

Vergaderjaar 2009–2010

26 643

Informatie- en communicatietechnologie (ICT)

Nr. 147

BRIEF VAN DE MINISTER VAN ONDERWIJS, CULTUUR EN WETENSCHAP

Aan de Voorzitter van de Tweede Kamer der Staten-Generaal

Den Haag, 21 december 2009

Mede namens de staatssecretaris van Economische Zaken bied ik u hierbij de kabinetsvisie supercomputers en supernode in Nederland aan (zie bijgaand). Ook treft u hierbij het eindrapport naar de economische effecten van de vestiging van een supernode in Nederland aan.¹

De kabinetsreactie op het advies van ICTRegie over de ICT-onderzoeksinfrastructuur verwoordt dat Nederland zal blijven deelnemen aan de voorbereiding van een Europees netwerk van supernodes met het oog op de vestiging van een supernode in Nederland. In deze visie wordt voorgesteld om de leidende rol van Nederland in PRACE te continueren en samen met (internationale) partners uit wetenschap en bedrijfsleven de mogelijke vestiging van een supernode in Nederland verder te onderzoeken.

De minister van Onderwijs, Cultuur en Wetenschap,
R. H. A. Plasterk

¹ Ter inzage gelegd bij het Centraal Informatiepunt Tweede Kamer.

Kabinetsvisie supercomputers en supernode in Nederland

Hoofdpunten

De grote maatschappelijke uitdagingen waar ons land, Europa en de wereld voor staan vragen om krachtige, soms ook niet conventionele oplossingen. Tot die uitdagingen behoren in ieder geval de toekomstige energievoorziening, de beveiliging van ons land tegen wateroverlast – vanuit de zee en vanuit het binnenland – de gevolgen voor het weer door klimaatveranderingen, de vergrijzing en de volksgezondheid en zo meer. Eén van de belangrijkste en bewezen manieren waarop vandaag dieper inzicht verkregen kan worden in de processen die de wereld drijven in de komende jaren, is Computational Science. Computational Science is de ontwikkeling en het gebruik van modellen, ondersteund door de groot-schalige inzet van computers. Deze toepassing, ook wel High Performance Computing (HPC) genoemd, is bij uitstek geschikt om ons een beeld te vormen van de toekomst en scenario's door te rekenen.

Nederland is in de afgelopen 25 jaar nauw betrokken geweest bij de ontwikkeling van dit nieuwe onderzoeksdomein, ook wel de *derde methode* in de wetenschap genoemd (te onderscheiden van «experiment» en «theorievorming»). Reeds in 1984 hebben de ministeries van OCW en EZ de aanzet gegeven tot de vorming van een nationaal beleid voor HPC, waaraan NWO sinds 1990 vormgeeft met de stichting Nationale Computerfaciliteiten. Met deze steun hebben zich toonaangevende onderzoeksgebieden, zoals atmospheric science en theoretische chemie, ontwikkeld, die dankzij de aanwezigheid van een nationale supercomputer in Nederland een stempel zetten op ons nationale researchprofiel.

Economische en demografische ontwikkelingen in de wereld maken het steeds belangrijker dat op Europees en op nationaal niveau wordt gewerkt aan een verdere profilering van ons land als kennisland, zowel voor de opleiding van studenten en promovendi als voor het aantrekken van leidende onderzoekers en bedrijven. Maar het is evenzeer belangrijk om de onafhankelijkheid van ons wetenschappelijk onderzoek en onze beleidsbeslissingen te garanderen.

In het Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) wordt daarom op Europees niveau gewerkt aan het creëren van een top-infrastructuur van hoogwaardige rekenvoorzieningen (supercomputers), die gelijkwaardig is aan de ICT-infrastructuur van de VS en Azië. Nederland neemt deel aan PRACE met het doel de Nederlandse belangen bij de vormgeving van deze top-infrastructuur maximaal te garanderen. Voor de implementatiefase van deze Europese infrastructuur hebben de ministeries van Economische Zaken en Onderwijs Cultuur en Wetenschap een maatschappelijk-economische verkenning¹ laten uitvoeren.

Deze visie, waarin het accent ligt op supercomputers, moet worden gezien in de context van het advies van ICTRegie, dat een integrale benadering van de ICT-infrastructuur voor wetenschappelijk onderzoek in Nederland beschrijft². De kabinetsreactie³ op dat advies vormt dan ook het uitgangspunt voor deze onderhavige visie.

¹ Zie de Economische Effecten Analyse (EEA) van Ecorys.

² Zie ook de ICT-Agenda 2008–2011.

³ 11 mei 2009: kabinetsreactie op het advies van ICTRegie over de ICT-onderzoeksinfrastructuur voor het wetenschappelijk onderzoek in Nederland.

⁴ E-science: de koppeling tussen computertechnologie, moderne communicatiemiddelen en wetenschap. Computational science: het ontwikkelen van optimale applicaties in toepassingsdomeinen.

Conclusies

- De grote maatschappelijke uitdagingen van de toekomst vergen een krachtige inzet van moderne methoden voor scenario-ontwikkeling en analyse. E-Science en Computational Science⁴ zijn bij uitstek de methoden die dit mogelijk maken.
- De nationale aanwezigheid van topvoorzieningen voor High Perfor-

mance Computing draagt bij aan de oplossing van grote maatschappelijke problemen in Nederland, aan de bevordering van sleutelgebieden in Computational Science en aan de economische structuurversterking door innovatie, profilering en werkgelegenheid¹.

