmisch sorteren efficiënter maakt, tot GNoME, dat het proces van materiaalontdekking vereenvoudigt. In 2023 werden ook belangrijke medische systemen gelanceerd, waaronder EVEscape, dat pandemieën beter kan voorspellen, en AlphaMissense, dat helpt bij AI-gestuurde mutatieclassificatie.

Diepgaande computationele uitdagingen. Het afgelopen decennium werd de opkomst van deep learning (DL) gezien als een flexibel en populair hulpmiddel om een breed scala aan onderzoeksuitdagingen aan te pakken. Veel vergelijkbare modellen zijn sindsdien ontstaan en deze trend lijkt in de nabije toekomst niet te stoppen. Terwijl de grote spelers in de industrie zich richten op de meest lucratieve gebruiksscenario's, belichaamd door generatieve AI [28], richt onderzoek zich op domeinspecifieke modellen, die op maat zijn gemaakt voor gespecialiseerde gebruiksscenario's. Uitlegbare of explainable AI is ook een belangrijk doel in hedendaags onderzoek [29], aangezien DL-modellen soms zwarte dozen worden genoemd, vanwege hun inherente ongeschiktheid tot interpretatie.

Hier komt multimodale AI. Traditioneel bleven AI-systemen beperkt in reikwijdte, met taalmodellen die uitblonden in tekstbegrip maar haperen in beeldverwerking, en vice versa. Recente ontwikkelingen hebben geleid tot de ontwikkeling van sterke multimodale modellen, zoals Gemini van Google en GPT-4 van OpenAI. Deze modellen leggen flexibiliteit aan de dag. Ze zijn in staat om afbeeldingen en tekst te verwerken, en in sommige gevallen zelfs audio.



Figuur 3.17: De evolutie van AI voor verschillende vaardigheden ten opzichte van de menselijke norm [30].

De rol van HPC. High performance computing is en zal de ruggengraat zijn van de AI- transformatie. AI-modellen vereisen grote hoeveelheden gegevens, al dan niet gesimuleerd, alsook acceleratoren om in een aanvaardbare tijd te worden getraind en resultaten te infereren. HPC-clusters bieden het noodzakelijke platform om grootschalige AI-modellen te trainen, maar moeten worden uitgerust met de juiste apparatuur om DL-modellen te berekenen. Terwijl we nog steeds gewend zijn aan klassieke processoren, staat het einde van dit tijdperk voor de deur: de wijdverbreide adoptie van AI-technieken vereist een verschuiving naar gespecialiseerd en modular computing die vele vormen kan aannemen (TPU's, GPU's, FPGA's), afhankelijk van het gebruiksscenario [31].

HPC moet ook evolueren op het vlak van computationele en communicatiesnelheid, verbeterde energie-efficiëntie en een nog grotere opslagcapaciteit om te voldoen aan de toekomstige vereisten. Integratie van AI en HPC vereist een multidisciplinaire benadering: samenwerking tussen computerwetenschappers, domeinexperts en HPC-specialisten is essentieel om AI-modellen af te stemmen op specifieke wetenschappelijke vragen en ervoor te zorgen dat computationele bronnen efficiënt worden gebruikt.

Een van de belangrijkste wetenschappelijke uitdagingen bij het integreren van AI met HPC is de ontwikkeling van AI-algoritmen die de architectuur van moderne gespecialiseerde supercomputers volledig kunnen benutten. AI-modellen worden steeds groter en vragen meer resources [32]. Er is een dringende behoefte aan onderzoek naar nieuwe parallele algoritmen en AI-frameworks die geoptimaliseerd zijn voor nieuwe gespecialiseerde hardware [33].

AI-risico's. Er is een ernstig gebrek aan robuuste en gestandaardiseerde vormen van evaluatie voor verantwoorde AI. Toonaangevende ontwikkelaars, waaronder OpenAI en Google, testen hun modellen voornamelijk tegen verschillende benchmarks voor verantwoorde AI. Deze praktijk bemoeilijkt het systematisch vergelijken van de risico's en beperkingen van de beste AI-modellen. AI-ontwikkelaars scoren ook laag op transparantie, vooral wat betreft het publiek maken van trainingsgegevens en methodologieën, wat dan weer gevolgen heeft voor het onderzoek. Dit gebrek aan openheid belemmert

de inspanningen om meer inzicht te krijgen in de robuustheid en veiligheid van AI-systemen. Extreme AI-risico's zijn moeilijk te analyseren. Het afgelopen jaar is er onder AI-wetenschappers en -beoefenaars een belangrijk debat op gang gekomen over de focus: ligt die op directe modelrisico's, zoals algoritmische discriminatie, of op potentiële existentiële bedreigingen op de lange termijn? Het is een uitdaging geworden om te onderscheiden welke beweringen wetenschappelijk gefundeerd zijn en als basis voor beleidsvorming moeten dienen. Deze moeilijkheid wordt nog vergroot door de tastbare aard van reeds aanwezige kortetermijnrisico's, in tegenstelling tot de theoretische aard van existentiële bedreigingen.

