

37. Sitzung des Wissenschaftlichen Lenkungsausschusses der Deutsche Klimarechenzentrum GmbH

Beginn der Sitzung: 03. Dezember 2018 um 10:30

Teilnehmer

Dr. Norbert Attig, Jülich Supercomputing Centre

Dr. Frauke Feser, Helmholtz-Zentrum Geestacht

Dr. Bernadette Fritsch, AWI Bremerhaven (Vorsitzende des DKRZ-Usergroup-Komitees)

Prof. Dr. Andreas Hense, Institut f. Geowissenschaften und Meteorologie Universität Bonn

Prof. Dr. Thomas Ludwig, DKRZ

Prof. Dr. Marcus Müller, Universität Göttingen

Dr. Mathis Rosenhauer, DKRZ (Protokoll)

Prof. Dr. Robert Sausen, DLR Oberpfaffenhofen

Prof. Dr. Detlef Stammer, Institut für Meereskunde, Universität Hamburg

Hannes Thiemann, DKRZ

Prof. Dr. Uwe Ulbrich, Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin

Dr. Martin Werner, AWI Bremerhaven (Vorsitz)

1. Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird ohne Änderungen angenommen.

2. Organisatorisches

a) Annahme des Protokolls der 36. Sitzung

Das Protokoll wird angenommen.

b) Ort und Termin der nächsten Sitzung

Die nächste Sitzung wird am 24.06.2019 in Hamburg stattfinden.

3. Bericht DKRZ

a) Nutzung HLRE-3 (Biercamp)

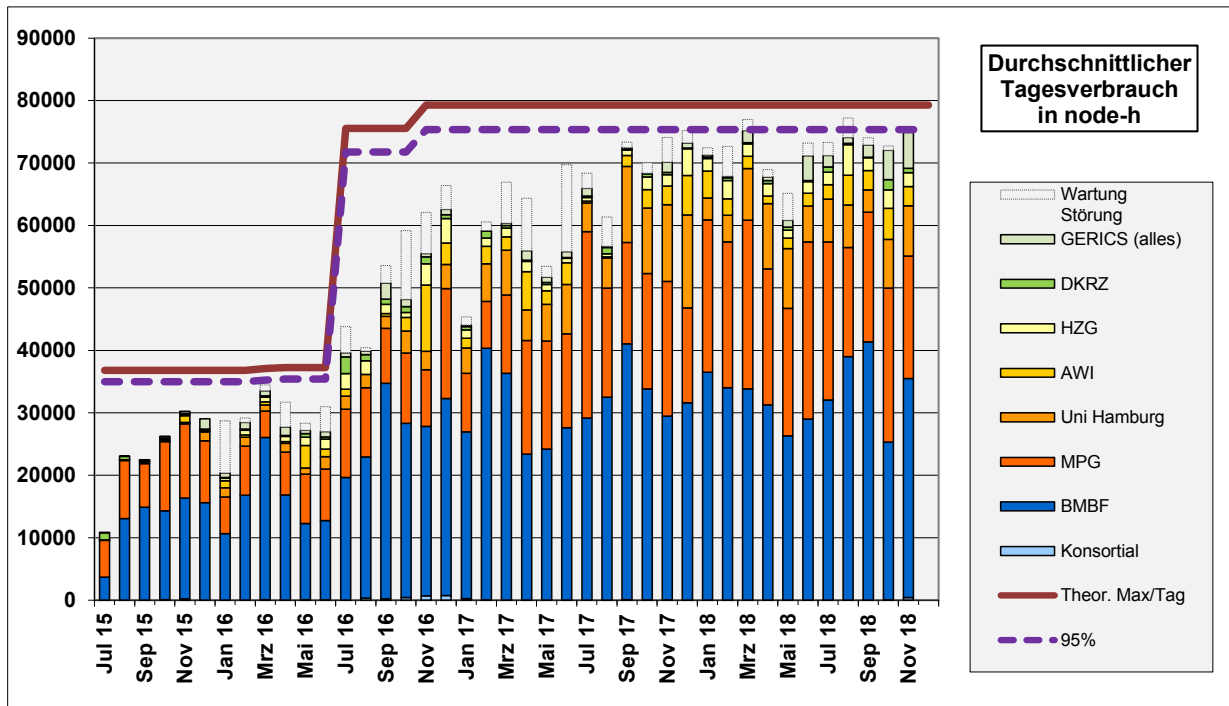


Abbildung 1: Durchschnittlicher Tagesverbrauch auf Mistral in Knotenstunden

Seit der letzten Sitzung des WLA konnte auf Mistral eine Auslastung von fast 95% beobachtet werden. Trotz teilweise sehr hoher Außentemperaturen waren keine Ausfälle aufgrund unzureichender Kühlung zu verzeichnen.

