

SCHRIFTELIJKE VRAAG

nr. 365
van **MATTHIAS DIEPENDAELE**
datum: 1 maart 2016

aan **PHILIPPE MUYTERS**
VLAAMS MINISTER VAN WERK, ECONOMIE, INNOVATIE EN SPORT

Vlaamse supercomputer - Stand van zaken

Sinds oktober 2012 beschikt Vlaanderen over een operationele Tier1-infrastructuur aan de universiteit van Gent binnen het kader van het Vlaams Supercomputer Centrum (VSC). De Herculesstichting staat in voor het beheer.

Het VSC is sinds 2014 op kruissnelheid. De afgelopen jaren werden beoordelingsmomenten voorzien voor door de universiteiten en de strategische onderzoekscentra (SOC's) ingediende aanvragen voor rekentijd op de Tier1-supercomputer. Naast onderzoekers verbonden aan de Vlaamse publieke kennisinstellingen kunnen ook bedrijven gebruikmaken van deze grote rekeninfrastructuur. De deelname van bedrijven blijft een uitdaging.

De supercomputer is ondertussen aan vervanging toe. Daarom sloot de Herculesstichting vorig jaar met de KU Leuven een overeenkomst voor de installatie en de technische exploitatie van de tweede Vlaamse Tier1. In de loop van 2016 zou deze tweede Vlaamse Tier1-supercomputer operationeel worden. Dit jaar worden drie beoordelingsmomenten gepland voor door de universiteiten en de SOC's ingediende aanvragen voor rekentijd op de Tier1.

1. Kan de minister een overzicht geven van de vijf afgelopen oproepen voor onderzoeksinfrastructuur voor de Vlaamse Tier1-supercomputer?
 - a) Hoeveel aanvragen voor rekentijd werden aangevraagd en toegekend? Hoe uit zich dat in core-uren of nodedagen?
 - b) In hoeveel gevallen ging het om universiteiten, SOC's of bedrijven?
 - c) Wat is de verdeling van de wetenschapsdomeinen?
 - d) Welke evolutie stelt de minister vast in het gebruik van de Tier1-infrastructuur de afgelopen jaren?
2. Een belangrijk punt is het betrekken van bedrijven bij het gebruik van de supercomputer.
 - a) Met hoeveel bedrijven werden al overeenkomsten gesloten over het structureel afnemen van rekentijd op de Tier1? Welke zitten eventueel in de pijplijn?
 - b) Hoeveel bedrijven vonden in totaal reeds hun weg naar de Tier1-infrastructuur? In welke sectoren zijn deze bedrijven actief?

- c) Heeft de minister zicht op de tevredenheid van deze bedrijven bij het gebruik van de Tier1-infrastructuur?
- d) De lopende acties om Vlaamse bedrijven te informeren over de mogelijkheden van grote rekencapaciteit worden ook in 2016 voortgezet.

Kan de minister duiden welke initiatieven ter zake genomen worden?

- 3. In 2015 sloot de Herculesstichting met de KU Leuven een overeenkomst voor de installatie en de technische exploitatie van de tweede Vlaamse Tier1. Deze tweede supercomputer wordt in de loop van dit jaar operationeel.
 - a) Wanneer zal de nieuwe Tier1-supercomputer operationeel zijn en hoe zal de overgang met de oude Tier1-infrastructuur verlopen?
 - b) Wat zijn de technische specificaties van deze nieuwe supercomputer ("rekenkracht")? Hoe verhouden die zich ten opzichte van de vorige supercomputer en op welke punten zullen die verbeteringen bieden?
 - c) Hoe zal Vlaanderen zich positioneren met de nieuwe supercomputer in internationaal opzicht? Zijn er eventueel nieuwe mogelijkheden met de nieuwe supercomputer in Europese context (bv. ESFRI)?
 - d) Wat is de totale kostprijs van de nieuwe Tier1-supercomputer?
 - e) Wat gebeurt er met de oude Tier1-supercomputer na de definitieve ingebruikname van de nieuwe Tier1-infrastructuur?
- 4. Welke financiering is in 2016 vooropgesteld voor investeringen in de Tier2-computers aan de Vlaamse universiteiten? Welk doel hebben deze investeringen? Graag een overzicht per Tier2-infrastructuur.
- 5. Eind 2015 werd het reglement voor door de universiteiten en de SOC's ingediende aanvragen voor rekentijd op de Tier1 geëvalueerd.

Welke conclusies kunnen uit deze evaluatie worden getrokken en op welke punten wordt eventueel bijgesteld?