Ethische overwegingen. AI heeft sinds zijn ontstaan bij mensen amusement, angst en nieuwsgierigheid getriggerd en kreeg onlangs veel aandacht en ook kritiek vanwege de ontwrichtende impact [34]. Naarmate we AI- en HPC-technologieën ontwikkelen, is het van cruciaal belang om hun sociale en economische impact te onderzoeken. De Europese Unie (EU) heeft de AI Act goedgekeurd [35], een nieuw regelgevend kader voor AI-technologieën die binnen de EU worden verspreid. HPC-faciliteiten en onderzoekers zullen een actief deel zijn van het ethische debat en zullen de veiligheid en beveiliging van gegevens en geleverde AI-modellen moeten waarborgen. Daarnaast zijn er ook de milieubekommernissen vanwege de energiebehoeften.

Kortom, de toekomst van AI in de wetenschap zal voor diepgaande veranderingen zorgen in de manier waarop we fundamentele vragen verkennen en begrijpen binnen disciplines. Met de ondersteuning van een geavanceerde HPC-infrastructuur kan AI wetenschappelijke ontdekkingen versnellen en nieuwe uitdagingen aanpakken. Bovendien moeten ook ethische overwegingen en regelgevende instanties tijdens dit proces worden gerespecteerd.

4 Reflecties voor de toekomst

4.1 *Wat zijn de nieuwe hardware-evoluties?*

De toepassing en de technische aard van grootschalig computergebruik evolueren in de richting van meer energie-efficiënte, innovatieve technologieën en geïntegreerde cloud-toepassingen. Sommige bekende computerparadigma's zoals de wet van Moore, lopen ten einde, waardoor het noodzakelijk wordt fundamenteel nieuwe technieken en oplossingen te zoeken voor grootschalig computergebruik.

Toekomstig grootschalig computergebruik zal steeds meer gebaseerd zijn op *accelerated computing*, met als bekendste voorbeeld het gebruik van GPU's. De voorbije jaren zijn bijna alle grootschalige computersystemen op wereldschaal uitgerust met grote aantallen **acceleratoren**, momenteel de voor de hand liggende manier om een hogere prestatie haalbaar te maken in computersystemen. Het toenemende gebruik van machine learning in gegevensverwerking en in simulaties heeft tevens veel baat bij acceleratoren. In de verdere toekomst zal quantum accelerated computing, wat momenteel alleen experimenteel aanwezig is in enkele HPC-systemen, naar verwachting ook een grotere rol gaan spelen in wetenschappelijke workloads. Pure quantum computing zal waarschijnlijk nog wat langer op zich laten wachten, hoewel dit werkveld de afgelopen jaren snel in beweging is gekomen.

Commerciële **cloudleveranciers** bieden in toenemende mate computerdiensten aan die een toegevoegde waarde kunnen betekenen voor wetenschappelijk computergebruik en gegevensverwerking. Vooral voor relatief kleinschalige workloads zijn deze diensten laagdrempelig en gebruiksvriendelijk. Voor grootschalige berekeningen en gegevensverwerking zijn ze nog vaak te duur, niet schaalbaar genoeg en hoogdrempelig, onder andere bij gegevensoverdracht. Verder maakt men zich zorgen over publieke waarden, privacy en vendor lock-in. Toch zal men regelmatig de kosten van het aanhouden van de eigen infrastructuur moeten afwegen tegen het gebruik en de voorwaarden van commerciële cloudleveranciers.

Ook het aanbieden en mogelijk combineren van verschillende HPC-technieken in modular computing [31], zoals HPC, high throughput computing (HTC), high performance data analytics (HPDA) en AI, is een veelbelovende evolutie.

Er rijzen dus belangrijke vraagstukken, zoals hoe de toekomstige infrastructuur het beste kan worden afgestemd op de toekomstige behoeften van onderzoekers, zowel op de korte termijn (één tot twee jaar) als op de langere termijn (drie tot zes jaar), en hoe we moeten omgaan met het dienstenaanbod van Big Tech, zoals de clouddiensten, versus eigen infrastructuur en de energiebehoeften.

De **uiteindelijke modulaire Tier-1 rekeninfrastructuur zal state of the art moeten zijn en een breed scala aan onderzoekers bedienen**, onder andere door het bieden van de juiste verhouding CPU-nodes versus GPU-nodes. De architectuur moet goed gebalanceerd zijn wat betreft rekenkracht versus de bandbreedte van geheugen/interconnect/storage, en het systeem moet energie-efficiënt zijn. Het **doel blijft immers om de wetenschappelijke output te optimaliseren in plaats van de piekprestatie te maximaliseren**.

Ten slotte moeten de investeringen in de regionale Tier-1 laag afgewogen worden tegenover de participaties in de Europese Tier-0 laag, die een voordeel van schaalvergroting bieden. Er moet met andere woorden een balans gevonden worden tussen regionale soevereiniteit en Europese participatie.

