

**Protokoll der 11. Sitzung
des Wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (WLA) für
die M&D-Gruppe am MPI-M und das Deutsche Klimarechen-
zentrum GmbH
(genehmigt auf der 12. Sitzung am 20.01.2006)**

Die Sitzung begann am 19. August 2005 um 10:00 Uhr im Raum 1729 des Geomatikums
(Bundesstr. 55 in Hamburg).

Teilnehmer:

Mitglieder des Ausschusses :

Prof. Dr. M. Heiman (MPI-Jena)

Prof. Dr. R. Klein (PIK)

Prof. Dr. U. Schumann (DLR)

Prof. Dr. D. Stammer (Uni HH)

Vertreter der Gruppe "Modelle und Daten" (M&D)

Dr. M. Lautenschlager

Vertreter des DKRZ:

Herr M. Prugger (admin. Geschäftsführer)

Dr. J. Biercamp

Gäste

Prof. Dr. J. Marotzke (MPI-M)

Dr. P. Bergweiler (BMBF/DLR-PT)

Dr. B. Fritsch (DKRZ-User Group, AWI Bremerhaven)

Dr. E. Roeckner (zeitweise)

Protokoll:

Dr. H. Luthardt (M&D)

Beginn der Sitzung : 10.00 Uhr

TOP 1 Begrüßung

Prof. Klein begrüßt die Teilnehmer zur 11. Sitzung des WLA und stellt die Beschlussfähigkeit des WLA fest, da 4 von derzeit 7 Mitgliedern anwesend sind. Er begrüßt insbesondere Herrn Dr. Bergweiler, der zukünftig als Vertreter des BMBF an den WLA-Sitzungen teilnehmen wird.

TOP 2 Annahme der Tagesordnung

Auf Vorschlag von Prof. Schumann wird der Tagesordnungspunkt 'Verschiedenes' um die Unterpunkte „Auswirkung des Weggangs von Prof. Brasseur“ und „Papier des Nationalkomitee zur Global Change Forschung“ erweitert.

TOP 3 Annahme des Protokolls der 10. Sitzung des WLA vom 7. Januar 2005

Das Protokoll wird mit einer Änderung angenommen. Der Verweis auf das Verwenden von Mitteln aus der Beschaffungszusage für das DKRZ für das Forschungsflugzeug HALO soll überarbeitet werden.

TOP 4 Bericht DKRZ

Herr Prugger als Geschäftsführer des DKRZ berichtet, dass die Universität den Ruf an Herrn Prof. Bischof im Juni ausgesprochen hat. Dieser hat dann im Juli Gespräche mit dem Kanzler geführt. (Ein weiteres Gespräch ist für den 5. September geplant). Allgemein wird die Stimmung als positiv betrachtet.

Prof. Brasseur wird die MPG Anfang 2006 verlassen. Es besteht die Hoffnung, dass bis zu diesem Zeitpunkt der neue DKRZ-Geschäftsführer im Amt sein wird.

Im Zusammenhang mit der Beschaffung des Nachfolge-Systems am DKRZ wurde beim BMBF angestrebt, den Zuwendungsbescheid noch vor der Wahl zuzustellen.

Dr. Biercamp berichtet von den Arbeiten, die im Vorfeld der Beschaffung durchgeführt werden müssen und die nun beginnen sollten. Dazu gehören u.a. die Definition der unterschiedlichen Anwendungsprofile, die Erstellung einer Liste von Anwendungsbenchmarks und die Vorbereitung der Benchmarkprogramme. Hier hat der WLA die Möglichkeit, Einfluss auf die Benchmarkliste zu nehmen. Dies sollte spätestens bei der nächsten Sitzung erfolgen.

Zu den Benchmark-Kandidaten gehören u. a. das ECHAM5+MESSY-Paket. Die Frage nach der Rolle von MOZART muss noch geklärt werden. Dazu sollte ein Basis-Biosphärenmodell eingebunden und die Komponente Luftchemie (MPI-Mainz) stärker integriert werden. Auch eine Kopplung an die Soziosphäre sollte berücksichtigt werden.

Ein Entwurf einer solchen Benchmarkliste sollte veröffentlicht werden (WEB, Teilnehmer der WLA-Workshops) .

