

Protokoll
der 12. Sitzung des Wissenschaftlichen Lenkungsaus-
schusses (WLA) für die M&D-Gruppe am MPI-M und das
Deutsche Klimarechenzentrum GmbH
(genehmigt auf der 13. Sitzung am 29.8.2006)

Die Sitzung begann am 20. Januar 2006 um 10:10 Uhr im Raum 4027 des ZIB.

Teilnehmer:

Mitglieder des Ausschusses :

Prof. Dr. M. Heiman (MPI-Jena)
Prof. Dr. A. Hense (Uni Bonn)
Prof. Dr. R. Klein (PIK)
Prof. Dr. D. Olbers (AWI)
Prof. Dr. U. Schumann (DLR) ab 10.30 Uhr
Prof. Dr. H. v. Storch (GKSS)

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

Dr. M. Lautenschlager

Vertreter des DKRZ:

Herr M. Prugger (Geschäftsführer)
Dr. J. Biercamp

Gäste

Prof. Dr. J. Marotzke (MPI-M)
Dr. M. Rieland (BMBF)
Dr. B. Fritsch (DKRZ-User Group, AWI Bremerhaven)

Protokoll:

Dr. H. Luthardt (M&D)

Beginn der Sitzung : 10.10 Uhr

TOP 1 Begrüßung

Prof. Klein begrüßt die Teilnehmer zur 12. Sitzung des WLA. Er begrüßt insbesondere Herrn Prof. Hense, der als Nachfolger von Prof. Hauf in den WLA berufen wurde. Dr. Rieland wird in Zukunft als Vertreter des BMBF an den Sitzungen teilnehmen.

TOP 2 Annahme der Tagesordnung

TOP 4 und 5 werden in der Reihenfolge vertauscht, TOP 10 (Benchmark-Liste für die Nachfolgebeschaffung im HLRE) wird für diese Sitzung gestrichen.

TOP 3 Annahme des Protokolls der 11. Sitzung des WLA vom 19. August 2005

Das Protokoll wird mit einer Änderung (TOP 5) angenommen. Anlage 1 (Kriterien für Konsortialrechnungen) wird mit Änderungen genehmigt (s. TOP 7 / Anlage 1)

TOP 5 Bericht M&D (Lautenschlager)

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

a) Leistungskatalog

Der Leistungskatalog ist aus der Strategiediskussion entstanden. Ziel der darin beschriebenen Angebote von M&D ist eine effektivere Nutzung der Ressourcen für die Erdsystemforschung durch die Verwendung einheitlicher Workflows. Eine enge Kooperation mit dem DKRZ ist hierbei vorgesehen.

Schwerpunkt ist die Entwicklung und Nutzung der IMDI (Integrierte Modell- und Daten-Infrastruktur) und die Durchführung von Konsortialrechnungen (z.B. mit CLM) und der Dateninfrastruktur im Rahmen des WDC Climate.

Gegenwärtig enthält die Datenbank zu etwa 95% Modelldaten und etwa 5% Beobachtungs-(Reanalyse)daten. Es fehlen weitgehend Instrumentenbeobachtungen, wobei über ein Projekt mit dem DWD ein solcher Zugang angestrebt wird.

Die Frage nach der Verbuchung von zusätzlichen Mitteln für Medien und Arbeitsaufwand bei ergänzenden Leistungen ist jedoch noch nicht beantwortet.

Es wird auch eine Datenpublikationsmöglichkeit mittels DOI (Digital Object Identifier) angeboten. Hier muss die Frage nach Implementierung der Qualitätssicherung (Review-Prozesses) noch abschließend geklärt werden.

Der WLA begrüßt den Leistungskatalog. Er soll jetzt auf dem M&D Webserver veröffentlicht werden und es soll danach verfahren werden.

b) Stand der Konsortialrechnungen

Über den Stand der Konsortialrechnungen mit dem CLM liegt eine Tischvorlage vor.

