

ExpEnclosure 1b. Category 1 Application form – English version

APPLICATIONS ARE PREFERABLY DRAWN UP IN ENGLISH. AN ENGLISH TRANSLATION HAS TO BE ENCLOSED WITH APPLICATIONS SUBMITTED IN DUTCH.

The application form is available in English on the website

<https://www.vscentrum.be/en/access-and-infrastructure/project-access-tier1>

Title of the application:

High-throughput screening of an unknown quaternary crystal space

Name and first name of the applicant:

Michael Sluydts

Institution:

Ghent University

Research group / department:

Center for Molecular Modeling

Title / position:

Postdoctoral researcher

e-mail address:

michael.sluydts@ugent.be

Total computing time that is needed, in node days:

4056

Total disk storage that is applied for (in GiB):

860

1. Title of the research project (with IWETO or FRIS link if available) within the framework of which computing time is applied for:

A firmer basis for the reliability claims of solid-state density-functional theory

2. Describe your research project in short. Explicitly mention the scientific questions that you are planning to address and the overall scientific goals of the project. (max. 1 A4 in Arial 12):

With access to over 70 elements in the periodic table the possibilities to create complex materials are literally endless. In nature however materials containing four elements, quaternaries, are already quite rare. This is because the more complex the material, the more ways can be found in which it might decompose into similar simpler materials. Are the few hundred experimentally known quaternaries the only possible ones, or are there still many waiting to be discovered? And which features influence stability of these crystals? Obtaining systematic data to answer these fundamental questions is difficult, since 50% of them share similar crystal structures. In previous TIER1 projects, we have examined a few families for which experimentally stable quaternaries were known, and discovered within each family a more than 10-fold increase of possible stable materials, showing clear systematics. Encouraged by this success, we want in this project to leave the experimentally familiar grounds, in order to explore an uncharted region of the quaternary crystal space, There are mathematical speculations in the literature about a so-called “trigohexagonite” quaternary structure. It would have unusual properties if it exists, but no realization of such a crystal has been discovered so far. Hypothetical crystals in this crystal structure will be explored using High-Throughput Density Functional Theory using the software package VASP automated with the self-developed automation software Queue Manager. These tools have been developed in the course of previous TIER1 projects. Adding this trigohexagonite family to our current dataset would increase the diversity of the data set, even if no stable crystals might be found. The increased diversity will be beneficial for the data mining and machine learning strategies that are being developed for this kind of data.

[1] M. J. Bucknum, B. Wen, and E. A. Castro, “Trigohexagonite,” *J. Math. Chem.*, vol. 48, no. 3, pp. 816–826, 2010.

3. Provide an abstract (10 lines) for scientific communication on the website in layman’s terms. See also item 12 of this application form.

While many materials are known, many more are waiting to be discovered. One way to find them is massive screening using quantum simulations, which is capable of predicting the stability of hypothetical materials. Following up on previous projects where existing families of quaternary crystals were

significantly expanded, here a completely hypothetical new crystal structure is explored. In this way the database of quaternary materials will be significantly diversified opening the way to advanced data mining techniques.

4. Financing institution or channel, financing the research project in full or in part (FWO, BOF, IWT, EU, ...): Please attach the confirmation letter as enclosure (see instructions in enclosure 3 "EasyChair proposals submission procedure").

FWO, confirmation letter attached at end of document.

5. Name and email address of the promoter(s) of the research project:

Stefaan Cottenier (stefaan.cottenier@ugent.be)

6. Persons mandated by the Applicant to compute on the Tier-1 within the framework of the present project: Please provide for every person:

- name and first name
- institution
- research group / department
- title / position
- experience of using HPC resources in the past (Tier-0/Tier-1/Tier-2 infrastructure in Belgium and abroad)

dr. ir. Michael Sluydts (vsc40479)

Ghent University

Center for Molecular Modeling

PhD Fellow

Five years of experience performing VASP screening on both TIER2 and TIER1. Main developer of Queue Manager.

Prof. dr. ir. Veronique Van Speybroeck (vsc40021)

Ghent University

Center for Molecular Modeling

Professor

Experience with a wide variety of DFT packages since the opening of the Ghent VSC on both TIER2 and TIER1.

Prof. dr. Stefaan Cottenier (vsc40026)

Ghent University

Center for Molecular Modeling

Assistant Professor

Experience with a wide variety of DFT packages since the opening of the Ghent VSC on both TIER2 and TIER1.

7. Explain why this project needs to run on a Tier-1 system, why the machine you have requested is suitable for the project and how the use of the system will enable the science proposed (max. ½ A4 in Arial 12).

We are studying a set of 4224 hypothetical crystals. Each of the crystals undergoes a workflow with 12 tasks, resulting in 50,688 tasks. While each of these tasks is not that intense, calculating the entire screening set requires resources not available on smaller clusters. The managing of the tasks is largely automated using software that has been tested on the BrENIAC cluster.

8. Justify the number of node days requested. This should include information such as: number and nature of computing tasks, software used, and the sequence in which they will be performed.

Indicate for each typical computing task the required resources:

- wall clock time (note that 3 days is the maximal wall clock time for any job; checkpointing should be used for longer run times)
- memory (maximum 64 GiB/node)
- number of nodes
- number of CPU cores
- disk space (estimated volume in GiB and the total number of files); make a clear distinction between usage of Tier2 DATA/HOME partitions and the Tier1 SCRATCH partition
- number of tasks, and an indication of how many such tasks would be submitted concurrently.

This information should take the form of a table (an example is provided as Table 2 in the appendix). Provide additional descriptions of the computing tasks and comments as needed. Resource estimates should be preferably based on the results of actual calculations on Tier1 (via, e.g., a Starting Grant) for system/problem sizes that are on par with those of the intended computing tasks (e.g., same mesh sizes, actual molecular system, ...). If not, provide the name, architecture, #cores, memory, etc. of the machine that was used to obtain these results and explain how you have calculated/rescaled the wall clock times, number of cores, etc.

(max. 1 A4 Arial 12)

The screening study consists of a stability study of 4224 crystals. An identical workflow is applied to each of the crystals using the automation software Queue Manager. Details of the expected calculation time consumption can be found on the following page, based on statistical averages from our previous datasets, rescaled based on a few test calculations on BrENIAC. With respect to previous projects the precision settings of various steps has been increased to make the data compatible with public projects such as Materials project (materialsproject.org). Sufficient calibration tests have been performed for these systems in the pilot phase and previous TIER1 projects and thus are no longer needed during this project.

	Node day calculation								Storage volume estimate	
Computational task	# of such tasks	Wall clock time (days) per task	# Tier1 nodes per task	# node days per task	# CPU cores per task	Memory usage (GiB) / node per task	OpenMP / MPI / hybrid / vSMP	Tier2 DATA/HOME volume (GiB) + number of files	Tier1 SCRATCH volume (GiB) + number of files	
initial volume optimization	4224	0.04	1	168.96	28	15	MPI	0.0 / 2 (tar)	0.3 / 20	
Full geometry optimization	4224	0.48	1	2027.52	28	15	MPI	0.0 / 2 (tar)	0.3 / 20	
Equation of state generation	4224	0.38	1	1605.12	28	15	MPI	0.0 / 14 (tar)	2.0 / 140	
Final single point calculation	4224	0.025	1	105.60	28	20	MPI	0.05 / 2 (tar)	0.3 / 20	
Density Of States	4224	0.015	1	63.36	28	20	MPI	0.1 / 2 (tar)	0.7 / 20	
Band structure	4224	0.020	1	84.48	28	20	MPI	0.1 / 2 (tar)	0.7 / 20	
total	4224	0.96	1	4055.04				950.4 / 143616 (tar) (all 4224 tasks)	860 / 48000 (peak)	

- **initial volume optimization:** the unit cell of the crystal is decorated with the chosen quartet of elements, and without altering the relative positions of the atoms a first estimate of the volume of the unit cell is searched.
- **full geometry optimization:** for the unit cell volume achieved in the previous step, the position of the atoms and the shape of the unit cell is optimized. This is by far the most time-consuming step.
- **equation of state generation:** for the optimized cell resulting from the previous step, an equation of state is determined that yields an accurate volume and bulk modulus. In contrast to previous projects each data point will optimize internal positions.
- **single point calculation:** the crystal is now fully optimized, and an accurate total energy can be determined. This is the number that will be used for the stability assessment.
- **density of states + band structure:** a lot of useful information is implicitly contained in the DOS and band structure of the crystal. By computing and storing this information now, relations between stability and macroscopic properties of the crystal can be established later.

9. Describe the software required to perform the computing task(s). Please clearly provide the following per item in this regard:

- a reference to the software's web page
- the software license system (open source, GPL, etc.)
- if there is no free academic use of the software, state which license makes the installation and the use valid on the Tier-1 by the Applicant (+ add a copy of the signed license)
- if need be, which license server will be used (name + IP address)
- whether the software is already available on the Tier-1 (see <https://www.vscentrum.be/cluster-doc/software/tier1-muk>) and, if this is not the case, compilation and installation instructions (possibly with reference to existing Tier-2 installation)

Provide the results of scaling tests that were conducted with this software, preferably on Tier-1 (using, e.g., a Starting Grant) for system/problem sizes that are on par with those of the intended computing tasks (e.g., same mesh sizes, actual molecular system, ...). If not, provide the name, architecture, #cores, memory, etc. of the machine that was used to obtain these results.

Provide both a table and scaling plot such as table 1 and plot 1 in the appendix (max. 2 A4 in Arial 12).

VASP 5.4.1

- <http://www.vasp.at>
- License: attached at the end of the document
- The software is already available on the TIER1 infrastructure.

Queue Manager is self-developed and has been tested on the machine, it does not perform any actual calculations, only handling logistics, so does not require scaling tests.

Within this study the goal is to perform a large amount of single node jobs meaning intranode scaling is most important. The systems are too small for multinode processing. The possible combinations of k-point and band parallelization within a node were tested on BrENIAC for a prototype crystal with results shown in Table 1. Due to the sparsity of the matrix, resulting from the 28-core architecture the table has not been plotted.

Table 1: Intranode scaling behavior for a prototype quaternary crystal: cpu time for 1 ionic step in seconds

NCORE KPAR	1	2	4	7	14	28
1				364.085	349.149	383.394
2				333.333	327.601	
4				320.397		
7	329.332	393.445	430.308			
14	374.346	422.255				
28	599.281					

Best performance is obtained for NCORE=7 and KPAR=4, meaning each group of 7 cores, calculates 1 band on 1 k-point. Performance is similar for KPAR=2 where 1 k-point can most likely be calculated per CPU, while higher KPAR causes overhead, most likely due to the increased memory requirements.