Der ursprünglich geplante Workshop mit den Hauptnutzern des DKRZ hat bisher nicht stattgefunden. Er wird dennoch als wichtig auch im Zusammenhang mit der Nachfolgebeschaffung angesehen. Es wird jetzt angestrebt, ihn im Zusammenhang mit dem Amtsantritt des neuen Geschäftsführers durchzuführen.

Prof. Schumann weist auf die Notwendigkeit einer solchen Veranstaltung hin, insbesondere auch im Hinblick auf die neue Klientel, die sich im Rahmen des neuen BMBF-Schwerpunkts zum Klimaschutz gebildet hat. Er sollte daher spätestens im Frühjahr stattfinden und die Schwerpunkte Darstellung der Großnutzer, neue Projekte und Außendarstellung haben.

Ein Vorschlag hierzu soll von DKRZ/M&D ausgearbeitet werden.

TOP 5 Nutzung des HLRE

Dr. Biercamp verweist bei seinem Bericht über die Nutzung des HLRE auf die schriftlichen Unterlagen.

Es werden ca. 110000 CPU-Stunden monatlich zur Verfügung gestellt, die auch vollständig abgerufen werden. Der 'fair share scheduler' arbeitet wie geplant und es wurde eine „Standby queue“ eingerichtet, in der die verbrauchte Rechenzeit dem jeweiligen Projekt nicht angerechnet wird und damit auch keinen Einfluss auf die vom Fair Scheduler vergebene Priorität hat. In den an die Gesellschafter versandten Abrechnungen wird diese Rechenzeit aber berücksichtigt. Insgesamt läuft das gesamte System sehr gut.

TOP 6 Bericht M&D (Lautenschlager)

Dr. Lautenschlager verweist auf den schriftlichen Bericht für die M&D Gruppe und berichtet über einige aktuelle Entwicklungen:

CLM: Der Aufwand für die Integration des CLM in die Laufzeitumgebung wird mit etwa 68 Tagen abgeschätzt. Durch diese Einbindung wird die Lauffähigkeit auf vielen Systemen sichergestellt. Hinzu kommen einmalig etwa 30 Tage Arbeitszeit für die Einbindung der Regionalmodelle.

Die Supportstelle für das CLM in Cottbus ist inzwischen besetzt (wurde zwischenzeitlich von B. Rockel aus der GKSS wahrgenommen). Die erste Version wurde im Juli (ursprünglich geplant war Januar) übergeben. Die Integration begann Mitte Juli. Ein noch zu bearbeitender Punkt ist hierbei die Regularisierung der (gedrehten) Gitter. Auch fehlt noch eine umfangreiche Dokumentation und die Anpassung an außereuropäische Regionen ist noch durchzuführen. Gegenwärtig wird geplant, dass die Rechnungen im Oktober starten können.

Konsortialrechnungen: Die ECHAM5-Rechnungen sind inzwischen abgeschlossen und die Atmosphärendaten sind über die Datenbank für die Community zugreifbar. Die Einbindung der Ozeandaten ist dagegen noch nicht abgeschlossen. Die vom IPCC angeforderten Daten für den AR4 sind zum PCMDI (IPPC-AR4-Model Data Archive) transferiert. Die Atmosphärendaten (ca. 80 Tbyte) stehen seit April der internationalen Forschergemeinschaft über das WDC-Climate zur Verfügung. In den ersten sechs Monaten verzeichnete das WDCC bereits 51 000 Datenzugriffe.

Ende September sollen die Daten auf einem Workshop in Hamburg der Community vorgestellt werden.

Gegenwärtig werden die Forcing-Daten für die Regionalläufe aufbereitet.