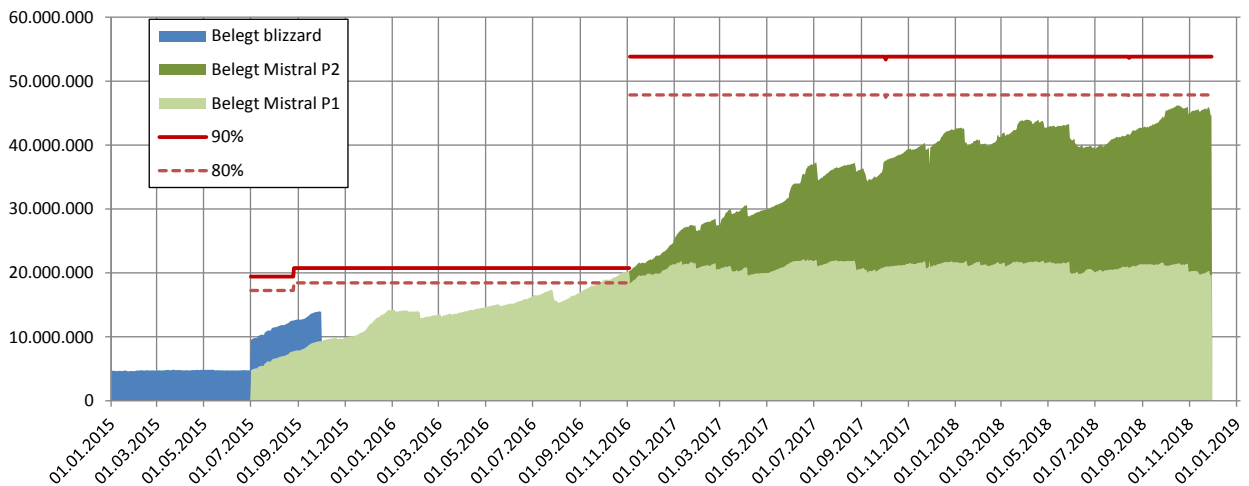


Abbildung 2: Belegung des Lustre Dateisystems

Die derzeit installierte Version des Lustre Dateisystems erlaubt es nicht, Projekte auf den vom WLA bewilligten Plattenbereich zu beschränken. Daher wurde in Abstimmung mit der DKRZ-Usergroup ein Verfahren implementiert, um eine übermäßige Benutzung des Dateisystems zu verhindern. Mit diesen Maßnahmen konnte weitgehend sichergestellt werden, dass alle Projekte ihren zugeteilten Festplattenbereich nutzen können.

