

**BremHLR**

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

**Statusbericht 2008**

**des**

***Kompetenzzentrums***

***für***

***Höchstleistungsrechnen Bremen***

***– BremHLR –***

**Bremen, Juni 2009**



Universität Bremen



JACOBS  
UNIVERSITY



Alfred-Wegener-Institut  
für Polar- und Meeresforschung  
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Hochschule Bremerhaven



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

© 2003-2009 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

[www.bremhllr.uni-bremen.de](http://www.bremhllr.uni-bremen.de)



## Das Berichtsjahr 2008 in Stichpunkten

- **Positive Begutachtung des Kompetenzzentrums**
- **Hochschule Bremerhaven neuer HLRN-Partner**
- **Neuer Supercomputer am HRLN - 60 Mal mehr Leistung**
- **3. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung**
- **Bremer HRLN Anteil**

## Inhaltsverzeichnis

<b>1. Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur</b>	<b>4</b>
1.1. Aufgaben . . . . .	4
1.2. Struktur . . . . .	4
1.3. Personelles . . . . .	5
1.4. Begutachtung des BremHLR . . . . .	5
1.5. Konstituierende Sitzung des Lenkungsausschusses nach der Fortschreibung . . . . .	6
<b>2. Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum</b>	<b>7</b>
2.1. Unterstützung des HLRN . . . . .	7
2.2. Tätigkeiten mit Bezug zur Universität Bremen . . . . .	7
2.3. Weitere Aktivitäten des BremHLR . . . . .	8
<b>3. Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten</b>	<b>9</b>
<b>4. Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR</b>	<b>12</b>
<b>5. Informationen zur Infrastruktur: Der neue Supercomputer am HLRN</b>	<b>14</b>
<b>6. Projektberichte</b>	<b>16</b>
6.1. hbk00005: Auswertung von geophysikalischen Parametern mit dem Satelliteninstrument SCIAMACHY . . . . .	16
6.2. Paläoklimamodellierung an der Universität Bremen (Fachbereich Geowissenschaften) . . . . .	20
6.2.1. hbk00012: Modellierung känozoischer Klimazustände . . . . .	20
6.2.2. hbk00007: Solarinduzierte Klimavariabilität im Holozän . . . . .	27
6.2.3. hbk00008: Klimamodellierung quartärer Interglaziale . . . . .	29
6.2.4. hbk00013: Atmosphärischer Aerosoltransport im glazialen Klima - Numerische Untersuchungen mit einem gekoppelten Klimamodell . . . . .	31
6.2.5. hbk00017: Tektonisch induzierte Klimaänderungen im Miozän	33
6.3. hbk00015: Towards a Global Ocean Modelling System based on the Finite Element Method . . . . .	35
6.4. hbk00016: High Resolution Modelling of Particle Fluxes in the Northwest African Upwelling Region . . . . .	39
<b>A. Bericht über die Begutachtung des BremHLR am 11. Dezember 2007</b>	<b>44</b>

# 1. Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur

## 1.1. Aufgaben

Das Land Bremen beteiligt sich am Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen – HLRN –, um an dem rasanten Fortschritt der Computer- und Softwaretechnologie Teil zu haben. Das Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen – BremHLR – unterstützt dazu Wissenschaftler im wissenschaftlichen Rechnen insbesondere im Land Bremen. Unterstützung wird für Projekte sowohl in der Konzeption, der Antragstellung als auch der Durchführung geleistet. Der Schwerpunkt der Unterstützung liegt hierbei auf Projekten auf dem HLRN-System. Durch den Beschluss des Lenkungsausschusses vom 20. April 2005 wurde die Betreuung aber auch auf Rechenprojekte an den nationalen Höchstleistungsrechenzentren wie z. B. dem John von Neumann-Institut für Computing (NIC) in Jülich ausgeweitet.

Als Bestandteil im Kompetenznetzwerk des HLRN beteiligt sich BremHLR unter anderem an der fachspezifischen Nutzerberatung, der Pflege von Software-Paketen und der Veranstaltung überregionaler Nutzerworkshops. Die Geschäftsstelle des BremHLR ist an der Universität Bremen im Zentrum für Technomathematik angesiedelt.

Das BremHLR wurde am 1. Juli 2003 als Kooperation zwischen der Universität Bremen (UB), der Jacobs University Bremen (JUB) und dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (AWI) am 1. Juli 2003 gegründet. Seit April 2008 ist auch die Hochschule Bremerhaven (HBHV) Kooperationspartner des BremHLR. Das Kompetenzzentrum wird von den beteiligten Kooperationspartnern sowie dem Bremer Senator für Bildung und Wissenschaft (SfBW) finanziell getragen.

## 1.2. Struktur

Dem Lenkungsausschuss des BremHLR als oberstes beschlussfassendes und steuerndes Gremium gehören Vertreter der kooperierenden Einrichtungen an. Im Einzelnen sind dies:

- Prof. Dr. Alfred Schmidt (UB, Zentrum für Technomathematik ZeTeM)
- Prof. Dr. Wolfgang Hiller (AWI, Rechenzentrum)
- Prof. Dr. Ulrich Kleinekathöfer (JUB)
- Prof. Dr. Stephan Frickenhaus (HBHV)
- Helmuth Wolf (SfBW)

Die fachspezifische Betreuung der Projekte am Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) sowie von Projekten an anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren wird von den Fachberatern des BremHLR geleistet, die ebenfalls den Einrichtungen der Kooperationspartner angehören. Im Berichtszeitraum waren folgende Fachberater tätig (siehe auch 1.3):

- Dr. Michael Schröter (AWI/Rechenzentrum, UB/ZeTeM, Leiter Geschäftsstelle, bis 6.2008)
- Dr. Lars Nerger (AWI/Rechenzentrum, UB/ZeTeM, Leiter Geschäftsstelle, seit 10.2008)
- Thorsten Coordes (UB/ZARM)
- Dr. Achim Geleßus (JUB/CLAMV)
- Dr. Kerstin Fieg (AWI/Rechenzentrum)

Die Geschäftsstelle ist verantwortlich für die Organisation der Workshops (siehe Abschnitt 4) und die Unterstützung der Nutzer, insbesondere im Antragsverfahren. Das Sekretariat der Geschäftsstelle wird geleitet von

- Julitta von Deetzen.

### 1.3. Personelles

Aufgrund des Beitritts der Hochschule Bremerhaven ist der Lenkungsausschuss des BremHLR durch Prof. Dr. Stephan Frickenhaus verstärkt wurden. Dr. Michael Schröter hat im Juni 2008 das BremHLR verlassen. Die Tätigkeit des Leitenden Fachberaters wurde zum Oktober 2008 von Dr. Lars Nerger übernommen.

### 1.4. Begutachtung des BremHLR

Das BremHLR wurde im Dezember 2007 im Rahmen der Beantragung einer weiteren Förderungsphase durch die Fachgutachter der DFG, Prof. Christian Bischof, Ph.D, RWTH Aachen und Prof. Dr. Wilfried Juling, Universität Karlsruhe (TH), beide Mitglieder der DFG-Rechnerkommission begutachtet. Das BremHLR wurde hierbei sehr positiv beurteilt und seine Schlüsselrolle für die effektive Nutzung des HLRN und anderer HPC-Ressourcen betont. Das vollständige Gutachten ist im Anhang A abgedruckt.

Das Gutachten betont auch, dass sich die zusätzlichen Investitionen des Landes Bremen in die Geschäftsstelle von BremHLR aufgrund der guten Nutzung des HLRN um ein Vielfaches amortisiert haben. Die Wirtschaftlichkeit von BremHLR für den Förderzeitraum von Juli 2003 bis Juni 2008 ergibt sich aus den Kosten der Bremer Beteiligung am HLRN sowie der Förderung von BremHLR sowie dem Gewinn durch

abgenommene Rechenzeit am HRLN durch Bremer Projekte. Die abgenommene Rechenzeit hat zum Selbstkostenpreis von 70 Euro pro Rechenzeiteinheit 'NPL' einen Wert von etwa 5 Mio. Euro. Diesem Gewinn stehen Kosten von etwa 1 Mio. Euro für die HLRN-Beteiligung sowie BremHLR gegenüber. Hiermit ergibt sich ein Gewinn von 4 Mio. Euro durch die intensive Nutzung des HLRN-Systems durch Bremer Nutzer.

## **1.5. Konstituierende Sitzung des Lenkungsausschusses nach der Fortschreibung**

Am 3. Juli 2008 fand am Alfred-Wegener-Institut (AWI) die konstituierende Sitzung des BremHLR Lenkungsausschusses nach der Fortschreibung unter Anwesenheit der Fachberater statt. Aus den beteiligten Zentren war jeweils mindestens ein Vertreter anwesend. Ein wichtiges Thema der Sitzung war die Planung der Informationsveranstaltung zum HLRN-II System am 17.10.2008. In dieser Veranstaltung (siehe auch Abschnitt 4) wurde den Bremer Nutzern das neue HLRN-II Rechnersystem vorgestellt. Außerdem diente die Veranstaltung dazu, das BremHLR vorzustellen, um neue Nutzer zu gewinnen. Des Weiteren wurde in der Sitzung des Lenkungsausschusses über die Neubesetzung der Stelle des leitenden Fachberaters gesprochen. Die Stelle war zu diesem Zeitpunkt ausgeschrieben, so dass die Aussicht geäußert wurde, dass die Stelle zum Oktober 2008 wieder besetzt werden könnte. Abschließend wurden noch mögliche Nutzerworkshops für das Jahr 2009 besprochen.

## 2. Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum

### 2.1. Unterstützung des HLRN

Ein Schwerpunkt der Aktivitäten des BremHLR lag auch in diesem Berichtszeitraum in der Unterstützung des HLRN. Neben den Tätigkeiten von Wolfgang Hiller als Mitglied der Technischen Kommission sowie Alfred Schmidt als Mitglied des Wissenschaftlichen Ausschusses besteht die Unterstützung des HLRN durch das BremHLR hauptsächlich in der Fachberatung für Bremer Projekte am HLRN. Außerdem beteiligen sich die Fachberater an der Pflege von numerischen Bibliotheken auf dem Rechensystem sowie der Dokumentation. Durch den Wechsel auf das neue HLRN-II System bestand vor allem im 4. Quartal 2008 ein erhöhter Portierungsbedarf sowie die Notwendigkeit der Neuinstallation von Bibliotheken, wie das Löser-Interface Paket FoSSI.

### 2.2. Tätigkeiten mit Bezug zur Universität Bremen

Das BremHLR wurde 2003 gegründet, um Wissenschaftlern die Möglichkeit der Unterstützung im wissenschaftlichen Rechnen zu bieten. Bundesweit sieht die Strategie eine Versorgung des wissenschaftlichen Rechnens mit Rechenressourcen durch eine pyramidenförmige Versorgungsstruktur vor. An der Spitze der Pyramide steht das Höchstleistungsrechnen an den nationalen Zentren (Jülich, München, Stuttgart), die sich als „Gauss Zentrum für Supercomputing“ zusammengeschlossen haben. Die mittlere Schicht deckt das Hochleistungsrechnen mit Zentren/Verbänden der Gauss-Allianz wie dem HLRN ab. Für die Versorgung mit HPC-Servern auf der untersten Ebene sind die Hochschulen und die einzelnen Institute verantwortlich.

An der Universität Bremen wird zurzeit über eine Umstrukturierung dieser untersten Ebene nachgedacht. Ziel der Überlegungen ist es, durch Ressourcen-Sharing brachliegende Rechenkapazität auch über einzelne Fachbereiche und Institute hinweg verfügbar zu machen. Verfügbare Systeme sollen so effizienter genutzt werden und es können Kosten reduziert werden. Der IT-Steuerungskreis der Universität Bremen diskutiert deshalb über die Versorgung durch eine Grid-Infrastruktur. Das BremHLR hat dafür die Arbeitsgruppe „AG Grid Computing“ initiiert und federführend ein erstes Konzept für den Aufbau einer „Campus-Grid“ Infrastruktur entworfen. In dieser AG Grid-Computing sind Vertreter aller Einrichtungen vertreten, die zum Betrieb des Grid beitragen können oder als potenzielle Nutzer des Grids in Frage kommen. Im Rahmen dieser Aktivitäten berät BremHLR die Universität Bremen auch hinsichtlich der Möglichkeit einer zentralen Unterbringung („Housing“) für Cluster-Computer, die in den Fachbereichen beschafft werden. Hierzu gab es von Mitgliedern des Lenkungsausschusses in 2008 mehrere Besuche bei den HLRN-Rechenzentren in Berlin und

Hannover, um sich über die Infrastruktur der Rechnerräume zu informieren.

