

**Protokoll der 14. Sitzung
des Wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (WLA) für
die M&D-Gruppe am MPI-M und das Deutsche Klimarechen-
zentrum GmbH
(Genehmigt auf der 15. Sitzung am 28.09.07)**

Die Sitzung begann am 1. Februar 2007 um 10:00 Uhr im Raum 132 des DKRZ.

Teilnehmer:

Mitglieder des Ausschusses :

Prof. Dr. M. Heimann (MPI-Jena)
Prof. Dr. A. Hense (Uni Bonn, ab 10.20 Uhr)
Prof. Dr. R. Klein (PIK)
Prof. Dr. G. Lohmann (AWI)
Prof. Dr. U. Schumann (DLR, bis 14:50 Uhr)
Prof. Dr. D. Stammer (Uni Hamburg, ab 12.00 Uhr)

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

Dr. M. Lautenschlager

Vertreter des DKRZ:

Herr M. Meinecke (Geschäftsführer)
Dr. J. Biercamp
Herr S. Heinzl

Gäste

Prof. Dr. J. Marotzke (MPI-M)
Dr. G.-H. Klein (BMBF/DLR)
Dr. B. Fritsch (DKRZ User Group, AWI Bremerhaven)
Prof. Dr. Jos Lelieveld (MPI-Chemie, Mainz, ab 12.30 Uhr)

Protokoll:

Dr. H. Luthardt (M&D)

Beginn der Sitzung : 10.00 Uhr

TOP 1 Begrüßung

Prof. Heimann begrüßte die Teilnehmer zur 14. Sitzung des WLA und insbesondere Herrn M. Meinecke als neuen Geschäftsführer des DKRZ und Herrn S. Heinzel (Technischer Direktor des DKRZ).

TOP 2 Annahme der Tagesordnung

Der Tagesordnungspunkt 10 wird vor den bisherigen TOP 8 verlegt.

TOP 3 Annahme des Protokolls der 13. Sitzung des WLA vom 29. August 2006

Das Protokoll wird ohne Änderung angenommen.

TOP 4 Bericht DKRZ

a) Bericht des Geschäftsführers

Herr Meinecke stellte sich als Geschäftsführer des DKRZ vor. Er ist seit 2001 im Ruhestand, hat aber durch seine Tätigkeiten bei der MPG langjährige Kenntnisse der Verhältnisse beim MPI-M und DKRZ. Seine Aufgabe als Geschäftsführer soll nicht zu lange währen und baldmöglichst durch eine dauerhafte Lösung ersetzt werden.

Stand der Zukunftsdiskussion für das DKRZ

Das Eckpunktepapier (zur Zukunft des DKRZ) ist seit der letzten Sitzung nicht sehr viel weiter entwickelt worden.

Der Bewilligungsbescheid für den neuen Rechner wurde noch nicht ausgestellt, wird gegenwärtig im BMBF bearbeitet und sollte aber kurzfristig (Ziel: in 2 Wochen) erteilt werden. Auch das Eckpunktepapier zur Struktur des 'neuen' DKRZ wurde noch nicht von allen Beteiligten unterschrieben. Das DKRZ soll danach eine GmbH bleiben.

Das Berufungsverfahren für die mit der Geschäftsführung des DKRZ verbundene Professur (Uni Hamburg) soll in Kürze gestartet werden und im Laufe des Jahres wird ein Abschluss des Verfahrens angestrebt.

Die Planung für den 'Umbau' des neuen DKRZ Gebäudes geht gut voran, sodass der neue Rechner voraussichtlich direkt dort installiert werden kann.

b) Nutzung des HLRE

Eine Übersicht über die Nutzung des HLRE ist in den Sitzungsunterlagen enthalten und wurde von Dr. Biercamp kurz erläutert.

Es wurden rund 120 000 CPH/h pro Monat abgegeben. Der Rechner ist damit vollständig ausgelastet.