More generic VASP scaling behavior tested on BrENIAC within our group is attached at the end of this document.

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

Similar usage on a monthly basis. Queue Manager will also generate new jobs at night/during holidays.

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

Projects with M. Sluydts as participant:

2016-2 Shape tuning of CdSe nanostructures by ab initio determination of the anisotropic growth mechanism.

2015-20 Computational Discovery of Quaternary Zintl Phases
2015-007 Hunting for new quaternary Zintl phases of the 1:1:1:4 stoichiometry
2014-032 High-throughput determination of vacancy trapping enthalpies for the improvement of electronic device production

Output:

PhD dissertation M. Sluydts ISBN 978-94-619-433-4

Master thesis K. Dumon and T. Crepain

10.1021/acsnano.5b06965

Article: M. Sluydts et al. "High-throughput screening of extrinsic point defect properties in Si and Ge: database and applications" – Under review at Chem. Mater.

12. Are the applicants of this application bound by a confidentiality agreement? If so, the title and the abstract of this application will not be published on the website of the FWO / Flemish Supercomputer Center.

yes / no

Should you have any questions or encounter any difficulties during the electronic submission of an Application, please contact by e-mail:
Associatie KU Leuven: hpcinfo@kuleuven.be
Associatie Universiteit Gent: hpc@ugent.be
Associatie Universiteit Hogescholen Antwerpen: hpc@uantwerpen.be
Associatie Universiteit Hogescholen Limburg: geertjan.bex@uhasselt.be
Universitaire Associatie Brussel: rosette.vandenbroucke@vub.ac.be
For the other institutions: caroline.volckaert@FWO.be

VASP benchmark on BrENIAC

Kurt Lejaeghere – Arthur De Vos – Sam De Waele

1. Background

BrENIAC contains 580 nodes with 28 cores each, which are of the Broadwell E5-2680v4 type. Each node has 128 or 256 GB RAM and consists of 2 NUMA regions of 14 cores. The network is connected through an Infiniband EDR 2:1 connection.

To benchmark the performance of VASP (module VASP/5.4.1-intel-2016a) on BrENIAC, three very different test systems were considered:

- A doubled Fe_{16}N_2 unit cell with one N atom removed
(35 atoms, 224 bands, 196 irreducible k-points, vasp_std)
designated by tag METAL
- a Ge semiconductor surface with Pt atoms adsorbed
(100 atoms, 336 bands, 8 irreducible k-points, vasp_std)
designated by tag SEMI
- the metal organic framework UiO-66 with two missing linker defects
(420 atoms, 1120 bands, 1 irreducible k-point, vasp_gam)
designated by tag PORE

2. Optimal parallelization on 1 node

VASP has the possibility to parallelize over k-points and, for a given k-point, over electronic bands. In general, parallelization over k-points is more efficient, since it requires almost no communication between subprocesses. However, it also substantially increases the memory requirements, since the calculation of the wavefunction at 1 k-point is based on knowledge of all energy levels at that k-point. The memory needed therefore increases when more k-points are computed simultaneously (KPAR). Analogously, parallelization within 1 band occurs by grouping blocks of plane waves in diagonalization routines and allows spreading the memory even thinner. It is more favourable for the memory requirements to devote more cores to a single electronic band (NCORE), equivalent with fewer bands per node, but this behaviour is less distinct.

Table I: Walltime of a calculation of METAL, SEMI and PORE on 1 node, depending on the parallelization settings (number of k-points treated simultaneously, KPAR, and number of cores per band, NCORE).

wall time METAL [s]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	9863	6772	6402	6924
KPAR = 2	8654	6515	5601	
KPAR = 4	8435	6369		

wall time SEMI [s]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	777	770	710	687
KPAR = 2	775	769	685	
KPAR = 4	720	729		

wall time PORE [s]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	4900	4091	4059	3809

Table II: Memory usage per core for a calculation of METAL, SEMI and PORE on 1 node, depending on the parallelization settings (number of k-points treated simultaneously, KPAR, and number of cores per band, NCORE).

mem METAL [MB]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	1499	933	883	896
KPAR = 2	2002	1486	1446	
KPAR = 4	3091	2601		

mem SEMI [MB]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	328	199	193	187
KPAR = 2	424	307	297	
KPAR = 4	643	525		

mem PORE [MB]	NCORE = 1	NCORE = 7	NCORE = 14	NCORE 28
KPAR = 1	736	406	369	352

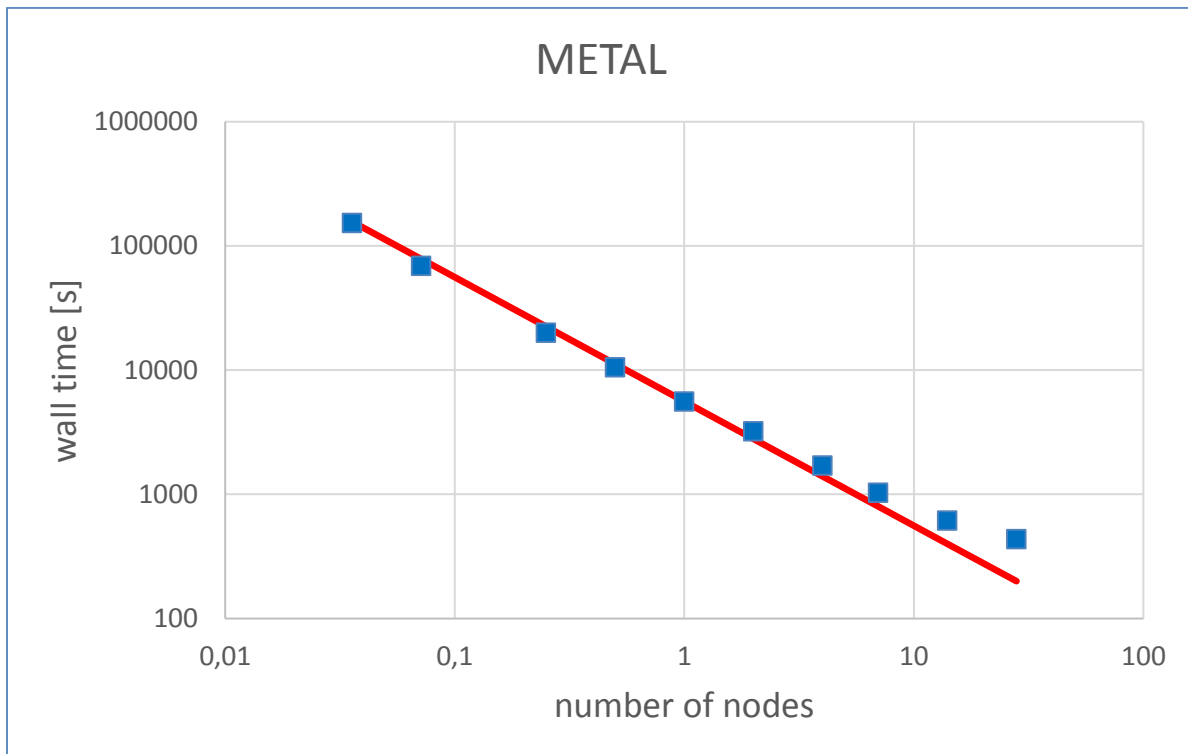
In terms of timing, we see that a higher order of k-point parallelization reduces the required wall time. However, it is not immediately clear which band parallelization is optimal. Many systems benefit from NCORE = 7 or 14, in line with the use of 1 shared memory per band, but for specific systems and number of plane waves, NCORE = 1 may become most favourable (e.g. when increasing the number of plane waves for SEMI). We can only conclude that the *best tradeoff between k-point parallelization and band parallelization needs to be tested for the particular system at hand*. This can be done quite easily, using only a few test calculations (e.g. NCORE = 1, 7, 14 and 28 at KPAR = 1 on 1 node for a representative

system and cutoff energy) and for the optimal configuration taking *KPAR as high as possible*. In addition, the guidelines for memory should be taken into account as well, since *large systems or systems with many k-points (like METAL) may suffer from too high memory requirements*. Finally, the NSIM tag does not matter too much, but NSIM = 1 is strongly discouraged, as it drastically increases the computation time (default is NSIM = 4).

In comparison to Ghent clusters, the (empty) BrENIAC machine performs exceptionally well. For the SEMI system, timings are about two times as good as the best wall times ever achieved on Muk (1378 s in 2013). The same is true in comparison to golett, one of the most recent machines on the UGent HPC (1300 s in 2016). These numbers were scaled to be comparable to the 28 cores per node of BrENIAC. Note, however, that the wall time on golett was measured on the machine in full loading (whereas the BrENIAC machine was almost empty), which has a large impact on the speed of the calculations.

3. Intra- and multinode scaling

Figure 1: Intra- and multinode scaling of the wall time for the METAL system.