ANTWOORD

op vraag nr. 365 van 1 maart 2016

van **MATTHIAS DIEPENDAELE**

1. a.

Sinds 2014 waren er 7 oproepen voor de Tier-1 supercomputer: 3 oproepen in 2014 en 2015, en reeds 1 oproep in 2016. Er waren 92 aanvragen voor reguliere project toegang, waarvan er 85 werden gehonoreerd. In totaal werd zo rekentijd ten belope van 290.000 nodedagen (111 miljoen core-uren) uitgereikt. Dit komt ongeveer overeen met 12.000 jaar rekentijd op één enkele CPU. Daarnaast werden er sinds 2014 ook 19 'starting grants' van telkens 100 nodedagen toegekend aan onderzoekers. Met deze beperkte rekentijd kunnen onderzoekers zich vertrouwd maken met de Tier-1 omgeving en testen uitvoeren als voorbereiding voor het indienen van een volwaardig projectvoorstel.

b.

Het merendeel van de reguliere projecten (81 van de 85) en "starting grants" (16 van de 19) werden toegekend aan onderzoekers van universiteiten. 1 regulier project en 1 "starting grant" werden toegekend aan onderzoekers van een strategisch onderzoekscentrum (SOC). Tenslotte werden er 3 reguliere projecten en 2 "starting grants" toegekend aan onderzoekers die tegelijk verbonden zijn aan een universiteit en een SOC (VIB, iMinds).

Bedrijven kunnen continu aanvragen indienen voor rekentijd op de Tier-1 supercomputer (los van de oproepen). Via contractuele overeenkomsten met bedrijven werd zo ruim 15.000 nodedagen aan rekentijd uitgereikt.

c.

De verdeling van de toegekende projecten (85) situeren zich in volgende wetenschapsdomeinen:

- 52 computationele chemie
- 21 klimaatmodellering
- 10 (stromings)mechanica
- 1 Bioinformatica
- 1 Data-analyse

Merk op dat in 2016 een project werd toegekend in het wetenschapsdomein van de data-analyse. Dit is het eerste Tier1 project in de sociale wetenschappen.

d.

Het gebruik van de Tier-1 infrastructuur is duidelijk op kruissnelheid gekomen en heeft in 2014-2015 nagenoeg een "steady state" regime bereikt, waarbij de machine geregeld een volledige economische bezettingsgraad behaalt. Maar er is zeker nog een mogelijkheid voor groei en ruimte voor nieuwe onderzoeksgroepen en -

domeinen op de rekeninfrastructuur. Het VSC voert volop inspanningen om deze onderzoekers te stimuleren om de overstap van het Tier2- naar het Tier1-niveau te maken om zo hun onderzoek op een niveau hoger te tillen. Maar dit zal nog de nodige tijd en inzet op langere termijn vergen.

Dankzij een aantal maatregelen die werden genomen in samenspraak met de Tier-1 "allocation board", lijkt reeds het begin van een kentering merkbaar in de eerste aanvraagronde van 2016 waarbij nieuwe onderzoeksgroepen de weg lijken gevonden te hebben naar de Tier-1, met als resultaat een eerste project binnen de sociale wetenschappen.

2. a.

Tot op heden werden met twee bedrijven overeenkomsten afgesloten voor structurele afname van rekentijd op de Tier-1: één bedrijf uit de sector van hernieuwbare energie en een ander bedrijf dat actief is in de farmaceutische sector.

Verscheidene andere bedrijven zijn reeds actief op de Tier-1 rekeninfrastructuur in een exploratieve fase. Hierbij wordt nagegaan of de schaalgrootte van deze infrastructuur meerwaarde kan bieden voor hun activiteiten. Twee van deze bedrijven hebben thans een lopende overeenkomst met één van de universiteiten binnen het VSC consortium voor het gebruik van de Tier-2 infrastructuur. Het betreft bedrijven die actief zijn in het domein van de hernieuwbare energie en de staalindustrie.

b.

In totaal vonden al zes bedrijven hun weg naar de Tier-1-infrastructuur. Deze bedrijven waren actief in de volgende sectoren: farmaceutische industrie, hernieuwbare energie, chemische industrie, staal industrie, elektronica en elektrotechniek.

c.

Er is nog geen formele tevredenheidsbevraging gebeurd bij deze bedrijven maar de bedoeling is wel om dit structureel te gaan doen in de toekomst. Een aantal van de industriële 'early adopters' hebben wel al verschillende malen hun tevredenheid uitgedrukt over de infrastructuur en diensten van het VSC. De bereidwilligheid van deze bedrijven om als referentie op te treden op bijvoorbeeld de VSC 'industry day' is daarbij veelzeggend.

d.