Für die CLM-Konsortialrechnungen (5+x) sind Rechenzeitanträge gestellt worden (Tischvorlage). Sie umfassen insgesamt 290 000 CPU-h, es werden etwa 200 Tbyte an Daten erzeugt, die dann u. a. für die BMBF-Projekte zur Verfügungen stehen werden. (dazu siehe TOP 13)

SGA: Kurzfristig wurde vom BMBF eine Aufstockung der Personalmittel bei M&D bewilligt, die zum Ziel hat, die direkte Unterstützung der Projekte im Rahmen des neuen Schwerpunkt „Klimafolgen“ zu verbessern. Es handelt sich hierbei um 2 Stellen (ab 1. Mai), die in einer

Gruppe SGA (Service Gruppe Anpassung) zusammengefasst sind. Eine Stelle ist bei M&D angesiedelt (Nutzung der Daten aus der regionalen Klimamodellierung), die zweite beim DWD (Aufbereitung historischer Daten, insbes. Beobachtungsdaten). Die Gruppe wird von der aus Dr. Rudolf (DWD), Prof. v. Storch (GKSS) und Dr. Lautenschlager (M&D) bestehenden Steuerungs-Gruppe geleitet. Näheres ist über die SGA-Webseite (<http://sga.wdc-climate.de/>) zu ersehen.

Dr. Bergweiler sieht hierin eine sehr positive Entwicklung, die auch zu einer besseren Vorbereitung des Projektes führt. Z. z. Haben sich jeweils 30 Verbände gemeldet (Adaptation/Mitigation). Die SGA-Gruppe wird auch an der Auswahl der Antragsskizzen beratend beteiligt sein.

In der Zukunft ist ein Repräsentations-Workshop geplant.

Projekte: M&D ist involviert in das C3-GRID-Projekt, das am AWI koordiniert wird und ein Klimadaten-Processing-Grid realisieren soll. Der Hamburger Cluster wird unter Beteiligung von MPI (½ Stelle), DKRZ (1 Stelle), M&D (1 Stelle) sowie dem IfM in Kiel (½ Stelle) gebildet. Ziel ist die Implementierung der GRID-Infrastruktur zur Nutzung von Anwendungen in der Erdsystemforschung.

Im Rahmen des ENSEMBLES-Projektes hat M&D ein halbe Stelle (für 3 Jahre) für das Datenmanagement (Umfang ca. 200TByte) zugestanden bekommen. Gegenwärtig ist allerdings die Frage der Medienkosten noch nicht geklärt.

Prof. Klein betont abschließend zu diesen Punkt den sehr guten Eindruck des Konzeptes der Workflows und der Modellintegration, das in der schriftlichen Unterlage dargestellt ist.

TOP 7 Verwendung der IPCC-Ergebnisse

Dr. Roeckner (MPI-M) stellt dem WLA die Rechnungen und Ergebnisse der Konsortialläufe zum IPCC-AR4 vor.

Zusammenfassend wird festgestellt, das die Ergebnisse keine großen Unterschiede zu den früher durchgeführten Läufen aufweisen, wohl aber Änderungen im lokalen Bereich zeigen. Die Ensemble Rechnungen erlauben zudem eine verbesserte Abschätzung der Genauigkeit der Ergebnisse. Noch zu untersuchen ist die Wirkung von Ruß sowie der Einfluss einer interaktiven Landoberflächenänderung. Beides ist bisher nicht in den Modellrechnungen integriert gewesen.

TOP 8 COSMOS Initiative

Unter großem Interesse fand im Mai ein Workshop statt, an dem Gruppen teilnahmen, die teilweise schon aktiv im Projekt arbeiten (z. B. aus Finnland, wo das Projekt national gefördert wird). Die Phase I (COSMOS1) ist dabei ein Prototyp, der die technische Machbarkeit demonstrieren soll.

Ziel ist die Kopplung existierender Modelle und die Verbesserung der Prozesse.

Prof. Schumann weist darauf hin, dass die Gefahr besteht, dass ohne eine Förderung des BMBF hier ein Vakuum entstehen könnte, insbesondere nach dem Weggang von Prof. Brasseur. Prof. Marotzke sieht eine Eigendynamik zu diesem Punkt, da viele Gruppen interessiert sind und auch das MPI an Kooperationen Interesse hat. Allerdings ist die Frage der Koordination noch zu lösen.

Auch ICON ist ein Teil von COSMOS (auf der globalen wie regionalen Skala).