### 2.3. Weitere Aktivitäten des BremHLR

Als das Highlight des Veranstaltungsjahres 2008 ist der vom BremHLR organisierte und durchgeführte *3. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* zu nennen. Mit 30 Teilnehmern war der Workshop wieder sehr gut besucht.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 28. Januar bis zum 1. Februar an der JUB abgehalten. Als Referenten konnten wie bereits bei den bisherigen Workshops Dr. Wolfgang Baumann und Dr. Hinnerk Stüben (beide Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin) gewonnen werden. Der Workshop wurde auch wieder für die Studenten der JUB als offizielle Lehrveranstaltung angeboten. Durch die Bearbeitung einer abschließend bewerteten Übungsaufgabe konnten die Studenten Kreditpunkte für ihr Bachelor- und Masterstudium erlangen.

Der sehr gute Zuspruch und der große Erfolg der Veranstaltung spiegelt deutlich den dringenden Bedarf zur Ausbildung im Hoch- und Höchstleistungsrechnen wider und gibt Anlass dazu, sie auch weiterhin als regelmäßige Ausbildungs- und Schulungsmaßnahme anzubieten.

Auch im aktuellen Berichtszeitraum war das BremHLR an einer Reihe weiterer Veranstaltungen beteiligt. Eine Übersicht hierzu ist in Abschnitt 4 zu finden.

### 3. Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten

Der Trend der sehr guten Auslastung des HLRN durch die Bremer Projekte bei gleichzeitig steigendem Bedarf an Rechenleistung setzte sich auch für den aktuellen Berichtszeitraum fort. Für Bremer Projekte wurde für 2008 mehr als doppelt so viel Rechenzeit bewilligt wie für das Jahr 2007. Dieses ist vor allem auf Neuanträge mit höherem Rechenzeitbedarf als bisherige Projekte zurückzuführen (siehe Tabelle 3.1), die auch in Hinblick auf die Leistungssteigerung durch das neue HLRN-II System größer ausgelegt wurden. Allerdings war die Nutzung des bis September 2008 verfügbaren Systems HLRN-I durch Bremer Projekte eingeschränkt durch die sehr hohe Auslastung des Systems. Das neuen System HLRN-II, das im August für die Nutzer freigeschaltet wurde, wurde im Jahr 2008 von Bremer Projekten aufgrund von Schwierigkeiten bei der Portierung nur in sehr geringem Umfang genutzt. Daher liegen die Bremer Projekte mit einem prozentualen Anteil von 4,6 % an der gesamten am HLRN verfügbaren Rechenleistung für die ersten 3 Quartale, anders als in den bisherigen Jahren, nur in der Größenordnung des investiven Anteils des Landes Bremen. Auf das gesamte Berichtsjahr wurde ein prozentualer Anteil von 3,5 % erreicht, was auch auf die geringe Nutzung der neuen HLRN-II Systems im 4. Quartal 2008 zurückzuführen ist.

Tabelle 3.1.: Übersicht der Bremer HPC-Projekte, die innerhalb des Berichtszeitraums vom BremHLR betreut wurden. Status: F = Fortsetzung, E = Erstantrag

Projektleiter	Institut	Kennung	Laufzeit		NPL	Status
Prof. Dr. J.P. Burrows	UB	hbk00005	III/03	– II/09	20000	F
		NIC - hbb10	I/06	– II/09	≈2950	F
Prof. Dr. M. Schulz	UB	hbk00007	III/08	– II/09	20800	E
Prof. Dr. M. Schulz	UB	hbk00008	III/08	– II/09	13600	E
Prof. Dr. M. Schulz	UB	hbk00012	I/04	– II/08	4800	F
Prof. Dr. M. Schulz	UB	hbk00013	III/08	– II/09	10200	E
Prof. Dr. D. Olbers	AWI/UB	hbk00014	II/04	– IV/08	950	F
Prof. Dr. D. Olbers	AWI/UB	hbk00015	IV/04	– I/09	2000	F
Dr. G. Karakas	AWI/UB	hbk00016	I/05	– I/09	1300	F
Prof. Dr. M. Schulz	UB	hbk00017	III/08	– II/09	13600	E

Im zweiten Quartal 2008 ist das Projekt hbk00012 von Prof. Dr. M. Schulz ausgeführt. Es wurden aber aus dieser Arbeitsgruppe vier Erstanträge mit jeweils deutlich höherer Rechenzeitanforderung gestellt. Alle vier Anträge wurden positiv begutachtet.

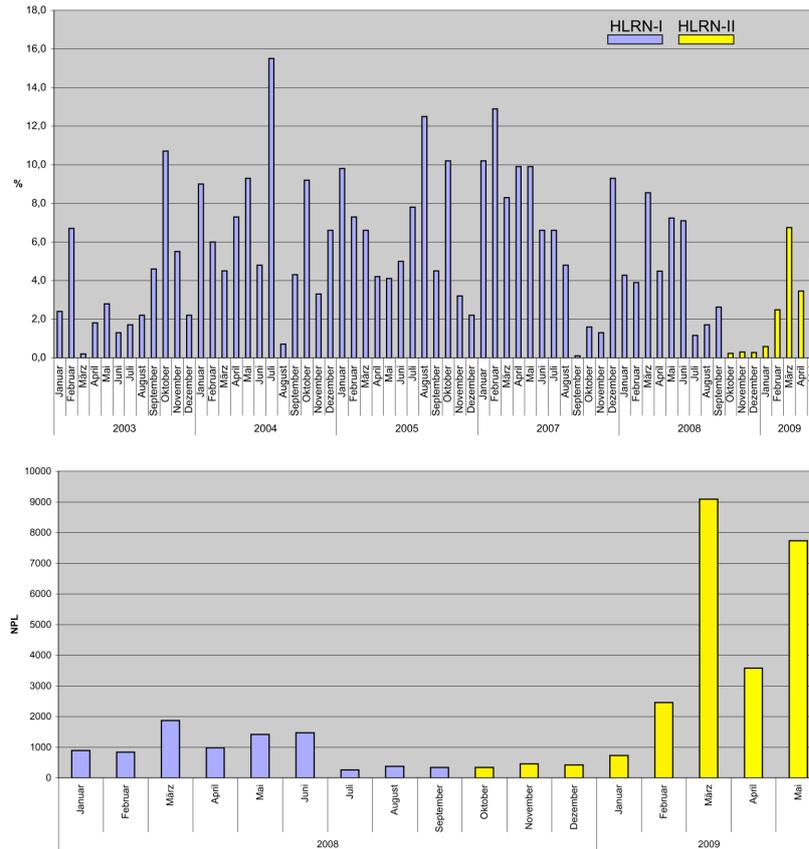


Abbildung 3.1.: Grafische Darstellung des Rechenzeitverbrauchs der Bremer HLRN-Großprojekte. Oben: Verbrauch in Prozent für den Zeitraum 2003 bis Mai 2009. Bis September 2008 sind Werte für das HLRN-I, ab Oktober für das HLRN-II System dargestellt. Unten: Verbrauch in der HLRN-Leistungseinheit NPL zwischen 1.2008 und 5.2009.

tet und sind seit dem dritten Quartal des Berichtsjahres aktiv. Hierdurch ist die Anzahl der vom BremHLR betreuten Projekte auf 10 gestiegen, wobei 9 dieser Projekte am HLRN und ein Projekt am NIC in Jülich angesiedelt sind. Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt Tabelle 3.1. Die Projekte werden von insgesamt 36 am HLRN akkreditierten Nutzern durchgeführt.

Insgesamt wurden 2008 etwa 9600 NPL<sup>1</sup> durch Bremer Projekte am HLRN abgenommen. Das entspricht einem Verbrauch von etwas über 300.000 CPU-h. Aufgrund der hohen Systemauslastung des HLRN-I Systems sowie der Umstellung auf das neue HLRN-II System lag der Abnahme deutlich unter dem des Vorjahres. Eine detaillierte Übersicht zum Verbrauch der Bremen Projekte am HLRN zeigt Abbildung 3.1.

<sup>1</sup>Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit, 1 NPL entspricht 1 CPU-h auf einem 32 CPU Knoten des HLRN-I Systems. Auf dem HLRN-II System entspricht 1 NPL einer CPU-h auf drei Knoten mit je 8 Prozessorkernen.

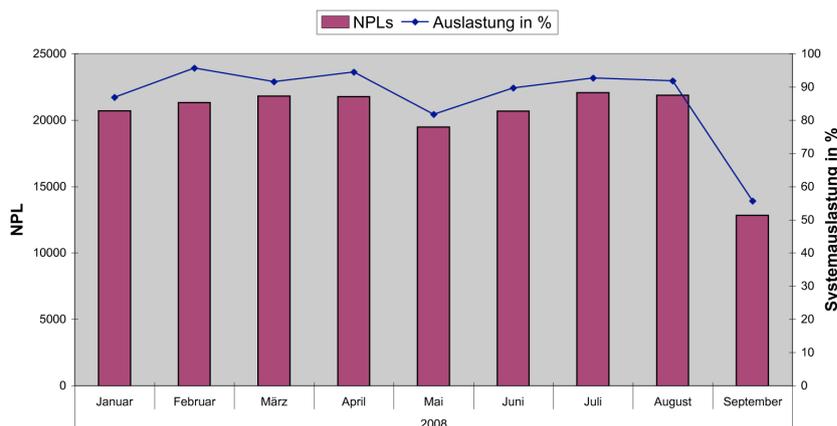


Abbildung 3.2.: Grafische Darstellung der Gesamtauslastung und des Rechenzeitverbrauchs des HLRN-I Systems im Jahr 2008.

Auf dem HLRN-I System wurden monatlich durchschnittlich 930 NPL abgenommen. Bei einer mittleren monatlichen Verfügbarkeit von etwa 20300 NPL am HLRN-I entspricht dies etwa dem beobachteten prozentualen Bremer Anteil von etwa 4,5 %, siehe Abb. 3.1. Bedingt durch Schwierigkeiten bei der Portierung der Programme Bremer Projekte, wurden auf dem neuen HLRN-II System ab Oktober nur durchschnittlich 400 NPL abgenommen. Wie das untere Diagramm in Abb. 3.1 zeigt, lag die Menge monatlich abgenommener NPL damit etwas über dem Verbrauch des dritten Quartals. Da mit dem HLRN-II System die monatliche Verfügbarkeit auf etwa 150000 NPL angestiegen ist, lag der prozentuale Anteil Bremer Projekte im vierten Quartal bei nur 0,3 % (Abb. 3.1 oben). Mit Beginn des Jahres 2009 konnte die Portierung der Bremer Projekte auf das HLRN-II System abgeschlossen werden, so dass sich der Abnahme von NPL auf ein vielfaches gegenüber der Nutzung auf dem HLRN-I System gesteigert hat.

Innerhalb des aktuellen Berichtszeitraums war das HLRN-I Rechensystem sehr stark ausgelastet. Dadurch konnte deutlich weniger als die bewilligte Rechenzeit abgenommen werden, wie auch von den Projektleitern beklagt wurde. Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 3.2 den Rechenzeitverbrauch am HLRN in NPL sowie die prozentuale Auslastung des HLRN-Systems. Im Durchschnitt liegt die prozentuale Auslastung des HLRN-I im Zeitraum von Januar bis August 2008 bei etwa 91 %, was für ein Hoch- bzw. Höchstleistungsrechenzentrum eine sehr hohe Auslastungsquote darstellt.

Neben der hohen Auslastung des Systems war aufgrund von speziellen sehr großen Simulationen anderer HLRN-Partner ab Juli nur 75 % des Gesamtsystems frei verfügbar. Dieses hat die Rechenmöglichkeit der Bremer Projekte erheblich eingeschränkt, wie auch die Verbrauchszahlen zeigen. Gegenüber einem mittleren prozentualen Anteil von etwa 6 % im Zeitraum Januar bis Juni, betrug der mittlere prozentuale Anteil im Zeitraum Juli bis September nur 1,8 %.

## 4. Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

### 3. BremHLR-Workshop *Einführung in die Programmierung mit MPI und OpenMP*

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 28. Januar – 1. Februar 2008

**Ort:** Jacobs University Bremen, CLAMV TeachingLab

**Beschreibung:** In dem Workshop wurden die Grundlagen der parallelen Programmierung vermittelt. Der Schwerpunkt liegt auf den Programmiermodellen MPI und OpenMP. Praktische Übungen bildeten einen wesentlichen Teil des Workshops.

**Referenten:** Dr.-Ing. Wolfgang W. Baumann und Dr. Hinnerk Stüben (beide Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, ZIB)

**Teilnehmerzahl:** 30

**Teilnehmende Institutionen:** AWI, JUB, UB (IUP, ZARM, ZeTeM), Max-Planck-Institut für marine Mikrobiologie Bremen

### HLRN-II Intel/SGI Anwenderworkshop

**Veranstalter:** HLRN, Zuse-Institut Berlin

**Datum:** 6. – 9. Mai 2008

**Ort:** Zuse-Institut für Informationstechnik Berlin (ZIB)

**Beschreibung:** In dem Workshop wurde das neue HLRN-II System von Vertretern der Firmen SGI und Intel vorgestellt. Behandelt wurden die Hardware des Systems, ebenso wie die Programmierumgebung.