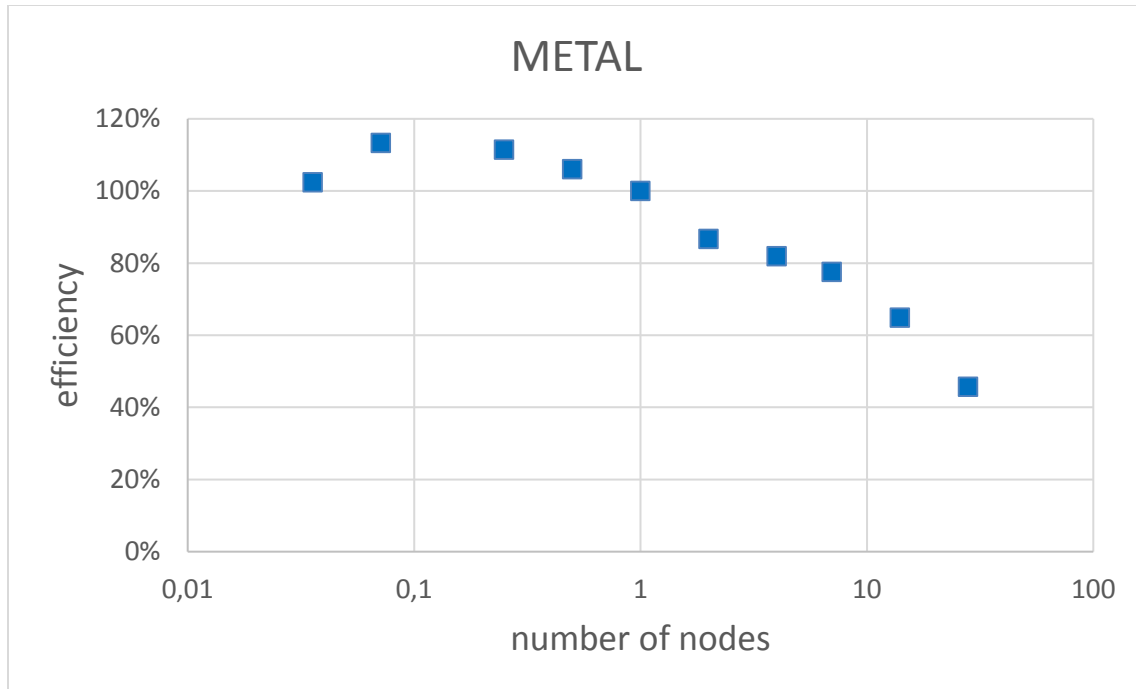
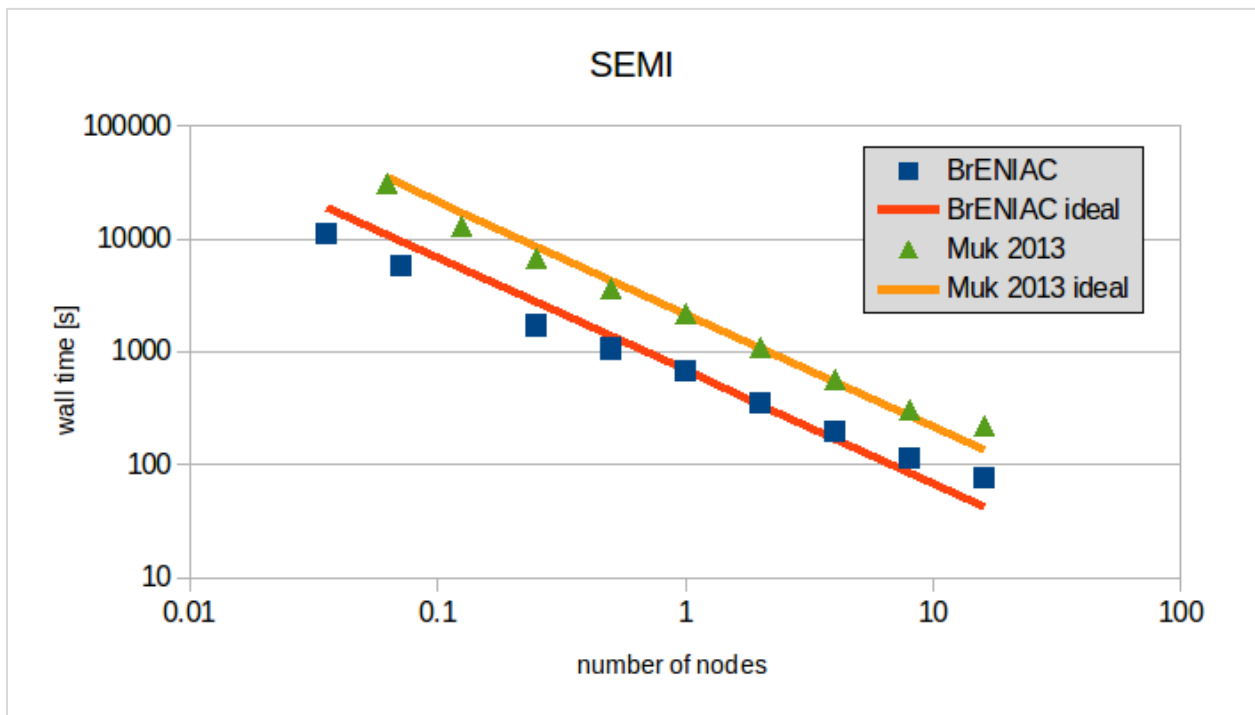


Figure 2: Intra- and multinode scaling of the wall time for the SEMI system (BrENIAC 2016 and Muk 2013). The red and orange lines denote the ideal scaling behaviour.



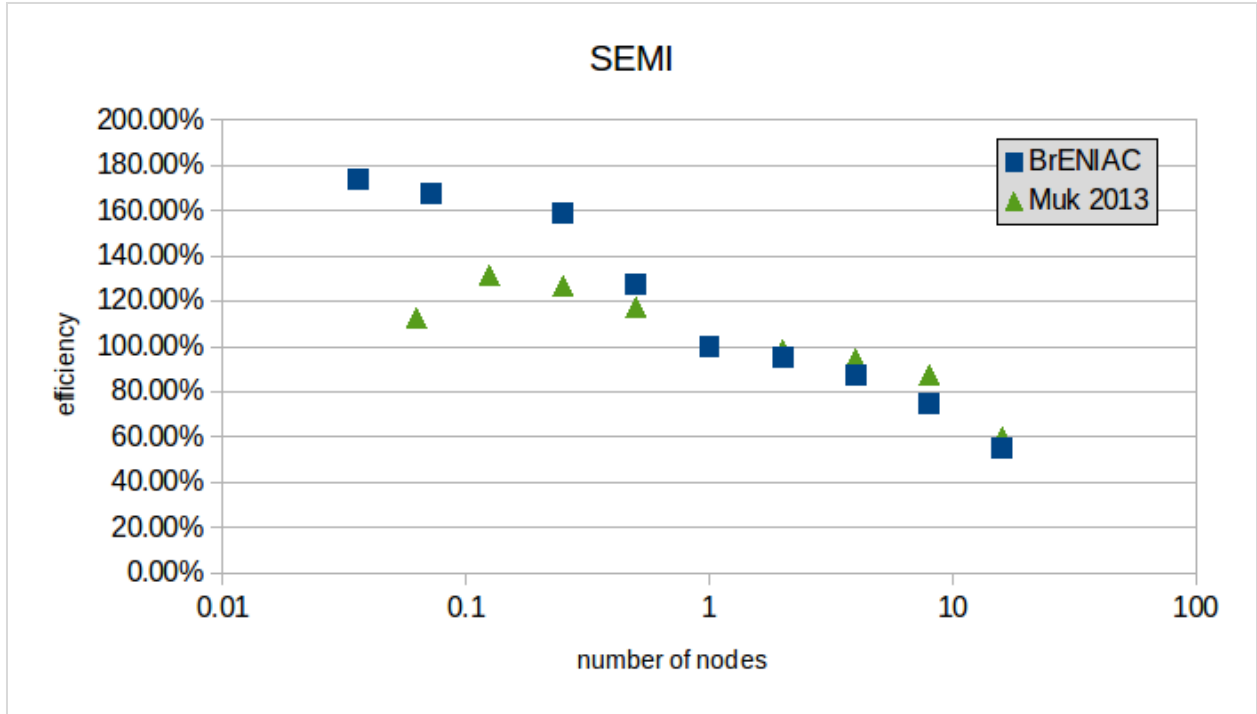
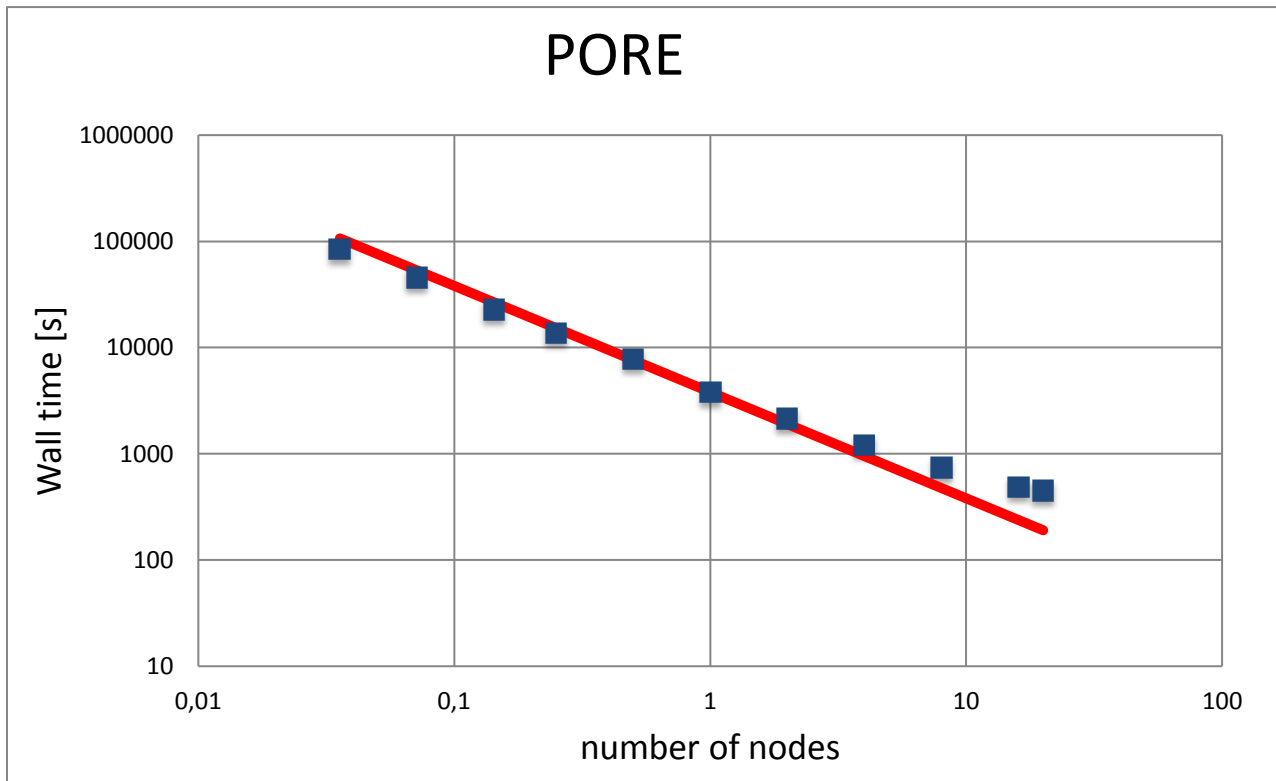
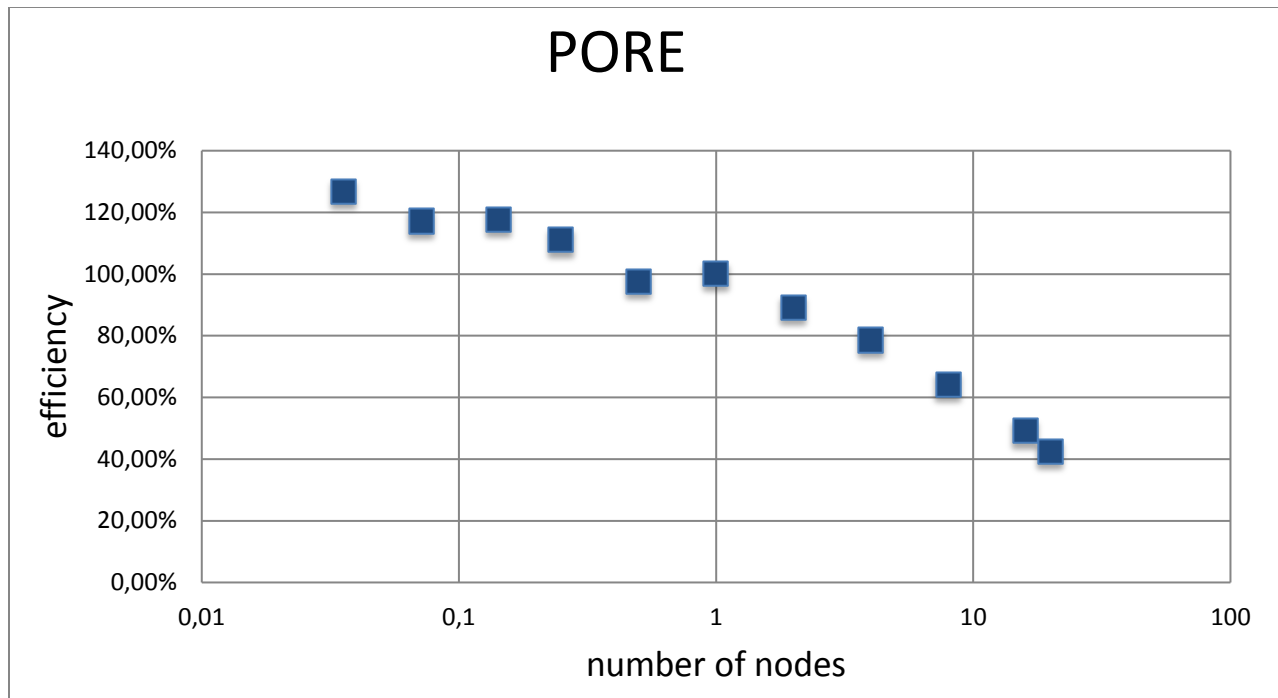