Die Verteilung der Anteile auf Gesellschafter/BMBF entspricht den jeweiligen Kontingenzen.

TOP 5 Planung für das HLRE II – Informationen über die Rechnerneubeschaffung (Heinzel, Biercamp)

Herr Heinzel erläutert in seinem Vortrag den Status des DKRZ – auch im Umfeld vergleichbarer deutscher und europäischer Rechenzentren und stellt als besondere Stärken heraus:

- 'state of the art' supercomputing Umgebung, speziell für die Bedürfnisse der Erdsystemforschung
- hervorragender Daten-Service
- hohes Niveau des Applikations-Service, insbesondere der Hochleistungsgraphik im bundesweiten Vergleich

Diese Punkte stellen Alleinstellungsmerkmale dar, die es zu erhalten gilt.

Weitere Aspekte eines künftigen DKRZ sollten aufgrund der bisherigen Erfahrungen berücksichtigt bzw. gestärkt werden:

- Stärkung der Capability Services
- Frage nach Nutzung der Rechner auch mit vielen Prozessoren
- Palette von Rechnern ist notwendig
(Der neue Linux-Cluster ist wichtiger Schritt in dieser Richtung)
- Hochleistungs-Visualisierung
- Verstärkung der Applikationsgruppe (3 Stellen notwendig, eine bisher geschaffen)
- Systemgruppe benötigt ebenfalls 3 neue Stellen (eine bisher geschaffen) für den Betrieb des zukünftigen Rechners
- Der Datenservice nimmt bereits eine Spitzenstellung ein - auch im weltweiten Vergleich
- und sollte auf diesem Level weitergeführt werden
- Auch hier sind Änderungen notwendig, da man zu stark von einzelnen Firmen abhängig ist. Hierzu ist in diesem Bereich eine Verstärkung (2 Stellen) notwendig.
- Hohes Niveau der Applikations-Services, insbesondere der Visualisierung.

Das HLRE II soll im 2./3. Quartal 2008 betriebsbereit sein. Es wird eine Leistungssteigerung um den Faktor 30 zum HLRE angestrebt.

Zeitplan für die Beschaffung:

Frühjahr 2007	: Vorstellung beim BAR
Oktober 2007	: Entscheidungsfindung
Okt/Nov 2007	: Mittelabfluss

Dazu müsste der Zuwendungsbescheid spätestens im März d.J. ergehen.

Eine gemeinsame Ausschreibung für Compute- und Datenservice wird als nicht sinnvoll erachtet, der Datenservice soll für alle Architekturen 'passen'. Die Aufteilung der Mittel muss vorher erfolgen, der Datenservice soll ausgeschrieben werden, nachdem der Zuschlag für den Computerserver erteilt wurde.

Die Unterbringung des HLRE II soll in dem Gebäude der Physikalischen Chemie (Bundesstrasse) erfolgen, das zunächst vollständig renoviert werden muss. Ein Bezug zum 1.10.08 wird angestrebt.

Einige Benchmarkprogramme sind bereits ausgewählt, hierzu gehören ECHAM, CLM, NEMO, FEOM und ECHAM5/MECCA. Weitere mögliche Benchmarks sind: Ein (4-D) Assimilationsmodell, LPJ oder JSBach und COSMOS. Die Umstellung wird teilweise mit Unterstützung der Hardwarefirmen erfolgen.

Aus den Reihen des WLA wird vorgeschlagen, dass das PALM Programm (verwendet neuen Algorithmus) mit berücksichtigt wird. Auch sollte der Aspekt der Kopplung intensiv betrachtet werden.

Im Hinblick auf den Datenserver ist angestrebt, Plattenkapazität (-cache) vorzuhalten, die der Datenerzeugung von einigen Monaten entspricht.