4.2 *Wat zijn de organisatienoden?*

Om het HPC-Vlaanderen project in goede banen te leiden kan gekozen worden uit meerdere opties wat betreft de organisatie van het Tier-1 luik. Het Tier-2 luik is ingebed in ieder van de academische hubs. Het Tier-0 luik overstijgt het Vlaamse niveau. We vermelden vier Tier-1 modellen die we kort uitwerken:

1. De huidige VSC-structuur voorziet in lokaal opgestelde infrastructuur, met een bijbehorend gedistribueerd management en een gebruikersondersteuning die zijn verdeeld over de academische associaties.
2. Centralisatie van de Tier-1 infrastructuur met centraal beheer van die regionale machine is het geval in sommige Europese landen.
3. Voor de regionale Tier-1 machine kan een contract afgesloten worden met een groot datacenter, inclusief systeembeheer en gegarandeerde beschikbaarheid.
4. Vlaanderen kan ook voor het Tier-1 niveau participatie zoeken in een regionale/nationale cluster, zoals die er zijn in de EuroHPC Joint Undertaking.

Huidige structuur. De huidige VSC-structuur wordt uitvoerig beschreven in sectie 2.1, met meer details over de Tier-2, Tier-1 compute-, data- en cloud-faciliteiten en het Tier-0 luik in de volgende secties. Sectie 2.7 brengt een SWOT-analyse. Het huidige frontoffice- en backoffice-opzet is sinds 2023 in ontwikkeling en wordt nog verder uitgewerkt.

VSC voorziet in een customised hardware-aanbod voor de Vlaamse onderzoekers aan de universiteiten, de overheid en de industrie. Een voortzetting in de tijd van eenzelfde type hardware wordt door de onderzoekers erg op prijs gesteld. De onderzoeksgroepen hebben immers doorgaans bijna geen personeel ter beschikking om veel tijd te besteden aan het overzetten van software tussen configuraties.

Gecentraliseerde structuur. Om de voor- en nadelen van zo'n structuur te belichten bespreken we het HPC-opzet in Nederland. De Nederlandse nationale Tier-1 supercomputer is een centrale voorziening die wordt beheerd door SURF, een coöperatie van ruim honderd Nederlandse onderwijs- en onderzoeksinstellingen die ICT-diensten ontwikkelt en levert. Al sinds 1984 wordt de nationale supercomputer centraal beheerd en gefinancierd via het NWO, de Nederlandse tegenhanger van het FWO. Pas sinds 2020 is de Tier-1 financiering structureel. Voor de vervanging van het huidige systeem, Snellius, wordt over een periode van vijf jaar een budget van 30M euro opzijgezet. Dit investeringsbudget (CAPEX) dekt niet de operationele kosten (OPEX) die nochtans gestaag blijven toenemen. Er wordt nu getracht af te stappen van de zuivere investeringsbudgetten en in plaats daarvan total cost of ownership (TCO) budgetten te gebruiken.

Naast de nationale Tier-1 voorziening staan er ook lokale Tier-2 voorzieningen bij de universiteiten. Die worden niet nationaal/centraal gefinancierd. Het valt voor dat er voor instellingsclusters subsidietoekenningen worden gebruikt, maar dat is niet het stan-

daardmechanisme. Op dit moment is DelftBlue van de TU Delft, met een TCO-budget van zo'n 5M euro, het grootste Tier-2 systeem van Nederland.

Hoewel Nederland in 2017 een van de eerste zeven ondertekenaars van de EuroHPC-verklaring was, heeft het Nederlandse ministerie lang geen middelen ter beschikking gesteld om te participeren in EuroHPC-systemen. In 2023 werd 2M euro vrijgemaakt om deel te nemen aan het LUMI pre-exaschaal consortium, en 8M euro om mee te doen met het Frans-Nederlandse Jules Verne exaschaal consortium. Er zijn op dit moment nog geen structurele middelen voor de participatie in toekomstige EuroHPC-systemen.

Huren versus aankopen. Hier bepaalt het VSC als klant de behoeften en specificaties van de benodigde Tier-1 regionale machine, zoals het aantal en het type van de CPU- en de GPU-processoren, en de compute nodes, de geheugenvereisten, de vereiste communicatie- en transfersnelheid en opslagcapaciteit. Het datacenter waarmee samengewerkt wordt, stelt de gewenste hardware ter beschikking van de klant, 7/7 en 24/24, op exclusieve basis, tegen een jaarlijks tarief en voor een afgesproken periode. Penaliteiten worden voorzien bij het eventueel falen van het systeem. Om pieken op te vangen is het systeem ook tijdelijk uitbreidbaar.

Met deze keuze is er geen behoefte meer aan eigen geklimatiseerde lokalen, onderhoudsploegen voor de hardware en eigen personeel voor systeembeheer. Een lokaal personeelslid zorgt voor de installatie van de software en het optimale gebruik van de infrastructuur. Op die manier kunnen meerdere van de vier huidige Tier-1 personeelsleden additioneel ingezet worden voor gebruikersondersteuning. Of het systeem in prijs volledig vergelijkbaar is met de aankoop van de benodigde hardware, moet verder onderzocht worden.