Figure 3: Intra- and multinode scaling of the wall time for the PORE system. The red line denotes the ideal scaling behaviour.





By performing the calculations on a few cores up to multiple nodes, we note that the computational efficiency proceeds in 2 steps. On the one hand, it remains most efficient to perform calculations on 1 or a few cores, and up to the use of an entire node, the efficiency steadily declines. This intranode scaling differs significantly for different systems, however, with poor scaling for SEMI and almost ideal scaling for METAL. *The multinode scaling, however, is quite efficient*, and parallelization over 8 nodes leads to wall times that are still 60-80 % of the efficiency of a single node. Beyond 16 nodes, efficiency drops below 50 %, and calculations are only advisable if they cannot be calculated within 72h on fewer nodes. This behaviour is similar for all tested systems, despite their large diversity, and in line with tests on Muk in 2013 (see Figure 2). We may therefore conclude that it is *not meaningful to perform such scaling tests time and again; only the optimal parallelization settings on 1 node need to be examined when considering a new system.*

As a final note concerning the parallelization settings in multinode calculations, we remark that it is best not to parallelize 1 k-point or 1 band over multiple nodes. Using KPAR equal to the number of nodes (or higher) decreases the computational load significantly, because k-point parallelization requires little communication. For the SEMI system on 2 nodes, for example, a k-point-parallelized calculation (KPAR = 4, NCORE = 14) takes 359 s, while a band-parallelized calculation (KPAR 1, NCORE = 14) takes 408 s. For the METAL system, the difference is huge: 14 002 s for KPAR = 4 and NCORE = 14, compared to 43 229 s for KPAR = 1 and NCORE = 14.

SOFTWARE LICENSE AGREEMENT FOR THE USE OF VASP5.2 BY ACADEMIC INSTITUTIONS

The Universität Wien, Austria (UW in the following) and Ghent University, Belgium (UG in the following) ¹ conclude the following agreement:

(1) The UG acquires a non-exclusive academic license for the use of the software-package VASP (Vienna ab-initio simulationprogram) for ab-initio local-density-functional total-energy and molecular-dynamics calculations, **versions VASP5.2 and VASP4.6** by the research group Functional Nanomaterials (FUNNANO)². Under this licence the use of the software is restricted to a maximum of six researchers or students, all belonging to this research group and to the same organisational unit and working at the same location. The licence does not cover the use of VASP by external collaborators working at other institutions.

(2) The license covers access to the source-code, the program documentation and to the data-base for ultrasoft pseudopotentials and PAW-potentials. UW reserves the exclusive property of the software. It declines any liability for the software and any responsibility for the results of calculations produced with the program. The license does not cover any maintenance service for the software or support for its implementation.

(3) The license is not transferable to another research group of UG without the written agreement of UW. UW reserves the right to refuse authorization of such a transfer. A transfer to a research group not belonging to UG is excluded.

(4)The UG guarantees that the software or parts thereof shall not be made accessible to third parties without the explicit written consent of UW. Access to the code and to the data-base shall be made available through an account of the UW. The UG guarantees that the password for this account will be known only to one contact-person and shall not be communicated to temporary co-workers or guests. All installations of the source code, the executable or the data-base must be copy-protected and accessible only to the authorized users.

¹Please insert here the name of the institution concluding this agreement with UW. This institution must be a legal person and the agreement must be signed by an authorized representative of this institution. Define the acronym (replacing) under which this institution is referred to in the text of the agreement.

²Please insert here the name and affiliation research group for which the license is acquired

SOFTWARE LICENSE AGREEMENT FOR THE USE OF VASP5.2 BY ACADEMIC INSTITUTIONS

(5) If VASP is used as the basis of further methodological or software-development, UG agrees to make these additions available to UW. UW will also be entitled to include these additions in further releases of VASP.

(6) In future publications of work performed using VASP, the use of the software shall be properly acknowledged, e.g. in the form

”The calculations have been performed using the ab-initio total-energy and molecular-dynamics program VASP (Vienna ab-initio simulation program) developed at the Institut für Materialphysik of the Universität Wien [1-3].”

[1] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11 169 (1996).

If the PAW-version is used, reference will be made to

[2] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. **59**, 1758 (1999).

If special features implemented in VASP will have been used, reference should be made to the relevant publications as listed on the VASP home-page.

(7) The UG accepts to pay to UW a licence fee Euro 4.000,- (fourthousand Euro). The licence fee is strongly discounted and applies only to academic institutions with undergraduate teaching.

(8) The licensee will use VASP exclusively for non-profit research. If VASP is used in contractual research in cooperation with or for industry or for military institutions, the financial conditions will have to be re-negotiated.

(9) UW declares that it has the full power and authority to grant the rights granted in this agreement without the consent of any other person, and that the license and use of the software by the licensee will not in any way constitute an infringement or other violation of any copyright, proprietary right or any other rights of any third party.

(10) Any disputes arising from the license agreement are subject to the laws of the Republic of Austria.

(11) The terms of this agreement shall prevail any terms or conditions of the licensee.

**SOFTWARE LICENSE AGREEMENT FOR THE USE OF VASP5.2 BY
ACADEMIC INSTITUTIONS**

For the Universität Wien:

Jürgen Hafner
Fakultät für Physik, Universität Wien
Sensengasse 8/12, A-1090 Wien, Austria

Date

For the UG

Name (in print): Michel Waroquier
Institution: Faculty of Sciences, Ghent University

Address: Technologiepark 903, BE-9052 Zwijnaarde, Belgium

Date: 26 January 2010

For the research group entitled to use VASP5.2:

Name (in print): Veronique Van Speybroeck (FUNNANO)



FWO - Stichting van Openbaar Nut – Ondernemingsnummer 0880.212.840

OVEREENKOMST FWO - ONDERZOEKSPROJECT

TUSSEN

Het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen, Egmontstraat 5, 1000 Brussel, vertegenwoordigd door dr. Jurgen Tack, secretaris-generaal, hierna het FWO genoemd, enerzijds,

de onthaalinstelling(en)

Universiteit Gent

EN

de verantwoordelijk woordvoerder van het onderzoeksproject van het FWO met dossiernummer **G.0E01.16N**

Stefaan Cottenier
Universiteit Gent

anderzijds,

WORDT HET VOLGENDE OVEREENGEKOMEN

Artikel 1 - De volgende bijlagen maken integraal deel uit van deze overeenkomst:

- Bijlage 1: Projectomschrijving – onderzoeksproject G.0E01.16N
- Bijlage 2: Het FWO - Reglement inzake de onderzoeksprojecten
- Bijlage 3: Het FWO - Algemeen reglement

UITVOERING

Artikel 2 - De vermelde promotor en copromotoren verbinden er zich toe het onderzoeksproject, zoals omschreven in de oorspronkelijke kredietaanvraag, uit te voeren.

Artikel 3 - het FWO verbindt er zich toe de subsidies vermeld in bijlage 1 voor de duur van de overeenkomst en overeenkomstig de modaliteiten van het FWO-reglement inzake onderzoeksprojecten, uit te betalen.

Artikel 4 - De onthaalinstelling(en), vertegenwoordigd door hun rector of directeur, bieden de promotor of de copromotor(en) de mogelijkheid om in hun laboratoria of diensten het in deze overeenkomst vermelde onderzoek door te voeren.

DUUR

Artikel 5 - Het onderzoek dat het voorwerp van deze overeenkomst uitmaakt zal worden uitgevoerd gedurende de periode zoals bepaald in bijlage 1 en voor zover de bevoegde instanties het FWO de hiertoe nodige middelen verschaffen.

BEHEER VAN DE MIDDELEN

Artikel 6 – Het financieel opvolgen van de toegekende kredieten wordt toevertrouwd aan de financiële diensten van de universiteit of de wetenschappelijke instelling waaraan de promotoren en copromotoren verbonden zijn.

Artikel 7 - De promotor treedt op als verantwoordelijk woordvoerder t.o.v. de administratie van het FWO en beheert de middelen.

