

Wissenschaftliches Rechnen am MPI-M

Klima- und Erdsystemmodelle laufen auf Höchstleistungsrechnern mit Hunderten, in Zukunft sogar vielen Tausenden von Prozessoren. Sie erzeugen riesige Datenmengen. Zielsetzung der Programmierung ist nicht nur, die Programme im wissenschaftlichen Sinne optimal zu gestalten, sondern sie auch möglichst schnell ablaufen lassen zu können, um die Ergebnisse möglichst bald zu erhalten. Für hohe Geschwindigkeit sorgt die ständige Anpassung der Programme an die Rechnerarchitekturen der Supercomputer. Wie und durch wen können die Modelle so gebaut werden, dass sie schnell und effektiv laufen? Und wie handhaben die Wissenschaftler die gigantischen Modelldatenmengen in Größenordnungen von Tera- und Petabyte?

Die Klimaforscher am Max-Planck-Institut für Meteorologie (MPI-M) nutzen als Hardware die Höchstleistungsrechner- und Datenspeichersysteme des [Deutschen Klimarechenzentrums](#) (DKRZ), entwickeln spezielle Software für die Analyse der Modelldaten und benötigen Numerik- und Software-Spezialisten, mit denen sie sich gemeinsam um diese Aufgabenstellungen der Modellentwicklung und –Nutzung kümmern.

CIMD - Computational Infrastructure and Model Development

Um Synergien zwischen allen Beteiligten zu schaffen, hat das MPI-M eine neue wissenschaftliche Gruppe CIMD ([Computational Infrastructure and Model Development](#)) ins Leben gerufen und diese in eine übergeordnete Struktur, ein „Labor“ (SCLab – Scientific Computing Laboratory), integriert. Ziel ist es, Lösungen zu erarbeiten, die es den Klimaforschern ermöglichen, ihre wissenschaftlichen Fragestellungen mit Hilfe der Modelle effizienter lösen zu können.

Die Gruppe CIMD unterstützt die technische Entwicklung der Erdsystemmodelle. In enger Zusammenarbeit mit den wissenschaftlichen Abteilungen und mit CIS (Central IT-Service) stellt CIMD Software-Bibliotheken und Werkzeuge für die Modellinfrastruktur bereit. Zudem gehört es zu den Aufgaben von CIMD die mittel- und langfristigen strategischen Entwicklungen in der Modellierung des MPI-M zu begleiten. Dazu wird CIMD in die Entwicklung neuer Projekte und in strategische Entscheidungen der Modellentwicklung eingebunden. Konkrete Aufgaben sind die Optimierung der Modelle für die Höchstleistungsrechner, das Pre- und Post-Processing, Arbeitsabläufe und -umgebungen sowie die Anpassung an neue Technologien.

CDOs - Climate Data Operators

Eine erfolgreiche Entwicklung und Anwendung der Erdsystemmodelle des MPI-M (MPI-ESM) setzt eine umfangreiche, hoch spezialisierte Software-Umgebung voraus. Dazu gehören Programme, die die Weiterverarbeitung der erzeugten umfangreichen Modelldaten ermöglichen und vereinfachen. Riesige Datenmengen in Größenordnungen von Petabyte müssen bewältigt und ausgewertet werden. Wie kann man diese Datenmengen beherrschen? Hierzu wurden am MPI-M federführend von Uwe Schulzweida die Climate Data Operators (CDOs) entwickelt. Diese Entwicklung ist mittlerweile eine wahre Erfolgsgeschichte.

Die CDOs sind eine Sammlung von mehr als 400 Operatoren, um die Daten aus Klima- und Wettervorhersagemodellen zu verarbeiten und zu analysieren. Mit ihnen können die Wissenschaftler einheitliche Formate erstellen, zwischen verschiedenen Gittertypen und –auflösungen interpolieren und die Daten in andere Formate konvertieren. Große Datensätze können mit den CDOs zerlegt oder aus kleineren zusammengefügt werden. CDOs ermöglichen Vergleiche und die arithmetische Verarbeitung von Daten sowie das Berechnen von geophysikalischen Größen und Statistiken. Damit sind sie eines der wichtigsten Werkzeuge der Klimaforscher für die Analyse der großen Modelldatenmengen. Eine ausführliche Dokumentation und Entwicklungsplattform hilft den Forschern bei der Anwendung.

Weitere Gruppen in SCLab

SCLab besteht neben CIMD aus zwei weiteren Gruppen: dem Central IT Service (CIS) und AMCP (Applied Mathematics and Computational Physics) sowie einem IT-Strategen, dessen Aufgabe es ist, sich um die IT-Partnerschaften des MPI-M zu kümmern. Geleitet wird SCLab von einem der drei Direktoren des MPI-M, zurzeit vom Geschäftsführenden Direktor Prof. Bjorn Stevens.

CIS als zentraler IT-Service am MPI-M unterstützt und entwickelt die IT-Umgebung für die Klimaforscher einschließlich des Zugangs zum DKRZ. Die Aufgaben umfassen die Bereitstellung und den Betrieb von Hardware, die Beschaffung und Betreuung von Servern und Software sowie die technische Unterstützung der Webseiten. In Projekten werden darüberhinaus spezielle Anforderungen des MPI-M zentral entwickelt und bearbeitet. Der zentrale Anlaufpunkt von CIS für jeden Mitarbeiter des MPI-M ist der Help-Desk.

AMCP ist verantwortlich für die Entwicklung der dynamischen Operatoren, die den Erdsystemmodellen zugrunde liegen. Das sind im Wesentlichen Algorithmen der angewandten Mathematik für die strömungsdynamischen Kerne der Atmosphären- und Ozeanmodelle des MPI-M, formuliert als partielle Differentialgleichungen. Das Arbeitsgebiet von AMCP umfasst zudem die Schnittstelle dieser Kerne mit den physikalischen Parametrisierungen. Gegenwärtig leitet AMCP die Entwicklung des Ozeanteils im neuen ICON-Modell. Die Entwicklungsarbeit von AMCP braucht eine enge Kooperation mit der Gruppe CIMD, in der die Expertise für die Rechenarchitektur und –infrastruktur liegt.

Das MPI-M kooperiert aktiv mit zahlreichen anderen Institutionen in IT-Infrastrukturprojekten. Diese Kooperationen haben oft einen strategischen Charakter, der sich positiv auf den wissenschaftlichen Fortschritt auswirkt. Der IT-Verantwortliche für die **strategischen IT-Partnerschaften** des MPI-M pflegt und initiiert diese Partnerschaften und repräsentiert das MPI-M in dieser Hinsicht nach außen. Er kooperiert eng mit dem für SCLab verantwortlichen Direktor und den SCLab-Gruppen.



Kontakt:

Dr. René Redler
Max-Planck-Institut für Meteorologie
Tel.: +49 40 41173 102
E-Mail: rene.redler@mpimet.mpg.de

Reinhard Budich
Max-Planck-Institut für Meteorologie
Tel.: +49 40 41173 369
E-Mail: reinhard.budich@mpimet.mpg.de