Es traten einige Verzögerungen auf, die sich durch einige erforderliche Nachbesserungen

hinsichtlich der Modellstabilität ergaben. Erste Läufe waren Ende Dezember abgestürzt. Es wurden Änderungen in der Konfiguration (erweiterte Relaxationszone, höhere vertikale Auflösung) durchgeführt. Die Verzögerung scheint jedoch weniger dramatisch, da auch eine Verschiebung des Anlaufens des BMBF Projektes, in dessen Rahmen auf die Daten zugegriffen werden soll, eingetreten ist.

Es wird erwartet, dass die Rechnungen bis Ende des Jahres abgeschlossen werden können. Im Rahmen der SGA (Service Gruppe Anpassung) wurden vom BMBF zwei Stellen zur Verfügung gestellt, die bei M&D (ab Mai 2005) und beim DWD (ab Okt. 2005) angesiedelt sind.

Die Daten der Regionalrechnungen im UBA Projekt werden auch den BMBF Projekten zur Verfügung stehen.

c) Neue Web-Seiten von M&D

M&D hat zwischenzeitlich seine Web-Seiten überarbeitet.

Die Frage nach der Einhaltung der gesetzlichen Forderung nach 'Barrierefreiheit' muss noch geklärt werden.

Die Protokolle der WLA Sitzungen sollen weiterhin öffentlich sein.

TOP 4 Bericht DKRZ

a) Bericht des Geschäftsführers

Herr Prugger als Geschäftsführer des DKRZ berichtet, dass die Berufung von Prof. Bischof mit dessen Absage, die allerdings noch nicht offiziell mitgeteilt wurde, gescheitert ist.

Prof. Brasseur ist mit Wirkung vom 15.1.06 als Geschäftsführer des DKRZ ausgeschieden, Herr Prugger ist gegenwärtig alleiniger Geschäftsführer.

Es wird angestrebt zur Unterstützung der Geschäftsführung zwei Direktoren im Nebenamt zu gewinnen:

Herr Heinzl vom Rechenzentrum Garching als technischer Direktor und

Prof. Marotzke (MPI-M) als wissenschaftlicher Direktor.

Zur langfristigen Sicherung des DKRZ sind gegenwärtig verschiedene Gespräche im Gange, an denen neben dem BMBF, der zust. Hamburger Behörde und der MPG auch die anderen Gesellschaftervertreter beteiligt sind.

Insgesamt werden die Gespräche als konstruktiv eingeschätzt.

Dr. Rieland stellt klar, dass das BMBF sich nicht aus dem DKRZ zurückziehen will, erwartet aber eine Lösung, bei der alle Beteiligten ein gewisses Entgegenkommen zeigen müssen.

Die Bewilligung der Mittel für den HLRE-Ausbau soll innerhalb der nächsten Monate erfolgen.

Nachfolgend findet eine teilweise kontroverse Diskussion über die zukünftige Rolle und Aufgaben des DKRZ statt. Hierbei wird die Frage diskutiert, inwieweit angewandte Mathematik, Algorithmenentwicklung oder andere Verfahren zur effektiveren Nutzung der Informatik durch die Erdsystemforschung als 'added value' des DKRZ betrachtet werden sollen.

Einigkeit besteht in der Feststellung, dass der Service und die Kompetenz des DKRZ (und

M&D) auch in seiner zukünftigen Form für die Community erhalten bleiben müssen.

Die mögliche Option, das DKRZ als europäisches 'Superrechenzentrum' zu installieren, wird als wenig erfolgversprechend eingeschätzt. Dagegen wird eine Lösung als Kompetenzzentrum für die Erdsystemforschung in einer darunter angesiedelten Ebene von nationalen Rechenzentren als realistischer eingeschätzt.

b) Nutzung des HLRE

Das System ist sehr gut ausgelastet.

Es liegen folgende Anträge vor:

Behrens	8700 CPU-h
Biastock	50000 CPU-h
Cubasch	40000 CPU-h
Eden	25000 CPU-h
Jakob	26000 CPU-h

Da die für Konsortialrechnungen vorgesehene Rechenzeit bis 31.8.06 nicht voll genutzt werden kann, sind noch Ressourcen verfügbar, die bei einer pauschalen, 20%-igen Kürzung ausreichen sollten.