**Teilnehmerzahl:** 34

### 14. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, Zuse-Institut Berlin

**Datum:** 6. – 9. Mai 2008

**Ort:** Zuse-Institut für Informationstechnik Berlin (ZIB)

**Teilnehmerzahl:** 20

**Teilnehmende Institutionen:** BremHLR (AWI, ZARM), GWDG Göttingen, IO Warnemünde, RRZN Uni Hannover, RZ Uni Hamburg, RZ TU Clausthal, RZ Humboldt-Uni Berlin, RZ TU Hamburg-Harburg, RZ Uni Kiel, RZ Uni Rostock, ZIB,

## Feierliche Einweihung Hochleistungsrechnersystem HLRN-II

**Veranstalter:** HLRN, Zuse-Institut Berlin

**Datum:** 3. Juli 2008

**Ort:** Zuse-Institut für Informationstechnik Berlin (ZIB)

## HLRN-II Informationsveranstaltung

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 17. Oktober 2008

**Ort:** Universität Bremen

**Beschreibung:** Die Veranstaltung diente dazu, Bremer Nutzern das neue System HLRN-II vorzustellen. Außerdem wurde die Tätigkeit des BremHLR vorgestellt.

**Teilnehmerzahl:** 21

**Teilnehmende Institutionen:** HS Bremerhaven, SfbW, AWI, Uni Bremen, DKFI, IPS GmbH

## 15. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, Technische Universität Hamburg-Harburg

**Datum:** 27./28. November 2008

**Ort:** Technische Universität Hamburg-Harburg

**Teilnehmerzahl:** 19

**Teilnehmende Institutionen:** BremHLR (AWI, ZARM), FU Berlin, IO Warnemünde, RRZN Uni Hannover, TU Berlin, RZ Uni Hamburg, RZ TU Hamburg-Harburg, RZ Uni Kiel, ZIB

## 5. Informationen zur Infrastruktur: Der neue Supercomputer am HLRN

Am 3. Juli 2008 wurde die erste Phase des neuen HLRN-II Rechensystems mit einer Festveranstaltung am Zuse-Institut für Informationstechnik Berlin eingeweiht und am 10. Juli das System am Regionalen Rechenzentrum Niedersachsen in Hannover feierlich übergeben. Das System wird von der Firma Silicon Graphics Inc. (SGI) geliefert. Die erste Ausbaustufe besteht an jedem der HLRN-Standorte Berlin und Hannover aus einem Cluster SGI Altix ICE und einem Cluster SGI Altix XE 1200. Der ICE-Cluster besteht jeweils aus 320 Rechenknoten. Jeder dieser Knoten ist mit zwei Quad-Core Prozessoren vom Typ Intel Xeon Harpertown bestückt und verfügt über 16 GByte Hauptspeicher. Der XE-Cluster besteht jeweils aus 44 Rechenknoten, die mit den gleichen Prozessoren ausgestattet sind wie die Knoten des ICE-Systems. Allerdings sind die Knoten des XE-Clusters für speicherintensive Anwendungen ausgelegt und verfügen deshalb über je 64 GByte Hauptspeicher. Die Knoten der Cluster sind jeweils mit zwei Infiniband-Netzwerken vernetzt. Ein Netzwerk dient hierbei für die Kommunikation in parallelen Programmen, während über das zweite Netzwerk der etwa 425 TByte große Festplatten-Speicher angeschlossen ist.

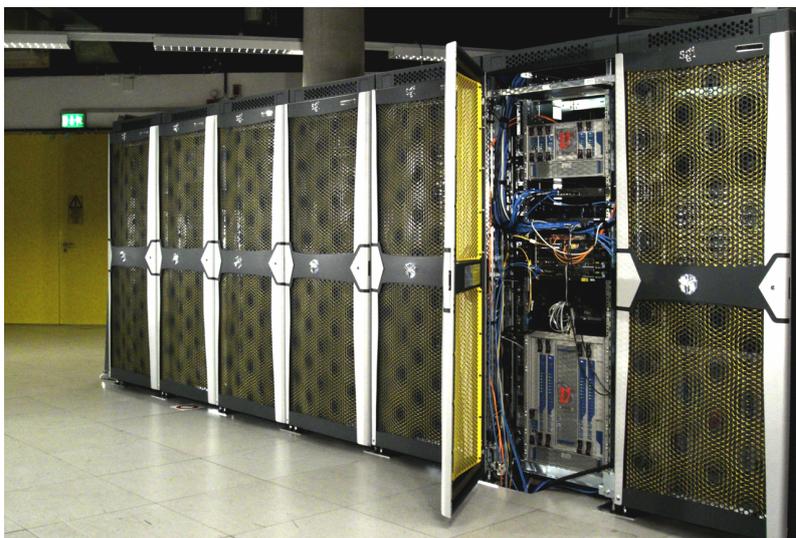


Abbildung 5.1.: Rechnerschränke des SGI Altix ICE Systems am ZIB.

Das derzeitige System hat mit einer maximalen Rechenleistung von 30.72 TFlop/s pro ICE-Cluster und 4.2 TFlop/s pro XE-Cluster in etwa die 7-fache Durchsatzleistung des im Oktober 2008 abgeschalteten HLRN-I Systems. In der Top500-Liste der weltweit schnellsten Höchstleistungsrechner sind die beiden ICE-Teilsysteme in Ber-



lin und Hannover getrennt vertreten. In der Liste von Juni 2008, haben die beiden Systeme die Plätzen 71 und 72 erreicht, wobei die Summe der Rechenleistung in etwa mit dem Rechnersystem auf Platz 31 vergleichbar war.

Die nächsten Ausbaustufen des Systems sind für das Ende des ersten Quartals 2009 und das Jahresende 2009 geplant. Im Endausbau soll das System eine maximale Rechenleistung von 312 TFlop/s erreichen und damit die Rechenleistung des HLRN-I Systems um den Faktor 60 übersteigen.

## 6. Projektberichte<sup>1</sup>

### 6.1. hbk00005: Auswertung von geophysikalischen Parametern mit dem Satelliteninstrument SCIAMACHY

HLRN-Projektkenung:	hbk00005
NIC-Projektkenung:	hbb10
Laufzeit:	III/03–II/09
Projektleiter:	Prof. Dr. J.P. Burrows
Projektbearbeiter:	Dr. Marco Vountas Wolfhardt Lotz Alexei Rozanov
Institut/Einrichtung:	Institut für Umweltphysik, Physik und Chemie der Atmosphäre, Universität Bremen

#### Ziele

Das Instrument, SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY), tastet weltraumgestützt die Erdatmosphäre global erstmals abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie ab. Als Limb-Geometrie bezeichnet man diejenige Perspektive des Sensors, die schräg auf den Rand der Atmosphäre blickt. Im Falle von SCIAMACHY beginnt ein sogenannter „Limb-State“ bei etwa 3 km Höhe und tastet nacheinander bei Abständen von ebenfalls 3 km 34 Höhenschichten der Erdatmosphäre ab. Man spricht daher auch von „Randabtaugungsmessungen“. Die Messungen in Nadir-Geometrie sind diejenigen in denen der Sensor direkt nach Unten misst. Diese technische Besonderheit der abwechselnden Limb-Nadirmessungen wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhenauflösung und Verteilung verschiedener Spurengase zu bestimmen (auch in der Troposphäre), welche für eine ganze Reihe wissenschaftlicher Fragestellungen von besonderer Bedeutung ist. Insbesondere die Erfassung und Überwachung troposphärischer Ozon, Brommonoxid- und Stickstoffdioxid-Konzentrationen eröffnet neue Möglichkeiten im Bereich des Umweltmonitorings. Die Datenprodukte dienen der flächendeckenden und dauerhaften Überwachung von industriellen Emissionen und der Biomassenverbrennung. Die Auswertung von Spurengasen in Limb-Geometrie ist bei der angestrebten Genauigkeit überaus rechenzeitintensiv. Die resultierenden Spurengasverteilungen liefern einen entscheidenden Beitrag zur globalen Erfassung der Erdatmosphäre und sind in die-

---

<sup>1</sup>Für den Inhalt der Projektberichte sind ausschließlich die genannten Projektleiter bzw. die Projektbearbeiter verantwortlich.

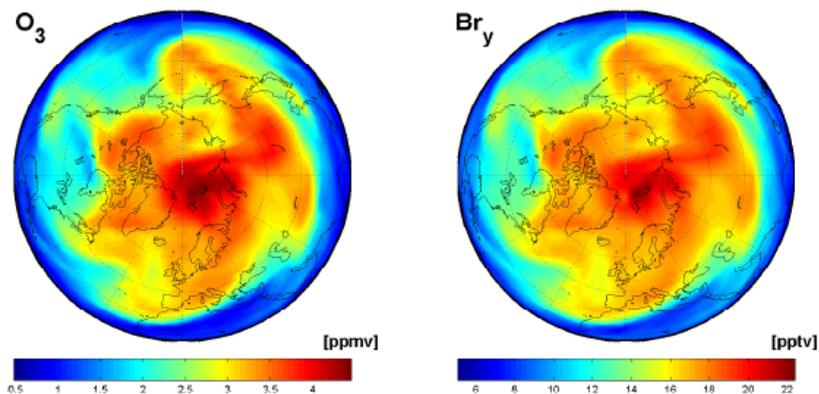


Fig. 10. Example of BASCOE  $O_3$  and  $Br_\gamma$  volume mixing ratios in the northern hemisphere at a potential temperature of  $475^\circ K$  ( $\sim 60$  mb), for the 1st March 2004 at 00:00 UT. Blue denotes relatively low volume mixing ratios; red denotes relatively high mixing ratios.

ser Güte bisher nicht systematisch erstellt worden. Für ausgesuchte atmosphärische Parameter wird eine Abdeckung angestrebt, die sowohl räumlich wie auch zeitlich so lückenlos wie möglich ist. Die Datenlage im Fall von SCIAMACHY läßt eine globale Abdeckung innerhalb von etwa sechs Tagen zu.

## Ergebnisse

Wie im vorangegangenen Berichtszeitraum dient die beim HLRN abgenommene Rechenleistung der langfristigen Erstellung von globalen Spurengaskarten und Profilen und schließt die Lücke in der Verfügbarkeit von höherrangigen SCIAMACHY-Datenprodukten. Ferner dient sie nach wie vor der Validation der operationellen Level 2-Produkte und der Abwicklung von Drittmittelprojekten. Die maßgebliche Beteiligung der Arbeitsgruppe an der „Quality Working Group“ für SCIAMACHY führte im Berichtszeitraum zu spezifischen Berechnungen, die insbesondere der Qualitätskontrolle offizieller Agenturprodukte dienen.

Neben der projektspezifischen Berechnung von Daten diente die Rechenleistung auch der wissenschaftlichen Gemeinde, die auf diese Weise mit (den zur Zeit einzigen) systematisch berechneten Profildaten versorgt wird.

Eine weiterer wichtiger Schritt ist die Einbeziehung von Wolkenparametern. Die Spurengasauswertung ist dringend auf die Einbeziehung der Höhe der Wolkenoberkante, geometrischer Ausdehnung und Wolkenbedeckungsgrad angewiesen. Die Bestimmung dieser Parameter ist ebenfalls sehr rechenzeitintensiv. Dem Projekt liegt eine Datenbasis für die Wolkenparameter vor- die Einbindung ist vollständig abgeschlossen und funktionstüchtig. Ergebnisse sind in Kürze zu erwarten (s. Abschnitt Ausblick).

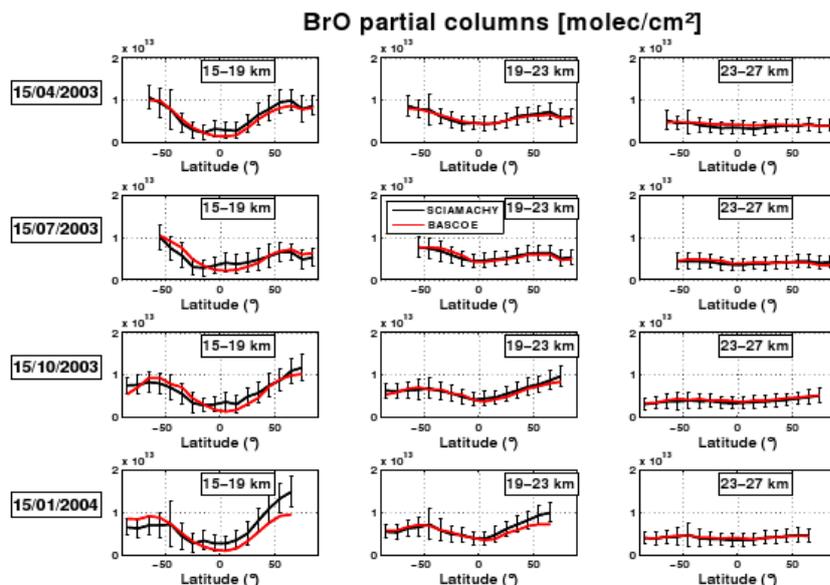


Fig. 7. Zonal means of BrO partial columns (ZA lower than 85°), for three altitude ranges (left plots: 15 to 19 km, centre plots: 19 to 23 km, right plots: 23 to 27 km) calculated from SCIAMACHY limb profiles and BASCOE modelled profiles for the 15th of April, July, October (2003) and January (2004). Black lines: SCIAMACHY limb observations; red lines: BASCOE analysis.