Der WLA soll in die Beschaffungsaktivitäten eingebunden werden. Ebenso sollen Repräsentanten der Nutzer (z.B. die DKRZ User Group) beteiligt werden. Bisher sind folgende Nutzer benannt:

Arne Biastoch (IfM Geomar, NEMO),
Bernadette Fritsch (AWI, User Group, Paleo),
Johann Jungclaus (MPG, ECHAM, COSMOS),
Klaus Keuler (CLM-Community),
Armin Köhl (Uni-HH, Assimilation),
Burkhardt Rockel (GKSS, CLM)
Robert Sausen (DLR, MESSy/MECCA)
Siegfried Raasch (Uni Hannover, PALM)

Vorschläge für weitere Nutzer-Repräsentanten sollen an Dr. Biercamp gehen.

Insgesamt empfiehlt der WLA mehr Unterstützung für die Nutzer, um Umstellungen der Software durchzuführen und eine effektive Nutzung der Infrastruktur zu erreichen.

Dazu wird vom WLA die folgende Stellungnahme einstimmig beschlossen:

Der WLA hält eine Stärkung der Unterstützung und Ausbildung in Hinblick auf die effiziente Nutzung moderner Hochleistungsrechner im Bereich der Erdsystemmodellierung für dringend geboten.

Dies umfasst insbesondere:

- **Eine personelle Verstärkung der fachspezifischen Nutzerunterstützung durch die Abteilung Anwendungssoftware des DKRZ.**
- **Ein deutlich erweitertes Schulungsangebot im Bereich moderner Programmiermethoden, insbesondere der Parallelisierung, unter besonderer Berücksichtigung der Bedürfnisse der Nutzer des DKRZ.**
- **Eine Verankerung entsprechender Ausbildung und Forschung, auch hinsichtlich fortschrittlicher Methoden der numerischen Erdsystemmodellierung, an den Universitäten, insbesondere durch zügige Besetzung des Lehrstuhls "Wissenschaftliches Rechnen in den Geowissenschaften" in der MIN-Fakultät der Uni Hamburg.**

Dies steht im Einklang mit den vom "User Group Committee" vorgetragenen Forderungen.

TOP 6 Bericht M&D

a) Stand der Konsortialrechnungen

Dr. Lautenschlager berichtet über die Konsortialrechnungen, bei denen der Schwerpunkt auf den Rechnungen mit dem CLM liegt und von einem BMBF Fachgespräch „Klimamodellierung im gesellschaftlichen Kontext“ (13.12.06 in Bonn). Partielle Freigabe der Da-

ten und Information der Öffentlichkeit sollen am 28.2/1.3 in Berlin anlässlich der Auftaktveranstaltung für den BMBF Förderschwerpunkt KlimaZwei erfolgen.

Durch einen Fehler mussten 100 Modelljahre neu gerechnet werden (ca. 48000 CPU-h). Dafür soll das zweite Szenario des B1-Laufes (zunächst) nicht gerechnet werden. Des Weiteren wurden bisher gerechnet:

20C3M	: vollständig
A1B	: 50 Jahre
A1B_2	: < 50 Jahre
B1_1	: < 50 Jahre

Zusätzlich wurden Läufe in Stuttgart auf der NEC SX6 durchgeführt (2ter 20C3M Lauf). Prof. Stammer regt an, die Erfahrungen, insbesondere die Schwierigkeiten, die dabei auftreten ('Remotes Rechnen') zu dokumentieren.

Der BMBF Schwerpunkt KlimaZwei ist inzwischen angelaufen und seine Projekte benötigen erste Daten kurzfristig.

b) Kriterien für Community Modelle

Der als Anlage zur vorläufigen Tagesordnung verteilte Entwurf „Kriterien für Community Modelle“ wurde diskutiert. Der Entwurf wurde mit geringen Änderungen (s. Anlage) akzeptiert.