TOP 9 Bericht der DKRZ-User-Group-Vorsitzenden

Die Vorsitzende der DKRZ-User-Group, Frau Dr. Fritzsch spricht einige Punkte an, die aus Sicht der Nutzer als vorrangig zu klären sind:

Es besteht der Bedarf nach einer klaren Definition der Konsortialrechnungen und der Spezifikation der Kriterien, die erfüllt sein müssen, um den entsprechenden Support von WLA (Ressourcen) und M&D (Durchführung) zu erhalten. Dies muss überprüfbar und für die Nutzer nachvollziehbar sein.

Auch die Möglichkeit, einen Antrag auf Durchführung von Konsortialrechnungen zu stellen muss geregelt werden.

Nach kurzer Diskussion besteht Einvernehmen darüber, dass der im Protokoll zusammengestellte Diskussionsinhalt als erste Fassung der Kriterien für Konsortialrechnungen dienen soll. Der Diskussionsstand ist im Anhang 1 zusammengefasst.

Der WLA wird diesen Punkt auf seiner nächsten Sitzung behandeln.

Ein weiterer Punkt, der von den Nutzern als zunehmend wichtig betrachtet wird, ist die Erstellung eines Datenhaltungskonzeptes. Es soll die zunehmende Bedeutung der Datensicherung bei wachsenden Kosten für die erforderlichen Datenträger berücksichtigen. Das Kostenverhältnis zwischen Rechenleistung und Datenhaltung muss auch bei den Neubeschaffungen des HLRE berücksichtigt werden.

Abschließend berichtet Frau Dr. Fritzsch, dass die im Februar durchgeführte Nutzerschulung von DKRZ und M&D eine überaus positive Reaktion hervorgerufen hat und wiederholt werden soll.

Die DKRZ-User-Group besteht derzeit aus 12 Personen die aus dem Bereich der Gesellschafter und großen Nutzern des HLRE stammen. Die Gruppe ist aber grundsätzlich offen für alle Nutzer des DKRZ

Mittagspause 12.30 – 13.15 Uhr

TOP 10 Weitere Konsortialrechnungen / Rechnernutzung für 2006

Um die geplanten Konsortialrechnungen mit dem CLM durchführen zu können, werden für den Rest des Jahres 2005 3 Knoten der NEC benötigt. Im erste Halbjahr 2006 sind dann 5 Knoten erforderlich, um die Ergebnisse zeitnah (dem neuen BMBF-Projekt) verfügbar machen zu können.

TOP 11 Strategie für die Begutachtung und Kontingenzuweisung von Rechenzeitanträgen

Für die Begutachtung und Kontingenzuweisung von Rechenzeitanträgen ist ein Kriterienkatalog erforderlich (Prof. Heimann), der möglichst umgehend erstellt werden sollte.

Neben den bereits früher diskutierten Kriterien (wiss. Begutachtung etc.) sind auch Aspekte zu berücksichtigen wie

- die sinnvolle Nutzung der Ressourcen (z.B. ist ein Rechner dieser Leistungsklasse erforderlich ?)
- die effektive Nutzung der Ressourcen (z.B. ist das Programm optimiert/optimierbar ?)
- die Größe des Projektes (z.B. profitieren mehrere Gruppen von den Ergebnissen ?)

Die Klärung derartiger Fragen muss von Mitgliedern des WLA vorgenommen werden, die durch 'externe Gutachter' unterstützt werden können. Die Auswahl der Gutachter sollte der WLA (bzw. der Exekutivausschuss) auf Vorschlag von DKRZ bzw. M&D treffen. Auf diese Weise sollten 90% der zu vergebenden Rechenzeiten gehandhabt werden.

Dabei soll auch die Nutzung der Gesellschafteranteile transparent gemacht werden.

Prof. Marotzke stellt in diesem Zusammenhang die Nutzungsübersicht über den MPG-(Gesellschafter-) Anteil am HLRE vor (s. Anhang 2).

Der WLA akzeptiert diese Darstellung und sieht sie als beispielhaft auch für die anderen Gesellschafter.

Daraufhin wird der Beschluss gefasst:

Der WLA sieht die gewünschte Transparenz der Nutzung der Rechner durch die Gesellschafter durch die vom MPI-M vorgelegte Übersicht als hinreichend an. Die anderen Gesellschafter werden gebeten, eine vergleichbare Übersicht vorzulegen.