- De positieve maatschappelijke en economische effecten van het bezitten van een Supernode in Europees verband² zijn de investeringen waard (zie de Economische Effecten Analyse van Ecorys van 26 oktober 2009).
- De Supernode kan in verschillende branches tot concurrentievoordelen leiden en een belangrijke bijdrage leveren aan het opleiden van nu schaarse deskundigen.
- Niet investeren in een Supernode, betekent dat de bestaande cyclus van gebruik door kennisinstellingen en bedrijven in Nederland wordt doorbroken. Hierdoor zal een belangrijk deel van het talent, dat voor het bedrijfsleven en de wetenschap nodig is, niet meer kunnen worden verworven (brain drain). Investeren in supercomputers is van belang om de bedrijven die hier nu gebruik van maken voor Nederland te behouden³.
- Nederland dient daarom een krachtige speler te blijven in de vormgeving van de Europese ICT-infrastructuur. Dit betreft ook de bouw van een supercomputer-infrastructuur van internationale allure, zoals door het European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) geprioriteerd. De integrale uitvoering van het ICTRegie advies, zoals onderschreven in de kabinetsreactie, is daarvoor een goed uitgangspunt.
- Nederland heeft een nationaal belang bij het participeren op het hoogste niveau in PRACE om de toegang tot en de expertise bij het gebruik van supercomputers te garanderen voor maatschappelijke sleutelgebieden en wetenschappelijke profilering in Computational Science.
- De vestigingslocatie van de Supernode vormt een cruciale randvoorwaarde voor de uiteindelijke omvang van de economische effecten. Met het oog op de beschikbaarheid van geschikt personeel, de aanwezigheid van het IT cluster rond SARA, de mogelijkheden voor spin offs en de nabijheid van Schiphol, heeft vestiging in Amsterdam de voorkeur.

1. De betekenis van supercomputers als onderzoeksinstrument

Onderzoek in het bedrijfsleven en in de wetenschap bestaat tegenwoordig uit drie methodologieën: het experiment, de theorie en modellering (of simulatie). Die laatste, ook wel de *derde methodologie* in de wetenschap genoemd, is de afgelopen 25 jaar tot volle wasdom gekomen. In Nederland heeft dit proces geleid tot een sterke ontwikkeling van inmiddels gevestigde onderzoeksdomeinen, zoals de stromingsdynamica (Computational Fluid Dynamics), met watermanagement en klimatologie als bekende bijzondere domeinen, de theoretische chemie -waaronder de katalyse en de ontwikkeling van nieuwe materialen- en andere domeinen, zoals de astronomie, deeltjesfysica, biofysica, het medisch onderzoek en gaming. De ontwikkeling van deze derde methodologie gaat hand in hand met de sterke toename in computervermogen. De beschikbaarheid van supercomputers en de voortdurende wens tot het begrijpen van complexe processen zijn de drijvende krachten achter deze krachtige nieuwe onderzoeksmethodologie.

Men mag volgens Prof. Dr. R.A. van Santen, voorzitter van de TWINS Raad⁴ van de KNAW, inmiddels concluderen dat de Computational Sciences behoren tot de belangrijkste ontwikkeling in de wetenschap sinds de Tweede Wereldoorlog. Het is een methodologie die alle wetenschapsgebieden raakt en breed toepasbaar is. Het is inzetbaar voor zowel fundamenteel wetenschappelijk onderzoek als in de meest praktische en

¹ Zie de EEA van Ecorys, figuur 3.1 pag. 15, tabel 3.2 p. 17, tabel 3.3 p. 19.

² Knooppunt in het Europese supercomputer-netwerk.

³ Zie de EEA van Ecorys, tabel 3.5 p. 21.

⁴ De Raad voor de Technische Wetenschappen, Wiskunde, Informatica, Natuuren Sterrenkunde en Scheikunde (TWINS) is in 2008 ontstaan door samenvoeging van de Akademie Commissie voor de Chemie (ACC), de Akademie Raad voor de Wiskunde (ARW), de Commissie voor Biochemie en Biofysica (CBB), de Raad voor Natuur- en Sterrenkunde (RNS) en de Raad voor Technische Wetenschappen (RTW).

alledaagse toepassingen. Het heeft de kijk op, en de processen in, het wetenschappelijk bedrijf als geheel drastisch verrijkt. Nederland heeft sinds het «overheidsstandpunt 1984» sterk ingezet op deze nieuwe ontwikkeling door deze met de nodige apparatuur te faciliteren. Nu bestaat er een nieuwe mogelijkheid om in Europees verband de Nederlandse positie een krachtige impuls te geven, door te kapitaliseren op eerdere investeringen in netwerk-, grid- en computerinfrastructuur. De bundeling van krachten in Nederland bekend onder de term «super-node», die bestaat uit grootschalige computer-, data-, netwerk- en visualisatievoorzieningen, en de daarbij behorende ondersteuning en expertise. Daarin vormt een supercomputer een onmisbaar element.