Op 14 april 2016 vindt een tweede VSC 'industry day' plaats. Het doel van dit event is de mogelijkheden en opportuniteiten van High Performance Computing (HPC) voor bedrijven te tonen en een overzicht te bieden van de infrastructuur en diensten van het Vlaams Supercomputer Center (VSC). Een aantal huidige Vlaamse industriële gebruikers komt die dag vertellen wat het VSC voor hen betekend heeft. Een vertegenwoordiger van HPC-Wales zal toelichten hoe zij succesvolle samenwerkingen met bedrijven hebben opgezet in Wales.

Verder zoekt het VSC actief naar bedrijven die mogelijk HPC kunnen gebruiken, of die hun computationeel werk willen opschalen op grote rekencapaciteit om een economische meerwaarde te realiseren. Dit verloopt, waar mogelijk, via beurzen, presentaties, nieuwsberichten uit de media, enz..Om de diensten van het VSC beter bekend te maken is ook contact gelegd met de IOF mandatarissen van de verschillende universitaire associaties, omdat deze mensen reeds een sleutelpositie bekleden op het raakvlak van de academische en bedrijfswereld. Het VSC overweegt

bovendien om een extra personeelslid aan te trekken om bedrijven te informeren en te ondersteunen bij het gebruik van VSC diensten.

Sinds medio 2015 maakt het VSC ook deel uit van het Europese SESAMENET consortium ('Supercomputing Expertise for Small And Medium Enterprises', zie ook <http://sesamenet.eu>). Dit project binnen het Horizon 2020 programma heeft als doel om HPC bij bedrijven te promoten en te ondersteunen in Europa. De focus ligt daarbij specifiek op KMO's. Het consortium omvat 15 partners uit 13 landen: nationale of regionale HPC centra, maar ook bedrijven. Het project werkt op verschillende fronten tegelijk: het verzamelen en delen van "best practices", bekendheid vergroten bij bedrijven, aanbieden van rekentijd, trainingen geven, 'Starten met HPC' documenten aanbieden, het tonen van wat huidige industriële gebruikers doen met HPC en hoe het hen helpt om meerwaarde te creëren. Via dit project zet Vlaanderen zich prominent op de Europese HPC kaart, met duidelijk oog voor de bedrijfswereld. Zo is het VSC en de inspanningen van de Vlaamse regering voor HPC één van de 'showcases' op de SESAMENET website en nieuwsbrief. De aanwezige expertise binnen het consortium kan bovendien een hefboom betekenen voor de effectiviteit van de VSC activiteiten gericht op bedrijven. Realiteitszin is daarbij wel aan de orde: uit contacten met partners die reeds langer ervaring hebben met het betrekken van bedrijven, blijkt wel dat een lange termijn perspectief moet gehanteerd worden om een volwaardige omslag binnen de bedrijfswereld te bewerkstelligen.

3. a.

De nieuwe Tier1-supercomputer werd besteld in november 2015. In maart en april 2016 zal de machine worden opgebouwd in het datacentrum van de KU Leuven. Er wordt verwacht dat de acceptatietesten zullen kunnen plaatsvinden in de eerste helft van mei 2016 zodat vanaf de tweede helft van mei de gebruikerstesten kunnen starten. Eerst zullen de huidige Tier1 gebruikers uit de universiteiten uitgenodigd worden om hun programmatuur uit te testen, vervolgens zullen de industriële gebruikers de mogelijkheid hebben om piloot-berekeningen uit te voeren op de machine. Vanaf juni zullen de ook nieuwe gebruikers de mogelijkheid hebben om gedurende enkele maanden piloot-runs uit te voeren op de nieuwe machine. Vanaf oktober kunnen de toegekende projecten ook gebruik maken van de nieuwe Tier-1 infrastructuur. Tot eind 2016 kunnen lopende projecten hun rekenwerk, wanneer ze dat wensen, nog verder uitvoeren op de oude Tier-1. Vanaf begin 2017 wordt alle rekenwerk van de toegekende projecten uitgevoerd op de nieuwe Tier-1.

b.

De nieuwe Tier-1 zal ongeveer 3,5 keer meer rekenkracht hebben en 3 keer meer geheugen dan de eerste Tier1-supercomputer. Het intern netwerk van de nieuwe computer is ongeveer 2 maal sneller dan het netwerk van de eerste Tier1-computer.