VERANTWOORDELIJKHEID

Artikel 8 - De uitvoering van deze overeenkomst stelt in geen geval het FWO aansprakelijk voor schade aan personen of goederen, die rechtstreeks of onrechtstreeks het gevolg is van het gesubsidieerd onderzoek.

Artikel 9 – Indien het onderzoek experimenten op de menselijke persoon omvat, die vallen onder de bepalingen van de Wet van 7 mei 2004 betreffende de experimenten op de menselijke persoon, dan dient voorafgaandelijk een verzekering afgesloten te worden door de instelling die optreedt als opdrachtgever (universiteit of ziekenhuis).

WETENSCHAPPELIJKE INTEGRITEIT

Artikel 10 - Het FWO waakt over de wetenschappelijke integriteit vanaf het moment waarop onderzoeksfinanciering wordt aangevraagd tot de uitvoering van het onderzoek en de publicatie van de onderzoeksresultaten. Daarom zijn onderzoekers die beroep doen op de ondersteuning van het FWO, alsook hun gastinstellingen, (co)promotoren en andere bij het FWO-onderzoek betrokken medewerkers, te allen tijde verplicht de wetenschappelijke integriteit in acht te nemen.

Elementaire gedragsregels in dat verband, vastgelegd in de *Ethische Code voor wetenschappelijk onderzoek in België* en de *European Code of Conduct for Research Integrity*, zijn van toepassing. Het FWO gaat ervan uit dat elke onderzoeker van bij de indiening van een aanvraag kennis heeft genomen van deze codes en zich ertoe verbindt hun bepalingen te zullen volgen in alle stadia van het voorgestelde onderzoek. Dat geldt ook voor hun gastinstellingen, (co)promotoren en bij het FWO-

onderzoek betrokken medewerkers voor wie zij mede verantwoordelijkheid dragen. Bij twijfel over de toepasselijkheid of de wijze van toepassing van een bepaling zal de gastinstelling en/of de onderzoeker die verantwoordelijk is voor het project contact opnemen met de FWO-administratie met het oog op verduidelijking en het maken van concrete afspraken daarover.

EINDE VAN DE OVEREENKOMST

Artikel 11 - Elk der partijen kan, mits een opzeg van minimum zes maanden, de overeenkomst verbreken, die bijgevolg voor alle betrokken partijen vervalt.

Artikel 12 - Elke wijziging van het voornaamste onderdeel van het onderzoeksprogramma heeft automatisch tot gevolg dat de overeenkomst binnen de zes maanden wordt stopgezet.

Het origineel is beschikbaar bij het FWO. De overige partijen verklaren een eensluidend afschrift van de overeenkomst en van het reglement inzake Onderzoeksprojecten te hebben ontvangen.

Brussel, 18 november 2015

voor het FWO

A handwritten signature in black ink, consisting of a large, stylized 'J' followed by a series of loops and a final flourish.

Jurgen Tack
secretaris-generaal

voor de Universiteit Gent

A handwritten signature in black ink, starting with a large 'A' and ending with a long, sweeping horizontal line.

Anne De Paepe
rector

de verantwoordelijk woordvoerder

A handwritten signature in blue ink, featuring a large, stylized 'S' followed by a series of loops and a final flourish.

Stefaan Cottenier
promotor

BIJLAGE 1: PROJECTOMSCHRIJVING

VOORWERP

I) Nummer van het onderzoeksproject: G.0E01.16N

II) Duur van de overeenkomst: 1/01/2016 - 31/12/2019

III) Promotor(en) van het onderzoeksproject:

De promotor, verantwoordelijk woordvoerder tegenover het FWO krachtens artikel 9 van het reglement inzake Onderzoeksprojecten van het FWO:

Stefaan Cottenier
Universiteit Gent

IV) Omschrijving van het onderzoeksproject:

Een steviger fundament voor de betrouwbaarheidsaanspraken van dichtheidsfunctionaaltheorie voor vaste stoffen

V) Onthaalinstelling(en):

Universiteit Gent

VI) Toegekende kredieten:

Universiteit Gent

Personeel- en werkingskrediet:

2016: € 60.000,00

2017: € 60.000,00

2018: € 60.000,00

2019: € 60.000,00

Uitrustingskrediet:

2016: € 0,00

Onderzoeksproject G.0E01.16N

Bijlage II: Reglement inzake de Onderzoeksprojecten

ALGEMEEN REGLEMENT

Het algemeen reglement is van toepassing.

Uitgebreide informatie, volledige reglementen en formulieren zijn on line beschikbaar.
Alle aanvullende inlichtingen kunnen worden bekomen op het secretariaat van het Fonds
Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen, Egmontstraat 5 te 1000 BRUSSEL,
telefoon 02 512 91 10.

ACHTERGROND

Art. 1.

De Vlaamse Regering verleent het FWO krachtens art. 169 van het Decreet betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap van 12 juni 1991 (Belgisch Staatsblad, 4/7/1991) een toelage ter ondersteuning van niet-gerichte **onderzoeksprojecten (*)**.

In het kader van het Koninklijk Besluit van 18 januari 1965 (Belgisch Staatsblad 5/2/65) ontvangt het Interuniversitair Instituut voor Kernwetenschappen (IIKW) een federale toelage van het Federale Ministerie voor Economische Zaken en Energie (Overeenkomst van 12/4/1965).

Het Fonds voor Geneeskundig Wetenschappelijk Onderzoek (FGWO) wordt federaal betoelaagd door het federale Ministerie van Volksgezondheid (Overeenkomst van 7/11/1969, aangepast in 8/1971).

Het FWO beheert al de voormelde toelagen.

* Franse nomenclatuur: Programme de Recherche du Fonds de la Recherche Scientifique - Flandre (FWO). Duitse nomenclatuur: Forschungsprojekt des Fonds für Wissenschaftliche Forschung - Flandern (FWO). Engelse nomenclatuur: Research Programme of the Research Foundation - Flanders (FWO).

Art. 2.

De onderzoeksprojecten van het FWO hebben tot doel het bevorderen van fundamenteel wetenschappelijk onderzoek, op initiatief van de onderzoekers in alle disciplines.

ONDERZOEKSPROJECTEN

Art. 3.

De Raad van Bestuur van het FWO kan toelagen toekennen voor onderzoek doorgevoerd aan universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap, aan de Evangelische Theologische Faculteit in Leuven en de Faculteit voor Protestantse Godgeleerdheid in Brussel, eventueel in samenwerking met Vlaamse of Federale wetenschappelijke instellingen. Zo het onderzoek gebeurt in samenwerking met een hogeschool zal het worden uitgevoerd onder de leiding en de verantwoordelijkheid van een Vlaamse universiteit.

Een onderzoeksproject wordt uitgevoerd onder leiding van een promotor, eventueel in samenwerking met één of meerdere copromotoren.

Accent wordt gelegd op projecten, die het eigen onderzoek in een groter wetenschappelijk geheel onderbrengen.

AANVRAGEN

Art. 4.

De aanvragen om subsidies worden, via de onthaalinstelling van de promotor, ingediend in het Engels door middel van online ingevulde formulieren. Betrokken formulieren moeten op het secretariaat van het FWO toekomen, uiterlijk op 1 april om 17u00 van het jaar dat het budgettaire dienstjaar, waarop het krediet is aangevraagd, voorafgaat. Zo deze datum op zaterdag of zondag valt wordt de indienlimiet verdaagd tot de daaropvolgende maandag om 17u00.

Art. 5.

Een onderzoeker kan per aanvraagronde voor maximaal twee projecten optreden als (co-)promotor. Wanneer de promotor-woordvoerder een project krijgt toegekend en hiervoor financiering ontvangt, kan hij/zij de aanvraagronde nadien geen aanvraag indienen als promotorwoordvoerder of als copromotor. Indien een aanvrager als co-promotor financiering ontvangt, kan hij/zij de aanvraagronde nadien wel meedingen voor nieuwe financiering.

Alle briefwisseling met het FWO gebeurt via de promotor als verantwoordelijke woordvoerder. Tevens ontvangen de copromotoren een kopie van deze briefwisseling.

Art. 6.

Indien een onderzoeksproject doorgevoerd wordt in de schoot van één of meerdere universiteiten of wetenschappelijke instellingen of hogescholen, zal de aanvraag bovendien:

- moeten bewijzen dat dit project verder reikt dan de huidige opdracht van de dienst of van de diensten, die er belang bij hebben, en dat de uitvoering ervan middelen vereist die de normale financiële mogelijkheden van bedoelde dienst(en) overschrijden;
- het aandeel aanduiden - in speciën of in prestaties - van voornoemde instelling(en) in de verwezenlijking van het onderzoeksproject.

EVALUATIE

Art. 7.

Voor de ex ante, intermediaire en ex post evaluatie van de dossiers doen de bestuursorganen een beroep op de wetenschappelijke commissies van het FWO. Voor de ex ante evaluatie wordt bovendien een beroep gedaan op externe referenten, overeenkomstig het reglement over interne en externe peer review.

Art. 8.

De promotoren moeten aan het FWO een wetenschappelijk verslag voorleggen:

- voor de in uitvoering zijnde projecten: het laatste jaar van de overeenkomst, een wetenschappelijk verslag, waarin de vorderingsstaat van het onderzoek evenals het nog uit te voeren gedeelte van het project wordt aangegeven, samen met de lijst van de eventuele wetenschappelijke publicaties.
- voor de volledig afgewerkte projecten : bij het verstrijken van de overeenkomst, een eindverslag over de wetenschappelijke activiteiten waaraan de lijst van de publicaties met betrekking tot dit project moet worden toegevoegd.

OVEREENKOMST

Contractuele partijen

Art. 9.

De kredieten, door het FWO verleend, worden in een overeenkomst nader omschreven. De bij deze overeenkomst betrokken partijen zijn:

De promotor en de copromotoren die de verplichting aangaan het gesubsidieerde onderzoek te ondernemen of verder te zetten.