Een supercomputer is ontzettend snel in rekenen. Was in 1984 in Nederland het summum van rekenkracht in staat 100 Mflop/s¹ (100 miljoen berekeningen per seconde) te berekenen, in 2009 is dat 60 Tflop/s («zestig-duizend miljard berekeningen per seconde»), een factor 600 duizend sneller²! De huidige maatstaven voor de top liggen echter nog aanzienlijk hoger. De VS hebben momenteel de snelste supercomputer ter wereld en houden de eerste plaats op de World ranking list van supercomputers (Top500)³: «Jaguar», met 1,75 Petaflop/s (17,5 tot de 15e flops/s). Traditioneel staat de VS aan de top, soms afgewisseld door Japan. Nederland loopt intussen in snel tempo achterstand op en staat inmiddels op de 93e plaats in de Top500⁴. Europa was tot voor kort ondervetegenwoordigd aan de top. Deze situatie is inmiddels onderkend en Europa heeft hierop een antwoord geformuleerd in de vorm van PRACE. Nederland streeft met zijn deelname aan PRACE na om de Nederlandse onderzoekers van universiteiten en onderzoekslaboratoria binnen de industrie toegang te verschaffen tot de meest geavanceerde supercomputers ter wereld en mede het Europese beleid verder te bepalen.

De grote mondiale uitdagingen, zoals de kennis over het klimaat en het daaruit volgende veranderende weerbeeld, energie, duurzame materialen, lage-temperatuur processen, watermanagement en gezondheid zijn voorbeelden van bijzonder grote, maatschappelijk en economisch belangrijke opgaven die leiden tot complexe rekenproblemen. Maatschappelijk worden steeds hogere eisen gesteld aan deze wetenschapsgebieden om snel en zo nauwkeurig mogelijk antwoorden te geven die er toe doen. Zo wil men bijvoorbeeld steeds nauwkeuriger weersvoorspellingen, tot op een gebied van een vierkante kilometer. Dit vereist dat modellen zo realistisch mogelijk zijn, en dat vergt de meest geavanceerde ICT-technologieën ter ondersteuning. Supercomputers worden dan ook bij uitstek gebruikt voor technisch-wetenschappelijk onderzoek.

Rekenen op het scherpst van de snede is een noodzakelijke voorwaarde voor succesvol excellent onderzoek binnen de computational sciences. De uitdagingen vertalen zich ondermeer in zogenaamde «grand challenges». Zulke uitdagingen vragen zelfs op moderne supercomputers miljoenen (!) processoruren rekentijd en nemen de huidige nationale supercomputer soms enkele maanden volledig in beslag. Toch is dit werk inmiddels karakteristiek voor het Nederlandse nationale research profiel. Daarom is de KNAW actief om onder leiding van de Twins Raad de samenhang van het hele computational Science domein te profileren en het succes ervan helder en manifest te maken. Computational Science is bij uitstek geschikt om inzicht in en greep te krijgen op het toekomstige, het ongrijpbaar kleine of juist heel grote of op zaken die anders ontoegankelijk zouden zijn.

Het gebruik van supercomputers neemt wereldwijd nog steeds toe. Dit komt omdat door toenemende rekenkracht de oplossing van nieuwe vraagstukken binnen bereik komt, maar evenzeer doordat de vraag naar

¹ Flop/s staat voor floating point operations per second, dus het aantal berekeningen op drijvende-komma-getallen per seconde.

Meestal gebruikt met voorvoegsels als M, G, T, P of E, voor Mega, Giga, Tera, Peta of Exa.

² 25 jaar grootschalig wetenschappelijk rekenen in Nederland, NWO, december 2009.

³ Zie de World ranking list van november 2009: <http://www.top500.org>.

⁴ <http://www.top500.org/country/143>.

high-end voorzieningen verder wordt opgestuwd door een bredere bekendheid ermee. Ook in het bedrijfsleven bestaat belangstelling voor, en wordt gebruik gemaakt van, supercomputers. Het in Amsterdam georganiseerde PRACE Industry Seminar¹ heeft deze belangstelling duidelijk aangetoond. Bedrijven als Shell en Philips gaven te kennen dat de aanwezigheid van een Supernode een rol speelt bij het kiezen van de locatie om R&D activiteiten te ontplooiën. Het belang van het simuleren van testsituaties (die onmogelijk, te gevaarlijk of te kostbaar zijn om te produceren in laboratoria) en het analyseren van data met behulp van computermodellen, beperkt zich dan ook niet tot de kennisinstellingen of grote industriële bedrijven, maar betreft ook het midden- en kleinbedrijf en de grote technologische instituten.

Een uitgebreide European Science Case vormde de basis voor de conclusies van ESFRI om de voorstellen voor de inrichting van een Europese «Tier-0» infrastructuur² van supercomputers van wereldniveau te steunen, en als direct uitvoeringswaardig te classificeren.

2. High performance computing, een korte geschiedenis

Nederland heeft een lange historie op het gebied van grootschalig en supersnel rekenen. Al lang voordat de eerste echte supercomputer Nederlandse bodem bereikte liep Nederland in de jaren vijftig voorop als ontwerper van toenmalige grote computers³. Pioniergroepen in de jaren zestig en zeventig ontwikkelden nieuwe manieren voor het gebruik van computers en droegen bij aan het conceptualiseren van een geheel nieuwe lijn in het wetenschappelijk onderzoek waarvan we vandaag de vruchten plukken.

