



Nieuwe toepassingsgebieden voor supercomputers

Naast de traditionele chemie, engineering en meteorologie maken ook andere sectoren steeds meer gebruik van supercomputers. Hiervoor ontstaan aangepaste opleidingen, die wiskundige informatica combineren met de nodige vakspecifieke achtergrond, zoals bio-informatica. Berekenen of het voordeliger is over een eigen supercomputer te beschikken, dan wel gebruik te maken van de cloud kan gelukkig nog met traditionele computers.

DOOR KOEN MORTELMANS

"Recentere toepassingsgebieden zijn DNA-onderzoek en farmacie maar ook bijvoorbeeld economische modellering," zegt Leen Van Rentergem, coördinator voor het Vlaams Supercomputercentrum VSC aan de KU Leuven. "De farmacie en de gezondheidszorg zijn nu hun achterstand aan het inlopen," aldus Pieter Peeters, directeur computationele biologie bij Janssen Pharmaceutica. "DNA-onderzoek en ook bijvoorbeeld het onderzoek naar de eigenschappen van medicijnen leveren een massa data op. Het menselijk genoom bijvoorbeeld bestaat uit meer dan drie miljard basenparen met meer dan 150 miljoen gekende variaties. Met traditionele

methoden uitvissen welke variaties verantwoordelijk zijn voor een bepaalde afwijking vergt jaren. Op sommige vragen bestaan er misschien wel een miljoen antwoorden."

Eigenschappen van medicijnen

"Supercomputers kunnen ons helpen om eigenschappen te identificeren van nieuwe chemische moleculen die gescreend worden op hun mogelijke medicinale eigenschappen. Op basis

"Een supercomputer kan duizenden parameters tegelijk vergelijken en door correlatie de meest waarschijnlijke effecten aanwijzen. Daardoor kunnen nieuwe tests zeer doelgericht worden uitgevoerd", aldus Pieter Peeters, directeur computationele biologie bij Janssen Pharmaceutica. (Foto : Janssen Pharmaceutica)

Breniac telt 1.160 Intel Xeon E5 2680v4-processors met een kloksnelheid van 2,4 GHz, goed voor circa 600 Tflops aan rekenkracht. In turbo kan hij naar 3,3 Ghz getrokken worden. (Foto : Karel Titeca)

van bestaande metingen van medicinale eigenschappen van een groot aantal moleculen kunnen algoritmes getraind worden om eigenschappen van nieuwe moleculen te voorspellen. Om dergelijke grote volumes eerder verzamelde data te interpreteren en om algoritmes te trainen is een supercomputer noodzakelijk. Een supercompu-



Op Vlaamse maat gesneden

Breniac is voltijds geboekt. Aan uitsluitend Vlaamse gebruikers. Twee keer per jaar kan je aanvragen indienen. Die worden door een commissie beoordeeld. Wie niet wordt geselecteerd mag altijd opnieuw meedingen, eventueel met een uitvoeriger argumentatie. De overgrote meerderheid van de gebruikers zijn academische onderzoekers. Niet-academische instellingen kunnen Breniac inzetten voor specifieke taken, zoals het berekenen van de ideale uitbaggering van de vaargeulen in de Westerschelde. Maar ook voor bedrijven is hij zinvol, in hun onderzoek en ontwikkeling, hun proofs of concept of voor het experimenteren met supercomputing. Hebben ze een supercomputer nodig voor hun permanente productieprocessen, dan is het meestal aangewezen zich een eigen exemplaar aan te schaffen. Gebruikers plaatsen op Breniac hun eigen software of aangepaste versies van bestaande commerciële pakketten.

ter kan duizenden parameters tegelijk vergelijken en door correlatie de meest waarschijnlijke effecten aanwijzen. Daardoor kunnen nieuwe tests zeer doelgericht worden uitgevoerd. Door het invoeren van die nieuwe resultaten kan de computer zichzelf beter maken in het herkennen van patronen. Dit laat toe om de bestaande bandbreedte voor laboratoriumtesten op deze chemische verbindingen optimaal in te zetten en het zoeken naar nieuwe geneesmiddelen enorm te versnellen."

Janssen zet zowel medewerkers met een achtergrond in biologie en scheikunde als bio-informatici in om met supercomputers complexe chemische reacties te voorspellen en zo nieuwe medicijnen en toepassingen van bestaande medicijnen te vinden.

Cloud?

Aangezien een aangekochte computer snel veroudert, waarom geen gebruik maken van de cloud voor omvangrijke berekeningen? "Oh, maar we doen dat ook. Maar dan vooral voor niet-continue opdrachten," legt Peeters uit. "Anders zouden de kosten in vergelijking te hoog oplopen. Bovendien kunnen we op een eigen supercomputer controleren wat er precies gebeurt. En de cloud biedt niet de snelle uitwisseling tussen parallel ge-

schakelde oplossingen, die bijvoorbeeld de computer in het ExaScience Life Lab bij imec wel heeft."

"Voor universitaire onderzoekers is een eigen supercomputer doorgaans goedkoper dan de cloud", stelt Van Rentergem. "Ze maken immers samen gebruik van de supercomputer en komen aan de beurt wanneer er vrije ruimte is. Wanneer veel gebruikers tegelijk een taak doorgeven, moeten ze wat langer wachten. Voor academisch onderzoek is dat meestal niet echt een probleem. In een commerciële context is wachten soms niet mogelijk."