TOP 7 Qualitätskontrolle der Ergebnisse von Konsortialrechnungen (aktuell : CLM und REMO)

In diesem Zusammenhang wurde auch die Frage diskutiert, wie mit der Freigabe der Daten verfahren werden soll. Im aktuellen Fall der CLM Daten wird am 13.2. ein Workshop zur Qualitätskontrolle stattfinden. Die Kontrollen können auf verschiedenen Levels stattfinden, die teilweise aber erhebliche Ressourcen erfordern. Da diese Daten für den KlimaZwei Schwerpunkt verwendet werden sollen, sollen diese Daten schrittweise (1960-2000, 2000-2050) freigegeben werden, und zwar zunächst nur für die KlimaZwei Projekte und unter einer Verpflichtungserklärung. Es ist geplant, nach Abschluss der Rechnungen einen Workshop durchzuführen. Der WLA unterstützt die Bemühungen der Uni Cottbus zu weiteren Qualitätskontrollen der CLM Daten, für die ggf. auch zusätzliches Personal erforderlich werden könnte.

Prof. Schumann sieht grundsätzlichen Diskussionsbedarf zum Thema „Qualitätssicherung bei Konsortialrechnungsdaten“. In Zukunft sollen zusätzliche automatische Prüfungen der erzeugten Datensätze (auch während der Rechnungen) stattfinden. Auch die wissenschaftliche Verantwortung muss zu Beginn der Rechnungen klar festgelegt werden.

Mittagspause von 13:00 bis 13:35 Uhr

TOP 10 (vorgezogen)

Vorstellung der Modelle MECCA/MESSy als potentielle Community Modelle und Möglichkeiten der Unterstützung bei der Optimierung der Modelle (Prof. Lelieveld, MPI-C)

Auf Einladung des WLA stellt Prof. Lelieveld das MESSy1-Modell im Rahmen eines 30-minütigen Vortrags („Atmospheric Chemistry Climate Modelling with ECHAM5/MESSy1“) vor.

Er stellt heraus, dass das Modell einen wertvollen Beitrag (Komponente) für die Klimamodellierung liefern kann. Das Modell wird am MPI-C in Mainz weiterentwickelt und wird bereits in der Community genutzt. Die Kriterien des WLA für Community Modelle und ihre Nutzung bei Konsortialrechnungen stellen kein Problem dar, da sie im Wesentlichen auch jetzt schon für das vorgestellte Modell gelten.

Gegenwärtig ist MESSy der Koppler. Es gelten aber Kodierungsstandards, die eine Nutzung des OASIS3-Kopplers in Zukunft erlauben sollten.

Das Modell ist noch nicht in die IMDI integriert und muss noch optimiert werden. Dies wird aber nicht als Ausschlusskriterium betrachtet (Schumann, Klein). Eine Unterstützung bei der Optimierung wäre hierbei nötig (Schumann), was auch im Interesse der Community wäre.

Eine Entscheidung über die Aufnahme des Modells in die Gruppe der Community Modelle soll auf der nächsten Sitzung getroffen werden.

TOP 8 Bericht der DKRZ User Group Vorsitzenden

Frau Dr. Fritsch berichtet über eine weiter anhaltende Verunsicherung der User hinsichtlich der zukünftigen Entwicklung des DKRZ. Hier ist eine umfangreichere Information gewünscht.

Bei Konsortialrechnungen wird eine bessere Information des gesamten Benutzerkreises (bzw. der Community) gewünscht, auch bei der Planung von Workshops zur Vorbereitung der Rechnungen.

Die M&D-Gruppe wird auch die Konsortialläufe und Veranstaltungen dazu im Internet ankündigen und dokumentieren.

Eine fachliche Betreuung der Läufe ist hierbei wichtig und die Expertise dazu sollte beim DKRZ weiter ausgebaut werden (s. Entschließung unter TOP5).

Auch die Universitäten sind dabei gefordert, im Rahmen ihres Ausbildungs- und Weiterbildungsauftrages darauf hinzuwirken, dass die aktuellen und potentiellen Nutzer von Höchstleistungsrechnern das know how erhalten, um diese Systeme effektiv nutzen zu können.