In 1970 ontstond er in Nederland een eerste begin van nationaal beleid, gericht op de toenmalige universitaire mainframes. Aan het eind van deze periode werd duidelijk dat een nieuwe generatie computersystemen, de vectorcomputers, ongekende versnellingen zouden opleveren. Deze systemen, die door deze sprong in prestaties «supercomputers» werden genoemd, gaven de Nederlandse overheid aanleiding te betekenis ervan voor het onderzoek en de economie te laten onderzoeken. In 1984 verscheen daarop het «Overheidsstandpunt Supercomputers». Dit gaf de aanzet tot nationale beleidsvorming, via de installatie van de Werkgroep Gebruik Supercomputers (1985) en resulteerde later, met steun van SURF, NWO en de VSNU tot de oprichting van de Stichting Nationale Computerfaciliteiten – NCF – onder NWO.

In de afgelopen 25 jaar werden verschillende supercomputers in Nederland in gebruik gesteld. Op den duur met een regelmaat van één per zes jaar, met een significante upgrade halverwege. Over de resultaten van deze inspanningen is sindsdien jaarlijks gerapporteerd. Het gebruik per onderzoeker en het aantal onderzoekers die op de supercomputer rekenen is in die periode enorm gegroeid. Van enkele duizenden uren per jaar in de periode tot 1990 tot miljoenen uren jaarlijks tegenwoordig. In 2007 werd de nieuwste nationale supercomputer, genaamd Huygens, aangeschaft.

In 2004 heeft Nederland het onderwerp Supercomputers op de Europese agenda gezet, in het kader van de ontwikkeling van een Europese strategie voor ICT-infrastructuren voor het technisch en wetenschappelijk onderzoek. Na dit initiatief is er Europees breed het inzicht ontstaan dat Europa een in de wereld onafhankelijke rol moet kunnen spelen op het gebied van modelleren, in het bijzonder met het oog op de grote mondiale uitdagingen. En Nederland heeft aan die verdere ontwikkeling op vele vlakken meegedaan. Inmiddels is dit uitgemond in een breed

¹ http://www.prace-project.eu/documents/press-releases-pdfs/D321_press_release_FINAL.pdf

² Tier-0 systeem: een supercomputer met Petascale performance (1 Pflop/s).

³ Zie voetnoot 2. Voorbeelden van grote computers uit die tijd: de ARRA, PTERA, ZERO14 en de ZEBRA.

gedragen initiatief tot versterking van de Europese HPC infrastructuur onder de PRACE organisatie, waarin ons land dan ook sterk deelneemt.

3. Het gebruik van supercomputers in de wetenschap

Supercomputers maken deel uit van de «ICT-infrastructuur», de voorwaardenscheppende infrastructuur voor alle wetenschapsgebieden die van ICT gebruikmaken om in de mondiale wetenschappelijke competitie te excelleren. Supercomputers vormen daarbinnen de top van de computerpiramide. Ze worden vooral gebruikt voor *simulaties*.

Simulaties spelen in het wetenschappelijk proces twee rollen. Op de eerste plaats om waarnemingen of de uitkomsten van experimenten te toetsen aan de gangbare theorie, en zo duiding te geven aan die resultaten («wat heb ik gemeten»). Op de tweede plaats om de theorie te gebruiken om voor praktische situaties (de toepassingen) antwoorden te genereren (voorspellen).

In grote lijnen wordt de ICT-infrastructuur voor research opgebouwd uit de volgende componenten: een hoogwaardig en veelzijdig netwerk (SURFnet in Nederland), supercomputers, de koppeling van alle systemen in één netwerk (Grids genoemd), data-opslag, datadiensten en visualisatie. Zo'n ICT-infrastructuur vormt een essentiële voorwaarde voor geavanceerd onderzoek op een groot aantal verschillende gebieden, zoals ook aangegeven in het ICTRegie rapport «ICT-infrastructuur voor het wetenschappelijk onderzoek in Nederland». Computational science, in eerste instantie vooral gedreven vanuit toepassingen en vanuit rekenmodellen, houdt zich vooral bezig met de methodologie van het modelleren. De term e-Science is geïntroduceerd in het begin van de 21e eeuw, en wordt gedefinieerd als wetenschap die in toenemende mate wordt mogelijk gemaakt door het internet, die gebruik maakt van zeer grote dataverzamelingen, tera-schaal rekencapaciteit of high-performance visualisaties. Computational science en e-science hebben belangrijke samenvallende kenmerken, zoals de optimalisatie van en de efficiency bij de inzet van de e-infrastructuur. De nadruk bij e-science ligt daarbij op het gebruik van de infrastructuur voor samenwerking en de inzet van decentrale systemen, terwijl de nadruk bij computational science ligt op het ontwikkelen van optimale applicaties in de toepassingsdomeinen. Het ligt daarom voor de hand dat de inrichting van een supernode en de oprichting van een e-Science Research Center¹ elkaar belangrijk zullen versterken.

Recent hebben een ruim veertig hoogleraren hun huidige en toekomstige onderzoek met supercomputers beschreven². Een verkort overzicht van de domeinen waarin supercomputers onmisbaar zijn omvat de volgende disciplines en toepassingen.

- Weer, klimaat en milieu: nauwkeurige hoge-resolutiemodellerings van lange termijn voorspellingen voor klimaatverandering, luchtverontreiniging en extreme weersituaties
- Watermanagement: waterstroombeheer in extreme situaties en adviezen bij calamiteiten
- Nanotechnologie: voorspelling van eigenschappen van samengestelde nanosystemen om te komen tot innovatieve oplossingen voor energieproblemen, moleculaire elektronica en biomoleculaire materialen
- Levenswetenschappen, biotechnologie: nauwkeurige dynamische moleculaire simulatie van eiwitten, interacties van medicijnen, modellering van complete cellen

¹ Zie de ICTRegie adviezen over de integrale ICT-infrastructuur en de concrete invulling van een op te richten e-SRC.