Dies wird vom WLA so genehmigt.

c) Ausbauplanung und Nutzungskonzept

Dr. Biercamp berichtet von Planungen, gemeinsam mit dem MPI-M einen skalaren Linux-Cluster (256 Cores) zu beschaffen. Dies soll mit Kompenstationsgeldern finanziert werden, ebenso wie ein Ausbau des GFS (Globalen File Systems) auf 50 Tbyte.

Als 'bottleneck' erweisen sich gegenwärtig das Daten-Retrieval und der externe Zugang.

Angestrebt wird auch eine 'verteilte' Visualisierung auf Clustern, die auch remote nutzbar sein soll.

Über Drittmittel (z.B. C3-Grid) sollen u. a. workflows der Nutzer analysiert werden, die dann mit berücksichtigt werden sollen.

TOP 6 Bericht der DKRZ-User-Group-Vorsitzenden

Die Vorsitzende der DKRZ-User-Group, Frau Dr. Fritsch berichtet von einer zunehmenden Verunsicherung der Nutzer hinsichtlich der Zukunft des DKRZ. Dies ist auch bedingt dadurch, dass es keine Informationen für die Nutzer gibt. Andererseits ist jedoch im Hinblick auf die Planungssicherheit eine Abschätzung erforderlich. Die User-Group hat einen entsprechenden Brief an die Gesellschafterversammlung geschrieben und ihn zusammen mit der Antwort ins Netz gestellt.

Nach Aussage von Herrn Prugger gibt es zum gegenwärtigen Zeitpunkt allerdings keine kommunizierbaren Ergebnisse.

Das neue Datenhaltungskonzept (s. TOP 9) wird von der Nutzerschaft positiv aufgenommen.

Die Kriterien für Konsortialrechnungen sollten veröffentlicht werden.

TOP 7 Kriterien für Konsortialrechnungen

Die Kriterien für Konsortialrechnungen, wie sie in der Anlage zum Protokoll der letzten Sitzung

zusammengefasst sind, wurden diskutiert und mit kleineren Änderungen genehmigt (Anlage 1 dieses Protokolls).

Prof. Schumann weist darauf hin, dass die geplanten Rechnungen zur „Simulation des letzten Millenniums“ als Testfall hinsichtlich der Kriterien betrachtet werden können.

Die Kriterien sind über den M&D Webserver allgemein zugänglich

(http://www.mad.zmaw.de/fileadmin/extern/documents/Kriterien_Konsortialrechnungen.pdf) .

Mittagspause 12.30 – 13.00 Uhr

TOP 9 (vorgezogen) Datenmanagement am DKRZ

Hierzu liegt eine schriftliche Ausarbeitung (DKRZ-Sitzungsunterlagen) vor.

Datenhaltung wird wie Compute-Service als Dienstleistung betrachtet. Aufgrund der Medienkosten muss hier auch eine Regelung erfolgen, die die Nutzerinteressen berücksichtigt, aber auch Einschränkungen der doppelten Speicherung von Daten definiert.

Die Gesellschafterversammlung muss sich mit diesem Thema ebenfalls befassen.

Der WLA akzeptiert das vorgelegte Datenkonzept und stimmt zu, dieses zu veröffentlichen und die erste Phase umzusetzen.

Das Konzept ist über den DKRZ Webserver allgemein zugänglich

(http://www.dkrz.de/dkrz/services/docs/Archivkonzept_Stand-Jan2006-V08)

TOP 8 Zukunft von DKRZ und M&D – Positionspapier der Klima-Community zur Zukunft des DKRZ

Die Gesellschafterversammlung des DKRZ hat die WLA-Vertreter gebeten, die Argumente für die Notwendigkeit der Weiterführung des DKRZ zusammenzufassen.

