

Naast de partijen met eigen software zijn er ook veel bedrijven en ingenieursbureaus die werken met rekensoftware onder een commerciële licentie. Dit verklaart ook de vaak wat kleinere rekenclusters die door bedrijven worden aangeschaft. De licentiestructuur staat het vaak niet toe om op een groot aantal nodes te rekenen. En het is blijkaar afdoende. Daniël (ClusterVision): "Toch zien veel bedrijven zichzelf onvoldoende als HPC gebruiker. Ze knopen wat standaard hardware aan elkaar en het werkt niet optimaal voor hun applicaties. Hier valt nog heel wat aan efficiëntie te verbeteren."

De cloud

De opkomst van cloud computing in de algemene IT wereld laat ook de HPC wereld niet geheel onberoerd. Marc (ttec): "Cloud biedt een nieuw, uniform en flexibel model om toegang tot de rekencapaciteit te bieden. Vroeger zorgde de virtualisatie van de hardware voor een aanzienlijke reductie in prestatie. Tegenwoordig zijn er cloud oplossingen die hier veel beter mee omgaan." Het gaat hier in eerste instantie om het gebruik van een cloud platform (zoals bijvoorbeeld OpenStack) als resource management systeem voor het eigen, private cluster. Als je een rekenklus wilt doen krijg je dan eigenlijk een soort mini-cluster toebedeeld waarop je alles zelf kan instellen en regelen. Dit werkt met behulp van zogenaamde Docker containers, een lichtgewicht tegenhanger van de virtuele machines. Een belangrijk voordeel is dat in een dergelijke container allerlei zaken speciaal voor een bepaalde rekenklus geconfigureerd kunnen worden waardoor het systeembeheer een stuk eenvoudiger is.

Het rekenen op publieke clusters zoals Amazon of Azure wordt door bedrijven nog niet veel gedaan. Marc (ttec): "De publieke cloud heeft een aantrekkelijk kostenmodel omdat je alleen betaalt als je gebruikt. Je hoeft geen hardware in huis te hebben en te beheren. Toch blijkt het bij regelmatig gebruik al gauw duurder dan het zelf aanschaffen van een cluster. En de veiligheid van data op een publieke cloud blijft voor veel bedrijven een lastig issue".

Daniël (ClusterVision) ziet de gebruikers die zelf rekensoftware ontwikkelen nog veelal op een traditionele manier op hun rekencluster werken: een shell met een commandoregel, zelf compileren van de broncode, rekenjobs configureren met tekstbestanden op een queue zetten. En een batterij shell-scripts die om deze workflow heen zijn gemaakt. Dit komt ook doordat de software zelf altijd al op die manier heeft gewerkt. Daniël: "Maar het cloud model zal zeker gaan groeien. Voor het toedelen van rekencapaciteit op het eigen cluster bieden wij ook al een cloud platform aan. En dit maakt het ook veel eenvoudiger om publieke clouds een keer in te schakelen bij een piekbelasting."

De slotsom

Kortom, de komende jaren zullen de HPC hardware platforms verder groeien in rekenkracht, maar daarbij zal de efficiëntie een steeds belangrijker factor worden. Hierdoor speelt parallel rekenen een steeds grotere rol, en om dit aan te kunnen dienen de rekenalgoritmes geschikt gemaakt te worden. En wat betreft het systeembeheer zullen we ook steeds meer gaan zien van management platforms die gebaseerd zijn op het cloud concept.

Stand en richting van de numerieke wiskunde - Interview met Kees Vuik



Prof. dr. ir. C. (Kees) Vuik

Door Bas van 't Hof, Jak Tang en Koos Huijssen

De activiteiten binnen VORtech hebben de afgelopen 20 jaren gelegen op het raakvlak van toegepaste wiskunde en wetenschappelijke software. Kees Vuik is hoogleraar aan de Technische Universiteit in Delft in de vakgroep Numerieke Wiskunde. In een interview met Kees vroegen we hem naar de ontwikkelingen op zijn vakgebied en wat we konden verwachten in de komende jaren.

Als je terugkijkt op de afgelopen twintig jaar, wat zijn dan de grootste ontwikkelingen geweest in jouw vakgebied?

"De ontwikkelingen zijn op zeker drie vlakken te beschrijven. Ten eerste is er op het gebied van de toepassingen van numerieke wiskunde veel veranderd. Vroeger zagen we met name toepassingen in de natuurkunde en scheikunde, maar nu kan je bijna overal 'computational' voor zetten: biologie, verkeer, finance, sociale wetenschappen... Het vakgebied is dus veel breder geworden. Maar als ik me beperk tot de natuurkunde zie ik ook verschuivingen. De laatste tijd zijn zogenaamde Large Eddy Simulations (LES) veel belangrijker geworden, en de stromingsverschijnselen van meerdere fasen (bijvoorbeeld vloeistof en gas). Daarnaast worden simulaties met onzekerheid steeds belangrijker, waardoor we ook bandbreedtes kunnen geven aan de voorspellingen van bijvoorbeeld het weer.