Tabel vergelijking Tier-1A (oude) – Tier-1B (nieuw)

component	Tier-1A		Tier-1B
Aantal rekennodes	528	+10%	580
Aantal cores	8448	+92%	16240
Aantal cores per node	16	+75%	28
Totale rekencapaciteit	175 TF	x 3.5	623 TF
Geheugen per node	64 GB	x2 x4	128 (75%) 256 (25%)

Geheugen per core	4 GB	= x2	4,57GB 9.14GB
Totale geheugen capaciteit	33 TB	x3	92 TB
Netwerk type	Infiniband FDR		Infiniband EDR
Netwerk latency	0.7 μ s	+ 40%	0.5 μ s
Netwerk bandbreedte	6.5 GB/s	x2	12 GB/s
Scratch storage capaciteit	400 TB	+ 58%	634 TB
Scratch storage bandbreedte	9.5 GB/s	x2	20 GB/s

c.

De nieuwe Tier-1 computer zal een rekenkracht hebben van 623 TFlop/s. Er kan worden verwacht dat de nieuwe Tier-1 in juni 2016 in de top 200 zal staan op de lijst van de krachtigste computers ter wereld. Op Europees niveau wordt verwacht dat de nieuwe Tier-1 in de top 60 zal terecht komen. De reken capaciteit zal vergelijkbaar zijn met Tier-1 Machines in een aantal Europese nationale centra, zoals Nederland (SurfSara, 1,3 PFlop/s), Oostenrijk (VSC, 681 Tflop/s) en Noorwegen (NSC, 407 GFlop/s). De nieuwe Tier-1 kan vergeleken worden met de faciliteiten in Duitse regionale centra.

De nieuwe Tier-1 kan ook gebruikt worden in het kader van PRACE 2.0. Er zal waarschijnlijk aan de PRACE 2.0 leden de mogelijkheid geboden worden om de nieuwe Tier-1 te gebruiken als bijdrage in de operationele kosten van het Tier-0 aanbod.

d.

De initiële aankoop prijs van de nieuwe Tier-1 computer, inclusief installatiekosten en opstartkosten is 5.523.497 euro. De stroomkosten worden geraamd op maximaal 360.000,00 euro per jaar. Hierin zitten de directe energiekosten verrekend plus de kosten voor de koeling. Het datacentrum kan een "Power Usage Effectiveness" garanderen van 1,5. Naast de aankoop en de stroomkosten zijn er nog heel wat andere kosten die gepaard gaan met het uitbaten van een Tier-1 machine. Deze kosten worden door KU Leuven ingebracht. Zo staat de machine in een nieuw state-of-the art datacentrum voorzien van moderne technieken voor de exploitatie. Wanneer rekening gehouden wordt met een afschrijving van 20 jaar kan de kostprijs van het gebruik van het datacentrum geraamd worden op ongeveer 170.000 euro per jaar.

e.

In eerste instantie wordt er een overgangsfase van verscheidene maanden ingelast waarin gebruikers van de oude Tier-1 kunnen overschakelen naar de nieuwe Tier-1. De duur van deze overgangsfase zal flexibel worden gehanteerd, afhankelijk van de effectieve oplevering van de nieuwe Tier-1. Daarna zal de oude supercomputer definitief worden ontmanteld als Tier-1 faciliteit.

Medio november 2016 vervalt het onderhoudscontract op de hardware van de oude Tier-1 machine en defecte onderdelen zullen vanaf dan niet meer worden vervangen. Na de finale overschakeling naar de nieuwe Tier-1 supercomputer, zal een inventaris worden gemaakt van de nog bruikbare hardware uit de oude Tier-1. Na een grondige kosten-baten analyse zal de nog bruikbare hardware worden geherconfigureerd als kleinere Tier-2 supercomputer voor verschillende doeleinden.

4.

Jaarlijks wordt aan de Vlaamse universiteiten een subsidie toegekend voor de Tier-2 infrastructuur. Naast de financiering van de werking wordt deze vooral aangewend voor de vernieuwing en uitbreiding van de Tier-2 infrastructuur. Voor 2016 is hetzelfde bedrag als in 2015 voorzien voor Tier-2 infrastructuur:

Rubriek	KU Leuven	UHasselt	UGent	VUB	UAntwerpen	Totaal
Personeel in FTE	5	1	4	2	3	15
Personeel in Euro	€ 475.000	€ 95.000	€ 380.000	€ 190.000	€ 285.000	€ 1.425.000
Herculesleutel 2014	0,4316	0,0324	0,3187	0,1008	0,1165	1,000
CAPEXen werking Tier-2	€ 1.186.900	€ 89.100	€ 876.425	€ 277.200	€ 320.375	€ 2.750.000

Aan de Universiteit Gent zal de 2016 Tier-2 financiering als volgt worden aangewend:

- (1) Het bestaande dataopslag systeem zal deels worden vervangen wegens einde levensduur. Tegelijk zal bijkomend volume worden aangekocht om PetaByte-schaal storage te kunnen aanbieden aan de onderzoekers, kaderend in de Big Data specialisatie van de Universiteit Gent binnen het VSC.
- (2) Een kleinere rekencluster zal worden aangekocht tegen het einde van 2016.

