

**Protokoll der 4. Sitzung
des Wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (WLA) für
die M&D-Gruppe am MPIfM und das Deutsche Klimare-
chenzentrum GmbH
(genehmigt auf der 5. Sitzung am 27.6.2002)**

Die Sitzung begann am 11. Januar 2002 um 9:15 Uhr im Seminarraum des Institutes für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover

Teilnehmer:

Mitglieder des Ausschusses :

Prof. Dr. C. Böning (IfM, Kiel)
Prof. Dr. H. Grassl (MPIfM)
Prof. Dr. T. Hauf (IfM Hannover)
Prof. Dr. R. Klein (PIK)
Prof. Dr. D. Olbers (AWI)
Prof. Dr. R. Schumann (DLR)
Prof. Dr. H. v. Storch (GKSS) (ab 9.45 Uhr)
Prof. Dr. J. Sündermann (UniHH)

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

Dr. U. Cubasch
Dr. M. Lautenschlager

Vertreter des DKRZ:

Prof. Dr. G. Brasseur (wiss. Geschäftsführer, auch M&D)
Dipl. Phys. W. Sell (techn./admin. Geschäftsführer)
Dr. Joachim Biercamp

Gäste:

Dr. M. Rieland (BMBF)

Protokoll:

Dr. H. Luthardt (M&D)

TOP 1.: Begrüßung, Stand der Zusammensetzung der Mitglieder des WLA (BMBF)

Prof. Hauf begrüßt die Mitglieder des WLA im Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover.

Prof. Schumann eröffnete die Sitzung und teilt mit, dass der BMBF auf Vorschlag der DFG Herrn Prof. C. Böning vom Institut für Meereskunde an der Universität Kiel als Nachfolger von Herrn Prof. P. Lemke zum Mitglied des WLA berufen hat.

TOP 2 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird mit zwei Ergänzungen angenommen. Der TOP 4 (Stand der Beschaffung des neuen DKRZ-Rechners) wird um den Aspekt "Softwareprojekt" erweitert, der TOP 8 (Verschiedenes) wird um den Punkt "Fortsetzung der Finanzierung von M&D" ergänzt.

Prof. Graßl berichtet über die Einsetzung eines Ad-hoc-Ausschusses der MPG, der die Rolle des DKRZ und seine Beziehung zum MPI/M/MPG beurteilen soll. Dies ist zunächst ein MPG-interner Vorgang, der ggf. unter TOP 8 behandelt werden soll.

TOP 3 Annahme des Protokolls der 3. Sitzung des WLA vom 7. Juli 2001

Das Protokoll der 3. Sitzung wird mit einer Änderung (zu TOP 6.6, "Die Weiterentwicklung des HOPE Modellcode soll nicht von M&D weitergeführt werden") angenommen.

TOP 4 Stand der Beschaffung des neuen DKRZ-Rechners

Herr Sell berichtet über die neue Konfiguration des HLRE (Höchstleistungsrechnersystem für die Erdsystemforschung) und die verschiedenen Phasen bis zur endgültigen Ausbaustufe. Die Umbaumaßnahmen im Maschinensaal sind inzwischen abgeschlossen, die erste Ausbaustufe der NEC-SX6 soll zum Monatswechsel Jan/Feb 2002 geliefert werden. Die betriebsbereite Übergabe des HLRE nach BVB-Kaufvertrag ist für den 15. Februar vorgesehen. Insbesondere verweist er auf die stark erweiterten Plattenkapazitäten (11 TB am Compute-Server, 17 TB als Cache am Daten-Server).

Prof. Klein bemerkt, dass einen wichtigen Aspekt die Datenaufarbeitung/speicherung darstellt, die eine effektive Kopplung des Compute- und Datenserverbereichs erfordert.

Herr Sell erläutert, dass der Zugriff von Daten- und Compute-Server auf ein gemeinsames Filesystem erst ab der 2. Ausbaustufe (Herbst 2002) geplant ist, sobald der zur Steuerung des gemeinsamen Filesystems vorgesehene Intel-basierte Scalarrechner von NEC (Azusa-Rechner) einsetzbar ist.

Herr Sell weist darauf hin, dass das neue System insgesamt die in der Ausschreibung geforderten Leistungen übertreffen wird. Die Konfiguration der 3. Ausbauphase würde heute den 3. Platz der neu vom IDC (International Data Cooperation) herausgegebenen Rangliste der Supercomputer einnehmen.