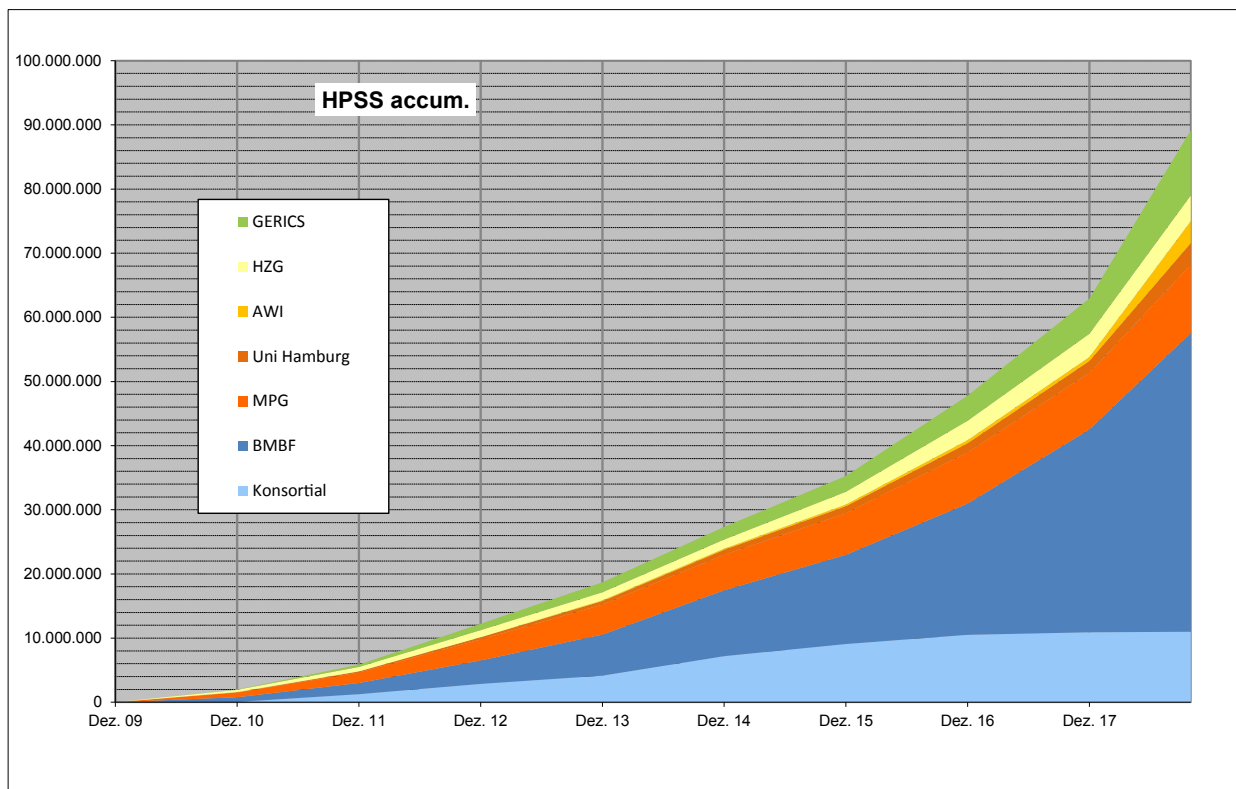


Abbildung 3: Belegung des Bandarchivs [GB]

Die Nutzung des Bandarchivs hat im vergangenen Jahr deutlich zugenommen. Neben der verstärkten Aktivität einiger Verbundprojekte, ist dies auch dem allgemein hohen Füllstand des Festplattensystems geschuldet.

c) Perspektiven, u.a. HLRE-4 (Ludwig)

Die Zuwendungsverträge für HLRE-4 sind in Arbeit bzw. in den meisten Fällen bereits geschlossen.

Es gibt Überlegungen, neben dem Großteil von CPU-basierten Rechenknoten auch GPU-Knoten anzuschaffen. Die Nutzer des DKRZ sind insbesondere an einem Portierungspfad von einem rein CPU-basierten Code hin zu einer GPU-Version interessiert.

Nach den Erfahrungen am Jülich Supercomputing Centre ist die Adaptierung von Modellcodes auf GPUs stark von der jeweiligen Nutzergemeinschaft abhängig. Die Anpassung eines umfangreichen Klimacodes ist dabei ungleich aufwändiger für als kleinere hochspezialisierte Anwendungen.

Es ist abermals festzustellen, dass angesichts des erwarteten geringen Leistungszuwachses der Rechnerhardware von HLRE-4 eine verstärkte Investition in Softwareentwicklung und Optimierung notwendig ist.

4. Bericht aus der DKRZ-User-Group (Fritzsch)

Das zuvor erwähnte Verfahren zur Umsetzung der Quoten auf Festplatten wurde in Zusammenarbeit mit der Usergroup erarbeitet. Im Detail sieht es so aus, dass ab einer Plattenbelegung von 95% alle Projektmitarbeiter gewarnt werden. Steigt die Belegung trotzdem über 100% des bewilligten

Plattenplatzes, so wird der Rechenaccount gesperrt. Das Verfahren hat sich in den vergangenen Monaten bewährt.

Für HLRE-4 wird auf die große Wichtigkeit einer guten Unterstützung des Pre- und Post-Processings hingewiesen. In vielen Fällen entsteht hier bereits ein Flaschenhals bei der Durchführung umfangreicher Simulationen.

Die Usergroup unterstützt das DKRZ weiterhin bei der Durchführung des Benchmarks für den HLRE-4.