Hierbei soll die Einzigartigkeit des DKRZ in Europa hervorgehoben werden. Auch soll der Bedarf sowohl nach den Rechen- und Datenkapazitäten als auch der Kompetenz herausgestellt werden, die das DKRZ (und M&D) gegenwärtig anbietet.

Im Hinblick auf die geplanten europäischen Grossrechenzentren wird sogar ein noch höherer Service-Bedarf im Hinblick auf deren Nutzung erwartet.

Ein entsprechendes Papier wurde inzwischen von Prof. Klein, Prof. Heimann, Prof. Marotzke und Prof. v. Storch erstellt (und an die Sitzungsteilnehmer verteilt).

Prof. Marotzke erläuterte das Papier.

Dr. Rieland weist darauf hin, dass der Nutzungsaspekt wichtig ist (auch auf kurzem Zeithorizont). Außerdem schlägt er vor, eine 'Executive Summary' voranzustellen.

Prof. Schuman regt an, dass derartige Papiere vorher verteilt werden sollten, und bedauert, dass im aktuellen Fall die WLA-Mitglieder nicht mehr eingebunden wurden.

TOP 11 E-Science-Konferenz, November 2006: Vortrag zur „Nutzung des 'Grid' in der Klimaforschung“ (Arbeitstitel)

Es wird vorgeschlagen, Prof. Sausen (DLR) oder Prof. Stammer (Uni HH) zu bitten, einen entsprechenden Vortrag auf der Konferenz zu halten.

Prof. Klein wird mit Prof. Sausen diesbezüglich Kontakt aufnehmen.

TOP 12 Verschiedenes

Information zu einem geplanten Community Projekt

Es liegt ein Schreiben vom MPI-M (Dr. Jungclaus) über das (Community-) Projekt COS-MOS vor, in dessen Rahmen Konsortialrechnungen durchgeführt werden sollen.

Der WLA nimmt dies zur Kenntnis und gibt eine Rückmeldung, der auch die Information über die Kriterien für Konsortialrechnungen beigelegt sein soll. Eine Klärung hinsichtlich der erforderlichen Rechenzeit muss noch erfolgen.

Web-Seite zur Rechenzeitvergabe

Dr. Biercamp stellt den Entwurf einer Webseite für die Kriterien einer Rechenzeitvergabe vor.

Workshops

Ein Workshop zum „Wissenschaftlichen Rechnen und seiner Nutzung für die Klimaforschung“ sollte im 2. Halbjahr 2007 am DKRZ stattfinden.

Hinweis

Vom 9.-11. Okt. findet in München die Deutsche Klimatagung statt.

TOP 13 Ort und Termin der nächsten Sitzung

Die nächste Sitzung des WLA findet am Dienstag, den **29. August 2006** um 10.00 Uhr in **Hamburg** statt.

Ende der Sitzung : 15:50 Uhr

gez. Dr. Hans Luthardt (Protokoll)

Anlage 1

Kriterien für Konsortialrechnungen (genehmigt auf der WLA-Sitzung am 20.1.2006)

Kriterien für Konsortialrechnung sind die folgenden Punkte:

- Die Rechnungen müssen Grundlage für umfassende nationale bzw. internationale Forschungsvorhaben sein.
Zur Abstimmung der Rechnungen muss Konsens in der jeweiligen Forschergemeinschaft hergestellt werden (z.B. durch einen Workshop).
- 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.
- Kriterien an Programme/Modelle:
 - Die Programme/Modelle müssen in der Regel 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 verantwortlicher Ansprechpartner beim Programmierer benannt sein.
 - Der Ressourcenbedarf der Programme muss die Nutzung des HLRE rechtfertigen.
- 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.
- Die Daten sind allgemein und sofort verfügbar und gemäß den (M&D/WDCC-) Kriterien für die Datenpublikation zu zitieren.
- Über die Ressourcenzuteilung entscheidet der WLA unter Berücksichtigung der Bedürfnisse des DKRZ-Normalbetriebs.
- Antrag, Durchführung und Ergebnisse werden im WEB dokumentiert.