Es ist eine Einweihungsfeier des neuen HLRE etwa Ende April/Anfang Mai geplant. Prof. Graßl schlägt vor, dieses Ereignis medienwirksam zu nutzen (s.a. TOP 8). Dr. Rieland empfiehlt, den Termin möglichst frühzeitig festzulegen um auch einem hochrangigen Vertreter (Ministerin, Staatssekretär?) des BMBF die Möglichkeit zu geben, dies in seinem Terminplan zu berücksichtigen.

Als wichtiger Aspekt beim Betrieb des HLRE im Hinblick auf eine effektive Nutzung der Ressourcen wird die Konfiguration der Jobklassen angesehen (Prof. Böning). Hier sollten die großen Jobs gefördert werden.

Ein fertiges Konzept des DKRZ gibt es hierzu jedoch noch nicht. Die Frage soll mit 'Power-Usern' diskutiert werden (Sell). Es wird angeregt, auch einen Vertreter für die anderen Nutzerkategorien in diese Gespräche mit einzubinden.

Prof. Brasseur weist darauf hin, dass eine Lösung so aussehen muss, dass das Community-Modell effektiv, aber auch auf parallelen Strukturen läuft. Die dazu erforderlichen Umstellungsarbeiten an den Modellen müssen noch geregelt werden.

Dr. Lautenschlager spricht das als begleitende Maßnahme zur Beschaffung des Datenservers geplante Softwareprojekt (10 Personen-Jahre zur Entwicklung automatischer Datenbank-Füllmechanismen, Integration des Applikationssevers als Datenportal und Optimierung der Transferraten an der Datenbankschnittstelle) an, das zunächst zurückgestellt wurde. Nach Aussage von Herrn Sell war der Kernteil dieses Projektes Teil der Ausschreibung und wurde mit eingekauft - eine semantische Datenhaltung sei möglich. Eine weitere als wichtig erachtete Anforderung, die im Rahmen dieses Projektes angegangen werden sollte, umfasst die Entwicklung einer Lösung für ein automatisches Füllen der Datenbank, das als unumgänglich für eine Archivierung der Modellergebnisse angesehen wird. Nach Aussage von Dr. Rieland war dieses Projekt nur im Rahmen des ursprünglichen Finanzrahmens (67 Mio DM) finanzierbar. Diese Mittel sind vollständig verbraucht (Sell).

Prof. v. Storch unterstützt die Notwendigkeit einer solchen Funktionalität und wirft die Frage auf, ob dies nicht bereits teilweise zu den Aufgaben des DKRZ gehört. Prof. Brasseur bietet an, dass dazu ein Lösungsvorschlag erarbeitet werden soll. Dieser muss jedoch für die Gesellschafter kostenneutral sein (Prof. v. Storch).

5. Gegenwärtiger und geplanter Personaleinsatz (Aufgabenbereiche) bei M&D und DKRZ

Dr. Cubasch berichtet über die gegenwärtigen Aufgaben und den Personaleinsatz von M&D (s. Sitzungsunterlagen).

Es wurde in diesem Zusammenhang auch die Frage nach der Rolle von M&D bei der Parallelisierung der Modelle diskutiert.

Die Parallelisierung von Modellen soll grundsätzlich bei den Entwicklern liegen, wobei es Sonderregelungen für 'Übergangsmodelle' geben kann, die für die Community von Bedeutung sind.

Prof. Brasseur betont, dass die MPIfM-Modelle nur auf dem vom MPI genutzten Rechnersystem effektiv laufen werden. Dies sollte jedoch keinen großen Umstellungsaufwand erfordern (Prof. Klein), soweit die Parallelisierung mit Standardverfahren (z.B. mit MPI)

durchgeführt wurde.

Prof. Sündermann weist jedoch darauf hin, dass einige Institute auf eine Unterstützung bei der Parallelisierung (z.B. durch M&D) angewiesen sein könnten.

In diesem Zusammenhang wird auf die Gruppe 'Wissenschaftliches Rechnen' am DKRZ hingewiesen, die zur Unterstützung bei der Parallelisierung eingesetzt werden könnte.

Nach Aussage von Herrn Sell sind die Arbeitsfelder dieser Gruppe jedoch 'Untersuchung und Einsatz von geeigneten Algorithmen auf parallelen Systemen' und 'Optimierung von parallelem I/O', und schafft damit eine breite Basis für die Übertragung in unterschiedliche Einzelanwendungen.

Prof. Brasseur macht den Vorschlag, dass DKRZ und M&D ein Konzept für eine Zusammenarbeit auf diesem Gebiet erstellen.