5. Vorstellung Ressourcen und Antragsverfahren ESM-Partition des Jülich Supercomputing Centre (M. Müller, N. Attig)

Auf Anregung der DKRZ Gesellschafter wurden Herr Prof. Marcus Müller (Uni Göttingen, LA-Vorsitzender) und Dr. Norbert Attig (JSC, Leitung Abteilung „Application Support“) als Vertreter des Jülich Supercomputing Centre (JSC) als Gäste zur WLA-Sitzung eingeladen. Zweck des Besuchs war ein erster Informationsaustausch mit Fokus auf die neue ESM-Partition des JSC und dem dazu gehörenden Rechenzeit-Vergabeverfahren. Die Vortragsfolien von Dr. Attig befinden sich im Anhang zu diesem Dokument.

6. Sonstiges

Auf der Gesellschafterversammlung des DKRZ wurde beschlossen den "BMBF-Anteil" an den Ressourcen des DKRZ in "Community-Anteil" umzubenennen. Es muss noch geklärt werden wie zukünftig Gutachter ernannt werden, die bisher vom BMBF vorgeschlagen wurden.

7. Rechenzeitanträge

Im nichtöffentlichen Teil der Sitzung wurde unter anderem über die Rechenzeitanträge für BMBF-Projekte beraten.

Für HLRE-3 (Mistral) wurden 12.358.704 Knotenstunden an Rechenzeit zugeteilt. Dies entspricht einer Kürzung der beantragten Rechenzeit um durchschnittlich 40%.

Die Kürzungen verteilen sich wie folgt auf die Anträge:

Keine Kürzung:	35 Anträge
> 0 <= 20%:	17 Anträge
> 20 <= 40%:	30 Anträge
> 40 <= 60%:	16 Anträge
> 60 <= 80%:	4 Anträge
> 80 < 100%:	3 Antrag
Abgelehnt:	0 Anträge