EU-participatie. In samenwerking met enkele kleinere landen in Europa kan ook overwogen worden om een joint venture op Tier-1 niveau op te starten. Dat kan zeker een voordeel van schaalvergroting met zich meebrengen. Er kan meer aangekocht worden met één groot samengesteld budget dan met aparte kleinere budgetten. Dat schaalvergroting loont, werd al duidelijk in figuur 2.4.

4.3 *Wat zijn de financieringsnoden?*

De huidige bedragen die de Vlaamse overheid investeert in het Tier-2 en Tier-1 luik van het VSC, zijn gebaseerd op het VSC-meerjarenplan dat neergelegd werd in mei 2022 (gezondheidsindex 120,25; index consumptieprijzen 121,01). Door de impact op de levensduurte van de recente crisissen die de wereld doormaakte, de coronapandemie en de Russische invasie van Oekraïne zijn de lonen sinds mei 2022 echter zeer sterk gestegen en is het kostenplaatje voor de energieconsumptie geëxplodeerd, niettegenstaande elk nieuw systeem energiezuiniger is dan het voorgaande. Ook de aankoop van hardware is veel duurder geworden, onder andere door de AI-hype. Kortom, **met een vaste enveloppe neemt de performantiegroei van de infrastructuur af.**

Met het toenemende belang van de participatie in Europese HPC-initiatieven dienen ook de middelen voor de Tier-0 activiteiten sterk opgetrokken te worden. Als Vlaanderen even succesvol wordt in het behalen van Europese HPC-projecten als in het recente

Europese Horizon 2020-programma, dan verwachten we dat de Vlaamse overheid jaarlijks een bedrag van 2M euro moet oormerken enkel voor de vereiste cofinanciering in de Europese HPC-projecten. Inmiddels loopt de Vlaamse participatie in het LUMI pre-exaschaal project tot en met 2026, voor een bedrag van jaarlijks minstens 0,5M euro. Dan is er nog de mogelijke voortzetting van het LUMI-project in LUMI-Next, waarvoor op jaarbasis ongeveer 1M euro moet ingepland worden.

Een herziening van tabel 2.2 voor de financiering vanaf 2026 dringt zich dus op. In tabel 4.1 hebben we de Tier-2 en Tier-1 bedragen voor uitrusting en werking geïndexeerd, en het Tier-0 aandeel herzien (1,5M euro voor 2026 en 3,0M euro vanaf 2027). Voor de VTE-kosten moet minstens 120K euro per jaar gebudgetteerd worden. Dit brengt het benodigde **bedrag voor de jaarlijkse recurrenente Tier-2, Tier-1 en Tier-0 financiering op ongeveer 17,7M euro**. Dit bedrag zou ook automatisch geïndexeerd moeten worden om de prijsstijgingen op verschillende vlakken het hoofd te bieden.

	VTE	werking/uitrusting
Tier-2	23	€ 4,5M
Tier-1	12	€ 5,6M
Tier-0	3	€ 3,0M
	€ 4,6M	€ 13,1M

Tabel 4.1: Benodigde Vlaamse VSC-financiering vanaf 2026 (afgeronde bedragen).

We merken nog op dat de Vlaamse academische associaties en het FWO aan dit budget een aanzienlijk bedrag in kind toevoegen door het gebruik van hun datazalen, vergaderzalen, kantoorruimte, aankoopdiensten, juridische, financiële en personeelsdiensten, en het ter beschikking stellen van extra ondersteunend personeel. Tevens draagt elke VSC-hub de stroomkosten van de Tier-2 infrastructuur. Op Tier-0 niveau vaardigt Vlaanderen momenteel ook nog 0,5 VTE af aan het LUMI User Support Team, waarvan de financiering valt binnen de bijdrage van Vlaanderen aan het LUMI-consortium.

4.4 Wat zijn de opleidingsnoden?

Al jaren een doorn in het oog is het ontbreken van een gedegen, volwaardige, toegespitste HPC-opleiding in Vlaanderen. De Vlaamse studentenpopulatie maakt veel te laat in haar opleiding kennis met HPC, en enkel fragmentarisch, meestal in keuzevakken die ze moeten volgen voor het maken van hun eindwerk.

Op de landkaart van de pan-Europese **EUMaster4HPC** ontbreekt zowel Vlaanderen als België. Deze master is **gefinancierd door de EuroHPC Joint Undertaking** en wordt georganiseerd door een consortium dat bestaat uit universiteiten, onderzoekscentra, rekencentra en de industrie. Door de organisatie ervan hoopt Europa een Europees netwerk te creëren en het Europese HPC-ecosysteem te versterken.



Figuur 4.1: EUMaster4HPC, deelnemende universiteiten (groen), andere partners (blauw) (bron: eumaster4hpc.uni.lu).

Aangezien het in Vlaanderen moeilijk is om gedegen HPC-medewerkers te rekruteren, is het belangrijk dat aan dit initiatief wordt deelgenomen. Het krijkt het niveau van de Vlaamse HPC-kennis op, verhoogt de visibiliteit van HPC-Vlaanderen in het Europese landschap en levert nieuwe HPC-medewerkers op.