² Zie «Het belang van High Performance Computing voor Nederland», december 2008, SARA/NCF.

- Medische wetenschappen: simulatie van ontwikkeling botstructuren onder stress, van bloedstromen en hartfunctie, van computational neurology (hersenenonderzoek)
- Energieonderzoek: begrijpen van hoge-energieplasma's, kernfusie, zonne-energie; modellering van verbrandingsprocessen voor efficiënte en schone energie
- Astrofysica: studie van de evolutie van sterrenstelsels, van energieomzettingen onder extreme omstandigheden, ontstaan van het heelal
- Chemie en materiaalkunde: katalyse voor chemische processen bij lage(re) temperaturen (wassen bij lage temperatuur, olie kraken bij lage temperatuur, efficiëntere chemische omzettingen), berekening en verklaring chemische eigenschappen van materialen en hun duurzaamheid, moleculaire dynamica.
- Computerlinguïstiek/taal- en spraaktechnologie: vertalen en uitspreken van tekst, het detecteren van fouten in tekst, het beantwoorden van vragen en het voeren van dialogen.

Nederland heeft een naam opgebouwd in veel van deze disciplines, met topdeskundigen van wereldniveau, die hun succes mede te danken hebben aan het gevoerde nationale ICT-infrastructuur beleid (waarin de supercomputer een essentiële rol speelt).

4. Supercomputing in industriële en maatschappelijke sectoren

Het onderzoek dat met supercomputers wordt verricht, vormt ook een belangrijke voedingsbodem voor de ontwikkeling van industriële, technologische en maatschappelijke toepassingen¹. Het gebruik van Supercomputers (*High Performance Computing*) is van nut in uiteenlopende industriële sectoren: de farmaceutische industrie, de automotieve industrie, gaming en artificial intelligence, in brede sectoren als de chemie, bulk- en fijnchemie, in de halfgeleiderindustrie en in het bank- en verzekeringswezen². Daarnaast zijn er zwaarwegende maatschappelijke aspecten, zoals het verantwoordelijk omgaan met energiebronnen en het waarborgen van veiligheid als gevolg van klimaatveranderingen.

Chemische sector

De chemie is een grootverbruiker van supercomputers. Bijvoorbeeld in de polymeren industrie. Dit is een enorme markt met grote toegevoegde waarde. Specifieke producteisen vragen gedetailleerd onderzoek. Daarom wordt het onderzoek naar nieuwe varianten gedaan met behulp van computersimulaties en modellering. Meer computer(reken)kracht betekent onmiddellijk meer (en vooral) sneller inzicht in mogelijke combinaties. Vooral het aspect van snelheid is belangrijk. Hoe sneller nieuwe combinaties kunnen worden doorgerekend, des te meer mogelijke combinaties vergeleken kunnen worden. Het heeft geen zin een analyse te doen van 1 miljoen verschillende combinaties van stoffen als het antwoord op een enkele combinatie al een week op zich laat wachten. Indien het antwoord echter binnen enige uren bekend is, kan men nog diezelfde werkdag de resultaten verwerken en gebruiken om de analyse bij te stellen.

¹ In de ICT-Agenda 2008–2011 en de Lissabon-Agenda van maart 2000 wordt het belang van ICT voor de kenniseconomie en informatiesamenleving benadrukt.

² Bij het 1ste PRACE Industry Seminar in Amsterdam en het tweede in Toulouse waren al deze industriële partijen vertegenwoordigd.

Ook het doorrekenen van zogenaamde opschalingproblemen van de laboratoriumomgeving naar industriële productie (wat gebeurt er als je een stof in grote hoeveelheden gaat produceren) kan uitstekend met computermodellen worden opgelost. In de chemie wordt dan ook veel gebruik gemaakt van supercomputers en is men grootverbruiker van

computermodellering. De toenemende nadruk op «green chemistry» (milieubewust en duurzaam produceren) betekent een belangrijke stimulans voor deze ontwikkeling. De grote uitdaging daarbij is om afval terug te dringen («zero waste»), te werken met wateroplosbare stoffen en katalytische reacties te verbeteren.

De farmaceutische industrie

In het stukje over de chemische sector hebben we over hoeveelheden door te rekenen combinaties gesproken. In de farmaceutische industrie geldt deze uitdaging nog veel sterker. Het ontwikkelen van medicijnen «in silico» richt zich vooral op het doorrekenen van het effect van medicijnen op het functioneren van enzymen en eiwitten in het menselijk lichaam. Het bepalen van de juiste stoffen in medicijnen heeft uiteraard een groot gezondheidsbelang, maar voor de farmaceutische industrie ook een economisch belang. Het op de markt brengen van medicijnen is een kostbaar en langdurig proces. Elke keuze die tijdens dat proces gemaakt moet worden, dient juist te zijn. Het beschikbaar hebben van grote rekenfaciliteiten is daarbij cruciaal.