Ende der Sitzung: 16:00



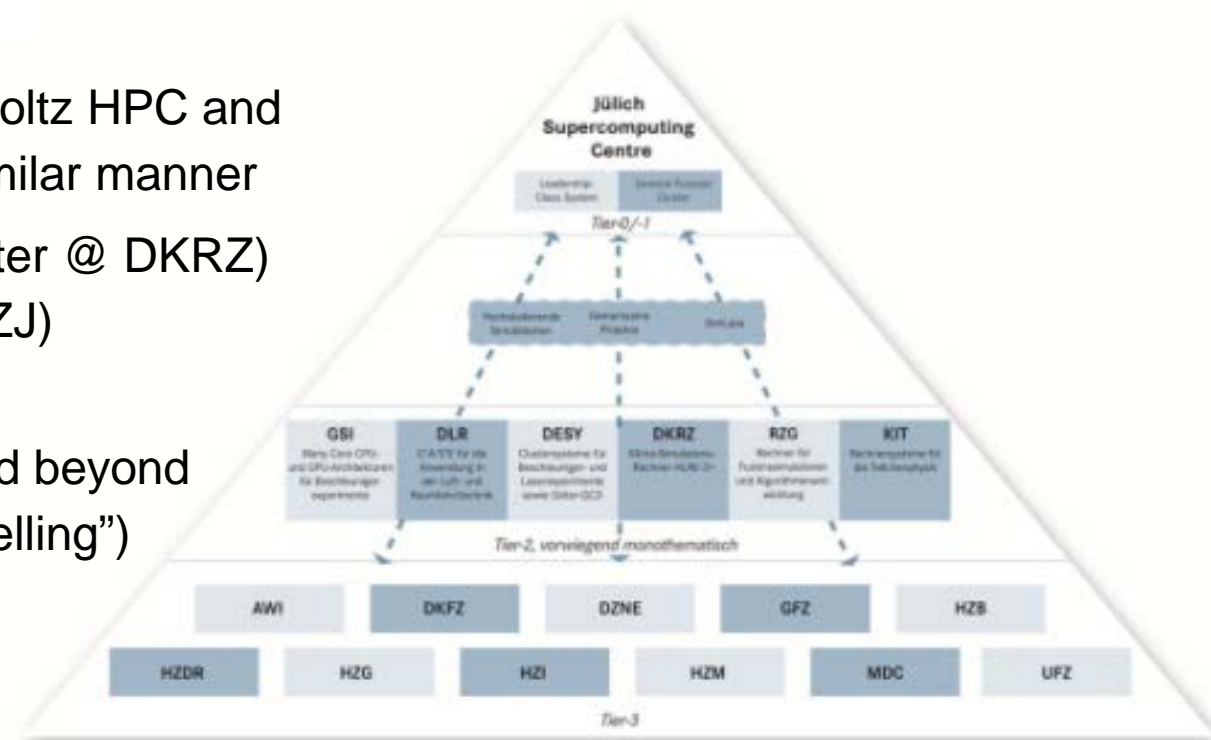
THE ESM PARTITION OF THE TIER-0/1 SUPERCOMPUTER IN JÜLICH

DECEMBER 3, 2018 | NORBERT ATTIG

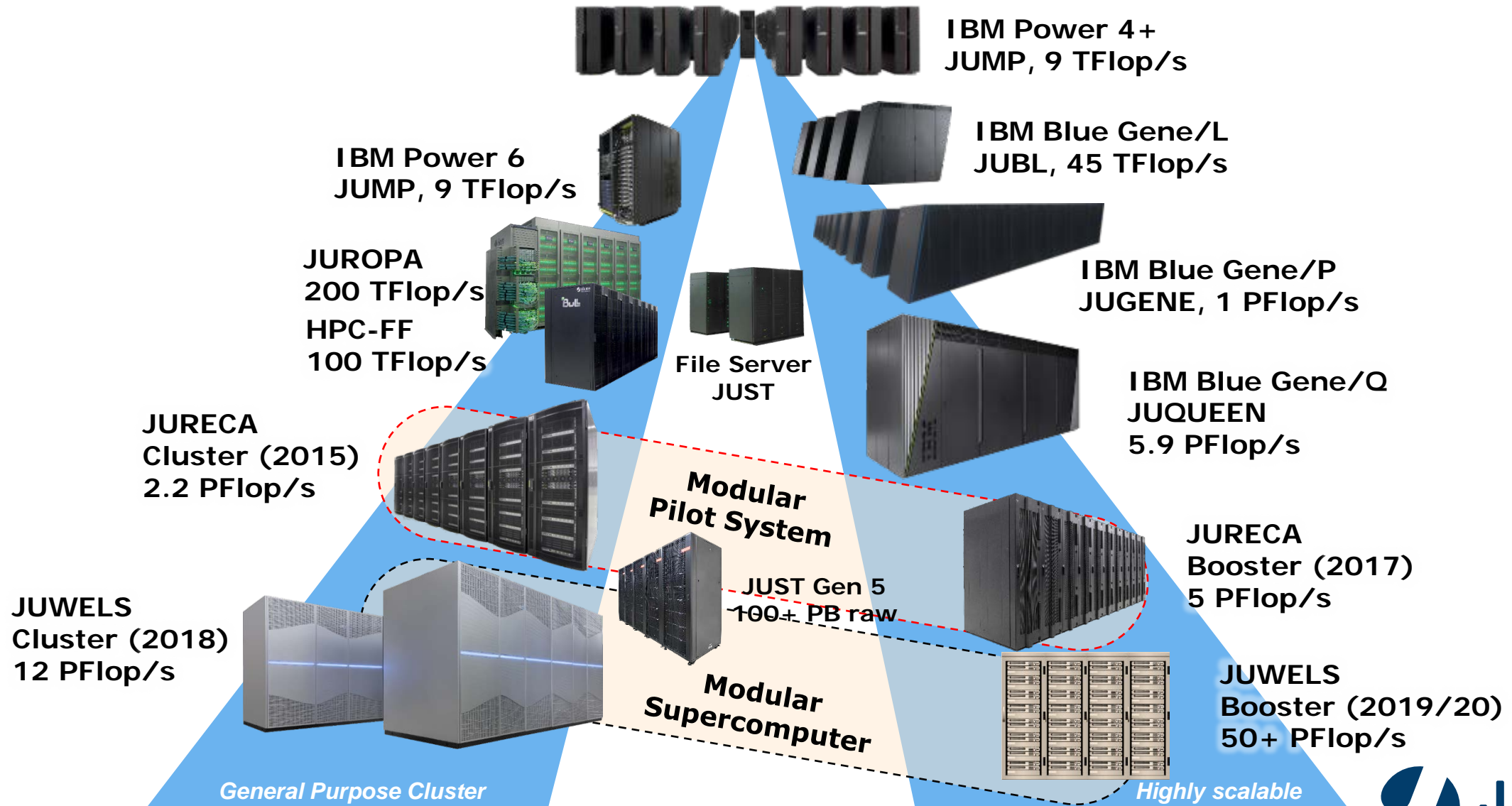
THE ESM PARTITION OF THE TIER-0/1 SUPERCOMPUTER IN JÜLICH

The undertaking

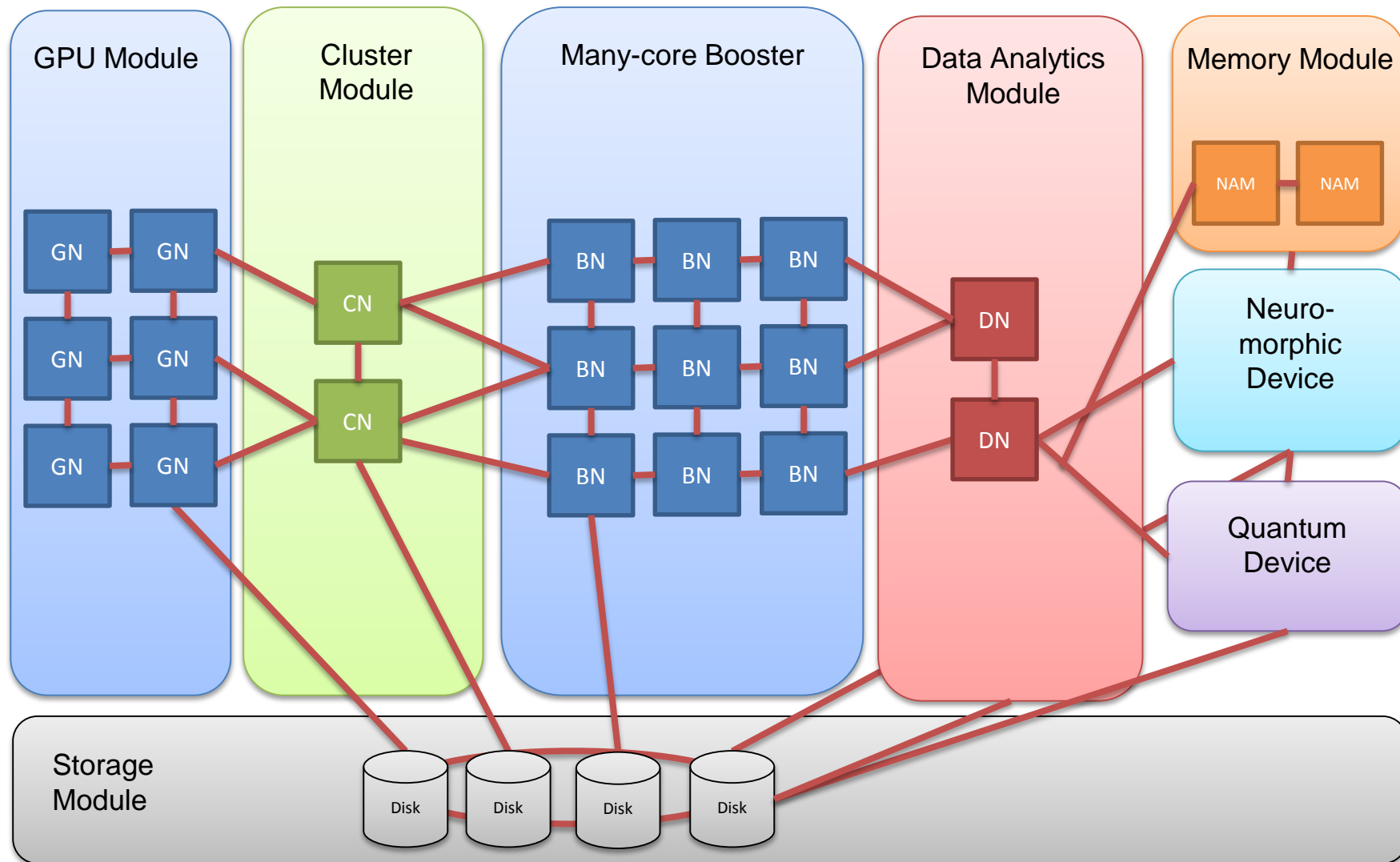
- makes all tiers of the performance pyramid of the Helmholtz HPC and Data Concept available to Earth system science in a similar manner
- combines the advantages of a conservative (Tier-2 Cluster @ DKRZ) and a more adventurous (modular Tier-0/1 System @ FZJ) supercomputer strategy
- is tightly coupled with a domain-specific user support and beyond (→ IVF proposal “Pilot Lab Exascale Earth System Modelling”)
- comprises an installation in two stages, is flexible and adoptable, is being harmonized with DKRZ.