We merken op dat het de Vlaamse associaties van universiteiten en hogescholen niet aan mogelijkheden en talent ontbreekt om deel te nemen aan zulke HPC-master. We verwijzen hiervoor onder andere naar de master wiskundige ingenieurstechnieken die wordt georganiseerd aan de KU Leuven en van waaruit de Vlaamse participatie aan de EUMaster4HPC voorbereid kan worden. Het VSC kan zelf niet in het initiatief instappen, omdat het enkel als gedistribueerd virtueel centrum bestaat.

4.5 Wat is de industriële verwevenheid?

Zoals werd opgemerkt in sectie 2.7 scoort het VSC goed wat betreft het aandeel van de regionale industrie in de gebruikte rekentijd. Er moet wel opgemerkt worden dat het VSC-model niet mikt op en niet geschikt is voor een zuivere productie-workload vanwege een industriële partner. Hiervoor zou immers de volledige infrastructuur redundant uitgevoerd moeten worden, zodat de betreffende cluster gegarandeerd ter beschikking blijft en niet uitvalt, bij voorbeeld door een stroompanne. Zulke garanties kan het VSC met het beschikbare budget niet leveren. Daarenboven behoort het niet tot de missie van het VSC.

Een ander veelgehoord probleem voor sommige industriële partners is de bezorgdheid met betrekking tot kennisbescherming. Die vereist ook organisatorisch veel meer afscherming, in vele betekenissen van het woord, dan nodig is op academisch niveau.

Conclusie

De drie sleutelwoorden in dit document zijn:

- **reflectie** over het huidige Vlaamse HPC-landschap, vooral met het oog op de toekomst,
- **Europa**, waarmee de samenwerking op HPC-vlak loont en almaar belangrijker wordt,
- **recurrente financiering**, om het voortbestaan en de verdere groei van het VSC te garanderen.

Vanuit de huidige situatie moet VSC evolueren naar een high end computing centrum dat tegen het einde van dit decennium een belangrijke plaats inneemt in het Europese HPC-ecosysteem. De noodzakelijke en recurrente financiering daarvoor dient alle niveaus te bedienen: Tier-2 op de universitaire campussen, Tier-1 regionaal en Tier-0 supranationaal.

Computersimulaties vormen een onlosmakelijk en essentieel element in de wetenschappelijke ontwikkeling en belangrijke sectoren zijn afhankelijk van de huidige evolutie naar een almaar grotere computercapaciteit. We denken hierbij onder andere aan domeinen zoals:

- de voorspelling van het ruimteweer, om de betrouwbaarheid van onze technologische infrastructuur te waarborgen;
- moleculair modelleren vanaf de atomaire schaal van nanomaterialen met de juiste functie voor de juiste toepassing;
- computationele modellen om de verspreiding van besmettelijke ziekten te begrijpen, beheren en beperken;
- computationeel geneesmiddelenontwerp en uitgebreide moleculaire dynamica-simulaties;
- geavanceerde stromingsmodellen met toepassingen in de lucht- en ruimtevaart, de automobielsector en energietransformatie;
- simulatie van de fysica van de interactie van grootschalige windparken met de atmosferische grenslaag;
- de ontwikkeling van duurzame chemische technologie, waarin hernieuwbare energie en circulariteit gedijen.

Voor de toekomst verwacht men dat HPC-**infrastructuur** zeer **modulair** wordt. Voor (grotendeels academische) RDI-activiteiten moet daarmee een **heteroog publiek** van onderzoekers uit **diverse domeinen** bediend worden.

Voor het beheer van die infrastructuur bespraken we vier modellen: het huidige **gedistribueerde** model, een meer **gecentraliseerd** beheer, het **inhuren** van de rekenkracht bij een groot datacenter en een **Europese** joint venture op Tier-1 niveau.

De **financiering** voor die infrastructuur, het beheer ervan en de gebruikersondersteuning moet dringend **geïndexeerd** worden, uitgebreid worden met een **Tier-0 luik** en **recurrent** worden op alle niveaus: Tier-2, Tier-1 en ook Tier-0.

Niet in het minst wordt er ook gepleit om aan te sluiten bij een **HPC-master**-initiatief!