De halfgeleiderindustrie

Dit is een zeer snel groeiende, zeer innovatieve en hoogwaardige sector. Binnen de sector is het gebruik van supercomputers essentieel voor het ontwikkelen van de volgende generatie chips. Voor de toekomstige generatie computerchips zijn nieuwe materialen nodig die worden ontwikkeld met de huidige supercomputers. Er is nog tamelijk veel onderzoek nodig om de vragen op te lossen die worden opgeroepen door de alsmaar verdere miniaturisering van de chips. Vragen op het gebied van lichtpaden, energieverbruik en dataopslag. De eigenschappen en werking van nieuwe (alternatieve) materialen voor de halfgeleiderindustrie worden getest met behulp van complexe computermodellen. Met name het analyseren van materiaaleigenschappen op het moleculaire niveau (het zogenaamde «moleculair modelling») neemt een hoge vlucht.

Maar ook voor het oplossen van vraagstukken op aanpalende gebieden is supercomputing van belang. Bijvoorbeeld voor het toekennen van «watermerken» aan nieuwe chips waarmee inbreuken op patenten kunnen worden tegengegaan.

Of bij het oplossen van allerlei wiskundige problemen die samenhangen met het analyseren van zeer grote databestanden (bijvoorbeeld uit de deeltjesfysica en de astronomie). Of bij de cryptografie voor de versleuteling van dataverkeer.

Maatschappelijke belangen

Vaak wordt wetenschappelijk onderzoek gekenschetst als fundamenteel of maatschappelijk relevant. Maatschappelijk relevant zijn die wetenschappelijke resultaten die reeds snel bruikbaar zijn in de maatschappij. Te denken valt bijvoorbeeld aan het ontwikkelen van wasmiddelen die werkzaam zijn bij lage temperaturen. Katalyse, modellering en grootschalige rekenfaciliteiten zijn bij de ontwikkeling van dergelijke producten onmisbaar. Gebruik van dergelijke wasmiddelen heeft minder energieverbruik tot gevolg, wat duidelijk een maatschappelijk belang dient. Een ander voorbeeld is de bescherming tegen weers- en klimaatinvloeden: hoe hoog gaan we in Nederland dijken maken, wat dient er te gebeuren met de kustverdediging, en hoe kunnen we verantwoorde beslissingen nemen in het geval van hoog water? Grote beschikbare rekenfaciliteiten zijn bij dit laatste onmisbaar.

Het is onder meer om deze reden van veiligheid dat binnen de wereld van de technologische instituten van Nederland al langer belangstelling bestaat voor het gebruik van supercomputers. Er is nu een modellencentrum in oprichting, waarbij het KNMI met ondermeer het RIVM, Deltares, Alterra, TNO en PBL kennis en krachten bundelen, om een stap voorwaarts te zetten in het koppelen en/of integreren van modellen uit verschillende disciplines t.b.v. een integrale vraagstelling en als Nederland een vooraanstaande positie te behouden. Men verwacht de business case voor dit modellencentrum rond de jaarwisseling te kunnen opleveren. Betrokken partijen zien raakvlakken met het nog op te richten e-Science Research Center en aansluiting wordt dan ook aanbevolen. NWO en SURF nemen binnenkort een besluit over de vormgeving van het e-Science Research Center. Het KNMI ziet groot belang bij het in Nederland hebben van een supercomputer om modellen snel en op de maatschappelijk gewenste schaal te testen. Het KNMI onderschrijft het belang van het huisvesten van een Supernode in Nederland.

5. Het belang van supercomputing voor de kenniseconomie

Nederland is een kenniseconomie bij uitstek. Ons land kan zich gelukkig prijzen met een wijdvertakt netwerk van kennis- en onderzoeksinstituten. Hun wetenschappelijke output is van hoog niveau en bekend bij vakgenoten en vindt zijn weg naar toepassingen in de technologie, industrie, onderwijs en economie. Om dit top-niveau te onderhouden en verder op te stuwen is een hoogwaardige infrastructuur voor High Performance Computing een absolute voorwaarde.

Men kan drie lijnen onderscheiden binnen het Computational Science domein: softwareontwikkeling, applicatieontwikkeling en toepassingen in de disciplines en het bedrijfsleven. Nederland draagt momenteel sterk bij aan al deze drie lijnen.

Softwareontwikkeling vindt vooral plaats waar de nieuwe systemen zich bevinden. Alleen daar is de interactie met leveranciers en met andere softwareontwikkelaars die zich in de nabijheid daarvan willen vestigen sterk genoeg om daaraan met succes te kunnen bijdragen¹. Het betreft dan compilers², bibliotheken, nieuwe technieken voor parallel rekenen en het gebruik van multi-core processoren. Nederland doet als principal partner in PRACE ook mee aan de ontwikkeling van de software voor de supercomputers van de toekomst. Die supercomputers zullen duizend maal sneller zijn dan de snelste ter wereld nu en dat brengt uitdagende vraagstukken met zich mee. Nieuwe software moet kunnen omgaan met systemen met zeer veel processoren op één chip en tienduizenden van dergelijke chips in één systeem. Niet alleen de supercomputerindustrie profiteert van deze ontwikkeling, maar ook de consument, door grote vooruitgang op bijvoorbeeld het gebied van mobiele telefonie en computertechnologie voor de particuliere markt³. Als land met een grote software export⁴ raakt deze ontwikkeling ons in de kern van dit kennisgebied. Het principal partnership in PRACE levert enorme kansen om de vruchten te plukken van deze nieuwe ontwikkelingen. De echte grootschalige softwareontwikkelingen zullen vrijwel zeker geconcentreerd worden rond de toekomstige Supernodes in Europa.