Der WLA stellt hierzu fest, dass eine enge Zusammenarbeit und Koordination der Arbeit von DKRZ und M&D äußerst wichtig sind und die organisatorische Trennung in der Praxis möglichst überwunden werden sollte. Daher sollte zwischen DKRZ-Geschäftsführern und Leiter der M&D Gruppe Einvernehmen über den Einsatz der Mitarbeiter der Gruppe "Wissenschaftliches Rechnen" am DKRZ herbeigeführt werden.

Der WLA fasst hierzu den folgenden Beschluss (ohne Gegenstimmen):

Der WLA schlägt vor, dass der Personaleinsatz und die Aufgabenzuweisung an die Mitarbeiter im Bereich "Wissenschaftliches Rechnen" am DKRZ im Einvernehmen von DKRZ Geschäftsführung, Projektleitung von M&D und Abteilungsleitung von M&D geregelt werden.

Auf der nächsten Sitzung soll dazu ein von DKRZ und M&D erstelltes Konzept vorgelegt werden.

Herr Sell gibt zu den schriftlich vorgelegten Unterlagen einen summarischen Bericht zum gegenwärtigen und geplanten Einsatz des DKRZ - Personals und über das abgedeckte Aufgabenspektrum.

Prof. Schumann fordert das DKRZ auf, ergänzend zu den vorgelegten anonymisierten Angaben eine namentliche Übersicht über die Mitarbeiter, deren Aufgabengebiete und über die unterstützten Institutionen mit dem Stand Dezember 2001 bei der nächsten Sitzung vorzulegen. Die von M&D bereits vorgelegte Übersicht soll hierzu um die DKRZ Mitarbeiter und die unterstützten Institutionen ergänzt werden.

Prof. Graßl stellt fest, dass eine 'Bereinigung' (Reduzierung) der bisher unterstützten Ozeanmodelle erforderlich ist, um die Kapazitäten effektiv einzusetzen. Man sollte sich auf ein Community-Ozeanmodell konzentrieren. Dies sollte innerhalb eines Jahres erfolgen. Prof. v. Storch stellt fest, dass nur die intensive Unterstützung eines Ozeanmodells durch M&D akzeptabel ist.

Prof. Böning weist darauf hin, dass MOM und OPA intensiv von externen Instituten entwickelt und unterstützt werden und wirft die Frage auf, inwieweit dies auch für HOPE der Fall ist.

Prof. Brasseur teilt dazu mit, dass innerhalb des PRISM-Projektes eine Einbindung von OPA beabsichtigt ist, während es fraglich ist, ob HOPE die Voraussetzungen für ein

Community-Modell erfüllen wird.

OPA wird vom AWI und dem IfM Kiel getestet. Außerdem laufen gegenwärtig Gespräche mit Dr. Jouzel und Dr. Navarra über die Entwicklung eines neuen Ozeanmodells auf der Basis des OPA-Modells.

Dr. Cubasch teilt mit, dass MOM Version 4 im 'beta'-Teststadium ist und M&D an diesen Test beteiligt sein wird.

Prof. Brasseur weist auf die zunehmende Zusammenarbeit mit Partnern in Europa hin, die auch Komponenten des Community-Modells betreffen werden.

Prof. Böning wirft die Frage nach einer Prozedur auf, wie zur Definition eines Community-Modells vorgegangen werden soll.

Der WLA beauftragt hierzu eine Gruppe, bestehend auf Prof. Böning, Prof. Olbers und Prof. Sündermann eine Vorlage eines Entwurfes von Kriterien zur Auswahl eines Community-Modells zu erarbeiten.

Prof. Hauf verweist auf den Statusbericht von der Gruppe der Bio-Geo-Chemie Modellierer (Koordinator Dr. Moll), den er als sehr nützlich hinsichtlich der Information bei der Entwicklung zu einem Community-Modell ansieht.

Dr. Cubasch betrachtet als vordringliche kurzfristige Schwerpunkte der Aktivitäten von M&D die Gebiete 'automatisches Füllen der Datenbank', 'Postprocessing' und 'Visualisierung' sowie die Aktivitäten innerhalb des Projektes PRISM (über Projektstellen *finanziert*).

Prof. Brasseur schlägt vor, auf der nächsten Sitzung des WLA einen Tagesordnungspunkt 'PRISM-Aspekte' aufzunehmen.

6. Nutzung von M&D und DKRZ und Rechenzeitanträge

Das DKRZ hatte unter diesem Punkt in den schriftlichen Unterlagen auf für erforderlich gehaltene Anpassungen in der Arbeitsorganisation der Nutzer mit zusätzlicher Softwareentwicklung durch M&D und DKRZ hingewiesen. Die hierzu erbetene Diskussion fand nicht statt.