Referenties

- [1] C. Hirsch, Y. Bruynseraede, A. Cuyt, N. De Kimpe, R. Gijbels, K. Heyde, D. Inzé, J. Thas, L. Vanquickenborne, J. Vandewalle en C. Waelkens. "High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen", KVAB, Standpunt nr. 5, 2008, <https://kvab.be/nl/standpunten/high-performance-computing>.
- [2] Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen, "Vlaams Supercomputer Centrum Jaarverslag 2022," 2023, <https://www.vscentrum.be/publications>.
- [3] S. Bassini, G. Scipione, A. Guidazzoli en M.C. Liguori, "Cineca HPC Report 2020", 2021, https://www.hpc.cineca.it/wp-content/uploads/2023/09/REPORT_HPC_20202021_0.pdf.
- [4] M. De Lorenzi, M.G. Giuffreda, S. Russo, A. Schneebeli, S. Ulmer en S. Waldrip, "CSCS Annual Report 2022", 2023, <https://www.cscs.ch/publications/annual-reports/cscs-annual-report-2022>.
- [5] A. Maharana, A. Isavnin, C. Scolini, N. Wijsen, L. Rodriguez, M. Mierla, J. Magdalenic en S. Poedts. "Implementation and validation of the FRI3D flux rope model in EUHFORIA", *Adv. Space Res.*, 70(6): 1641-1662, 2022, <https://dx.doi.org/10.1016/j.asr.2022.05.056> (figuur 12).
- [6] B. Perri, P. Leitner, M. Brchnelova, T. Baratashvili, B. Kuźma, F. Zhang, A. Lani, S. Poedts. "COCONUT, a novel fast-converging MHD model for solar corona simulations: I. Benchmarking and optimization of polytropic solutions", *Astrophys. J.*, 936: 19, 2022, <https://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/ac7237> (figuur 5).
- [7] N. Wijsen, D. Lario, B. Sánchez-Cano, I.C. Jebaraj, N. Dresing, I.G. Richardson, A. Aran, A. Kouloumvakos, Z. Ding, A. Niemela, E. Palmerio, F. Carcaboso, R. Vainio, A. Afanasiev, M. Pinto, D. Pacheco, S. Poedts en D. Heyner. "The effect of the ambient solar wind medium on a CME-driven shock and the associated gradual solar energetic particle event", *Astrophys. J.*, 950: 172, 2023, <https://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/acd1ed> (figuur 6).
- [8] L. Linan, F. Regnault, B. Perri, M. Brchnelova, B. Kuźma, A. Lani, S. Poedts en B. Schmieder. "Self-consistent propagation of flux ropes in realistic coronal simulations," *Astron. Astrophys.*, 675, A101, 2023, <https://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/202346235> (figuur 6).
- [9] V. Van Speybroeck. "Challenges in modelling dynamic processes in realistic nanostructured materials at operating conditions", *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 381: 20220239, 2023, <https://dx.doi.org/10.1098/rsta.2022.0239>.
- [10] V. Van Speybroeck, S. Vandenhaute, A.E.J. Hoffman en S.M.J. Rogge. "Towards modeling spatiotemporal processes in metal-organic frameworks", *Trends in Chemistry*, 3(8): 605-619, 2021, <https://dx.doi.org/10.1016/j.trechm.2021.04.003>.
- [11] J. Vercammen, M. Bocus, S. Neale, A. Bugaev, P. Tomkins, J. Hajek, S. Van Minnebruggen, A. Soldatov, A. Krajnc, G. Mali, V. Van Speybroeck en D.E. De Vos. "Shape-selective C-H activation of aromatics to biaryllic compounds using molecular palladium in zeolites," *Nature Catalysis*, 3: 1002-1009, 2020, <https://dx.doi.org/10.1038/s41929-020-00533-6>.
- [12] H.Q. Xu, S. Yang, X. Ma, J. Huang en H.-L. Jiang. "Unveiling Charge-Separation Dynamics in CdS/Metal-Organic Framework Composites for Enhanced Photocatalysis", *ACS Catalysis*, 8(12): 11615-11621, 2018, <https://dx.doi.org/10.1021/acscatal.8b03233>.
- [13] C. Chang, V.L. Deringer, K.S. Kattie, V. Van Speybroeck en C.M. Wolverson. "Simulations in the era of exascale computing", *Nat Rev Mater*, 8: 309-313, 2023, <https://dx.doi.org/10.1038/s41578-023-00540-6>.
- [14] The Nobel Prize in Chemistry 1998. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/>.
- [15] N. Hens en C. Faes. "WAT ALS? Wat de covidmodellen en -curves ons leren over het virus, over onszelf en over de toekomst," ASP, 2023. <https://watalsboek.be>.