DUAL HARDWARE STRATEGY AT FZJ/JSC

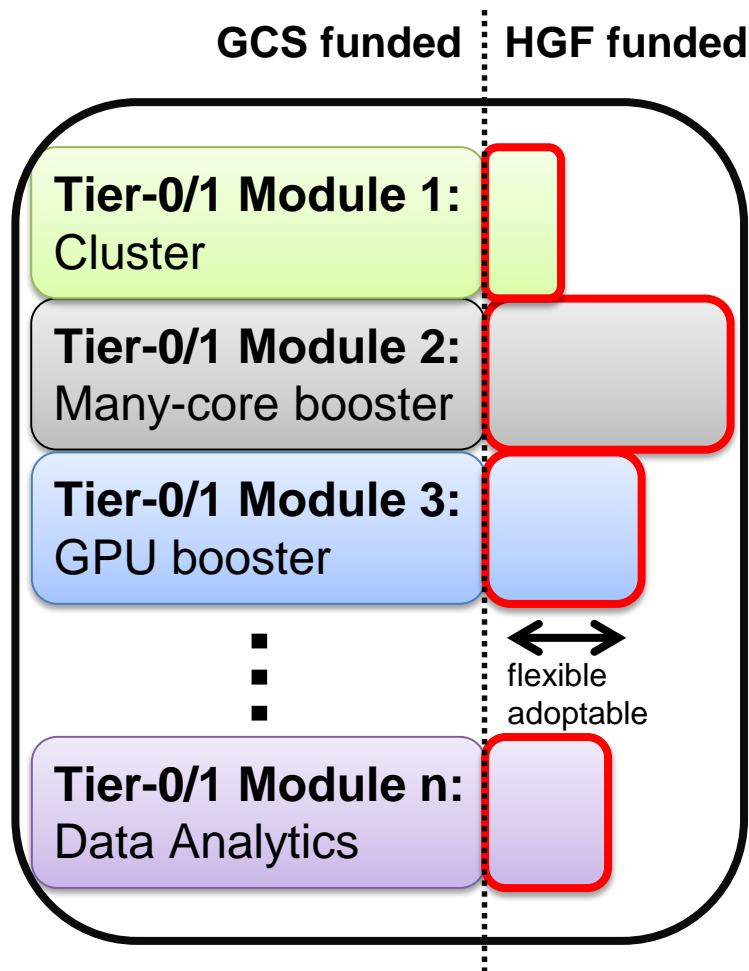


... AND EVOLUTION TO A MODULAR SUPERCOMPUTER

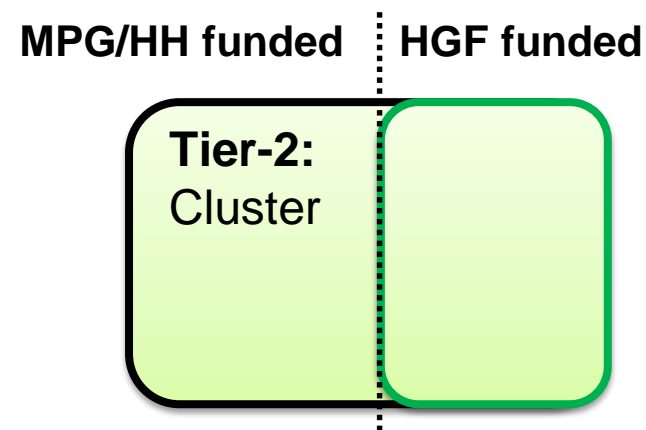


HPC LANDSCAPE FOR ESM IN HELMHOLTZ

Modular Tier-0/1 System @ FZJ



Tier-2 System @ DKRZ



- Helmholtz Ausbau Invest, submitted by HZG
Budget of the HGF share: 20.25 million Euro
- Helmholtz Ausbau Invest, submitted by FZJ
Budget of the HGF share: 15.1 million Euro