Herr Sell kann aus systemtechnischen Gründen (wegen des Systemwechsels von CRAY zu NEC) keinen aktuellen Stand der Nutzung der Rechnersysteme vorlegen, weist aber darauf hin, dass bis zur Freigabe des HLRE-Systems auf den NEC-Interimssystemen mehr als 25% der Ressourcen (aus dem Kontingent der Gesellschafter) für externe Nutzer zur Verfügung stehen. Dr. Biercamp schlägt vor, die bisherigen Kontingente zunächst weiterzuführen bis konkrete Rechenzeitanträge für das neue System vorliegen und bearbeitet sind.

Prof. Brasseur teilt mit, dass die Geschäftsführung einen Plan über die Nutzungsregelung bei der Tagung am 22./23. Januar (s.u.) diskutieren und anschließend aufstellen wird.

Die Vergabe der Rechenzeitkontingente, die den einzelnen Gesellschaftern zustehen, wird innerhalb der einzelnen Gesellschafterbereiche geregelt.

Prof. Schumann spricht sich dafür aus, ein gewisses Kontingent (10%) frei verfügbar zu halten und damit potentiellen Nutzern die Möglichkeit zu geben, die Eignung des HLRE für ihre Anwendungen zu erproben.

Der WLA hält es darüber hinaus für nützlich, dass Großnutzer des DKRZ, auch aus dem Gesellschafterbereich, in Zukunft ihre Projekte im Rahmen der WLA-Sitzungen vorstellen.

Was das Verfahren zur Bearbeitung von Rechenzeitanträgen angeht, so ist dem WLA an einer *möglichst* vollständigen Auslastung der Rechner gelegen. Daher werden in der ersten Phase voraussichtlich alle begründeten Anträge bewilligt werden.

Prof. Böning schlägt aufgrund von praktischen Erfahrungen in anderen Rechenzentren vor, die Bearbeitung von Anträgen für begutachtete Projekte jederzeit durchzuführen, bei nicht begutachteten Projekten jedoch bestimmte Termine zu setzen (4 mal jährlich).

Der WLA erwartet, dass bis Ende Januar eine Regelung der Zugangsbedingungen für das DKRZ vorliegt, die (auch) neben den Hauptnutzern auch eine Testnutzung vorsieht.

Im Rahmen des Antragsverfahrens, das über das DKRZ laufen soll, soll jedem Antragsteller auch ein persönlicher Ansprechpartner genannt werden.

Prof. Schumann bittet um Ergänzung des Entwurfs eines Antragsformular, das von Dr. Biercamp in Rückspache mit Prof. Klein und Prof. v. Storch ausgearbeitet und vorgelegt wurde, um die im folgenden genannten Punkte. Der Projektantrag auf Rechenzeit muss neben den benötigten DKRZ-Ressourcenbedarf auch Informationen liefern, die dem WLA die Beurteilung des Antrags ermöglichen. Dazu gehören eine Kurzbeschreibung des Projektes, die Kompetenz des Antragstellers, die Angabe der Ressourcen, die der Antragsteller für das Projekt zur Verfügung stellt, und eine Liste der (projektrelevanten) Veröffentlichungen des Antragstellers.

Prof. Brasseur weist darauf hin, dass auch eine Regelung für die Behandlung von Projekten auf europäischer Ebene gefunden werden muss.

Als wichtig wird vom WLA die Möglichkeit angesehen, das von ihm zu vergebende Rechenzeitkontingent zu steuern und zu überwachen und eine gerechte Zugriffsmöglichkeit auf die dem Nutzer zugestanden Ressourcen zu gewährleisten. Hierzu wird ein 'fair share scheduler' als geeignetes Instrumentarium angesehen. Ein solcher steht auch für die NEC zur Verfügung (Sell). Prof. Schumann bemängelt, dass das DKRZ bisher noch kein Konzept für dessen Konfiguration vorlegen kann. Prof. Brasseur sagt zu, dass nach dem Workshop am 22./23.1. (s.u.) eine durchsichtiges Konzept erstellt und ein Vorschlag zu dessen Implementierung vorgelegt werden wird.

Die Strukturierung des WLA-Kontingents sollte auf Basis der durch den verfügbaren Scheduler gegebenen Konfigurationsmöglichkeiten durchgeführt werden. Prof. v. Storch schlägt vor, zunächst mit einer Basiskonfiguration Erfahrung zu sammeln.