- [16] Stanford Flow Physics and Computational Engineering. "The Gallery of Turbulent Flows", 2013. [Online]. <https://web.stanford.edu/group/fpc/cgi-bin/fpcwiki/Main/Gallery>.
- [17] X.I.A. Yang en K.P. Griffin. "Grid-point and time-step requirements for direct numerical simulation and large-eddy simulation", *Phys. Fluids*, 33: 015108, 2021, <https://dx.doi.org/10.1063/5.0036515>.
- [18] H. Choi en P. Moin. "Grid-point requirements for large eddy simulation: Chapman's estimates revisited," *Phys. Fluids*, 24: 011702, 2012, <https://dx.doi.org/10.1063/1.3676783>.
- [19] Persoonlijke mededeling aan Charles Hirsch.
- [20] L. Lanzilao en J. Meyers. "A parametric large-eddy simulation study of wind-farm blockage and gravity waves in conventionally neutral boundary layers", *Journal of Fluid Mechanics*, 979: A54, 2024, <https://dx.doi.org/10.1017/jfm.2023.1088>.
- [21] K.M. Van Geem, V.V. Galvita en G.B. Marin. "Making chemicals with electricity", *Science*, 364(6442): 734-735, 2019, <https://dx.doi.org/10.1126/science.aax5179>.
- [22] IEA, "The Future of Petrochemicals Towards more sustainable plastics and fertilisers", 2018. [Online]. https://iea.blob.core.windows.net/assets/bee4ef3a-8876-4566-98cf-7a130c013805/The_Future_of_Petrochemicals.pdf.
- [23] M. Bonheure, R.L.J. Samee Lal, T. Verstraete en K.M. Van Geem. "New gold standard for olefin production: supersonic steam cracking", in *Faculty of Engineering and Architecture Research Symposium 2022 (FEARS 2022)*, Ghent, 2022: Ghent University, <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.7400993>.
- [24] J. Aerssens, F. Vermeire, S. U. Aravindakshan, R. Van de Vijver, en K.M. Van Geem. "The merit of pressure dependent kinetic modelling in steam cracking", *Faraday Discussions*, 238: 491-511, 2022, <https://dx.doi.org/10.1039/D2FD00032F>.
- [25] K. De Ras et al. "An experimental and kinetic modeling study on the low-temperature oxidation of oxymethylene ether-2 (OME-2) by means of stabilized cool flames", *Combustion and Flame*, 253: 112792, 2023, <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.112792>.
- [26] E. Heid en W.H. Green. "Machine Learning of Reaction Properties via Learned Representations of the Condensed Graph of Reaction", *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62(9): 2101-2110, 2022, <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00975>.
- [27] I.A. Udugama, P.C. Lopez, C.L. Gargalo, X. Li, C. Bayer, en K.V. Gernaey. "Digital Twin in biomanufacturing: challenges and opportunities towards its implementation", *Systems Microbiology and Biomanufacturing*, 1(3): 257-274, 2021, <https://dx.doi.org/10.1007/s43393-021-00024-0>.
- [28] OpenAI et al. "GPT-4 Technical Report", arXiv preprint 2303.08774, 2024, <https://dx.doi.org/10.48550/arXiv.2303.08774>.
- [29] L. Longo et al. "Explainable Artificial Intelligence (XAI) 2.0: A manifesto of open challenges and interdisciplinary research directions", *Information Fusion*, 106: 102031, 2024, <https://dx.doi.org/10.1016/j.inffus.2024.102301>.
- [30] Stanford Institute for Human-Centered Artificial Intelligence. "Artificial Intelligence Index Report 2024", Stanford University, 2024. <https://aiindex.stanford.edu/report/>.
- [31] E. Suarez, N. Eicker, T. Moschny, S. Pickartz, C. Clauss, V. Plugaru, A. Herten, K. Michielsen en T. Lippert. "Modular Supercomputing Architecture. A success story of European R&D," ETP4HPC, 2022, <https://dx.doi.org/10.5281/zenodo.6508394>.
- [32] W. Fedus, B. Zoph, en N. Shazeer. "Switch transformers: Scaling to trillion parameter models with simple and efficient sparsity", *Journal of Machine Learning, Research*, 23(120): 1-39, 2022, <http://jmlr.org/papers/v23/21-0998.html>.
- [33] S.-y. Liu, Z. Liu, X. Huang, P. Dong, en K.-T. Cheng. "LLM-FP4: 4-bit floating-point quantized transformers", *Proceedings of the 2023 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*, pp. 592-605, 2023, <https://dx.doi.org/10.18653/v1/2023.emnlp-main.39>.
- [34] Noam Chomsky. "The False Promise of ChatGPT", *New York Times*, 8 maart 2023, <https://www.nytimes.com/2023/03/08/opinion/noam-chomsky-chatgpt-ai.html>.
- [35] The EU Artificial Intelligence Act. 2024. <https://artificialintelligenceact.eu>.