§1. De promotor die ook de verantwoordelijke woordvoerder is t.a.v. het FWO, is ofwel:

- 1° een ZAP-lid met een aanstelling van meer dan 10% aan een Vlaamse universiteit;
- 2° een ZAP-lid dat een aanstelling van 10% heeft aan een Vlaamse universiteit met een onderzoeksopdracht
- 3° een ZAP-lid dat een aanstelling van 5% heeft aan een Vlaamse universiteit én kliniekhof of adjunct-kliniekhof is of een gelijkgestelde functie heeft in een Universitair Ziekenhuis;
- 4° een academisch personeelslid, met een aanstelling aan de Evangelische Theologische Faculteit in Leuven en de Faculteit voor Protestantse Godgeleerdheid in Brussel;
- 5° een onderzoeksdirecteur van het FWO

6° een nominatieve beneficiant van een ERC Starting Grant, een ERC Consolidator Grant, een Advanced Grant of een Odysseus II toelage, met een Vlaamse universiteit als onthaalinstelling.

§2. Alle copromotoren zijn onderzoekers op minstens postdoctoraal niveau. De copromotoren zijn verbonden aan een Vlaamse universiteit, of een academische opleiding van een Vlaamse School of Arts, of de Hogere Zeevaartschool, of een Vlaamse onderzoeksinstelling, of een Vlaams universitair ziekenhuis, of de Transnationale universiteit Limburg, of de Evangelische Theologische Faculteit in Leuven, of de Faculteit voor Protestantse Godgeleerdheid in Brussel, of een federale wetenschappelijke instelling, waarbij de copromotor behoort tot het Nederlands taalkader. (Onderzoekers uit het buitenland kunnen als copromotor bij het project betrokken worden zonder financiering door het FWO, voor zover de samenwerking relevant is voor het project.)

§3. Indien bij het project meerdere universiteiten betrokken zijn, dient per universiteit minstens de promotor of één copromotor te voldoen aan de voorwaarden, zoals vermeld in §1, lid 1°, 2°, 3°, en bovendien een aanstelling te hebben die de duur van het aangevraagde onderzoeksproject volledig dekt.

§ 4. Indien op het ogenblik van de aanvraag nog niet voldaan is aan de voorwaarden, vermeld in § 1 , dient de aanvrager aan te tonen dat dit wel het geval zal zijn bij de start van de overeenkomst.

Art. 10.

In het bijzondere geval van onderzoek dat gemeenschappelijk door een promotor en copromotoren in verschillende onthaalinstellingen doorgevoerd wordt, dient iedere promotor en iedere onthaalinstelling bij de overeenkomst betrokken te zijn: het contract zal alle nodige bepalingen omvatten inzake het aantrekken van personeel, het beheer der toelagen en de eigendom van de toegekende apparatuur.

DUUR EN MODALITEITEN

Art. 11.

In beginsel duren de onderzoekscontracten vier jaar en zijn ze eventueel met maximum twee jaar hernieuwbaar.

Art. 12.

Het opgemaakte contract zal eenzijdige verbrekingsclausules omvatten, die in ieder geval van vooropzeggingsbepalingen zullen vergezeld zijn.

Art. 13.

Het FWO zal de onthaalinstellingen verzoeken hun instemming te willen geven betreffende het doorvoeren, in hun lokalen, van het door het FWO ondersteund onderzoek. Het akkoord van de hoofden der onthaalinstellingen zal worden gevraagd aangaande de toegankelijkheid,

voor onderzoekers van andere instellingen, tot de installaties ter beschikking gesteld door het FWO.

Art. 14.

Daar de toelagen uitsluitend worden toegekend voor het uitvoeren van onderzoeksprojecten goedgekeurd door het FWO, zijn de promotoren verplicht ze alleen hieraan te besteden. Zodra hun aanwending deze verplichting niet meer nakomt, zullen de toelagen - of hun saldi - moeten terugvallen aan het FWO.

Art. 15.

Elke fundamentele verandering van het in uitvoering zijnde onderzoeksproject moet het voorwerp uitmaken van een onderzoek, gelijk aan die voor een nieuwe aanvraag en zal in een aanpassing van de overeenkomst, die de oorspronkelijke overeenkomst niet verlengt, worden opgenomen. Elke gedeeltelijke wijziging van het onderzoeksproject, alsook elke wijziging van de voorziene uitgaven, moeten vooraf de goedkeuring van het FWO bekomen.

Kostencategorieën

Art. 16.

§ 1. Voor de uitvoering van onderzoeksprojecten kan het FWO middelen toekennen voor twee categorieën:

1^e categorie: middelen voor personeel en werking

2^e categorie: middelen voor apparatuur (uitrusting)

Deze middelen kunnen niet overgedragen worden van de 1^e categorie (personeel en werking) naar de 2^e categorie (uitrusting) en omgekeerd.

§ 2. Per project en in het geval van een interuniversitair project, kan per onthaalinstelling, tussen de 45.000 en 130.000 euro per jaar personeel- en werkingsmiddelen worden aangevraagd. Voor interuniversitaire projecten kan de ondergrens voor de partner verlaagd worden naar 20.000 euro.

§ 3. De Expertpanels kunnen het gevraagde budget indien nodig reduceren, maar niet verhogen en dienen zich wel aan de gestelde boven- en ondergrens te houden.

§ 4. Voor uitrustingsmiddelen kan maximum 150.000 euro worden aangevraagd. Het aanvragen van matching funding tot maximaal 150.000 euro is mogelijk.

§ 5. Voor projecten aangevraagd in het kader van gezamenlijke internationale oproepen, zoals in het kader van ERA-NET en Joint Programming Initiatives, gelden de in §2 van dit artikel vermelde limieten niet.

§ 6. Aan de promotoren en copromotoren kan geen enkele bezoldiging of cumulatie met een bezoldiging worden toegestaan in het kader van een FWO-onderzoeksproject, tenzij de bestuursorganen een afwijking toestaan.

1) PERSONEEL EN WERKING

Art. 17.

§ 1. Op de toegekende personeels- en werkingsmiddelen kunnen de volgende kosten verantwoord worden, voor zover ze in de originele aanvraag vermeld zijn:

- a. Personeelskosten van wetenschappelijke of technische medewerkers;
- b. de normale werkingskosten, noodzakelijk voor de uitvoering van het project;
- c. kosten voor jobstudenten, enquêteurs en onkosten, voortvloeiend uit de uitnodiging van een gastonderzoeker in de onderzoekseenheid;
- d. kleine apparatuur van minder dan 20.000 EUR per eenheid, noodzakelijk voor het project;
- e. kosten van studieverblijven en deelname aan congressen in het buitenland voor zover deze in de lijn liggen van het toegekende onderzoeksproject;
- f. toegang tot en disseminatie van onderzoeksresultaten
- g. verplaatsingskosten in België.
- h. gebruik Vlaamse Supercomputer (VSC) (reglement en tarieven)

§ 2. Personeelskosten kunnen enkel verantwoord worden indien:

- het aanwerven van personeel is opgenomen in de originele aanvraag;
- het personeel werd aangeworven d.m.v. een arbeidsovereenkomst of een beursovereenkomst voor de aanstelling van een doctoraatsbursaal of postdoctoraal bursaal door de onthaalinstelling;
- wanneer het gaat om een aanstelling via een beurs, het beurzen zijn onderworpen aan de sociale zekerheid,

Personeelskosten kunnen gedurende de looptijd van de voor de uitvoering van het project door betrokken partijen ondertekende overeenkomst en het daarop volgende jaar worden verantwoord.

Vakantiegeld bij uitdiensttreding van personeelsleden, dat ofwel 3/4 van de duur van het project, ofwel ten minste drie opeenvolgende jaren op één of meerdere projecten van het FWO stond, kan worden verantwoord op een afzonderlijk daarvoor voorziene begrotingspost. Voor personeel dat niet aan de gestelde voorwaarden voldoet, dient dit wel op het project aangerekend te worden.

§ 3. Positieve saldi van de toegekende personeels- en werkingsmiddelen kunnen tot maximum twee jaar na de einddatum van de overeenkomst worden aangewend voor het verantwoorden van de kosten zoals bepaald in § 1, uitgezonderd de personeelskosten (§1, a).

Art. 18.

Zo de promotoren de toelating hebben in het kader van overeenkomsten door het FWO gesteund, personeel aan te trekken, verloopt de rekrutering van deze personeelsleden conform aan de bepalingen van de Gedragscode voor de Rekrutering van Onderzoekers, zoals door de Europese Commissie samen met het Europese Handvest voor Onderzoekers in 2005 gepubliceerd. Daarnaast dienen de aanstellingen te geschieden in overeenstemming met de terzake geldende wettelijke bepalingen en overeenkomstig de vergoedingen en reglementen van kracht in de onthaalinstelling, (in het overgrote deel van de gevallen dus volgens het stelsel van toepassing in de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap) voor wat betreft de hiërarchie der graden, de vereisten voor aanwerving en bevordering, alsmede de bezoldigingen.

De onthaalinstellingen kunnen desgewenst bijkomende eisen stellen.

De wetenschappelijke personeelsleden dienen aan de voorwaarden te voldoen om zich aan een universiteit in de Vlaamse Gemeenschap in te schrijven voor een doctoraat of houder te zijn van een diploma van Doctor op proefschrift of van een diploma of certificaat dat wettelijk of in toepassing van de richtlijnen van de Europese Unie of een bilateraal akkoord hiermee als gelijkwaardig wordt erkend, conform de bepalingen van het Decreet betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap van 12 juni 1991, art. 60 (Belgisch Staatsblad, 4/7/1991).

Binnen de objectieven, door het project gesteld, zal het onderzoek, zo mogelijk derwijze worden georganiseerd dat het voor de predoctorale onderzoekers kan leiden tot een doctoraat op proefschrift.

Vanaf het begrotingsjaar 2014 bezorgt de onthaalinstelling jaarlijks voor 15 maart van het daaropvolgende jaar aan het FWO een lijst met een overzicht van het personeel op de verschillende FWO-projecten. De lijst wordt opgedeeld per project/budget en vermeldt volgende gegevens: naam, voornaam, geboortedatum, nationaliteit, datum in dienst, datum uit dienst, tewerkstellingspercentage, contractsoort, statuut (BAP - doctoraatsbursaal, BAP - WM, ATP, ...) en hoogst behaalde diploma en een verklaring van de onthaalinstelling dat het wetenschappelijk personeel aan de gevraagde voorwaarden voldoet. De personeelsuitgaven op onderzoeksprojecten van het FWO, die niet aan deze voorwaarden voldoen, worden verworpen.

2) UITRUSTING

Art. 19.

Apparatuur: Alle materiaal, verworven dankzij een werkings- of uitrustingskrediet van het FWO, wordt eigendom van de universiteit of van een instelling voor wetenschappelijk onderzoek waaraan de titularis van het krediet verbonden is of van een hogeschool, krachtens een afspraak met een Vlaamse universiteit die in de aanvraag wordt opgenomen.

