



### UITDAGING

Eiwitten zijn zeer ingewikkelde moleculen. Voor het herberekenen van de eiwitstructuren heeft het CMBI met name behoefte aan een ruime rekencapaciteit die onbeperkt kan worden opgeschaald zonder de noodzaak om te scheduleren. Een andere eis van het CMBI is dat de rekenkracht eenvoudig, flexibel en snel beschikbaar is.

### OPLOSSING

Het type project van het CMBI past zeer goed bij een High Performance Computing-cloudplatform. Het cloudplatform is gericht op maximale prestaties en maximale betrouwbaarheid. Dankzij VMware vCloud Director is zowel 'horizontal' als 'vertical' scaling mogelijk.

### RESULTATEN

Met het High Performance Computing-cloudplatform beschikt het CMBI over de flexibiliteit om snel van start te gaan met het berekenen van eiwitstructuren en onbeperkt op te schalen. Extra rekencapaciteit is eenvoudig en direct beschikbaar. Hierdoor bespaart het CMBI veel tijd en geld.

Radboud University Nijmegen  Medical Centre  
Nijmegen Centre for Molecular Life Sciences

## CMBI herberekent eiwitstructuren met VMware-gebaseerde HPC-cloud

Voor het herberekenen van eiwitstructuren heeft het Centre for Molecular and Biomolecular Informatics (CMBI) van het Universitair Medisch Centrum St. Radboud in Nijmegen behoefte aan een grote rekencapaciteit die eenvoudig en flexibel is in te zetten. Extra rekencapaciteit moet op aanvraag direct beschikbaar zijn. Het CMBI vult deze behoefte in met een VMware -gebaseerde 'High Performance Computing-cloud', die wordt geleverd door een vCloud Powered Partner.

Eiwitten zijn zeer ingewikkelde moleculen. De structuur van een eiwit is als het ware een driedimensionaal model dat vertelt waar alle atomen van eiwitten zich specifiek in de ruimte bevinden. Voor de wetenschap is het echter van zeer groot belang dat er een goed beeld is van zoveel mogelijk eiwitstructuren. Een goed inzicht helpt onder andere bij de ontwikkeling van nieuwe medicijnen. Momenteel zijn er in totaal 89.000 eiwitstructuren bekend, waarvan er 10.000 zijn opgelost met een natuurkundig fenomeen genaamd Nuclear Magnetic Resonance (NMR) of 'kernspinresonantie'. Op deze laatste groep richt het onderzoek van het Centre for Molecular and Biomolecular Informatics zich. De helft van de met NMR opgeloste structuren is geschikt om te herberekenen, waardoor een nog beter inzicht in de structuren ontstaat. "De technologie om structuren te berekenen is in de loop der jaren enorm vooruitgegaan", aldus onderzoeker Wouter Touw, als PhD-student verbonden aan het CMBI. "Wij kunnen nu in één dag meer berekenen dan tien jaar geleden in een hele maand."

### Embarrassingly parallel

Voor het herberekenen van de eiwitstructuren heeft het CMBI met name behoefte aan een ruime rekencapaciteit die onbeperkt kan worden opgeschaald zonder de noodzaak om te scheduleren. Een andere eis van het CMBI is dat de rekenkracht eenvoudig, flexibel en snel beschikbaar is. Cloud computing sluit het beste aan op de eisen van het onderzoeksinstituut.

"Onze problemen zijn echt embarrassingly parallel", zegt professor Gert Vriend die binnen het CMBI leiding geeft aan de onderzoeksgroep 'Protein Structure Bioinformatics'. "Voor elke eiwitstructuur die we willen herberekenen, worden steeds dezelfde stappen in een vaste volgorde doorlopen en draait er één core ergens tussen de 1 en 24 uur. Voor ons project hebben we weinig geheugen nodig; het gaat vooral om de 'supercycles' die snel beschikbaar

moeten zijn als we daar behoefte aan hebben. Daar is de cloud bijzonder geschikt voor."

### Het VMware-gebaseerde cloudplatform

Het CMBI kwam via het nationale HPC-centrum SARA (nu SURFsara geheten) uit bij een vCloud Powered Partner van VMware. Al snel bleek dat het type project van het CMBI en het High Performance Computing-cloudplatform van deze partner goed op elkaar aansluiten. Zo is het platform ingericht op embarrassingly parallel-berekeningen waardoor zware berekeningen in een korte tijd kunnen worden uitgevoerd.

Het cloudplatform is gericht op maximale prestaties en maximale betrouwbaarheid. Dankzij VMware vCloud Director is zowel 'horizontal' als 'vertical' scaling mogelijk. Bij 'vertical scaling' blijft er altijd een maximum aan cpu en geheugen in de

## VMWARE CASE STUDY

***“Waar we vijf jaar geleden nog servers door heel Europa nodig hadden voor onze berekeningen, hebben we nu ruimschoots voldoende aan dit cloudplatform.”***

Professor Gert Vriend, Centre for Molecular and Biomolecular Informatics

### VMWARE IN DE PRAKTIJK

- vSphere
- vCenter
- vCloud Director
- vShield
- ChargeBack
- vCenter Operations
- vCenter Orchestrator

blades. Bij 'horizontal scaling' wordt die beperking opgeheven en is het mogelijk om naadloos en snel op te schalen. Horizontale scaling is wat het CMBI aanwendt: een verdubbeling van het aantal resources betekent ook echt een verdubbeling van de snelheid.

### 100.000 cpu-uren

Het CMBI heeft nu zo'n 3400 structuren herberekend op het cloudplatform. In totaal zijn daarbij 100.000 cpu-uren gebruikt in het tijdsbestek van ongeveer een week. "Op een normale pc met vier cores zou je daar bijna drie jaar over doen", aldus Touw.

Het CMBI is dan ook enthousiast. Touw: "Als we capaciteit nodig hebben, dan is die ook altijd beschikbaar. We kunnen dus gewoon altijd rekenen, punt. En als er al kleine problemen zijn, dan is de behulpzaamheid vanuit de partner echt enorm."

"Waar we vijf jaar geleden nog servers door heel Europa nodig hadden voor onze berekeningen, hebben we nu ruimschoots voldoende aan dit cloudplatform", concludeert Vriend. "Het stelt ons in staat om wetenschap te doen waar we allemaal iets aan hebben."

### Resultaten

Met het High Performance Computing-cloudplatform beschikt het CMBI over de flexibiliteit om snel van start te gaan met het berekenen van eiwitstructuren en onbeperkt op te schalen. Extra rekencapaciteit is eenvoudig en direct beschikbaar. Hierdoor bespaart het CMBI veel tijd en geld.