Een tweede vlak is op het gebied van discretisatiemethoden. In 1996 dachten we dat we wel klaar waren met de eindige-differentie-, eindige-elementen- en eindige-volumemethodes. Later bleek echter dat de randelementen methodes en de discontinue Galerkin discretisatie goede aanvullingen

hierop waren. Deze methoden hebben echt hun eigen niche verworven.

Een derde vlak waar veel is veranderd is op het gebied van de numerieke iteratieve solvers. Twintig jaar geleden hadden we al de Krylov- en Multigrid-methodes. Daar zijn allerlei nieuwe varianten bijgekomen, en technieken als preconditioning, deflatie en een goed stopcriterium hebben de toepassingsbreedte en rekensnelheid spectaculair verbeterd.

"De solvers die in onze vakgroep worden ontwikkeld zijn echt van wereldklasse"

De solvers die in onze vakgroep worden ontwikkeld zijn echt van wereldklasse, en ze worden toegepast door partner bedrijven en instituten als Shell, MARIN en Deltares. Er is keihard gewerkt om dit voor elkaar te krijgen, daar ben ik echt heel trots op."

Wat is de invloed van de veranderingen op hardware gebied geweest op de numerieke wiskunde?

"In 1996 ontwikkelden we onze algoritmes met name voor single-core computers, ook al waren de grotere machines wel beschikbaar. Tegenwoordig zijn alle machines multi-core, en we gaan toe naar platformen met many-cores. Dan hebben we het over duizenden cores. Voor ons is het de uitdaging om slimme en efficiënte solvers te ontwikkelen



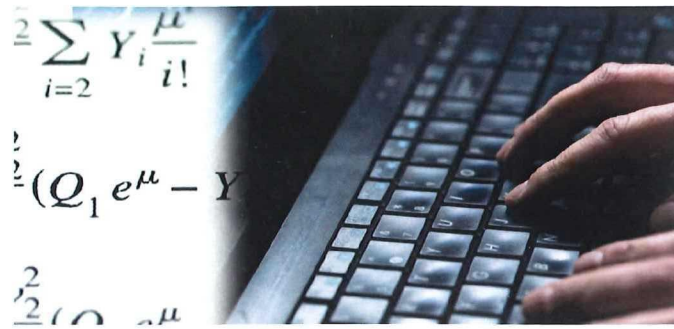
die ook goed paralleliseerbaar zijn. Op het gebied van de hardware zien we ook wel cyclische ontwikkelingen. Twintig jaar geleden moest je bij het Nederlands Lucht- en Ruimtevaartcentrum (NLR) in grote vectoren rekenen. Na een tijd kwam dit in vergetelheid, maar nu is dat door de GPU's weer helemaal terug. En in de toekomst gaan we toe naar steeds exotischere hardware zoals de FPGA's of zelfs quantum-computers. De numerieke algoritmes zullen hier ook mee moeten kunnen omgaan."

Zijn numeriek wiskundigen veranderd in 20 jaar tijd? En hoe ziet de toekomst er voor hen uit?

"Vroeger werd het numerieke werk noodgedwongen door ingenieurs uit andere disciplines opgepakt, het was geen op zichzelf staand vakgebied. Nu is het een vast onderdeel van de Wiskunde of de Computer Science faculteiten. Opvallend is dat de Informatica zich heeft teruggetrokken uit de scientific computing, en zich meer richt op toepassingen van data science en machine learning. We moeten onze wiskundigen en ingenieurs blijven opleiden in het gestructureerd programmeren, en daar bejiver ik me ook voor.

Onze numeriek wiskundigen vinden gretig aftrek op de banenmarkt, ook internationaal. Het is de combinatie van een hoogwaardig onderwijsniveau, een creatieve en zelfstandige denkwijze en een gezonde dosis perfectionisme die ons populair maakt. Die combinatie moeten we blijven koesteren."

"We moeten onze wiskundigen en ingenieurs blijven opleiden in het gestructureerd programmeren"



De financiële wiskunde sterk door de crisis – Interview met Kees Oosterlee



Prof. dr. ir. C.W. (Kees) Oosterlee

Door Jak Tang, Bas van 't Hof en Koos Huijssen

De laatste jaren is VORtech zich steeds meer gaan bezighouden met wiskundige vraagstukken en wetenschappelijke software dienstverlening op het financiële vlak. Kees Oosterlee is hoogleraar aan de TU Delft en is deel van het Management Team van het CWI in Amsterdam. Er is een goede samenwerking tussen VORtech en Kees, getuige onder andere het huidige Europese onderzoeksproject WAKEUPCALL. In het interview dat we met hem hadden heeft hij zijn visie gegeven op het vakgebied van financiële wiskunde en computational finance.