Deze instelling verbindt er zich nochtans toe het bedoelde materiaal ter beschikking te laten van de onderzoeker, gedurende de tijd die vereist is voor het afwerken van het onderzoek waarvoor het werd toegekend. Bovendien gaat ze de verbintenis aan het materiaal noch te verkopen, noch uit te lenen zonder de instemming van het FWO.

Ingeval het materiaal slechts mits bijdrage van een vreemd krediet kon worden aangekocht, beslissen de bestuursorganen van het FWO in overleg met de betrokken autoriteiten, over de eigendoms kwestie.

Het materiaal, aangekocht met een krediet van het FWO, door een onderzoeker die geen deel uitmaakt van de kaders van een universiteit, van een gelijkgestelde inrichting of van een Vlaamse of Federale wetenschappelijke instelling, blijft eigendom van het FWO. De houder van dergelijk materiaal verbindt er zich toe het in volmaakte staat - behoudens wat de normale slijtage of gevallen van overmacht betreft - terug in te leveren wanneer het hem niet langer meer van dienst is.

Art. 20.

Op de post apparatuur kan enkel de apparatuur die voor het project noodzakelijk is en die in de kredietaanvraag wordt vermeld, worden verantwoord. Het aangevraagde bedrag voor deze post mag de 150.000 EUR niet overschrijden. Matching funding tot 150.000 EUR is toegelaten.

Zo andere apparatuur dan deze vermeld in het aanvraagformulier zal aangekocht worden, dan dient dit vooraf bij het FWO te worden aangevraagd.

Op de post apparatuur is de verantwoording van werkings- en personeelskosten uitgesloten.

Uitgaven worden aanvaard zo ze gedateerd zijn tijdens het jaar van toekenning en de twee daaropvolgende budgettaire jaren.

OVERIGE BEPALINGEN

Art. 21.

Uitzonderlijk en grondig gemotiveerde aanvragen tot verlengingen moeten ten laatste tegen 30 november van het laatste jaar van de door het reglement toegestane aanwendingsduur, zijnde de duur van de ondertekende overeenkomst plus twee jaar, aan het FWO worden bezorgd en kunnen slechts voor maximum zes maand worden toegekend.

Art. 22.

Op voorwaarde dat dit door de overheid wordt toegestaan kunnen overheadkosten aan de onthaalinstellingen worden uitgekeerd volgens de door de overheid en het FWO nader te bepalen richtlijnen. Buiten deze overheadkosten mogen onderstaande rubrieken niet op een krediet van het FWO geheven worden:

- de huur, verwarming, verlichting, onderhoud van de lokalen en meubilair, daar dit kosten zijn die normaliter door de onthaalinstelling dienen gedragen te worden;
- de beheers- of administratiekosten.

BETALING – VERANTWOORDING – CONTROLE

Art. 23.

financieel verslag (rapportering) - betaling

§1. Per project wordt in de maanden april en juli een voorafbetaling van telkens 25% van het toegekende krediet, inclusief de overhead op het toegekende krediet in verhouding met de voorafbetaling en exclusief de kosten voor de personeelsadministratie berekend op basis van de personeelsuitgaven, van het betrokken jaar overgemaakt aan de onthaalinstelling. De kosten voor de personeelsadministratie op basis van de personeelsuitgaven worden berekend en uitbetaald bij de jaarlijkse afrekening en zitten vervat in het toegekende budget voor personeel en werking.

§2. Vanaf het begrotingsjaar 2014 wordt er voor 15 februari van het daaropvolgende jaar een prefiguratie ingediend bij het FWO van de te verantwoorde uitgaven op de onderzoeksprojecten.

§3. Vanaf het begrotingsjaar 2014 wordt er vóór 15 maart van het daaropvolgende jaar per project jaarlijks een financieel verslag bezorgd aan het FWO van het betrokken jaar. In het financieel verslag wordt er een opdeling gemaakt per categorie/krediet en boekingsnummer en boekingsdatum of factuurdatum en een globaal totaal per semester of per jaar. In het globaal financieel verslag worden de totalen per jaar per project en per categorie opgenomen. Dit financieel verslag wordt afgetekend door het hoofd van het departement financiën en een tweede verantwoordelijke (bijv. hoofd van de onderzoeksadministratie) ter staving dat de nodige controles werden uitgevoerd. Zij verklaren het financieel verslag voor “waar en echt”.

§4. Op basis van de financiële verslagen wordt het betrokken jaar definitief afgerekend, inclusief overhead, en het resterende deel van de verantwoorde uitgaven uitbetaald. Het resterende niet verantwoorde deel van het toegekende krediet wordt toegevoegd aan het krediet van het jaar n+1. Het resultaat is het totale beschikbare krediet voor het jaar n+1.

§5. De voorafbetalingen van het jaar n+1 zijn opnieuw twee schijven van 25% van het toegekende krediet. Bij de berekening van de tweede schijf van 25% wordt het saldo van het jaar n toegevoegd, omdat de definitieve afrekening van het jaar n pas kan gebeuren na 15 maart van het jaar n+1. Op dat ogenblik wordt het definitief budget van het jaar n+1 vastgesteld door bij het toegekend budget van het jaar n+1 het saldo van het jaar n toe te voegen. Op dit definitief budget wordt de tweede schijf van 25% berekend. Deze werkwijze is van toepassing voor de ganse looptijd van het project.

§6. Met betrekking tot projecten die in het betrokken begrotingsjaar eindigen kunnen de onthaalinstellingen de uitgaven met een factuurdatum binnen het project, maar die niet in het betrokken begrotingsjaar konden geboekt worden, voor 15 maart van het daaropvolgend jaar d.m.v. een extra lijst verantwoorden. De bedrijfsrevisor van de onthaalinstelling bevestigt dat deze uitgaven overeenstemmen met de boekhouding van de onthaalinstelling.

Art. 24.

Verantwoording/controle

§1 Systeemaudit

De onthaalinstellingen bezorgen jaarlijks vanaf het begrotingsjaar 2014 voor 30 april van het daaropvolgende jaar aan het FWO het commissarisverslag m.b.t. de gecontroleerde jaarrekening van het voorbije boekjaar.

§2. Globale reconciliatie FWO-projecten

Vanaf het begrotingsjaar 2014 bezorgt iedere onthaalinstelling voor 15 maart van het daaropvolgende jaar jaarlijks een verklaring van de bedrijfsrevisor, m.b.t. het voorbije boekjaar, aan het FWO waarin meegedeeld wordt, zonder rekening te houden met de toegekende en aangerekende overhead, dat de door de onthaalinstelling ingebrachte uitgaven d.m.v. de financiële verslagen bij het FWO overeenstemmen met de boekhouding van de onthaalinstelling.

§3. Projectaudit

Voor projecten vanaf 350.000 EUR wordt ter plaatse op het einde van het project een audit uitgevoerd door de bedrijfsrevisor van het FWO. De audit rekt het project definitief af. De bedrijfsrevisor van het FWO dient zich uit te spreken of de financiële rapportering aan het FWO een getrouw beeld geeft van de bestedingen van de middelen. De audit door de bedrijfsrevisor kadert binnen de normen en aanbevelingen van het instituut der bedrijfsrevisoren. Aan de bedrijfsrevisor van het FWO worden op zijn vraag, door de onthaalinstelling, alle stukken ter beschikking gesteld die hij nodig acht voor het uitvoeren van deze controleopdracht. De kosten van deze audits worden gedragen door het FWO.

§4. Steekproefsgewijze controle

De FWO administratie zal steekproefsgewijs stukken, inclusief weddenfiches, van de projecten tijdens de looptijd opvragen en controleren. Deze stukken kunnen elektronisch worden bezorgd. Op dat ogenblik worden de opgevraagde verantwoordingsstukken afgestemd met het dossier van de projectaanvraag. De opgevraagde stukken worden binnen de 3 maanden overgemaakt aan het FWO. Deze werkwijze blijft gehandhaafd tot het definitief afsluiten van een project.

Indien er belangrijke lacunes worden gevonden m.b.t. projecten bij een onthaalinstelling op basis van deze steekproefsgewijze controles, kan het FWO aan zijn bedrijfsrevisor ook voor projecten van minder dan 350.000 EUR opdragen om een projectaudit uit te voeren, overeenkomstig de bepalingen van artikel 24 – paragraaf 3.

In ieder geval behoudt de onthaalinstelling een recht van antwoord en kan de onthaalinstelling, ter ondersteuning, de bedrijfsrevisor van het FWO toegang verlenen tot het dossier van de bedrijfsrevisor van de onthaalinstelling. De doelstelling van deze procedures bestaat erin om dubbele controles te vermijden.

Art. 24bis

Bij het laattijdig of niet indienen van de verslagen en verklaringen, zoals vermeld in artikels 23 en 24, worden de betalingen opgeschort.

Art. 25.

De bepalingen in art. 23, § 1 t/m 4 en art. 24 § 1, 2 en 4 zijn niet van toepassing op de onthaalinstellingen met minder dan 15 lopende onderzoeksprojecten. Het aantal lopende onderzoeksprojecten wordt jaarlijks op 1 januari vastgesteld. Voor deze onthaalinstellingen is enkel de projectaudit van toepassing voor de projecten vanaf 350.000 EUR. Voor de projecten van minder dan 350.000 EUR geldt dat per trimester de verantwoordingsstukken moeten worden doorgestuurd aan het FWO.

ALGEMENE FINANCIËLE BEPALINGEN

Art. 26.

In géén enkel geval kunnen uitgaven ten laste worden genomen op kredieten toegewezen voor toekomstige begrotingsjaren. Dit houdt tevens in dat geen facturen worden aanvaard die dateren van vóór de begindatum van de overeenkomst.

Art. 27.

Het beheer van de verleende kredieten wordt toevertrouwd aan de boekhoudkundige dienst van de universiteit of de wetenschappelijke instelling waaraan de promotoren verbonden zijn.

Art. 28.

Het begrotingsjaar vangt aan op 1 januari en eindigt op 31 december.

SLOTBEPALING

Art. 29.

Voor alle gevallen die bij dit reglement niet zouden zijn voorzien, wordt er verwezen naar het reglement en de jurisprudentie van het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek - Vlaanderen.

26/06/2014

Bijlage III: Algemeen Reglement

Art. 1.