De HPC omgeving aan KU Leuven, die ter beschikking staat voor KU Leuven en U Hasselt, bestaat uit verschillende typen architectuur. Een algemene "thin node" cluster en 2 meer gespecialiseerde architecturen namelijk een "shared memory" machine en een beperkte partitie met acceleratoren en visualisatie nodes. Vermits de HPC infrastructuur voor vele onderzoeksgroepen een basisinfrastructuur is, werd er samen met vertegenwoordigers van gebruikers een lange termijn investeringsplan opgesteld. De standaard levensduur van rekennodes is 4 jaar, met een onderhoudscontract. KU Leuven heeft een investeringsplan om een 2^{de} thin node cluster operationeel te maken in het 3^{de} levensjaar van de 1^{ste} cluster. Concreet betekent dit dat KU Leuven in 2017 een aanbesteding en implementatie van een nieuwe cluster voorziet. Voor deze aanbesteding wordt het budget van 2016 en 2017 samengevoegd.

De snelle "scratch storage" van de cluster is operationeel sinds 2011 en wordt in 2016 vervangen. Deze vervanging zal ervoor zorgen dat er voldoende capaciteit is om steeds meer rekenwerk met grotere datavolumes te kunnen uitvoeren (cfr. Big-data).

In de eerste helft van 2016 zal de Universiteit Antwerpen een aanbesteding uitschrijven voor de vervanging van de cluster geïnstalleerd in 2009-2010. Hierbij zullen de middelen voor infrastructuur voorzien in 2016 en 2017 samengevoegd worden om in de loop van 2017 te beschikken over een volwaardige vervanger voor die cluster.

De VUB brengt momenteel de noden voor Tier-2 gebruik in kaart en afhankelijk van het resultaat zal er geopteerd worden voor een nieuwe Tier-2, voor een uitbreiding van de bestaande Tier-2 al dan niet aangevuld met commerciële cloud aanbiedingen voor heel specifieke toepassingen. Voor deze aanpassingen zullen de gecombineerde middelen van 2015 en 2016 gebruikt worden.

5.

De komst van een bestendige Tier-1 faciliteit in Vlaanderen is recent te noemen. De onderzoeksgroepen hebben zich nog niet ten volle aangepast aan dit nieuw gegeven. De supercomputer faciliteert wetenschappelijk onderzoek op een hoger niveau ('big

science'), maar nog niet alle onderzoekers hebben hun wetenschappelijke projecten overeenkomstig de mogelijkheden van deze nieuwe machines aangepast. De overgang van al de onderzoeksprojecten naar een hoger niveau zal nog enige tijd vragen.

In vergaderingen met de Tier-1 gebruikerscommissie en de Tier-1 "allocation board" is duidelijk naar voor gekomen dat een kostprijs om op Tier-1 te mogen rekenen één van de belangrijkste factoren is die onderzoekers tegenhoudt om hun onderzoek uit te rollen op deze machine. In de periode 2013-2015 werd slechts een fractie van de werkelijke kost doorgerekend aan de onderzoekers met een goedgekeurd project: 5% dan wel 10% voor gebruikers van universiteiten, respectievelijk SOC's. Maar zelfs deze minieme bedragen werken limiterend omdat de onderzoekers bang zijn om te falen.

In samenspraak met de Tier-1 "allocation board" werd beslist dat vanaf 2016 onderzoekers van universiteiten en SOC's kostenloos kunnen rekenen op de Tier-1 supercomputer. Maar om toegang te krijgen moeten ze wel nog steeds een aanvraag indienen, die nauwgezet wordt gescreend door de Tier-1 "allocation board". Deze maatregel lijkt reeds in de eerste aanvraagronde van 2016 vruchten af te werpen: nieuwe onderzoeksgroepen hebben een aanvraag ingediend, zowel vanuit universiteiten als vanuit SOC's. In de loop van 2016 zal een verdere bijstelling van het reglement worden doorgevoerd met het oog op een verdere homogenisering van de verschillende categorieën waarbinnen onderzoekers Tier-1 aanvragen kunnen indienen.