TOP 13 wird vorgezogen.

TOP 13 Rechenzeitvergabe

a) für regionale IPCC-Rechnungen

Dr. Lautenschlager erläutert die geplanten Konsortialrechnungen, die auch in der Tischvorlage ausführlich erläutert sind. Es sollen 5 Läufe durchgeführt werden (3* Szenario A1B und 2* Szenario B1), optional auch die anderen.

Dazu werden 290 000 CPU-h Rechenzeit erforderlich sein und etwa 200 TByte an Daten gespeichert. Prof. Schumann regt hierzu an, die 3-D-Felder mit 3 stündiger Auflösung zu speichern, da eine gute Auflösung der Tagesganges für zahlreiche Fragestellungen wichtig ist. Dies würde nach einer ersten Schätzung das Datenaufkommen auf etwa 300 Tbyte erhöhen. Dem wurde zugestimmt.

Zu diesem Punkt wird diskutiert, inwieweit die Notwendigkeit besteht, für diese Rechnungen 5 Knoten zu nutzen, da die Ergebnisse nicht mehr in den IPCC-AR4 eingehen können. Andererseits besteht jedoch auch der Bedarf, mit diesen Ergebnissen im Rahmen des neuen BMBF-Schwerpunktprogramms arbeiten zu können.

Nach Diskussion wird der Beschluss gefasst:

Für die regionalen IPCC-Konsortialrechnungen werden 4 Knoten für den beantragten Zeitraum zur Verfügungen gestellt. Sie sollen für die Rechnung der Szenarien A1B (2x) und B1 (2x) verwendet werden.

b) sonstige Anträge

Dr. Biercamp erläutert die Anträge auf Rechenzeit am HLRE, die in den schriftlichen Unterlagen zusammengefasst sind. Sie machen 1,2 Mio CPU-h bei einem zu erwartenden Gesamtkontingent von 660 000 CPU-h. Aus den Erfahrungen der letzten Jahre ist eine Überbuchung von 150 % möglich und im Hinblick auf eine effektive Auslastung des Rechners sogar sinnvoll. Dr. Biercamp schlägt daher eine pauschale 25%-Kürzung der Kontingente vor. Dem stimmt der WLA zu.

Es wird in diesem Zusammenhang angeregt, die Berichte der Projekte als Broschüre zu veröffentlichen und im Web eine Liste der Projekte und der entsprechenden Publikationen zur bereitstellen.

TOP 12 Datenhaltung/Datenaccounting

Frau Fritsch betont nochmals die Bedeutung der Aufbewahrung von veröffentlichungsrelevanten Daten, für die eine Aufbewahrungsfrist von 10 Jahren gilt. DKRZ-User-Group, M&D und DKRZ haben hierzu einen Vorschlag für die Strategie zur Datenhaltung und Datenaccounting erarbeitet (s. Tischvorlage). Er basiert auf der Einführung von 3 Archivierungsklassen :

Arbeitsdaten,
Projektdaten und
Dokumentationsdaten.

Letztere sollen gemäß der „Vorschläge zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis“ der DFG im Normalfall 10 Jahre aufbewahrt, doppelt gesichert und im WDC-Climate dokumentiert und publiziert werden..

Ein solches Konzept soll in die neue Ausschreibung eingebunden werden.

Arbeits- und Projekt-Daten sollen automatisch verfallen. Sie können mit einer Zeitmarke für ihre Löschung versehen ins Archiv geschrieben werden.

Ein Konzept bzw. Geschäftsmodell zur Abrechnung der Archivressourcen steht noch aus.

Der WLA bittet die User-Group, M&D und DKRZ den Ansatz weiter zu verfolgen, ein Konzept zur Durchführung der Datenhaltung zu erarbeiten und es auf der nächsten Sitzung zur Diskussion zu stellen.

TOP 14 Verschiedenes

Weggang Prof. Brasseur

Prof. Schumann äußert sein Bedauern über den Weggang von Prof. Brasseur zum Beginn des nächsten Jahres. Er sieht dadurch nachteilige Folgen für die Erdsystemforschung in Deutschland und macht unter anderem die bürokratischen Verhältnisse, mit denen es Prof. Brasseur zu tun hatte hierfür mitverantwortlich.