Geavanceerd wetenschappelijk onderzoek bevordert niet alleen de technologische ontwikkeling, de economie en het concurrentievermogen van Nederland, maar ook het onderwijs en de algemeen maatschappelijke kennis⁵. Economische en demografische onderzoeken in Europa en de Verenigde Staten tonen aan dat de hightech-sector een cruciale rol vervult in de nationale economische voorspoed⁶ en een positieve invloed heeft op het aantal hoog opgeleide inwoners⁷. Het aantal patenten verleend in Korea, India en China zal aan het einde van het decennium groter zijn dan in Europa en Japan. De hightech-export vanuit Europa is afgenomen van

¹ Zie EEA Ecorys, p. 24 t/m 28.

² Een compiler is een computerprogramma dat programmeercode vertaalt in machinecode.

³ ICT-Agenda 2008–2011.

⁴ In 2004 stond Nederland met een exportwaarde van \$1,7 miljard aan software op de vierde plaats op de wereldranglijst.

⁵ Zie de ICT-Agenda 2008–2011, de EEA van Ecorys, p. 30, de Draft Council Conclusions on the future of ICT Research, Innovation and Infrastructures van de EC van 2 oktober 2009, p. 3 en 4, Masterplan ICT, mei 2009, IPN, p. 11 t/m 15.

⁶ Zie ICT 2030.nl, mei 2009, p. 16 t/m 18.

⁷ Zie de EEA van Ecorys, p. 31.

43% in 1980 tot 34% in 2001, terwijl die van de opkomende economieën in dezelfde periode steeg van 7% tot 25%. De hightech-sector droeg in de VS tot 2001 bij aan de verbetering van de betalingsbalans van de Amerikaanse economie, maar sinds 2001 is de waarde van de hightech-import in de VS groter dan de hightech-export. In een recente studie van de Europese Commissie, kwam ook naar voren dat in 2025 de R&D voorsprong van Europa en de Verenigde Staten verplaatst zal zijn naar Azië, met China en India verantwoordelijk voor 20% van 's werelds R&D. Dit soort voorspellingen zijn verontrustend voor de ambities van Europa en vragen om een sterke aanpak op het niveau van ICT-infrastructuren (supercomputers, grids en netwerken) om die trend te keren¹.

Om uitdagend en innovatief wetenschappelijk onderzoek te kunnen verrichten, en daarmee onze concurrentiepositie te versterken, is op bijna elk terrein de inzet van computational science vereist. Dat vergt significante investeringen in de beschikbaarstelling van een Petascale HPC-infrastructuur, de ontwikkeling van bijbehorende software en algoritmes, de opleiding van informatici en de noodzakelijke aanpassingen aan de universiteitscurricula om de laatste technologische ontwikkelingen te bevorderen.

Om te zorgen dat de infrastructuur in de pas blijft met de ontwikkelingen van de technologie en de eisen van de onderzoekers, zijn bovendien regelmatige upgrades van hardware en software nodig. Topfaciliteiten in Nederland op Petascale-niveau zijn noodzakelijk om een boeiend klimaat van wetenschappelijke research en innovatie te creëren, voor samenwerking bij productontwikkeling en voor het opleiden van toekomstige generaties specialisten in computational science. Samenwerking en partnerschap met andere Europese en internationale organisaties is hierbij belangrijk om schaalgroottes te bewerkstelligen en om nieuwe kansen voor onderzoek en economische groei te benutten. Zo kan Nederland ook in de toekomst een centrum blijven van hoogwaardig, actueel en maatschappelijk relevant onderzoek.

6. Het nationale belang in Europees perspectief

Infrastructuren en in het bijzonder e-infrastructuren zijn niet langer aan nationale grenzen gebonden. Het Zesde Kaderprogramma heeft een sterke aanzet gegeven tot de vorming van pan-Europese ICT-infrastructuren. Onder het Nederlandse voorzitterschap is de e-IRG roadmap voor de Europese e-infrastructuur ontwikkeld en heeft Nederland ook voorzieningen voor High Performance Computing op de politieke agenda gezet (aangemeld bij ESFRI). In het Zevende Kaderprogramma heeft de Europese Commissie haar ambities aangescherpt voor een Europese supercomputerinfrastructuur. Kort daarna heeft ESFRI de plannen voor een dergelijke zogenaamde Tier-0 infrastructuur² voor supercomputers als rijp voor implementatie geëvalueerd. Deze Tier-0 HPC-infrastructuur is van wetenschappelijk, economisch en strategisch belang, voor de wetenschappelijke en economische concurrentiepositie van Europa en voor de Europese onafhankelijkheid om een oordeel te vormen over de grote mondiale problemen en hun oplossingsrichtingen.

PRACE

In het voorjaar van 2007 is een samenwerkingsverband getekend tussen 14 Europese landen, waaronder Nederland, onder de naam «Partnership for Advanced Computing in Europe» (PRACE). Doel van dit samenwerkingsverband is de realisatie van een *Sustainable Pan-European infrastructure for Advanced Computing*. Inmiddels is het samenwerkingsverband gegroeid tot twintig landen en bestaat er belangstelling bij nog meer landen voor deelname.

¹ In de ICT-Agenda 2008–2011 wordt het belang onderkend van een sterke ICT-infrastructuur voor het behouden van kennis en het stimuleren van innovatie.

² Tier-0 systeem: een supercomputer met Petascale performance (1 Pflop/s).