## Ausblick

Im Rahmen des EU-Projektes „Stratospheric Ozone: Halogen Impacts in a Varying Atmosphere (SHIVA)“ sollen in 2009 BrO Daten aus SCIAMACHY Messungen abgeleitet und analysiert werden, wobei insbesondere der mögliche Einfluss von hohen Wolken auf die BrO Auswertung im Bereich der tropischen Tropopausenregion untersucht werden soll. Es sollen aus den SCIAMACHY BrO Messungen dann längerfristige Trends sowie die Variabilität auf saisonaler und inter-annualer Zeitskala näher bestimmt werden. Diese Daten sollen helfen, existierende Unsicherheiten bezüglich des Beitrages kurzlebiger Bromverbindungen auf die Ozonchemie in einem sich ändernden Klima zu reduzieren.

## Publikationen

Die folgenden Veröffentlichungen sind im Rahmen der Kontingente an HLRN und NIC 2007/2008 entstanden:

F. Hendrick, A. Rozanov, P. V. Johnston, H. Bovensmann, M. De Mazière, C. Fayt, C. Hermans, K. Kreher, W. Lotz, B.-M. Sinnhuber, N. Theys, A. Thomas, J. P. Burrows, and M. Van Roozendaal (2008) – Multi-year comparison of stratospheric BrO vertical profiles retrieved from SCIAMACHY limb and ground-based UV-visible measurements, *Atmos. Meas. Tech. Discuss.*, 1, 451-480, 2008

**N. Theys, M. Van Roozendael, Q. Errera, F. Hendrick, F. Daerden, S. Chabrillat, M. Dorf, K. Pfeilsticker, A. Rozanov, W. Lotz, J. P. Burrows, J.-C. Lambert, F. Goutail, H. K. Roscoe, and M. De Mazière (2008)** – A global stratospheric bromine monoxide climatology based on the BASCOE chemical transport model, *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 8, 17581-17629, 2008.

**A. Doicu, S. Hilgers, A. von Bargaen, A. Rozanov, K.-U. Eichmann, C. von Savigny and J.P. Burrows (2007)** – Information operator approach and iterative regularization methods for atmospheric remote sensing, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 103(2), 340-350, 2007.

Im Rahmen der HIBISCUS Studie (HIBISCUS – investigating the impact of tropical convection on the stratosphere) wurde folgender Bericht angefertigt, der u.a. auf den am HLRN und NIC gerechneten Daten basiert:

**N. Montoux, A. Hauchecorne, J.-P. Pommereau, F. Lefèvre, G. Durry, R. L. Jones, A. Rozanov, S. Dhomse, J. P. Burrows, B. Morel and H. Bencherif** – “Evaluation of balloon and satellite water vapour measurements in the Southern tropical and subtropical UTLS during the HIBISCUS campaign”

## Veranstaltungen

Begutachtung des BremHLR durch die DFG an der das IUP mit 2 Personen teilgenommen hat:

- Veranstaltung am 11.12.2007

Eine INFO-Veranstaltung wurde vom BremHLR angeboten an dem das IUP mit zwei Personen teilgenommen hat:

- INFO-Veranstaltung am 17.10.2008

## 6.2. Paläoklimamodellierung an der Universität Bremen (Fachbereich Geowissenschaften)

### Einführung

Die Arbeitsgruppe „Geosystem-Modellierung“ am Fachbereich Geowissenschaften geleitet durch Prof. Dr. Michael Schulz führt mehrere Großprojekte am HLRN aus dem Bereich der Paläoklimamodellierung durch. Allen Projekten gemein ist die Benutzung des komplexen Klimamodells CCSM3 (Community Climate System Model, Version 3). Das Modell wurde größtenteils am NCAR (National Center for Atmospheric Research) in Boulder (Colorado) entwickelt, Teilkomponenten stammen aber auch von anderen Instituten. Es besteht aus dem spektralen Atmosphärenzirkulationsmodell CAM3, dem Landmodell CLM3, dem Finite-Differenzen-Ozeanmodell POP und dem dynamischen Meereismodell CSIM5 (elastisch-viskos-plastische Meereis-Rheologie). Energie- und Stoffflüsse zwischen den Modellkomponenten werden über ein Koppplermodul vermittelt. In der am HLRN verwendeten Version besitzt das Atmosphärenmodell eine Auflösung von ca.  $3.75^\circ$  mit 26 Schichten in vertikaler Richtung. Das Ozeanmodell hat eine horizontale Auflösung zwischen  $0,9^\circ$  und  $3,6^\circ$  mit 25 Schichten in vertikaler Richtung. CCSM ist ein „state-of-the-art“ Klimamodell, das u.a. auch für Zukunftsszenarien im letzten Sachstandsbericht des Weltklimarates (IPCC) verwendet wurde. Der enorme Rechenbedarf dieses komplexen numerischen Modells verlangt die Verwendung eines Höchstleistungsrechners. Die Modellkomponenten sind unter Verwendung von MPI (Message Passing Interface) und OpenMP für parallele Anwendungen konzipiert. Der Programmcode des Klimamodells CCSM3 ist weitgehend in Fortran90 formuliert.

Im Berichtszeitraum 2008 ist ein Großprojekt ausgelaufen („Modellierung känozoischer Klimazustände“), während vier neue Projekte gestartet wurden. Im Folgenden werden Ergebnisse und Perspektiven der Projekte kurz dargestellt.

#### 6.2.1. hbk00012: Modellierung känozoischer Klimazustände

HLRN-Projektkenung:	hbk00012
Laufzeit:	I/04–II/08
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	Dr. Matthias Prange Dr. Ute Merkel
Institut/Einrichtung:	Exzellenzcluster / DFG-Forschungszentrum „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen
Status:	Abgeschlossen am 30.6.2008

Das Verständnis von Klimaschwankungen in der Erdgeschichte kann wertvolle Hinweise auf Ursachen- und Wirkungsketten kurz- und langfristiger Klimawechsel liefern. Im Rahmen DFG-finanzierter Vorhaben wurden hierzu paläoklimatische Fragestellungen mit Hilfe des Klimamodells CCSM untersucht. In Teilprojekt 1 wurden dabei

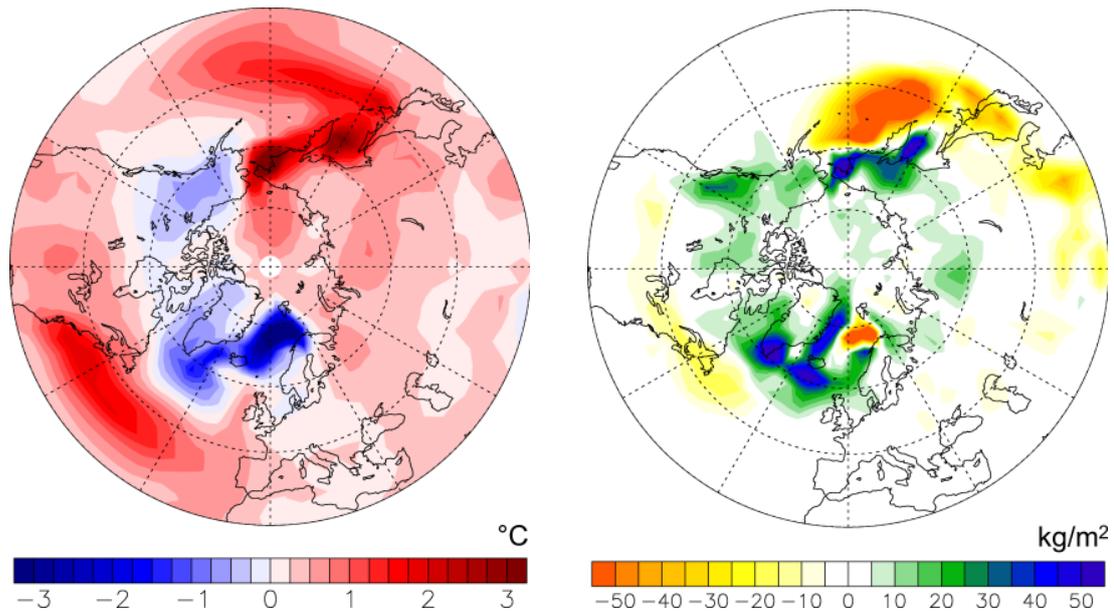


Abbildung 6.1.: Effekt der Schließung der zentralamerikanischen Landbrücke vor ca. 3 Millionen Jahren auf Oberflächentemperatur (**links**) und Schneefallrate (**rechts**) in hohen nördlichen Breiten. Gezeigt ist die Differenz der Jahresmitteltemperaturen bzw. des jährlichen Schneefalls zwischen dem Klimagleichgewichtszustand mit geschlossener Landbrücke und dem Klimagleichgewichtszustand mit offenem zentralamerikanischen Seeweg. Durch die Abkühlung und den erhöhten Schneefall über Kanada, Alaska und Grönland wurde der Aufbau bzw. das Anwachsen nordhemisphärischer Eisschilde vor ca. 3 Millionen Jahren begünstigt. Die Modellergebnisse untermauern erstmals eine häufig genannte Hypothese, nach der die Schließung des tropischen Seeweges das polare und subpolare Klima derart beeinflusste, dass das Einsetzen von Eiszeitzyklen im Pliozän begünstigt wurde.

Simulationen hinsichtlich tektonisch bedingter Klimaänderungen während des Miozäns (23 bis 5,3 Millionen Jahre vor heute) und Pliozäns (5,3 bis 1,8 Millionen Jahre vor heute) durchgeführt. Teilprojekt 2 befasste sich mit abrupten Klimaschwankungen (Dansgaard-Oeschger-/Heinrich-Ereignisse) während des Spätquartärs (hauptsächlich der Zeitraum 11.500-59.000 Jahre vor heute). Das Klimamodell musste mit entsprechenden Randbedingungen für die gewählten Zeitscheiben aufgesetzt werden. Hierzu mussten Änderungen in der atmosphärischen Zusammensetzung (z.B. Treibhausgase), des Meeresspiegels, der Eisschildverteilung sowie der Erdorbitalparameter berücksichtigt werden. Für die Plio-/Miozän-Simulationen mussten ferner paläogeografische und topografische Randbedingungen (z.B. verringerte Gebirgshöhen, offene Meeresstraßen) modifiziert werden. Die Klimasimulationen haben zahlreiche neue Erkenntnisse geliefert, u.a. zum Einfluss von tektonischen Meeresstraßenschließungen auf die globa-

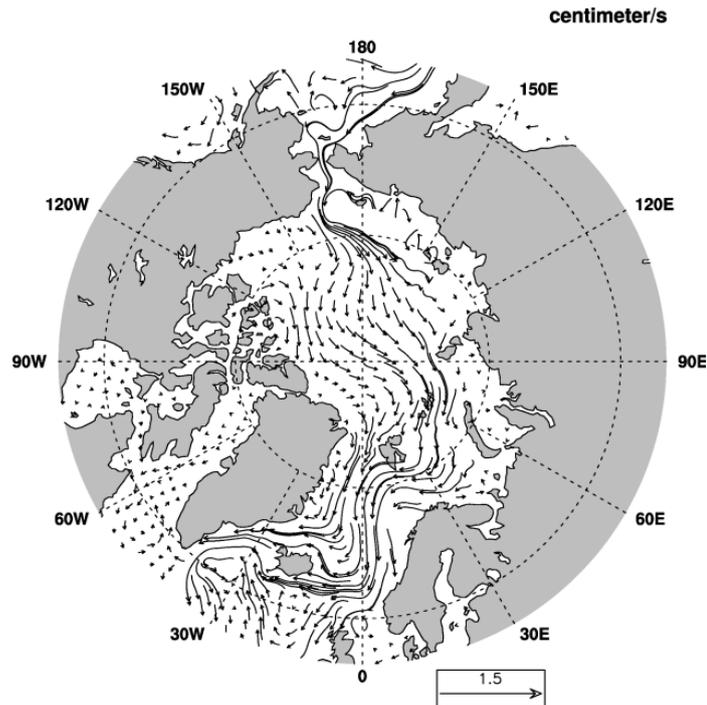


Abbildung 6.2.: Verstärkung der Oberflächenmeeresströmungen durch die Bering-, Fram- und Dänemark-Straßen („Arktischer Durchstrom“) infolge der Schließung des zentralamerikanischen Seeweges im Pliozän. Die Modellergebnisse liefern eine Erklärung für das aus marinen Sedimentkerndaten geschlossene Einsetzen eines verstärkten Ostgrönlandstroms vor ca. 3 Millionen Jahren. Die Verstärkung des Ostgrönlandstroms führte zu einer thermischen Isolation Grönlands vom relativ warmen Nordatlantik (vgl. Abb. 6.1), die das Wachsen des grönländischen Eisschildes begünstigte.