Der WLA bedauert den Wechsel von Prof. Brasseur und würdigt seine Verdienste um den Aufbau und die Entwicklung der Erdsystemforschung in Deutschland.

Nationalkomitee „Global Change Forschung“

Es wird mitgeteilt, dass das Nationalkomitee „Global Change Forschung“ ein Papier erarbeitet hat, dessen Empfehlungen in ein Forschungsprogramm umgesetzt werden sollen. Dieses Papier ist auch über das Web zugänglich, ist aber nicht einfach zu finden. Prof. Schumann ist bereit, auf Anfrage die URL weiterzugeben.

TOP 15 Ort und Termin der nächsten Sitzung

Die nächste Sitzung des WLA findet am 20. oder 26. Januar 2006 um 10.00 Uhr in Berlin oder Potsdam statt. Der genaue Termin muss noch mit den abwesenden WLA-Mitgliedern abgestimmt werden.

Als Themen sind u.a. vorgesehen:

- Datenhaltungs-/Datenaccounting Strategie
- Kriterien für Konsortialrechnungen
- Benchmarkliste für Nachfolgebekämpfung im HLRE

Ende der Sitzung : 15:30 Uhr

Protokoll der 11. Sitzung des Wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (WLA)
am 19. August 2005 in Hamburg

gez. Dr. Hans Luthardt (Protokoll)

Anlage 1

Kriterien für Konsortialrechnungen

Als Kriterien für eine Konsortialrechnung sollten die folgenden Punkte gelten:

1. Die Rechnungen müssen Grundlage für nationale bzw. internationale Forschungsvorhaben sein, wie z.B. IPCC oder BMBF-Forschungsschwerpunkte.
Zur Abstimmung der Rechnungen muss Konsens in der jeweiligen Forschergemeinschaft hergestellt werden (z.B. durch einen Workshop).
2. Die Antragsteller müssen dem WLA gegenüber deutlich machen, dass ein „breiter“ Konsens für die Rechnung besteht, das die Rechnungen eine nationale Aufgabe darstellen und der Umfang der Rechnungen die Nutzung des HLRE rechtfertigt.
3. Kriterien an Programme/Modelle:
 - Die Programme/Modelle müssen bei M&D in einer lauffähigen Version vorliegen und getestet sein.
 - Die Programme/Modelle müssen validiert sein
 - Die Programme müssen dokumentiert sein
 - Die Programme müssen für die vorgesehenen Rechner optimiert sein
 - Es muss ein verantwortlichen Ansprechpartner beim Programmierer benannt sein
 - Der Ressourcenbedarf der Programme muss die Nutzung des HLRE rechtfertigen
5. Die Rechnungen werden von M&D, DKRZ und dem federführenden Institut in der zur Verfügung stehenden Modell- und Datenstruktur (IMDI) mit den Ressourcen des DKRZ durchgeführt.
6. Die Daten sind allgemein verfügbar.
7. Über die Ressourcenzuteilung entscheidet der WLA unter Berücksichtigung der Bedürfnisse des DKRZ-Normalbetriebs
8. Antrag, Durchführung und Ergebnisse werden im WEB dokumentiert

Anlage 2

Rechenzeiten MPG@DKRZ 2004/2005

Projekte, PI, Institut	Bewilligt (kh)	Benutzt (%)
Chemical Transport Modelling, Schmidt, MPI-M	30	51
Large Eddy Simulation, Chlond, MPI-M	30	91
MOZART Development, RETRO, Schultz, MPI-M	30	51
Messy, Leijeveid, MPI-C	30	20
Biogeochemische Kreisläufe, Heimann,	30	131
MPI-BGC	25	20
Paleomodellierung, Mikolajewicz, MPI-M	25	100
Klima und Kohlenstoffkreislauf, Roeckner, MPI-M	20	75
Multicompartmental Chemistry Modelling, MPI-M	20	136
Gekoppelte Simulationen, Marotzke, MPI-	20	78
Summ	240	
10 - 20	94	56
kh		
< 10	38	21
IPCC		
MPG	100	100
Gesa	472	73
mit		