Breniac

Een supercomputer is een zeer snelle en extreem parallelle computer. Sinds kort is Breniac de krachtigste supercomputer van België. Fysiek staat hij in een computerzaal van de KU Leuven, maar de meeste gebruikers werken online en hebben deze zaal of het gebouw waarin deze zaal ligt nog nooit betreden. Breniac is overigens geen eigendom van de KU Leuven, maar van het VSC, een samenwerking tussen het Fonds voor Wetenschappelijk Onderzoek en de vijf Vlaamse universitaire associaties. De investering van 5,5 miljoen euro is betaald door de Vlaamse overheid. Daarom is deze supercomputer ook gemodelleerd om te beantwoorden aan de noden van de Vlaamse onderzoekscentra, ondernemingen, overheden én NGO's. Hij is ongeveer drie keer krachtiger dan de Tier-1 Muk die hij opvolgt. Die laatste was toegewezen aan universiteit Gent.

De parallelle werking van een groot aantal centrale verwerkingseenheden (cpu's) is essentieel. Supercomputers zoals Breniac bestaan niet uit krachtige, unieke componenten maar uit onderdelen die gewoon via het commerciële circuit verkrijgbaar zijn zoals de processoren van Intel, gebaseerd op de aloude x86. Zo is Breniac uitgerust met 1.160 Intel Xeon- E5 2680v4-processors met een kloksnelheid van 2,4 GHz, goed voor circa 600 Tflops aan rekenkracht. Die

"Binnenkort verdubbelt de capaciteit van Breniac", zegt Leen Van Rentergem, coördinator voor het Vlaams Supercomputercentrum VSC aan de KU Leuven. (Foto : KU Leuven)





“De cloud biedt niet de snelle uitwisseling tussen parallel geschakelde oplossingen, die bijvoorbeeld de computer in het ExaScience Life Lab bij imec wel heeft”, aldus Pieter Peeters, directeur computationele biologie bij Janssen Pharmaceutica. (Foto : KULeuven)

kan in turbo worden opgedreven tot 3,3 Ghz. Na een openbare aanbesteding kreeg Nec de opdracht hem te bouwen.

De naam Breniac is een samentrekking van de woorden ‘brain’ en ‘Eniac.’ Eniac was in 1946 een van de eerste computers voor algemeen gebruik. Breniac is ontworpen om vrijwel ononderbroken aan het werk te zijn tegen 60 tot 70% van zijn capaciteit. “We beschouwen dit als ‘volledig gebruik’. Om een taak, die de hele machine nodig heeft, te kunnen starten, moet de machine eerst geleidelijk aan leeg gemaakt worden. Daarom is een 100% bezetting niet mogelijk in een gedeelde machine,” zegt Van Rentergem.

Het VSC kon Breniac alleen toewijzen aan een instelling die over een computerzaal beschikte van de nodige omvang, met de nodige beveiliging en

koelcapaciteit. “Dat beperkte de mogelijkheden. Maar hij staat ten dienste van alle Vlaamse kandidaat-gebruikers. Hij neemt geen hele zaal meer in beslag zoals vroegere supercomputers, maar toch een ruimte van circa 10 op 2 meter.” De KU Leuven recupereert de warmte die vrijkomt bij het koelen van de computerzaal om andere gebouwen op de campus te verwarmen.

“Om het Vlaams onderzoek te laten meedingen op wereldschaal, moeten we proberen over een supercomputer te beschikken die tot de mondiale top tweehonderd behoort. Aangezien de hardware op dit vlak nog altijd snel evolueert kan zo’n computer snel afzakken in de rangorde. Daarom is een regelmatige investering nodig. Zo verdubbelt binnenkort de capaciteit van Breniac.” ■

ExaScience Life Lab

imec (Leuven) biedt sinds 2013 onderdak aan het ExaScience Life Lab. Dat is een samenwerking van imec zelf, Janssen Pharmaceutica, Intel, de KU Leuven, Universiteit Gent, Universiteit Antwerpen, de Vrije Universiteit Brussel en Universiteit Hasselt, met de geldelijke rugsteun van het Vlaams Instituut voor Innovatie door Wetenschap en Technologie. Dit lab bundelt de supercomputingexpertise van Intel en imec met Vlaanderens uitgebreide expertise in levenswetenschappen en biotech. Het onderzoekt hoe de huidige computertechnologie optimaal kan worden ingezet om ‘big data’ te verwerken.

Eén miljard Europees belastinggeld om China bij te benen

De Europese Unie heeft één miljard euro uitgetrokken om tegen 2023 een supercomputer te bouwen, die dan de snelste ter wereld moet zijn. Daarmee wil ze de VS, China en Japan bijbenen. De EU wil twee machines bouwen die allebei in staat zijn om per seconde minstens een biljard berekeningen uit te voeren. Dat is tien keer meer dan de huidige snelste computers. De nieuwe organisatie EuroHPC met basis in Luxemburg zal dit project managen. Van de huidige 500 supercomputers wereldwijd staan er vandaag iets meer dan 100 in Europa maar geen enkele ervan zit in de top-tien. In 2012 waren dat er nog vier.