USING THE ESM PARTITION

- Distribution of ESM resources is steered by AG Grossrechner
- AG Grossrechner agreed at its meeting in Bremen on Dec 5, 2017
 - to use the ESM partition preferably for the ESM project.
 - to use 30% of the ESM partition for initialisations, tuning and coupling of models within the ESM project without additional application, and to use 70% of the ESM partition for frontier simulations with a focus on the planned frontier simulations of the ESM project through a GCS/NIC-like peer review process.
 - to dedicate the resources preferably to scientists from the Helmholtz research field Earth & Environment; however, proposals from associated scientists at universities or other research institutions are welcome as well, as long as they are in cooperation with a member of the above mentioned Helmholtz research field.
 - to initiate a common FZJ/JSC-DKRZ governance by mutually inviting a member of each steering committee to participate in the corresponding granting meetings.
- A pool of Helmholtz reviewers is necessary to make the review process possible; great feedback so far!!
- Three experienced GCS/NIC reviewers from E&E provide decisive advice.

ESM PARTITION: PROPOSALS 2018/1

- 9 proposals received, requesting in total 70.7 Mcore-h on JUWELS (out of 60 Mcore-h available)
- 5 submitting Helmholtz centres: AWI (2), FZJ (3), HZG (1), KIT (1), UFZ (2)
- Size of proposals range from 0.1 to 22 Mcore-h with an average of about 7 Mcore-h
- Volume of the proposals is comparable with the volume of regular GCS/NIC proposals

- Evaluation of the proposals by topical reviewers. In general, two reviewers are assigned to one proposal.
- The evaluation reports are used by the coordination office for the CPU time granting in Jülich to prepare a first draft of the grant proposal
- The three ESM-oriented GCS/NIC reviewers (D. Jacob, Th. Jung, S. Kollet) adopted this suggestion
- The grant proposal was discussed and finalized in the meeting of the AG Großrechner on Apr 4, 2018
- The granting period is one year, starting May 1, 2018

ESM PARTITION: PROPOSALS 2018/2

- 3 proposals received, requesting in total 7.2 Mcore-h on JUWELS (out of 60 Mcore-h available)
- 2 submitting Helmholtz centres: AWI (1), FZJ (1); 1 submitting Leibniz Institute
- Proposal requests range from 0.5 to 5 Mcore-h
- The size of the ESM proposals is comparable with the size of regular GCS/NIC proposals

- Same procedure as described on the previous page
- On October 11, the AG Grossrechner discussed and finalized the allocation proposal
- The granting period will be for one year, starting Nov 1

- ESM scientists were strongly pointed to the next opportunity to submit a proposal

GCS PARTITION: EARTH AND ENVIRONMENT PROPOSALS 2018/1 & 2018/2

- 12 (7) E&E proposals, mainly from universities, are requesting additional 120 (80) Mcore-h on JUWELS (out of 275 Mcore-h available).
- The 12 (7) E&E proposals are in the general competition for GCS resources.

ROOF PAPER CONNECTING

THE HELMHOLTZ INVESTMENTS @ DKRZ & FZJ/JSC

- A **scientific-technical advisory board (STAB)** should be established to monitor the synergistic task allocation, and the new possibilities of interactions of the two computer centres.
Currently, AG Großrechner serves as this Board
- STAB should encourage a **harmonisation of the allocation of computing time** and storage requirements including giving recommendations on the cooperation of the computing time supervisory boards
- Recommendations for the configuration of the **data link** between the computer centres should be provided by the STAB
- Coordination of the **work environments/software stacks** and questions regarding software engineering (framework) should be addressed by the STAB

SELECTION OF QUESTIONS TO ADDRESS

- Send members from the two supervisory boards mutually to the other board
- What can the supervisory boards contribute to a DKRZ-JSC governance?
- Exchange information between the computing time supervisory boards about projects
 - Information necessary e.g., to estimate the need for a high-speed data link between DKRZ and JSC
 - How to handle proposals which are submitted by the same PI at both sites?
 - Should we think about moving projects from the ESM partition to DKRZ and vice versa?
- Should we synchronise the peer-review processes at JSC and DKRZ (as indicated in the roof paper)?
- Coordination of the JSC and DKRZ user support → separate workshop between DKRZ and JSC planned

ULTIMATE GOAL

Establishment of a national Earth system modelling platform through a tailored integration of scientific and methodological competences of the research fields Earth & Environment and Key Technologies and through a provisioning of the necessary infrastructures.

IVF proposal
ESM
(FB EuU)

IVF proposal
Pilot Lab EESM
(FB ST)

IVF proposal
Digital Earth
(FB EuU)