le Ozeanzirkulation und den Aufbau von polaren Eisschilden, zur Veränderlichkeit von globalen Telekonnektionsmustern (z.B. im Zusammenhang mit El Niño) während des Spätquartärs sowie zum Einfluss glazialer Randbedingungen auf die Bildung globaler Wassermassen im subarktischen und subantarktischen Ozean. Insbesondere wurde

- ein neuer Mechanismus entdeckt, der die Bildung der zentralamerikanischen Landbrücke vor ca. 3 Millionen Jahren (zuvor waren Nord- und Südamerika durch eine Meeresstraße voneinander getrennt) mit einer Abkühlung in Alaska und Kanada in Zusammenhang bringt, was erstmals den Aufbau von nordamerikanischen Eisschilden im Pliozän und somit das Einsetzen von Eiszeitzyklen begünstigte (Abb. 6.1),
- eine Erklärung dafür gefunden, wie die Bildung der zentralamerikanischen Landbrücke zu einer Verstärkung des Ostgrönlandstroms führte, die in einer thermi-

schen Isolierung Grönlands resultierte und somit das Wachstum des grönländischen Eisschildes förderte (Abb. 6.2),

- ein neuer Mechanismus entdeckt, der die Schließung der zentralamerikanischen Landbrücke mit einem Wachstum des antarktischen Eisschildes in Zusammenhang bringt,
- eine Erklärung für globale Veränderungen der Silikatakkumulation in Meeresedimenten während des mittleren Miozäns infolge einer flacher gewordenen zentralamerikanischen Meeresstraße gefunden,
- ein Mechanismus gefunden, der wiederkehrende jahrtausendlange Megadürren in der Sahelzone während des Spätquartärs erklärt (Abb. 6.3),
- ein Mechanismus entdeckt, der die in benthischen Foraminiferen gefundenen Änderungen in der Ausbreitungstiefe von Antarktischem Zwischenwasser zwischen Eiszeiten und Zwischeneiszeiten erklärt,
- neue Einsichten in den Zusammenhang zwischen El Niño und globalen Klimaänderungen im Spätquartär gewonnen (Abb. 6.4),
- die Bedeutung spätquartärer glazialer Randbedingungen für eine Verstärkung des indischen Monsunsystems gezeigt,
- jahreszeitliche Veränderungen planktonischer Foraminiferenpopulationen während des Letzten Glazialen Maximums untersucht, welche von besonderer Bedeutung für die Interpretation paläozeanographischer Rekonstruktionen sind.

Einige Ergebnisse wurden bereits in internationalen Fachzeitschriften publiziert bzw. sind zur Publikation eingereicht:

Mulitza, S., **M. Prange**, J.-B. Stuut, M. Zabel, T. von Dobeneck, A. C. Itambi, J. Nizou, M. Schulz, and G. Wefer, 2008: Sahel megadroughts triggered by glacial slowdowns of Atlantic meridional overturning. *Paleoceanography*, 23, PA4206, doi:10.1029/2008PA001637.

**Prange, M.**, 2008: The low-resolution CCSM2 revisited: new adjustments and a present-day control run. *Ocean Science*, 4, 151-181.

Fraile, I., **M. Schulz**, S. Mulitza, **U. Merkel**, **M. Prange**, and A. Paul: Modeling the seasonal distribution of planktonic foraminifera during the Last Glacial Maximum. *Paleoceanography*, im Druck.

**Merkel, U.**, **M. Prange**, and **M. Schulz**: ENSO variability and teleconnections during glacial climates. *Quaternary Science Reviews*, eingereicht.

Sarnthein, M., **M. Prange**, A. Schmittner, B. Schneider, and M. Weinelt: Mid-Pliocene shifts in ocean overturning circulation and the onset of Quaternary-style climates. *Climate of the Past*, eingereicht (veröffentlicht in *Clim. Past Discussions*).

**Prange, M.**, P. Langebroek, A. Paul, and **M. Schulz**: A possible role of the Panamanian gateway closure in Pliocene Antarctic ice-sheet development. *Paleoceanography*, eingereicht.

Timmermann, A., L. Menviel, Y. Okumura, A. Schilla, **U. Merkel**, O. Timm, A. Hu, B. Otto-Bliesner, and **Schulz, M.**: The bipolar seesaw revisited. *Quaternary Science Reviews*, eingereicht.

Beiträge zu Newslettern:

Stuut, J.-B., S. Mulitza, and **M. Prange**, 2008: Challenges to understanding past and future climate in Africa. *Eos Transactions AGU*, 89(21), 196.

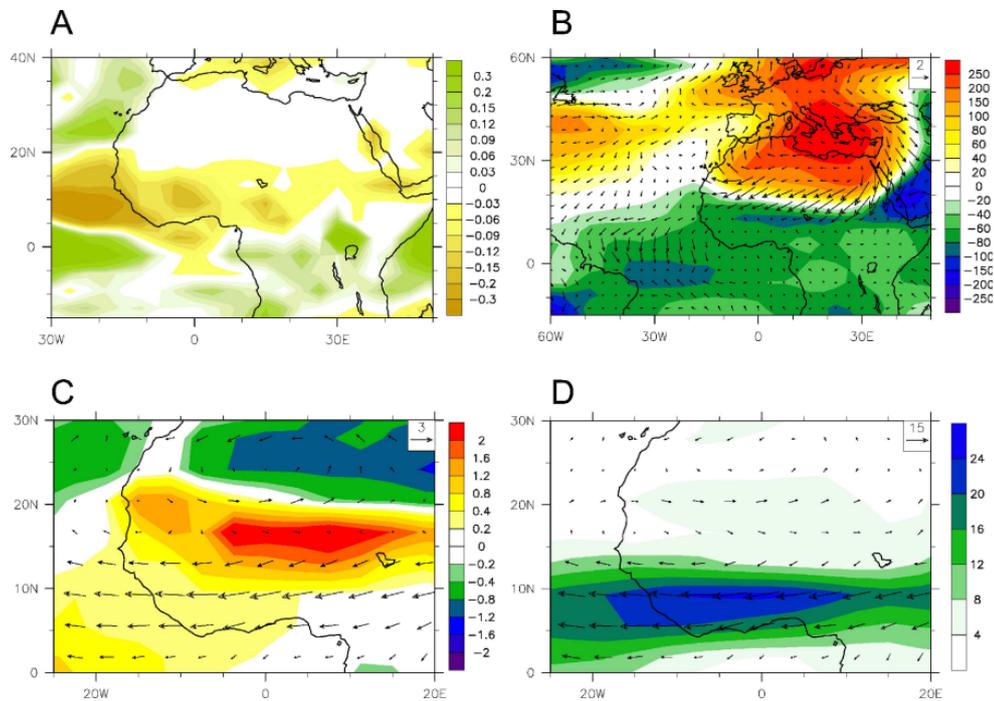


Abbildung 6.3.: Effekt einer 80%-igen Abschwächung der thermohalinen Zirkulation auf das Klima Westafrikas. Gezeigt sind Differenzen zwischen dem Klimazustand mit schwacher Tiefenwasserbildung und dem Kontrolllauf mit starker Tiefenwasserbildung (jeweils 100-Jahre-Mittel). (A) Jährlicher Nettoniederschlag (d.h. Regen minus Verdunstung; m/a); (B) sommerlicher (Juli-September) Luftdruck auf Meeresspiegelhöhe (Pa) und oberflächennahe Winde (m/s); (C) sommerliche Oberflächentemperatur ( $^{\circ}\text{C}$ ) und Winde auf der 700-hPa-Fläche (m/s); (D) sommerlicher Feuchtetransport auf der 700-hPa-Fläche (Konturen geben den Betrag der Feuchtetransporte an;  $\text{g}/\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}$ ). Anhand paläozeanografischer Daten konnte ein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Stärke der thermohalinen Zirkulation und langanhaltenden (ca. 1000 Jahre) Dürren in der Sahel-Region während der letzten 60.000 Jahre nachgewiesen werden. Dieser Zusammenhang wird durch die CCSM-Simulationen bestätigt und kann nun hydrodynamisch detailliert erklärt werden.

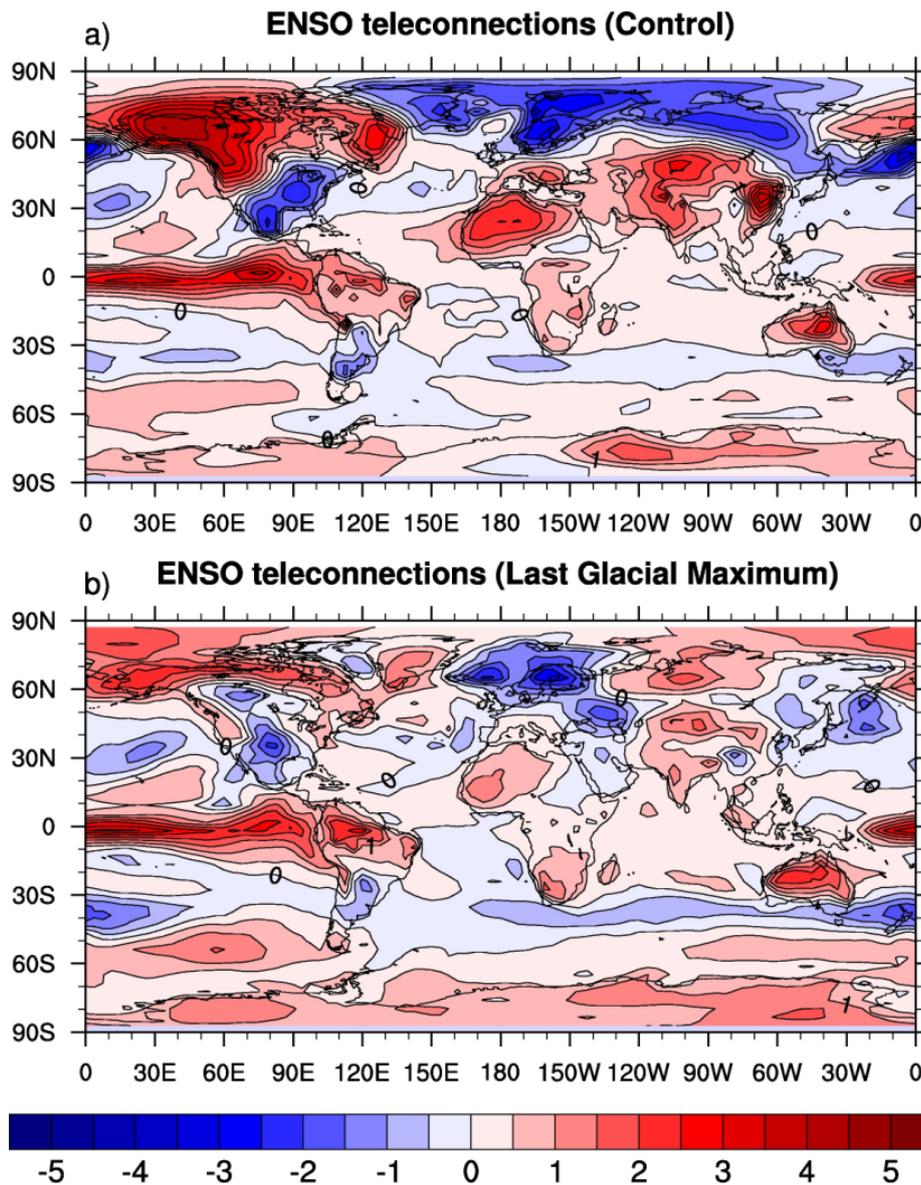


Abbildung 6.4.: Globale Veränderungen der Oberflächentemperatur (in °C) im Zusammenhang mit dem tropischen El-Niño-Southern-Oscillation-Phänomen hängen stark vom Klimazustand ab. (a) Im Kontrolllauf mit vorindustriellen Randbedingungen wird eine ausgeprägte Erwärmung über Nordamerika während El Niño simuliert. (b) Unter glazialen Randbedingungen ist die Fernwirkung deutlich abgeschwächt und weist sogar Regionen mit einer Vorzeichenumkehr der Anomalien auf.