RECENTE STANDPUNTEN

63. Christoffel Waelkens. – *De Vlaamse Wetenschapsagenda en interdisciplinariteit. Leren leven met interdisciplinaire problemen en oplossingen*, KVAB/Klasse Natuurwetenschappen, 2019.
64. Patrick Onghena – *Repliceerbaarheid in de empirische menswetenschappen*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2020.
65. Mark Eyskens – *Als een virus de mensheid gijzelt. Oorzaken en gevolgen van de Coronacrisis*, KVAB/ Klasse Menswetenschappen, 2020.
66. Jan Rabaey, Rinie van Est, Peter-Paul Verbeek, Joos Vandewalle - *Maatschappelijke waarden bij digitale innovatie: wie, wat en hoe? KVAB - Denkersprogramma 2019*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2020.
67. Oana Dima (auteur), Dirk Inzé, Hubert Bocken, Pere Puigdomènech, René Custers (eds)., *Genoom-bewerking voor veredeling van landbouwgewassen. Toepassingen van CRISPR-Cas9 en aanverwante technieken*, ALLEA-KVAB/Klasse Natuurwetenschappen, 2020.
68. Marie-Claire Foblets, *De multiculturele samenleving en de democratische rechtsstaat – Hoe vrijwaren we de sociale cohesie?*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2020.
69. Joost Van Roost, Luc Van Nuffel, Pieter Vingerhoets e.a., *De rol van gas in de Belgische energietransitie – Aardgas en Waterstof*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2020.
70. Richard Bardgett, Joke Van Wensem, *Bodem als natuurlijk kapitaal – KVAB Denkersrapport 2020*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2021.
71. Jos Smits e.a., *Multifunctionele eilanden in de Noordzee*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2021.
72. Elisabeth Monard, red., *Kunst, Wetenschap en Technologie in Symbiose*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2021.
73. Jan Wouters, Maaike De Ridder, *De problematiek van de rechtsstaat en democratische legitimiteit binnen de Europese Unie*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2021.
74. Hilde Heynen, Bart Verschaffel, e.a., *Architectuurkwaliteit vandaag, Reflecties over architectuur in Vlaanderen*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, Klasse Kunsten, 2021.
75. Godelieve Laureys, Kries Versluys, e.a., *Language Matters. Taalgebruik en taalbeleid aan de Vlaamse universiteiten*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2022.
76. Bea Cantillon, *Het armoedevraagstuk en de tragedie van de welvaartsstaat, Zeven termen voor een nieuw sociaal contract*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2022.
- 77b. Joos Vandewalle, Marc Acherooy e.a., *Een oproep tot een versnelde digitale transformatie voor België*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, ARB/Klasse Technologie en Samenleving, 2021.
78. Jo Tollebeek, Marc Boone en Karel van Nieuwenhuysse, *Een Canon van Vlaanderen, Motieven en bezwaren*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2022.
79. Luc Taerwe e.a., *Duurzaam beheer van infrastructuur. Niet alleen een kwestie van budgetten*, KVAB/ Klasse Technische Wetenschappen, 2022.
80. Willem Salet, Marleen Spiekman, Staf Roels, Tom Coppens, Ivo Van Vaerenbergh, *Naar klimaatneutrale woongebouwen in 2050*, KVAB Denkersprogramma 2022, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, 2022.
81. Sabina Leonelli, Stephan Lewandowsky, *De reproduceerbaarheid van het onderzoek in Vlaanderen: Feitenonderzoek en aanbevelingen*. KVAB Denkersrapport 2022, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen en Menswetenschappen, 2022.
82. Elisabeth Monard e.a., *Vrij onderzoek noodzakelijk voor maatschappelijke uitdagingen, Ruimte voor wetenschap op initiatief van de onderzoeker*, KVAB/Klasse Technische Wetenschappen, Klasse Menswetenschappen, Jonge Academie, 2023.
83. Herman De Dijn, Gita Deneckere, Danny Praet, Jo Tollebeek, Sabine Verhulst, *Een noodzakelijk goed, Over het blijvende belang van de geesteswetenschappen*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2023.
84. Anne-Marie Simon-Vandenbergen, Kristin Davidse, *Het klimaatdebat in Vlaanderen, Een analyse van taal en communicatie*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, Standpunt 84, 2023.
85. Helga Nowotny Ine Van Hoyweghen, Joos Vandewalle, *AI als aanjager van verandering, KVAB Denkersrapport 2023*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2023.
86. Luc Steels, Tom Willaert e.a., *Sociale media, Inzichten en Perspectieven*, KVAB/Klasse Menswetenschappen, 2023.



Een eerste Standpunt, “High Performance Computing (HPC) in Vlaanderen”, werd in 2008 gepubliceerd en vormde een belangrijke steun voor de evolutie en de financiering van het huidige Vlaams Supercomputer Centrum (VSC).

Ruim 15 jaar later was de KVAB van mening dat het moment aangebroken was om opnieuw over de relatie tussen Vlaanderen en het HPC-landschap te reflecteren. Sinds 2008 is het HPC-landschap immers sterk geëvolueerd. De participatie in Europese initiatieven is inmiddels enorm belangrijk geworden.

High performance computing heeft een aanzienlijke maatschappelijke impact op verschillende gebieden. HPC-systemen stellen onderzoekers in staat om complexe problemen te modelleren, simulaties uit te voeren en grote hoeveelheden gegevens te analyseren.

Naar de toekomst toe verwacht men dat HPC-infrastructuur zeer modulair wordt. Voor (grotendeels academische) RDI-activiteiten moet daarmee een heterogeen publiek van onderzoekers uit diverse domeinen bediend worden. Computersimulaties vormen immers een onlosmakelijk en essentieel element in de wetenschappelijke ontwikkeling en belangrijke sectoren zijn afhankelijk van de huidige evolutie naar alsmaar grotere capaciteit.

We vermelden hierbij onder andere de voorspelling van het ruimteweer, de ontwikkeling van nieuwe nanomaterialen, verspreidingsmodellen voor besmettelijke ziekten, nieuw geneesmiddelenontwerp, geavanceerde stromingsmodellen voor de lucht- en ruimtevaart en de transport- en energiesector, de ontwikkeling van grootschalige windparken en duurzame chemie.

De reeks Standpunten van de Academie is een bijdrage tot het wetenschappelijk onderbouwd debat over actuele maatschappelijke en artistieke thema's. De auteurs, leden en werkgroepen van de Academie schrijven in eigen naam, onafhankelijk en met volledige intellectuele vrijheid. De goedkeuring voor publicatie door een of meerdere Klassen van de Academie waarborgt de kwaliteit van de gepubliceerde studies.



**Vlaamse
overheid**