

Reacties van wetenschappers in Vlaanderen over de komst van de Tier-1 supercomputer

Prof. Pieter Libin (VUB):

“De recente ontwikkelingen in AI vinden hun oorsprong in theoretische fundamenteën en de beschikbaarheid van grote hoeveelheden rekenkracht”, zegt professor Pieter Libin van het Artificial Intelligence Lab van de VUB. “Om mee te draaien op het topniveau van AI-onderzoek is het essentieel om toegang te hebben tot een supercomputer zoals Tier-1 en dan vooral een supercomputer met veel GPUs. GPUs zijn rekeneenheden die sterk lijken op de grafische kaart waarop je zoon of dochter computerspelletjes spelen, maar dan veel krachtiger. Zulke systemen laten toe om grote efficiëntiewinsten te boeken bij het trainen en evalueren van nieuwe complexe machine learning modellen. Daarnaast hebben we op het AI lab een rijke traditie omtrent het gebruik van agent-gebaseerde modellen, om het ontstaan van taal, aspecten van computationele creativiteit, maar ook bijvoorbeeld het mitigeren van infectieziekten in een simulatieomgeving te bestuderen. Hier stelt de agent een basisbegrip voor, bijvoorbeeld een individu in een sociaal netwerk, als het gaat om het modelleren van infectieziekten binnen een populatie. Zulke simulaties beschouwen typisch een grote hoeveelheid agenten, hetgeen het computationeel zeer uitdagend maakt. Ook hier biedt de supercomputer heel wat mogelijkheden om experimenten sneller en uitgebreider uit te voeren.”

Prof. Frank De Proft (VUB):

“De vraag naar nieuwe chemische verbindingen en materialen met geschikte eigenschappen stijgt elk jaar”, zegt professor Frank De Proft namens de onderzoekers van de Onderzoeksgroep Algemene Chemie van de VUB, waar men al sinds de jaren '80 onderzoek verricht in het vakgebied van de computationele chemie. “De rekenkracht van de Tier-1 stelt ons in staat complexe materialen en chemische reacties te simuleren en de eigenschappen en chemische reactiviteit van verbindingen te voorspellen op basis van modelering op atomaire schaal. De rekenkracht is van groot strategisch belang voor de technologische ontwikkelingen die hieruit voortvloeien.”

Prof. Tinne Tuytelaars (KULeuven):

“De Tier-1 is cruciaal gebleken voor ons eerder onderzoek rond computervisie, omdat we zo grotere modellen op grotere hoeveelheden data kunnen trainen, waardoor we state-of-the-art resultaten konden voorleggen. We willen ons onderzoek verder uitbreiden van stilstaande beelden naar videodata en multimodale data, en liefst dan nog volledige video's en niet enkel korte fragmenten. Daarvoor is nog eens zo veel rekenkracht nodig.”, vertelt professor Tinne Tuytelaars van de onderzoeksgroep Stem en Beeldverwerking van de KULeuven. “Als individueel labo is het onmogelijk om de nodige infrastructuur uit te bouwen om mee te kunnen in een onderzoeksdomein dat nu al gedomineerd wordt door de grote industriële labo's. Dat maakt initiatieven zoals de Tier-1 superbelangrijk. Zonder nationale en internationale initiatieven zoals dit, zouden we het onderzoek in bepaalde kritische domeinen zoals AI, volledig aan de bedrijven moeten overlaten - duidelijk niet de gewenste situatie.”

Prof. Wim Thiery (VUB):

“We werken met het Community Earth System, waarin we data van alle voor het klimaat bepalende elementen, zowel de oceanen, de ijskappen en de gletsjers, de atmosfeer, als het

land op aarde, zoveel mogelijk willen combineren. Om onze modellen te berekenen kunnen we niet zonder de rekenkracht van een supercomputer. Enkel zo kunnen we realistische voorspellingen doen over de gevolgen van de klimaatopwarming.”, zegt klimatoloog Wim Thiery.

Prof. Jef Vandemeulebroucke (VUB):

“Mijn onderzoek draait rond medische beeldanalyse voor beeldgeleide therapieën, computer-geassisteerde diagnose en klinische beslissingsondersteuning voor precisie-geneeskunde”, zegt professor Jef Vandemeulebroucke die zich aan de VUB bezighoudt met multidimensionale signaalverwerking en communicatie. “De rekenkracht en snelle dataopslag van de Tier-1 laat ons toe grotere en nauwkeurigere AI-modellen te maken om pathologieën te onderscheiden van de normale anatomie op verschillende types medische beelden. Die rekenkracht stelt ons ook in staat te voorspellen welke behandeling de meeste kans op slagen heeft, door een grote populatie van eerder behandelde patiënten te bestuderen en de verbanden tussen de patiëntkarakteristieken, de toegediende zorg en het verloop van de patiënt te achterhalen. Op die manier hopen we op termijn steeds de gepaste behandeling te kiezen voor iedere patiënt.”