7. Geplante Workshop

Im ersten Halbjahr finden eine Reihe von Workshops statt, die für die Arbeit des WLA von Relevanz sind:

- 14./15.1. Interne Begutachtung der MPG zur Finanzierung und Struktur des DKRZ , der Aufgabenverteilung der Geschäftsführer und der Beziehung des MPIfM zu DKRZ und M&D.
- 22./23.1 Tagung in Reinbek zur Nutzung der DKRZ-Ressourcen durch die Community

und zur DKRZ-Struktur mit Vertretern der Community. Prof. Böning wird hierzu noch eine Einladung erhalten.

- 28.1. Workshop mit Vertretern des DKRZ, der Rechnerhersteller und der Hauptnutzer.
Der WLA schlägt vor, hierzu auch Vertreter der anderen DKRZ-Nutzer einzubinden.
- 26./27.3 Datenworkshop von M&D (s. Sitzungsunterlagen)
Prof. Sündermann wird als Vertreter des WLA teilnehmen und auf der nächsten Sitzung berichten.
- vorauss. März Workshop zum 'Dynamischen Kern von Atmosphärenmodellen', ausgerichtet vom MPIfM.
- 5/6 3. Workshop zum Thema "Chemical Weather", ausgerichtet vom MPIfM und DLR.
Anmerkung: dieser Termin wurde inzwischen auf 7./8. Mai verschoben
- geplant AWI/PIK - Workshop zum wissenschaftlichen Rechnen (ggf. zu koordinieren mit dem WS zum 'Dynamischen Kern von Atmosphärenmodellen')
- 26.8 - 20.9 PIK zusammen mit dem Helmholtz Institute for Supercomputing :
Second HELMHOLTZ-Institute Summer-School on "SCIENTIFIC SUPERCOMPUTING IN CLIMATE RESEARCH", Universität Potsdam
(Näheres: Prof. Klein)

8. Verschiedenes

- Bericht von der letzten Gesellschafterversammlung und Vorbereitung der kommenden (Sell)
Für den Betrieb des DKRZ werden zusätzliche Kosten für Medien und GWIN-Anschluss auftreten, deren Finanzierung noch nicht geklärt ist. Es sind Bestrebungen im Gange, die Kosten durch engere Einbindung der MPIs in Jena und Mainz abzudecken (Prof. Brasseur).
- Am 25.2. findet eine DKRZ-Gesellschafterversammlung statt. Der WLA wird dort durch Prof. Olbers vertreten.
- M&D Fortsetzungsantrag
Ende 2002 läuft der gegenwärtige Finanzierungsabschnitt von M&D aus. Der neue Antrag sollte bis Mitte des Jahres beim BMBF vorliegen. Der finanzielle Umfang bleibt unverändert (Dr. Rieland).
Der WLA hat diesbezüglich gegenwärtig keine Vorgaben. M&D soll Vorgaben im Rahmen des neuen Antragsentwurfes machen. Die Frage nach einem Änderungsbedarf im Hinblick auf die Punkte Parallelisierungsaufgaben, Aussenkontakte und Verbindung zum DKRZ sollte hierbei berücksichtigt werden.

Der Antragsentwurf soll spätestens am 1. Juni 2002 bei Prof. Schumann eingehen.

- Öffentlichkeitsarbeit

Die Einweihungsfeier des neuen HLRE soll zur medienwirksamen Bekanntmachung der in Hamburg verfügbaren Ressourcen und Aktivitäten zur Erdsystemforschung genutzt werden. Das DKRZ organisiert die Einweihungsfeier. Die Geschäftsführer legen den Rahmen fest und stimmen das Programm in Kontakt mit dem Vorsitzenden des WLA ab. Der WLA wirkt beim wissenschaftlichen Teil der Veranstaltung (Symposium) mit. Wenn möglich, möchte der Vorsitzende des WLA bei der offiziellen Einweihungsfeier eingebunden sein und bittet um entsprechende Terminabsprache.

- Dr. Rieland teilt auf Anfrage mit, dass der BMBF noch keinen Kontakt zum DWD bezüglich der Bereitstellung von Daten bei M&D für die Klimaforschung aufgenommen hat.

- Termin und Ort der nächsten Sitzung

Die nächste Sitzung des WLA wird am **Donnerstag, den 27. Juni 2002** im Potsdam Institut für Klimafolgenforschung (Gastgeber: Prof. Klein) stattfinden.
(Anfahrtsbeschreibung: <http://www.pik-potsdam.de/adress.html>)

Die Sitzung endet um 13.45 Uhr

gez. Dr. Hans Luthardt (Protokoll)

gez. Prof. U. Schumann (Vorsitzender)