### 6.2.2. hbk00007: Solarinduzierte Klimavariabilität im Holozän

HLRN-Projektkenung: hbk00007  
Laufzeit: III/08–II/09  
Projektleiter: Prof. Dr. M. Schulz  
Projektbearbeiter: Dr. Matthias Prange  
Vidya Varma  
Institut/Einrichtung: Fachbereich Geowissenschaften, Univ. Bremen

Um den gegenwärtigen anthropogenen Klimawandel und dessen Auswirkungen auf die Umwelt besser bewerten zu können, ist es notwendig die natürliche Variabilität des Klimasystems zu kennen und zu verstehen. Der Untersuchung der gegenwärtigen Zwischeneiszeit (des Holozäns, d.h. der letzten 10.000 Jahre) kommt hierbei eine ganz besondere Rolle zu, denn die Schwankungsbreite des Klimas in diesem Zeitraum liefert Hinweise darauf, inwieweit der Mensch bereits in die natürliche Klimaentwicklung eingegriffen hat.

Natürliche Klimavariabilität hat verschiedene Ursachen. Einerseits erzeugt das Klima als komplexes, nichtlineares dynamisches System eine interne Variabilität; andererseits führen aber auch Änderungen in den Antriebsparametern zu Klimaveränderungen. Von besonderer Bedeutung sind hierbei Änderungen in der solaren Einstrahlung. Solche Änderungen haben zwei Ursachen: (i) Änderungen in den Erdbitalparametern (d.h. Exzentrizität des Orbits sowie Schiefe und Präzession der Erdachse) und (ii) Variationen der solaren Aktivität. Während die Erdbitalparameter den Klimaantrieb auf Zeitskalen von 10.000 Jahren und länger bestimmen (sog. Milankovic-Zyklen) sind Variationen der solaren Aktivität auf Zeitskalen der Größenordnung 10-1000 Jahre relevant. In diesem von der DFG im Rahmen des Schwerpunktprogramms „INTERDYNAMIK“ bewilligten Projekts soll die solarinduzierte Klimavariabilität des Holozäns mit Hilfe des komplexen Klimamodells CCSM3 untersucht werden. Hierbei sollen sowohl Änderungen in den Erdbitalparametern als auch Änderungen in der solaren Aktivität berücksichtigt werden. Neben Sensitivitätsstudien sollen Simulationen für das gesamte Holozän durchgeführt werden.

Ein besonderes Augenmerk bei der Auswertung der Modellergebnisse soll auf Veränderungen im südhemisphärischen Westwindgürtel gelegt werden. Dieses Windsystem (zwischen ca. 30°-70°S) bestimmt nicht nur großräumig die Verteilung von Niederschlag in mittleren südhemisphärischen Breiten, sondern ist auch für großflächiges Ekman-Pumpen südlich des Antarktischen Zirkumpolarstroms verantwortlich. Somit kann der Westwindgürtel einen erheblichen Einfluss auf die globale Ozeanzirkulation und den Kohlenstoffkreislauf ausüben. Daten aus marinen Sedimentkernen, die vor der südchilenischen Küste gewonnen wurden, zeigen einen langfristigen Trend mit wärmerem, trockenerem Klima in Chile während des mittleren Holozäns (ca. 6000 Jahre vor heute) im Vergleich zu heute. Es wird vermutet, dass dieser Trend auf eine orbital gesteuerte Verlagerung des Westwindgürtels nach Süden zurückzuführen ist. Zudem zeigen die chilenischen Paläodaten dem langfristigen Trend überlagerte Schwankungen auf der Jahrhundert-Zeitskala. Variationen der solaren Aktivität

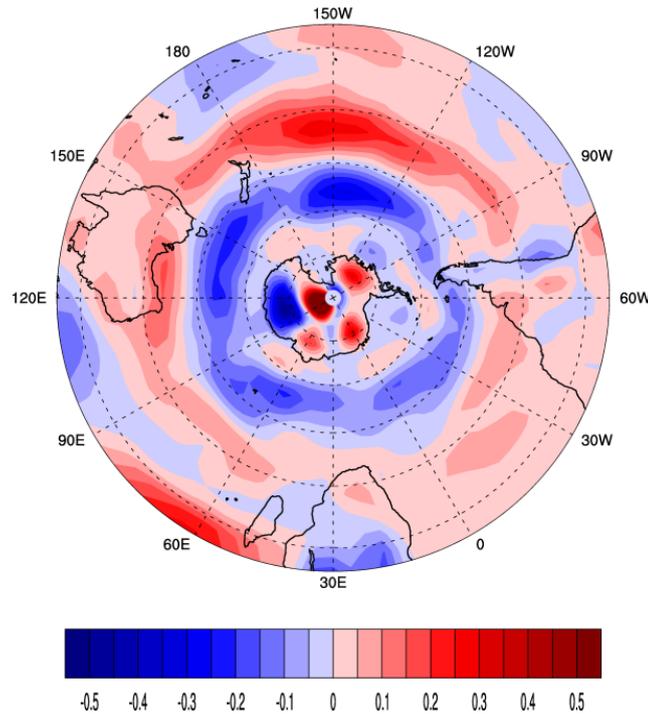


Abbildung 6.5.: Änderung der zonalen (d.h. von West nach Ost) Windgeschwindigkeit (m/s) nahe der Oberfläche in der Südhemisphäre infolge einer Abnahme der solaren Einstrahlung um  $2 \text{ W/m}^2$ . In Übereinstimmung mit Sedimentkerndaten wird eine Verstärkung der Westwinde im nördlichen Teil des Westwindgürtels (ca.  $30\text{-}45^\circ\text{S}$ ) und eine Abschwächung der Winde im südlichen Teil des Gürtels (ca.  $45^\circ\text{-}60^\circ\text{S}$ ) simuliert. Das Klimamodell erlaubt eine detaillierte Analyse der physikalischen Prozesse, die den Westwindgürtel beeinflussen.

könnten hierfür verantwortlich sein. Zum Testen dieser Hypothesen soll unser Modellansatz dienen. Selbstverständlich wird sich die Auswertung der Modellergebnisse nicht auf den südhemisphärischen Westwindgürtel beschränken. Aufgrund einer engen Kooperation mit Paläoklimatologen vom Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung sowie vom Geoforschungszentrum Potsdam, die im Rahmen des Projekts neue Sediment-Daten aus Chile auswerten, liegt hier jedoch ein Schwerpunkt bei der Modellanalyse.

Erste Sensitivitätsstudien mit CCSM3 zum Einfluss der solaren Aktivität bestätigen bereits die Hypothese zum solaren Einfluss auf den Westwindgürtel (Abb. 6.5). In diesen Experimenten wurde die „Solarkonstante“ (d.h. der Gesamtenergiefluss solarer Strahlung auf die Erde) reduziert. Im Einklang mit Paläodaten zeigt sich dabei eine Verstärkung der Westwinde im nördlichen Teil des Gürtels (ca.  $30\text{-}45^\circ\text{S}$ ) und eine Abschwächung der Winde im südlichen Teil (ca.  $45^\circ\text{-}60^\circ\text{S}$ ).

### 6.2.3. hbk00008: Klimamodellierung quartärer Interglaziale

HLRN-Projektkenung: hbk00008  
Laufzeit: III/08–II/09  
Projektleiter: Prof. Dr. M. Schulz  
Projektbearbeiter: Dr. Matthias Prange  
Rima Rachmayani  
Institut/Einrichtung: Fachbereich Geowissenschaften, Univ. Bremen

Quartäre Zwischeneiszeiten sind gekennzeichnet durch variierende Amplituden und unterschiedliche Muster von Änderungen in Klima, Vegetation und atmosphärischer Kohlendioxid-Konzentration. In diesem von der DFG im Rahmen des Schwerpunktprogramms „INTERDYNAMIK“ bewilligten Projekts steht der Vergleich von Klima- und Vegetationsdynamik zwischen verschiedenen Interglazialen im Mittelpunkt. Hierzu sollen Zeitscheibensimulationen für das Holozän, das letzte Interglazial (126.000-115.000 Jahre vor heute), das Marine Isotopenstadium (MIS) 11 (ca. 425.000-395.000 Jahre vor heute) sowie das MIS 15 (ca. 620.000-610.000 Jahre vor heute) mit CCSM3 (inkl. dynamischer Vegetationskomponente) durchgeführt werden. Es soll untersucht werden, in welchem Umfang Unterschiede zwischen verschiedenen Interglazialen durch Änderungen in den Erdorbitalparametern (Exzentrizität des Orbits sowie Schiefe und Präzession der Erdachse) erklärt werden können. Die Rolle von Rückkoppelungsmechanismen, die mit der terrestrischen Biosphäre zusammenhängen, soll dabei besonders untersucht werden. Schließlich soll das Klimamodell Aussagen darüber treffen, wie sich der terrestrische Kohlenstoffspeicher in Interglazialen ändert und in welchem Ausmaß Änderungen der atmosphärischen Kohlendioxid-Konzentration hierdurch erklärt werden können.

Die Auswertung der Modellergebnisse schließt detaillierte Modell-Modell- und Modell-Daten-Vergleiche ein. Hierzu findet im Projekt eine enge Kooperation mit Dr. V. Brovkin (MPI Hamburg), Prof. Dr. H. Fischer (Univ. Bern), Dr. P. Tarasov (FU Berlin) und Dr. A. Ganopolski (PIK Potsdam) statt.

Von wesentlicher Bedeutung für eine erfolgreiche Simulation früherer Interglaziale ist die Koppelung verschiedener Klimasystemkomponenten einschließlich einer dynamischen Vegetationskomponente. Es ist beispielsweise weitgehend akzeptiert, dass biogeophysikalische Rückkoppelungsmechanismen maßgeblich die Entwicklung von Monsun-Systemen beeinflussen können. Ebenso erfordert die Simulation von Verlagerungen der nördlichen Baumgrenze (und dem damit verbundenen „Taiga-Tundra-Feedback“) im Verlauf von Interglazialen ein dynamisches Vegetationsmodul. Obwohl die Landkomponente von CCSM3 grundsätzlich ein dynamisches Vegetationsmodell enthält, hat sich herausgestellt, dass dieses zu wenig Waldflächen produziert, Grasflächen überschätzt und insgesamt eine viel zu geringe Primärproduktion simuliert. Grund hierfür sind Mängel in der hydrologischen Komponente des Landmodells (zu geringe Transpirationsraten, dafür zu hohe Evaporationsraten). Um die Simulation der Biogeografie zu verbessern, haben wir Änderungen in das Landmodell implementiert. Konkret handelt es sich hierbei um eine Verbesserung der Parameterisierung

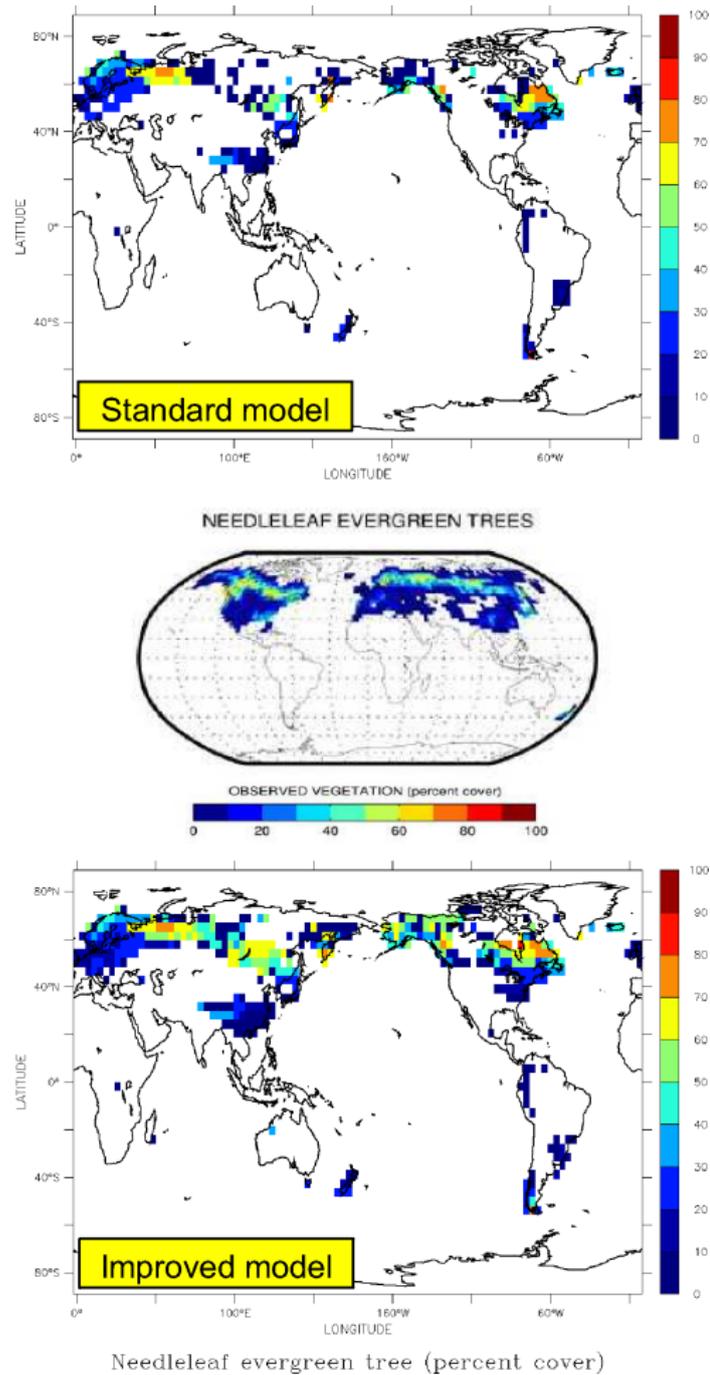


Abbildung 6.6.: Globale Nadelbaumbedeckung (in %) simuliert mit dem Standardmodell (**oben**), aus Beobachtungen (**Mitte**) und simuliert mit dem verbesserten Modell (**unten**). Während das Standardmodell die Bedeckung signifikant unterschätzt, liefert die Modellverbesserung eine Simulation mit geschlossenem zirkum-arktischen Baumgürtel (Taiga).