Prof. Hans De Winter (UAntwerpen):

“Zonder de Tier-1 infrastructuur van het Vlaams Supercomputer Center zou ons onderzoek naar het werkingsmechanisme van medicijnen totaal onmogelijk zijn. Voor ons is deze Tier-1 computerinfrastructuur tegelijkertijd ons laboratorium én onze onderzoeksapparatuur.”, zegt professor Hans De Winter van de onderzoeksgroep medische chemie van de UAntwerpen. “We maken dagelijks gebruik van die krachtige systemen om op atomaire schaal de binding van geneesmiddelen aan hun farmacologische eiwit te simuleren en te begrijpen. Zo hebben we ten tijde van de Corona-epidemie het Tier-1 systeem ten volle ingezet bij de zoektocht naar mogelijke SARS-CoV-2 inhibitoren, en vandaag zetten we de Tier-1 infrastructuur in bij de ontwikkeling van doelgerichte kankertherapieën en -diagnostica.”

Prof. Rony Keppens (KULeuven):

“De Tier-1 supercomputer speelt een cruciale rol bij hedendaags zonnefysisch onderzoek, waar numerieke simulaties ons uiterst scherpe beelden kunnen opleveren van bijvoorbeeld zonnevlekken, zonnevlammen, en zonnefilamenten”, zegt professor Rony Keppens van het centrum voor Mathematische Plasma astrofysica van de KULeuven.

“De scherpte van die beelden overstijgt de resoluties die met de modernste zonnetelescopen gehaald worden. Zo hebben we ontdekt dat er ook zoiets als zonneregen bestaat, waarbij er condensaties optreden in de zonsatmosfeer, die dan langs schuine, gebogen wegen naar het zonsoppervlak vallen. Die schuine wegen tonen ons hoe het magneetveld van de zon zich in allerlei lussen manifesteert.”

Prof. Veronique Hoste (UGent):

“Grote taalmodellen (LLM's) zijn de laatste jaren alomtegenwoordig geworden en hebben geleid tot drastische performante verbeteringen in een groot aantal NLP-taken, zowel op het gebied van automatisch taalbegrip opbouwen als op het gebied van automatische taalgeneratie.”, vertelt professor Veronique Hoste van de onderzoeksgroep Taal en vertaaltechnologie van de UGent. “Die modellen zijn vaak sterk gericht op het Engels, zelfs als ze meertalig zijn, en zijn vaak getraind op data waarvan de herkomst niet duidelijk is en

niet altijd vrij beschikbaar. Dankzij de Tier-1 infrastructuur kunnen we ook zelf grootschalige, open-source taalmodellen ontwikkelen voor de Vlaamse onderzoeksgemeenschap, met een focus op de Nederlandse taal.”

Prof. Danny Vanpoucke (UHasselt):

“Het ontwikkelen van nieuwe materialen en het verbeteren van bestaande materialen vereisen een diepgaand inzicht in wat er op atomaire schaal gebeurt. Dat gaat van nieuwe batterijmaterialen, over het circulair gebruik van biopolymeren zoals lignine, tot het ontwikkelen van nieuwe kwantum qubits in diamant voor de huidige kwantumrevolutie.”, zegt professor Danny Vanpoucke van Instituut voor Materiaalonderzoek van de UHasselt. “Die informatie is echter enkel toegankelijk vanuit theoretische modellen gestoeld in de kwantummechanica en de kwantumchemie. De nauwkeurigheid van die kwantummechanische modellen gaat echter hand in hand met hun complexiteit en de daaraan verbonden rekenkost. De rekenkracht welke ons ter beschikking staat via de Vlaamse Tier-1 faciliteit laat ons toe snel vooruitgang te boeken en onze collega’s in het experimentele onderzoek te ondersteunen en hen te helpen bij het rationeel gericht ontwerp van nieuwe materialen. Als we in Vlaanderen een voortrekkersrol willen spelen in innovatief materiaalonderzoek, dan is de toegang tot een Vlaamse Tier-1 supercomputer van centraal belang. Het laat ons toe meer en realistischere modellen te bestuderen, wat de voorspellende waarde van ons computationeel materiaalonderzoek vergroot.”