Laten we beginnen met terug te kijken op de afgelopen tijd. Is de financiële wiskunde erg veranderd in de laatste twintig jaar?

"Ja, enorm! En met name sinds de kredietcrisis die begon in 2008. Voor de crisis werden financiële producten steeds complexer, en men onderschatte de risico's die hieraan kleefden. Sinds de crisis is er veel meer regulering gekomen, en dit heeft geleid tot veel eenvoudigere producten. Doordat de aandacht nu veel sterker ligt op risicobeheersing zijn de vragen, de modellen en de wiskundige analyses ook veranderd. De risicoanalyse is een bijzonder soort kansrekening, omdat het venijn in de staart zit: zeer onwaarschijnlijke gebeurtenissen kunnen een heel groot effect hebben.

"De financiële wiskunde zal, nog meer dan nu het geval is, worden bepaald door beschikbare gegevens. Big data dus."

De crisis kan nu, achteraf, heel goed worden uitgelegd met de modellen die we momenteel hebben. Verder denk ik dat een crisis zoals we die gehad hebben, door de regulering

veel minder waarschijnlijk is geworden. Banken moeten nu veel grotere reserves aanhouden.

Deze nieuwe realiteit is overigens, net als de vorige, erg lucratief voor de banken: twee of drie jaar geleden gingen de banken (bijna) failliet, en nu maken ze weer miljarden winst. Dat zien we ook in de fondsen waarmee banken ons academisch onderzoek sponsoren, dat is nu weer makkelijker dan een aantal jaar geleden."

Is de rol van High Performance Computing veranderd in het bankwezen?

"Die rol is zonder twijfel toegenomen en zal verder toe blijven nemen. Vroeger hoefden voorspellingen niet zo nauwkeurig te zijn als nu wordt geëist. Ook is er tegenwoordig veel meer informatie beschikbaar die wordt meegenomen in het beslissingsproces. Dit is te danken aan de HPC, maar tegelijkertijd kan je dus ook niet meer zonder.

Je ziet de rol van financiële rekenmodellen en snelle computers ook in het veld van 'High frequency trading'. Het principe hierbij is dat prijswijzigingen aan de ene kant van de wereld net iets sneller naar elders verzonden worden, zodat daar nog gauw winst kan worden gemaakt. Wat je er ook van mag vinden, dergelijke handel levert een bijdrage aan de economie door te zorgen dat alles op elk moment gekocht en verkocht kan worden, al is het maar om het

gelijk weer door te verkopen. Als zaken onverkoopbaar worden kan dat heel nadelig zijn voor de economie. En deze handel is overigens ook zeer goed gereguleerd.”

Wat verwacht je van de toekomst van de financiële wiskunde?

“De financiële wiskunde zal, nog meer dan nu het geval is, worden bepaald door beschikbare gegevens. Big data dus. Maar om iets zinnigs met die data te kunnen doen hebben we goede technieken nodig om de hoeveelheid te kunnen reduceren terwijl de essentie behouden blijft. Ik verwacht dat we op dit vlak wel iets kunnen betekenen met compressed sensing. En ik wil in de toekomst de beschikbare data beter kunnen combineren met modelvoorspellingen.

Ook denk ik dat de zogenaamde ‘Block chain’, dat wil zeggen het elektronisch handelen zonder tussenpersoon zoals dat bij de bitcoin gebeurt, een grote rol zal spelen. Een interessant aspect is dat zowel Google als Microsoft al een licentie hebben om bankdiensten aan te bieden. Dat kan de markt aanzienlijk gaan veranderen.

“De risicoanalyse is een bijzonder soort kansrekening, omdat het venijn in de staart zit”

Verder zou ik zelf graag geavanceerde modellen willen gaan aanbieden die draaien op een mobiele telefoon. Bijvoorbeeld door op basis hiervan een game te maken die echt bestaande handelssituaties simuleert, gevoed met actuele gegevens. Een andere mogelijke toepassing zou kunnen zijn dat de telefoon van een beurshandelaar zijn ‘trading limit’ op aanvraag kan uitrekenen. Nu wordt die nog ‘s nachts uitgerekend en ‘s ochtends aan hem meegedeeld. Het zou enorm leuk zijn als ik zou kunnen bijdragen aan het ontstaan van een startup voor een dergelijk product, met jonge en enthousiaste ondernemers.”