von Bodenevaporation sowie eine Verbesserung der Berechnung von aufgefangenem Regenwasser durch die Baumkronen. Es hat sich gezeigt, dass die Modellverbesserungen insgesamt zu einer deutlichen Verringerung der Bodenevaporation zugunsten der Transpiration führen und infolgedessen eine deutlich größere Waldbedeckung simuliert wird (Abb. 6.6), die nun eine gute Übereinstimmung mit Beobachtungsdaten zeigt. Die simulierte globale Bruttoprimärproduktion beträgt in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Gruppen 120 Gt Kohlenstoff pro Jahr. Die Verbesserungen der Landhydrologie wurden in die gekoppelte Version des CCSM3 implementiert.

#### **6.2.4. hbk00013: Atmosphärischer Aerosoltransport im glazialen Klima - Numerische Untersuchungen mit einem gekoppelten Klimamodell**

HLRN-Projektkenung: hbk00013  
Laufzeit: III/08–II/09  
Projektleiter: Prof. Dr. M. Schulz  
Projektbearbeiter: Dr. Ute Merkel  
Institut/Einrichtung: Exzellenzcluster / DFG-Forschungszentrum „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen

Im Kontext des anthropogenen Klimawandels wird als zentraler Aspekt die Empfindlichkeit des Klimasystems gegenüber Störungen, z.B. Veränderungen der Treibhausgaskonzentrationen, diskutiert. Diese Klimasensitivität kann vom jeweiligen Ausgangsklima abhängen und wird unter anderem vom atmosphärischen Gehalt an Schwebeteilchen (Aerosolen) mitbestimmt, da Aerosole den atmosphärischen Strahlungshaushalt sowohl im solaren als auch im terrestrischen Spektralbereich verändern. Genauere Aufschlüsse zur Klimarelevanz von Aerosolen erhofft man sich vom Blick in die Vergangenheit. Meersalz- und Mineralstaub-Aufzeichnungen in polaren Eisbohrkernen sowie marinen Sedimenten weisen erhebliche Schwankungen zwischen Kalt- und Warmzeiten auf. Als Ursache für derartige Schwankungen sind sowohl Änderungen beim Eintrag von Aerosolen (Meersalz, Staub) in die Atmosphäre (Quellstärke) als auch Änderungen im Transport, in der Lebensdauer und der Deposition von Aerosolen zu betrachten. Bisher konnten jedoch nicht alle Evidenzen aus geologischen Archiven hinreichend erklärt werden. Neueste Rekonstruktionen der Aerosoldeposition zeigen sogar eine Kovariabilität zwischen polaren und tropischen Breiten während der letzten 500.000 Jahre. Dies legt eine enge dynamische Verknüpfung auf globaler Skala nahe und macht es erforderlich, diese Variationen in einen Kontext mit großskaligen Klimaänderungen im Ozean-Atmosphäre-Land-System zu stellen.

Die im Rahmen dieses Projekts geplanten CCSM3-Simulationen sollen klären, wie spätquartäre Klimafuktuationen auf Zeitskalen von Jahrhunderten bis zu Jahrtausenden (Dansgaard-Oeschger- und Heinrich-Ereignisse) den atmosphärischen Transport von Mineralstaub und Meersalz während des letzten Glazials beeinflussten und wie die verschiedenen Aerosoltypen auf klimatische Veränderungen reagieren und darauf zu-

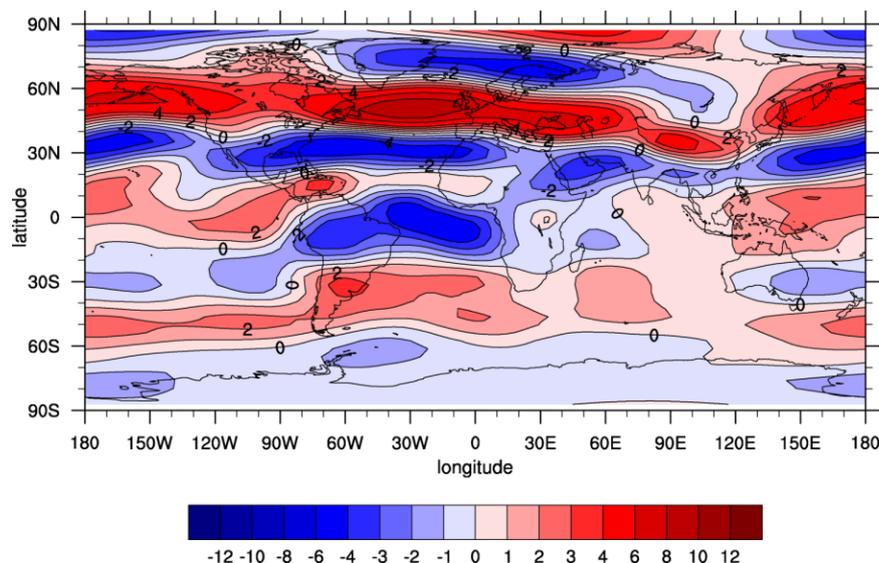


Abbildung 6.7.: Änderungen im zonalen Windfeld in ca. 12 km Höhe. Gezeigt sind Änderungen aus einer CCSM3-Simulation für das letzte Glazial (35.000 Jahre vor heute) gegenüber dem Letzten Glazialen Maximum (21.000 Jahre vor heute). Die Verstärkung der Westwinde z.B. in mittleren Breiten der Nordhemisphäre (40°N-60°N) resultieren als Antwort auf die glazialen Randbedingungen, u.a. auf die Höhe der kontinentalen Eismassen, welche 35.000 Jahre vor heute nur etwa halb so hoch waren wie 21.000 Jahre vor heute. Solch großskalige Änderungen der atmosphärischen Dynamik legen auch Implikationen für eiszeitliche Aerosoltransporte nahe. Einheiten: m/s.

rückwirken. Hierfür wird im Rahmen des Projektes zusätzlich eine Aerosoltransport-Komponente in das CCSM3 eingebaut, um im Zusammenspiel mit den anderen Modellkomponenten Quellen, Transporte und Ablagerung der Aerosole zu berücksichtigen. Hierzu sind in Kooperation mit Prof. Dr. Natalie Mahowald (Cornell University, Ithaca, USA) Modifikationen am CCSM3-Atmosphärenmodell vorzunehmen. Hinsichtlich der Auswertung der Aerosoldeposition in polaren Regionen basierend auf Eisbohrkerndaten findet eine enge Zusammenarbeit mit Prof. Dr. H. Fischer (Universität Bern) statt.

Als Ausgangsbasis können die CCSM3-Simulationen des Spätquartärs dienen, welche im Rahmen unseres 2008 abgeschlossenen HLRN-Großprojektes „Modellierung känozoischer Klimazustände“ durchgeführt wurden. Diese Simulationen legen beispielsweise eine signifikante Änderung der großskaligen atmosphärischen Windfelder im Zuge glazialer Klimarandbedingungen nahe (Abb. 6.7), woraus sich Implikationen für den globalen Aerosoltransport ergeben. Mit einem Fokus auf die Zeit 35.000 Jahre vor heute wird anhand der geplanten neuen Gleichgewichtssimulationen ein detaillierter Vergleich mit unseren existierenden spätquartären Simulationen ohne Aerosolkomponente möglich sein. Ferner runden idealisierte Experimente, in denen zur Imitation

von Stadialen und Interstadialen ein Schmelzwassereintrag in den Nordatlantik vorgeschrieben wird, unser Simulationsvorhaben zum glazialen Aerosoltransport ab.

Das Projekt ist Teil des Exzellenzclusters / DFG-Forschungszentrums MARUM - „Der Ozean im System Erde“.

#### 6.2.5. hbk00017: Tektonisch induzierte Klimaänderungen im Miozän

HLRN-Projektkenung: hbk00017  
Laufzeit: III/08–II/09  
Projektleiter: Prof. Dr. M. Schulz  
Projektbearbeiter: Dr. Matthias Prange  
Institut/Einrichtung: Exzellenzcluster / DFG-Forschungszentrum „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen

Während es allgemein akzeptiert ist, dass in der Kreidezeit (145 bis 65 Millionen Jahre vor heute) sowohl der Nord- als auch der Südpol weitgehend eisfrei waren, ist die anschließende Entwicklung des Erdklimas im Laufe des Känozoikums (die letzten 65 Millionen Jahre) aktueller Gegenstand der Debatte in der Paläoklimaforschung. Entscheidende und nachhaltige Klimaänderungen fanden insbesondere im Miozän (23 bis 5,3 Millionen Jahre vor heute) statt. Vor etwa 14 Millionen Jahren dehnte sich die Eiskappe der Antarktis sprunghaft bis an die Küsten des Kontinents aus. Fast gleichzeitig scheint sich die permanente Meereisdecke im Nordpolarmeer gebildet zu haben. In niedrigen Breiten ist das Miozän durch eine drastische Verstärkung asiatischer Monsun-Systeme gekennzeichnet. Als wahrscheinliche Ursache für die massiven Änderungen im Klimasystem gelten tektonisch induzierte Prozesse. Die Hebung des Himalaya und des Tibetischen Plateaus und der damit verbundene Klimawandel werden häufig als klassisches Beispiel für die Verbindung von Tektonik und Klima genannt. So haben frühere Modellstudien gezeigt, dass die Hebung des Tibetischen Plateaus nicht nur einen erheblichen regionalen Einfluss auf das indische Monsun-System hatte, sondern auch mit globalen Telekonnektionen verbunden war. Die Hebung des Gebirges führte demnach im Nordpazifik zur Intensivierung des subtropischen Hochs und des Aleutentiefs. Auch wurde eine Erwärmung der nordatlantischen Region infolge der Himalaya-Hebung simuliert. Die genaue Hebungsgeschichte ist allerdings noch immer Gegenstand aktueller Forschung. Vieles deutet jedoch darauf hin, dass zwischen 24 und 17 Millionen Jahren vor heute (frühes Miozän) eine Phase starken Anstiegs in der Himalaya-Region stattfand.