Auch im Zusammenhang mit der Neubeschaffung werden die Nutzer Unterstützung benötigen (z.B. zur Parallelisierung), wobei insbesondere die Universitätsinstitute auf externe Hilfe angewiesen sein werden.

Prof. Marotzke geht von einer Phase des Parallelbetriebes von altem und neuem Rechnersystem aus, die eine Umstellung erleichtern soll.

TOP 9 Rechenzeitanträge (Biercamp)

In der Tischvorlage sind die vorliegenden Aufstockungs- und Neuanträge aufgeführt (Anlage B).

Die Bewilligung der beantragten Rechenzeit würde zu einer erheblichen Überschreitung der verfügbaren Ressourcen führen. Daher werden die Rechenzeiten pauschal auf 50% gekürzt mit der Aufforderung, Aufstockungsanträge für die nächste Antragsperiode (ab Sept. 2007) einzureichen. Der dadurch erreichte Grad der Überbuchung liegt im Rahmen der bisherigen Praxis.

Der zweite B1-Lauf des CLM (Konsortialrechnung) soll aus dem Kontingent des Millennium-Laufes durchgeführt werden, solange von diesem keine wesentliche Rechenzeit abgezogen wird. Bis zum 15. März soll die Aufforderung zu Anträgen auf Rechenzeit herausgehen. Innerhalb von 2 Wochen sollte dann darauf reagiert werden.

TOP 11 Verschiedenes

entfällt.

TOP 12 Ort und Termin der nächsten Sitzung

Die nächste Sitzung des WLA findet am Donnerstag, den 6. September 2007 um 10.00 Uhr in **Hamburg** statt.

Der Termin der nächsten Sitzung wurde nach Rücksprache mit allen Beteiligten am 14.2. auf den

28. Sept. 2007, 10.00 Uhr

verlegt.

Ende der Sitzung: 15:45 Uhr

gez. Dr. Hans Luthardt (Protokoll)

Überarbeiteter Entwurf zu

Anlage 1

Kriterien für Community-Modelle (Überarbeiteter Entwurf)

Der WLA hat bisher keinen formalen Kriterienkatalog verabschiedet, der die Voraussetzungen definiert, die ein (von M&D unterstütztes) Community Modell erfüllen muss. Es wurde bisher im Einzelfall diskutiert und entschieden (Beispiel: CLM). Aus den bisherigen Diskussionen im WLA können die folgenden Kriterien als wesentlich betrachtet werden:

- Das Modell muss validiert und begutachtet¹ und im Rahmen von Projekten bereits erfolgreich eingesetzt worden sein.
- Es muss dokumentiert sein.
- Es muss eine stabile Entwicklergruppe/Konsortium existieren.
- Ein Forschungsinstitut oder eine etablierte Arbeitsgruppe muss für das Modell federführend verantwortlich sein und als Ansprechpartner für M&D zur Verfügung stehen.
- Es muss eine breites Interesse in der Community an der Verwendung des Modells dokumentiert sein.
- Das Modell soll modular programmiert und optimiert sein.
- Das Modell soll gut parallelisierbar sein.
- Das Modell muss für eine Einbindung in die Integrierte Daten und Modell Infrastruktur (IM-DI) geeignet sein, um auf verschiedenen Hardwareplattformen lauffähig zu sein.
- Das Modell kann für Konsortialrechnungen verwendet werden.
- Das Modell soll für interessierte Gruppen zur Verfügung stehen.
- Das Modell und seine Verwendung als Community-Modell werden im WEB dokumentiert.
- Die mit dem Modell im Rahmen von Konsortialrechnungen erzeugten Daten sind allgemein und sofort verfügbar und gemäß den (M&D/WDCC-) Kriterien für die Datenpublikation zu zitieren.

1 Der WLA führt die Begutachtung durch