Stromingen in beeld

Voor allerlei activiteiten in de kustgebieden is het van belang om een goed beeld te hebben van de stromingen en waterstanden. Denk bijvoorbeeld aan de loodsen, die dit soort informatie nodig hebben om schepen veilig de haven in te kunnen brengen. Met de nieuwe waterberichtgevingsviewer (WB-viewer) van het Hydro Meteo Centrum van Rijkswaterstaat is informatie over de kustwateren nu interactief toegankelijk.

De WB-viewer is niet alleen van belang voor loodsen maar ook voor allerlei andere gebruikers, zoals schippers en de beheerders van sluizen en havens. Aangezien al die gebruikers andere behoeftes hebben, is het van belang dat iedereen zelf de gewenste informatie kan selecteren. Dat is dan ook precies het sterke punt van de WB-viewer. Daarnaast wordt de informatie ook nog eens op een visueel aantrekkelijke manier gepresenteerd.

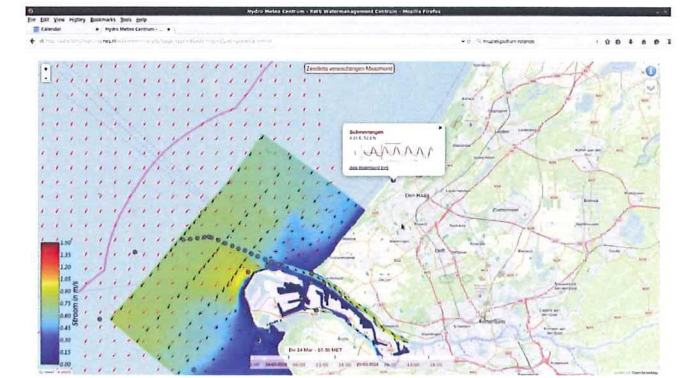
“Elke gebruiker heeft andere behoeftes. Met de WB-viewer kan iedereen zelf de gewenste informatie selecteren.”



Via waterberichtgeving.rws.nl (kies Projecten en dan Waterberichtgeving viewer) kunnen gebruikers kiezen uit viewers voor verschillende gebieden en toepassingen. Er is bijvoorbeeld een viewer voor de Westerschelde, waarin je direct het stromingsbeeld kunt zien. Door onderaan de viewer op de tijdbalk te klikken kun je zien hoe het stromingsbeeld de komende uren gaat veranderen. Op bepaalde punten in de kaart (bijvoorbeeld Vlissingen) kun je grafieken opvragen die het verloop van de waterstanden en stromingen in de komende uren op die plek tonen. Zo kan de gebruiker zich heel snel een beeld vormen van de situatie voor zover die voor hem van belang is, hij kan daarbij makkelijk in- en uitzoomen en waarden direct aflezen.

Het feit dat er gemakkelijk specifieke viewers kunnen worden geconfigureerd voor bepaalde toepassingen is een bewuste keuze in het ontwerp. Zo wordt er bijvoorbeeld ook een viewer aangeboden ten behoeve van The Ocean Cleanup, een innovatief bedrijf (toevallig gevestigd in hetzelfde gebouw als VORtech) dat zich tot doel gesteld heeft om met nieuwe technologie de oceanen schoon te maken. Een andere mooie toepassing is het zichtbaar maken van HF-radar gegevens. Dit zijn metingen van het stromingsbeeld die gedaan worden met een high-frequency radar vanaf de Nederlandse kust voor een groot gebied in de aanvaarroute naar Rotterdam.

Kwok Li is binnen VORtech verantwoordelijk voor de doorontwikkeling van de WB-viewer. “De basis van de



Stroming en getijdevoorspelling aan de Zuid-Hollandse kust in de WB-viewer

viewer is gelegd door Regien Brouwer, een zelfstandige met wie we samenwerken een aantal nieuwe technieken verkend waarmee volgens haar de toegankelijkheid van de voorspellingen veel beter zou kunnen worden. Dat blijkt ze goed gezien te hebben”, aldus Kwok. “De viewer is gebaseerd op het pakket Leaflet, waarmee interactieve kaarten gemaakt kunnen worden, en op het pakket dygraphs, dat gebruikt wordt om grafieken van bijvoorbeeld waterstanden te tonen.” Beide pakketten zijn open source JavaScript pakketten die zich zeer makkelijk laten inzetten voor dit soort toepassingen.

Rijkswaterstaat is bezig om de WB-viewer in het nieuwe ontwerp van de waterberichtgevingsite te integreren en om de mogelijkheden ervan actief te promoten. Dat levert zonder uitzondering enthousiaste reacties op. Het is dan ook te verwachten dat de WB-viewer de komende jaren een prominente plek zal hebben in de waterberichtgeving.