Het FWO streeft zijn statutair doel na, krachtens de artikels 1 en 19 van de statuten, door een actie die zich richt op het verleggen van de kennisgrenzen in alle wetenschapsgebieden, stimuleert en financiert het fundamenteel wetenschappelijk onderzoek aan de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap en aan de instellingen voor wetenschappelijk onderzoek.

Art. 2.

§ 1 De vermogensrechten op vindingen in het raam van wetenschappelijk onderzoek ondernomen met steun van het FWO komen toe aan de universiteit-onthaalinstelling krachtens art. 169ter van het Decreet van 12 juni 1991 betreffende de universiteiten in de Vlaamse Gemeenschap (Belgisch Staatsblad van 4 juli 1991).

§ 2 In navolging van de Berlin Declaration van 2003 ter bevordering van de vrije toegang tot wetenschappelijke kennis en cultureel erfgoed, zijn beneficianten van mandaten, kredieten en projecten van het FWO verplicht hun publicaties, die voortvloeien uit de FWO-toelagen, te deponeren in een publieke "Open Access" databank. Dit ten laatste één jaar na de publicatiedatum om een grotere impact en valorisatie van hun werk te bewerkstelligen. Wetenschappers worden aangeraden ook al hun andere publicaties in een dergelijke "Open Access" databank, zogenaamde "Open Archives", te deponeren, samen met de onderzoeksgegevens die tot deze publicaties hebben geleid.

Art. 3.

Het verlenen van een mandaat of onderzoekskrediet stelt in geen geval het FWO aansprakelijk voor schade aan personen of goederen, die rechtstreeks of onrechtstreeks het gevolg is van dit onderzoek.

Art. 4.

Onderzoekers in de medische of biomedische wetenschappen dienen, voor wat betreft de ethische problemen inzake de betrokkenheid van proefpersonen en/of proefdieren, het advies van de lokale ethische commissie in te winnen.

Betrokken onderzoekers moeten nauwgezet de geldende wettelijke verordeningen en ethische regels inzake experimenten op de mens te respecteren. Dit geldt ook voor het onderzoek dat het gebruik van laboratoriumdieren vereist.

Onderzoekers dienen zich bij het uitvoeren van hun wetenschappelijke activiteiten te houden aan de gedragsregels vastgelegd in de Ethische Code voor wetenschappelijk onderzoek in België (2009). De onderzoekers verbinden zich ertoe hun onderzoek op nauwgezette en onafhankelijke wijze uit te voeren en de resultaten waarheidsgetrouw te publiceren.

Art. 4bis – Wetenschappelijke integriteit.

§1. Rol universiteiten

1. De universiteiten waaraan de FWO-beneficianten hun onderzoeksprojecten uitvoeren, voeren een preventief beleid met betrekking tot wetenschappelijke integriteit en waken over de wetenschappelijke integriteit waarmee dergelijk onderzoek uitgevoerd moet worden.
2. In dit kader zijn de academische overheden ertoe gehouden om de secretaris-generaal van het FWO te informeren van zodra zij inbreuken op de wetenschappelijke integriteit begaan door beneficianten van het FWO nadat alle relevante procedures en geplogenheden aan hun instelling zijn doorlopen en daar geen redelijke twijfel meer bestaat over de inbreuk en de precieze aard daarvan.
3. De secretaris-generaal van het FWO brengt de onthaalinstelling op de hoogte van elke ernstige aanwijzing van inbreuken op de wetenschappelijke integriteit begaan door een van de beneficianten van het FWO. Daarop start de universiteit haar gebruikelijke procedure voor inbreuken op wetenschappelijke integriteit op. De universiteit voert in dat geval het onderzoek uit conform haar eigen regels en bezorgt haar vaststellingen aan het FWO.
4. In het verslag aan het FWO worden in elk geval integraal en duidelijk vermeld: de gedane vaststellingen, de gehanteerde onderzoeksmethodiek, de verdere bevindingen en het eventuele advies van de VCWI. De universiteit houdt zich, gedurende de volledige procedure, ter beschikking van het FWO voor het geven van bijkomende inlichtingen en informatie en draagt er al het mogelijke toe bij om financiële schade en afbreuk aan de reputatie van het FWO te helpen vermijden.
5. Communicatie door de universiteit aan derden zal steeds in overleg met het FWO gebeuren en vice versa.

§2. Procedure bij inbreuken wetenschappelijke integriteit

1. Bij aanwijzingen van een inbreuk op de wetenschappelijke integriteit door mandaathouders van het FWO of in het kader van ander door het FWO gefinancierd onderzoek voert de universiteit het onderzoek uit conform haar eigen regels en bezorgt haar bevindingen aan het FWO overeenkomstig paragraaf 1. Het bezorgen dient te gebeuren op een manier waarop de datum van bezorging en ontvangst duidelijk en ontegensprekelijk kan worden vastgesteld. Bij voorkeur wordt derhalve het dossier door de universiteit hetzij per e-mail, per fax dan wel per aangetekend schrijven aan het FWO bezorgd.
2. Het FWO behandelt elk dossier strikt vertrouwelijk.
3. Indien het dossier een advies van de Vlaamse Commissie voor Wetenschappelijke Integriteit (VCWI) bevat, wordt de onderzoeker zo spoedig mogelijk uitgenodigd om door het FWO te worden gehoord.
4. Indien de universiteit geen advies gevraagd heeft aan de VCWI m.b.t. het concrete dossier, kan het FWO het dossier ter advies voorleggen aan de VCWI. Zo spoedig mogelijk na de ontvangst van het advies van de universiteit, c.q. van de VCWI, wordt de onderzoeker uitgenodigd om door het FWO te worden gehoord. De onderzoeker kan zich op de hoorzitting laten bijstaan door een raadsman.
5. Indien op basis van het eerste (universitaire) c.q. tweede (VCWI-)advies niets ten laste kan worden gelegd van de onderzoeker, neemt de procedure automatisch een einde en hoeft de onderzoeker niet te worden uitgenodigd.

6. Na het horen van de onderzoeker neemt het FWO binnen de wettelijk en/of contractueel bepaalde termijn een beslissing over de gevolgen die aan de feiten worden gekoppeld. Het FWO kan beslissen de overeenkomst m.b.t. het mandaat, onderzoeksproject of ander FWO-subsidiekanaal te beëindigen of te herzien, waarbij steeds rekening zal worden gehouden met de belangen van de onderzoekers die te goeder trouw blijken te zijn. Indien het een mandaathouder is met een arbeidsovereenkomst met het FWO, wordt er een beslissing genomen binnen de drie werkdagen met het oog op het al dan niet ontslaan om dringende redenen.
7. De leden van de Raad van bestuur van het FWO, die de universiteit vertegenwoordigen waaraan de onderzoeker is verbonden, nemen in geen geval deel aan de hoorzitting of de besluitvorming.
8. Indien tot een ontslag om dringende redenen wordt beslist, omdat de integriteitsinbreuk een ernstige tekortkoming is die elke professionele samenwerking tussen het FWO en de onderzoeker onmiddellijk en definitief onmogelijk maakt, zal de beslissing tot dit ontslag in elk geval worden genomen en ter kennis gebracht van de onderzoeker binnen de drie werkdagen nadat voldoende zekerheid is verworven over de feiten. Daarbij wordt onder 'voldoende zekerheid over de feiten' begrepen: indien de bevindingen van de betrokken instelling(en) en/of die van de Vlaamse Commissie voor Wetenschappelijke Integriteit, die desgevallend door het FWO kan verzocht worden om een tweede opinie, voldoende duidelijkheid verschaffen.
9. De kennisgeving van de redenen van het ontslag om dringende redenen aan mandaathouders die aan het FWO verbonden zijn door middel van een arbeidsovereenkomst, zal gebeuren binnen de drie werkdagen na de dag van het ontslag met nauwkeurige vermelding van de motieven en de datum van de feiten. Daarbij geldt ook zaterdag als een werkdag bij de berekening van de driedagentermijn.
10. Bij aspiranten en andere beneficianten van FWO-financiering wordt zo snel mogelijk nadat voldoende zekerheid is verworven over de feiten een beslissing genomen over de overeenkomst of de andere gevolgen die aan de feiten worden gekoppeld.
11. Het FWO brengt zijn beslissingen ter kennis van de onderzoeker bij aangetekende brief of, indien nodig, deurwaardersexploot.
12. Het FWO brengt zijn beslissing ook ter kennis van de gastinstelling van de betrokken onderzoeker binnen de zeven kalenderdagen.
13. Het bureau van het FWO beslist of er al dan niet een strafklacht wordt neergelegd en deelt die beslissing mee aan de Raad van Bestuur en de gastinstelling. Het FWO kan desgevallend de tuchtprocedure schorsen.

Art. 5.

Aanvragen moeten uiterlijk op de limietdatum, die de periode waarop ze betrekking hebben voorafgaat, om 17.00u. op de zetel van het Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen, Egmontstraat 5 te 1000 Brussel worden ingediend. Als deze datum op een zaterdag of een zondag valt, dan wordt de indienlimiet verdaagd tot de daaropvolgende maandag om 17.00u. Uitzonderingen omtrent indiendata behoren tot de uitsluitende bevoegdheid van het Bureau. De limietdata zijn:

- Voor mandaataanvragen: 1 februari
- Voor Onderzoeksprojecten en Kredieten aan Navorsers: 1 april
- Voor andere kredieten, o.a. de Wetenschappelijke Onderzoeksgemeenschappen, de Reiskredieten, de Kredieten voor de Organisatie van Wetenschappelijke

Vergaderingen, de Wetenschappelijke Prijzen, de Wetenschappelijke Opdrachten en de Odysseus-projecten zijn deze data in het specifieke reglement vervat.

Art. 5 bis.

Een kandidaat kan per aanvraagronde slechts één mandaataanvraag indienen. Er kan maximaal tweemaal gepostuleerd worden voor eenzelfde mandaat.

Art. 6.

Vanaf het ogenblik van het versturen van de uitnodigingen voor de zitting zijn de dossiers op het secretariaat van het Fonds ter beschikking van de leden van de Expertpanels.

Art. 7.

De aanvragen, vergezeld van de adviezen van de bevoegde Expertpanels, worden voor beslissing aan het Bureau en de Raad van Bestuur overgemaakt.

Art. 8.

De secretaris-generaal van de Raad van Bestuur van het Fonds staat in voor het uitvoeren van de beslissingen van deze Raad.

Art. 9.

Dit algemeen reglement is van toepassing voor elk specifiek reglement. De specifieke reglementen zijn terug te vinden op de website van het FWO.

24/06/2015