Het Partnership kent een categorie Principal Partners en een categorie General Partners. Principal Partners onderscheiden zich van de General Partners daarin, dat de Principal Partners hebben toegezegd één van de toekomstige Europese Supercomputers van wereldklasse te zullen aanschaffen en ter beschikking te stellen aan de Europese onderzoeksgemeenschap. Met instemming van de ministeries OCW en EZ, en gehoord het advies van ICTRegie, heeft Nederland zich, vertegenwoordigd door de Stichting Nationale Computerfaciliteiten van NWO, in november 2008 als Principal Partner gepositioneerd. Deze positionering past binnen het profiel, dat Nederland in Europa en de rest van de wereld heeft, als land waarin computational research intensief wordt verricht, en dat altijd al de krachtigste voorzieningen heeft gehad.

Inmiddels heeft de Europese Commissie de voortgang rond PRACE beoordeeld en geconcludeerd dat PRACE de vereiste voortgang heeft geboekt voor de implementatiefase. Tot nu toe heeft Nederland het maximale uit het PRACE project gehaald en in een competitie financiering voor twee prototype systemen¹ in de wacht gesleept. Hiermee wordt het beeld bevestigd dat Nederland klaar is om in de toekomst als «hosting country» met succes dit soort competities aan te gaan.

Leidende Europese bedrijven willen bijdragen aan PRACE en hebben samen met kennisinstellingen en universiteiten één consortium opgericht teneinde de samenwerking met PRACE vorm te geven. Het uiteindelijke doel van alle betrokkenen is om te komen tot een technologische basis voor supercomputing in Europa. Zonder een dergelijke basis zal Europa afhankelijk blijven van de Amerikaanse en Japanse kennis op het gebied van supercomputers. Op de langere termijn betekent dit dat de Europese kennisinstellingen en industrie niet kunnen concurreren op topniveau.

Europese ICT-superknooppunten (Supernodes)

In de toekomst blijven er in Europa naar verwachting een beperkt aantal ICTsuperknooppunten over. De principal partners in PRACE zijn in een uitstekende positie om deze knooppunten te vormen. Nederland is met zijn uitstekende ICT-infrastructuur bij uitstek in een positie om bij te dragen aan deze Europese initiatieven en te profiteren van de extra mogelijkheden die dit biedt, waaronder ondersteunende middelen uit Brussel en versterking van de Nederlandse positie op langere termijn. In de ICT-agenda 2008–2011 wordt een integrale beschouwing gegeven van de Nederlandse ICT-infrastructuur. In de voortgangsrapportage op de ICT-agenda is aangekondigd dat het kabinet zal komen met een reactie op het ICTRegie rapport over de ICT-Infrastructuur van december 2008². Deze reactie ligt er inmiddels en daarin heeft het kabinet de voorgestelde bundeling (van de ICT-infrastructuur) gesteund en opgenomen dat bekeken zal worden wat de economische effecten zijn van het plaatsen van een supernode in Amsterdam³. Dat rapport is inmiddels af en de conclusies hebben we beschreven.

Aansluiting houden bij de ontwikkelingen

Voor de Nederlandse wetenschappelijke gemeenschap, maar ook voor het hightech bedrijfsleven, is het essentieel dat Nederland aansluiting houdt bij deze ontwikkelingen. De investeringen in de Nationale Computerfaciliteit bij SARA maar ook de investeringen in een van de beste onderzoeksdatanetwerken van de wereld (SURFnet) zouden anders teniet worden gedaan. Juist de combinatie van de Nederlandse expertise op het gebied van supercomputers én Gridnetwerken heeft veel dataverkeer en aanverwante bedrijven naar de Amsterdamse regio getrokken. Maar ook wetenschappelijk heeft het een aanzuigende werking, bijvoorbeeld op klimaat-

¹ De kosten voor de prototype systemen bedragen € 750 000. De helft wordt betaald vanuit het PRACE project, de andere helft wordt betaald door NCF. Het eerste prototype systeem is een uitbreiding van Huygens om future software te testen in een pseudo-productie omgeving. Het tweede prototype systeem is een systeem dat accelerators test, met echte applicaties van Nederlandse gebruikers van Huygens.

² December 2008, ICTRegie: «towards a competitive ICT infrastructure for scientific research in the Netherlands».

³ 11 mei 2009: kabinetsreactie op het advies van ICTRegie over de ICT-onderzoeksinfrastructuur voor het wetenschappelijk onderzoek in Nederland.

en medisch onderzoek. Dankzij de deelname aan PRACE op het hoogste niveau is Nederland nu als Europese partner ook uitgenodigd om samen met de VS en Azië te gaan werken aan de ontwikkeling – vooral op softwaregebied – van de nieuwste generatie supercomputers die over ruim tien jaar het licht moet gaan zien. Het gebruik van deze zogenaamde Exascale computers (1000 maal zo snel als de snelste vandaag ter wereld) vragen om enorme inspanningen op software en applicatiegebied, die uiteindelijk alle toepassingsdomeinen zal gaan treffen. Maar deze inspanningen zullen ook alle thans bekende systemen ten goede komen: van mobiele telefoon, tot laptop tot supercomputer. Dit is dan ook *het* moment om te kiezen voor een sterke Nederlandse positie in deze mondiale ontwikkelingen.

Een supernode is daarom niet alleen van grote betekenis voor wetenschap en innovatie, maar ook voor het bedrijfsleven en de positie van Nederland als kennis- en ontwikkelingscentrum.