Neben Gebirgshebungsprozessen gelten Öffnungen und Schließungen von Ozeanpassagen als weitere wichtige tektonische Prozesse, die einen nachhaltigen Einfluss auf das Klimasystem ausübten. So existierten im frühen Miozän direkte Verbindungen zwischen Pazifik und Atlantik (Panama-Passage) sowie zwischen Atlantik und Indik (Tethys-Seeweg). Paläozeanografische Befunde deuten auf eine besondere Rolle der Schließung des Tethys-Seeweges für die großräumige Ozeanzirkulation und die Klimaentwicklung des Miozäns hin. So wird vermutet, dass die Bildung einer warmen, salzigen Zwischen- bzw. Tiefenwassermasse in der östlichen Tethys und dem

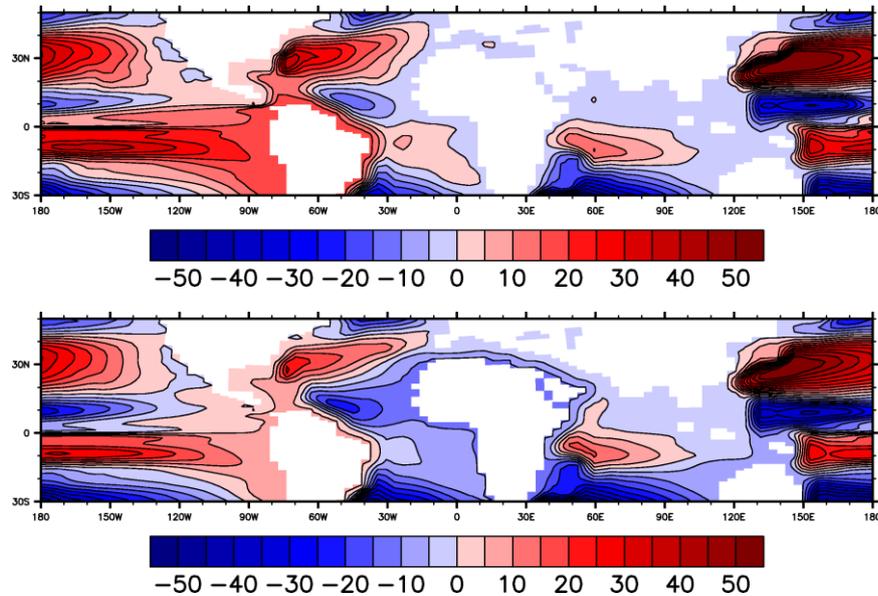


Abbildung 6.8.: Barotrope Stromfunktion (in  $10^6 \text{ m}^3/\text{s}$ ) der Ozeanzirkulation bei pliozäner (**oben**) und miozäner (**unten**) Paläogeografie. Die barotrope Stromfunktion gibt den vertikal integrierten Gesamttransport zwischen zwei Punkten an, d.h. der Volumenfluss zwischen zwei Isolinien beträgt hier jeweils  $5 \cdot 10^6 \text{ m}^3/\text{s}$  (positive Werte bedeuten dabei Zirkulation im Uhrzeigersinn). Deutlich ist zu erkennen, wie die nach Westen gerichtete Strömung durch die Tethys-Passage (direkte Verbindung zwischen Indik und Atlantik) auch die Transporte durch die zentralamerikanische Passage sowie den Indonesischen Archipel beeinflusst.

angrenzenden nördlichen Indik die globale thermohaline Zirkulation des frühen und mittleren Miozäns bis vor ca. 14 Millionen Jahren wesentlich beeinflusst haben könnte.

Ein weiterer wichtiger Punkt in der Debatte um die känozoische Entwicklung des Klimasystems betrifft die Rolle von atmosphärischem Kohlendioxid. Während einige Rekonstruktionen Kohlendioxid-Konzentrationen von unter 0,03% für das mittlere und frühe Miozän vorschlagen, deuten neuere Befunde auf weitaus höhere Werte (über 0,05% für das mittlere Miozän) hin. Im Rahmen dieses HLRN-Projekts soll der Einfluss tektonischer Prozesse und atmosphärischer Kohlendioxid-Änderungen auf die miozäne Klimadynamik mit Hilfe des gekoppelten Klimamodells CCSM3 systematisch untersucht werden. Hierzu werden miozäne Randbedingungen in das Klimamodell implementiert (Abb. 6.8). Durch den Vergleich verschiedener Sensitivitätsexperimente soll festgestellt werden, wie stark der relative Einfluss von Ozeanpassagen, Gebirgshebungen und Änderungen im atmosphärischen Kohlendioxid-Gehalt ist. Somit stellt dieses Projekt eine Erweiterung und Vertiefung bestimmter Teilaspekte des abgelaufenen Projekts „Modellierung känozoischer Klimazustände“ dar.

### 6.3. hbk00015: Towards a Global Ocean Modelling System based on the Finite Element Method

HLRN-Projektkenung: hbk00015  
Laufzeit: IV/04–I/09  
Projektleiter: Prof. Dr. D. Olbers  
Projektbearbeiter: Dr. Ralph Timmermann  
Dr. Tijana Janjic Pfander  
Institut/Einrichtung: Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung

#### Overview

During the year 2008, the work in this project focused on the assimilation of remote sensing data into a configuration of FEOM for the North Atlantic. The motivation for this stems from the fact that the orbiting of the JASON and TOPEX-POSEIDON (T/P) satellites in parallel during the TANDEM mission allowed for calculation of surface velocities from the sea surface height (SSH) data (Stammer and Dieterich 1999; Leeuwenburgh and Stammer 2002; Stammer and Theiss 2004). We assimilate such derived surface velocity data along their virtual tracks into the Finite Element Ocean Model (FEOM) of North Atlantic developed at the Alfred-Wegener Institut (AWI). This model uses continuous linear representation for the horizontal velocity, surface elevation, temperature and salinity, and solves the standard set of hydrostatic ocean dynamic primitive equations (Wang et al 2008). Assimilation is done using the Singular Evolutive Interpolated Kalman (SEIK) Filter (Pham 2001). For comparison, assimilation of only the altimetry data from the TANDEM mission is also performed. We investigate assimilation results depending on whether the observed field or its gradient is assimilated.

#### Introduction

##### Data

During the Tandem mission, two satellites, Jason and T/P, were orbiting the Earth following parallel tracks approximately  $1.4^\circ$  apart in longitude. Orbiting of the two satellites in parallel during the mission allowed for the calculation of surface geostrophic velocity from the SSH data. The computed surface geostrophic velocity data were provided to us together with the SSH anomaly data by the Zentrum für Marine und Atmosphärische Wissenschaften, University of Hamburg. Fig. 6.9 shows an example of the data available for assimilation.

##### Assimilation method

For the assimilation we used the sequential evolutive interpolated Kalman filter (SEIK) introduced by (Pham et al. 1998, Pham 2001) as provided by the data assi-

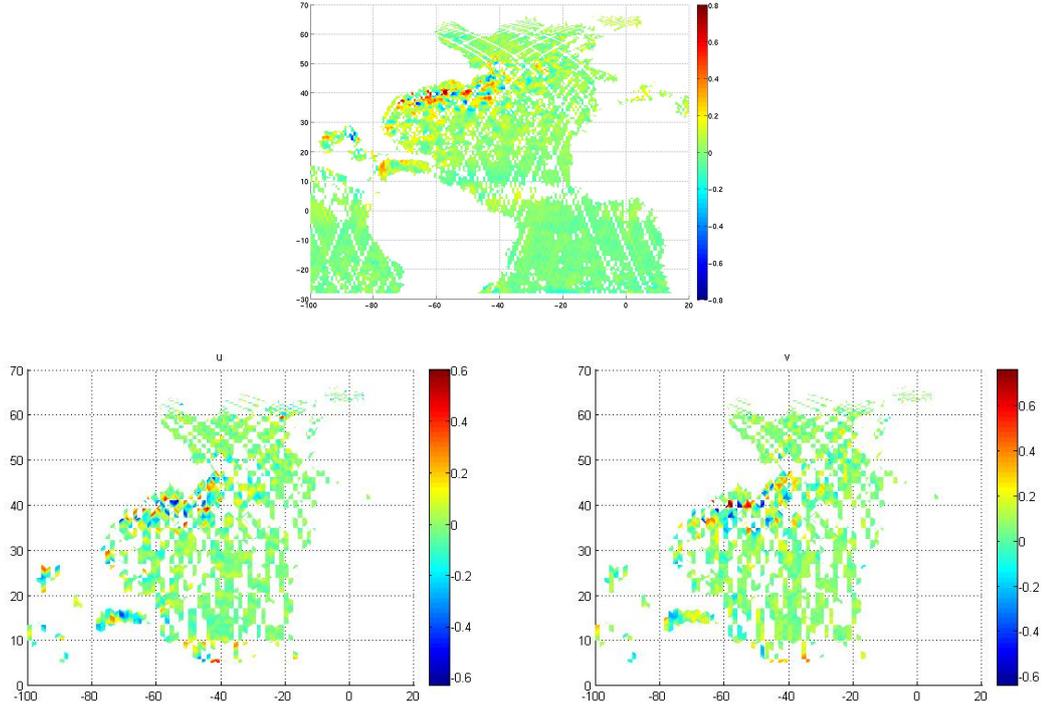


Abbildung 6.9.: Cycle 370 from Tandem mission: SSH anomaly data (top), zonal velocity (bottom left) and meridional velocity (bottom right).

milation framework PDAF (Nerger et al. 2005) at AWI. The SEIK filter has been used in a number of studies, e.g. (Hoteit et al. 2002, Nerger et al. 2006). In our study, the implementation is made with the newly developed finite element ocean model (Wang et al. 2008) in the North Atlantic and with Tandem data as described below. In the SEIK algorithm, the forecast field is computed as an average over the ensemble members, and the forecast error covariance matrix is obtained as the corresponding covariance matrix from the ensemble. Since the forecast error covariance matrix has a rank that depends on the number of ensemble members, it is represented in the algorithm in its reduced form. This allows that the analysis covariance matrix  $\mathbf{P}_k^a$  be calculated in its reduced form, too. The calculated analysis error covariance  $\mathbf{P}_k^a$  is then used to obtain the analysis using formulas:

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_k^a &= \mathbf{w}_k^f + \mathbf{K}_k(\mathbf{w}_k^o - \mathbf{H}_k \mathbf{w}_k^f), \\ \mathbf{K}_k &= \mathbf{P}_k^{a,SEIK} \mathbf{H}_k^T \mathbf{R}_k^{-1}.\end{aligned}\quad (6.1)$$

Here,  $\mathbf{w}_k^f$ ,  $\mathbf{w}_k^a$  respectively denote forecast and analysis of ocean state vector consisting of temperature, salinity, SSH and velocity fields at time  $t_k$  at all grid points;  $\mathbf{w}_k^o$  denote observational vector that contains sea surface height data or surface velocity data; in our case  $\mathbf{H}_k$  interpolates from the model grid to the observation location. The matrix

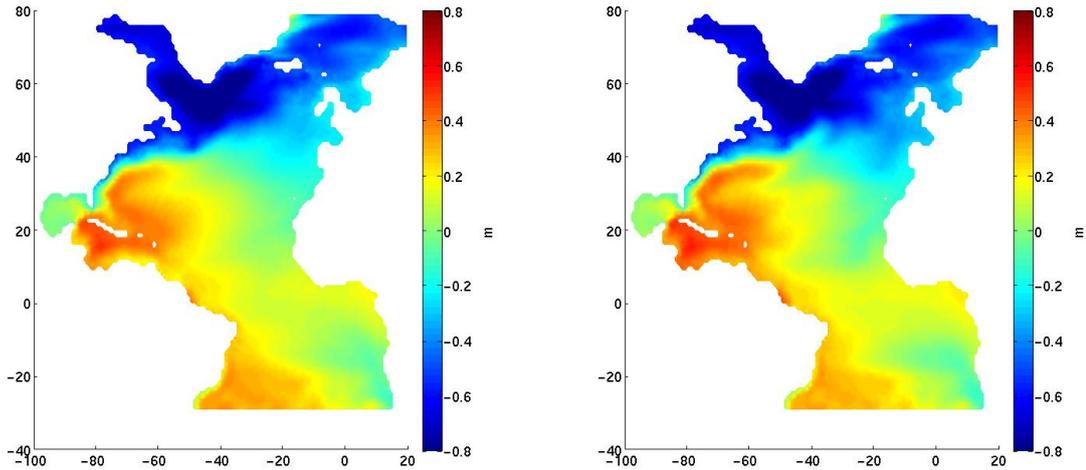


Abbildung 6.10.: Sea surface height field after 6 months of assimilation of SSH data (left) and surface velocity data (right).

$\mathbf{R}_k$  is the observation error covariance matrix that is diagonal. Once the analysis is completed, the second-order accurate sampling technique is used for generation of new ensemble members that have the mean and covariance equal to  $\mathbf{w}_k^a$  and  $\mathbf{P}_k^a$ . This analysis ensemble is propagated with the full nonlinear model to the next assimilation time step.

## Results

So far, assimilation has been performed using regular  $1^\circ$  finite element ocean model of the North Atlantic. The model uses continuous linear representation for the horizontal velocity, surface elevation, temperature and salinity, and solves the standard set of hydrostatic ocean dynamic primitive equations (Wang et al. 2008). The model has open boundaries. Assimilation results shown in Fig. 6.10 were obtained using the global SEIK algorithm with forgetting factor of 0.8, 16 ensemble members, and assimilation step of every 10 days. In Fig. 6.10, sea surface height field after 6 months is shown as obtained by the assimilation of the sea surface height (left) and the surface velocity (right). The sea surface height and the sea surface velocity data are assimilated along the tracks corresponding to the TANDEM mission.

Experiments will be repeated with the Finite Element Ocean model (FEOM) that has the resolution of  $1/6^\circ$  in the Caribbean Region, Gulf of Mexico and Gulf Stream Region, and where the resolution decreases smoothly to  $1^\circ$  towards the rest of the ocean. The mesh for the Finite Element Ocean Model in the North Atlantic was constructed in such a way that crossover points of satellite tracks are computational nodes in the focus area of the Gulf Stream. The mesh consists of 55415 surface nodes and 30 layers. In order to represent all the processes as realistically as possible, the model has open boundaries and is driven by daily wind fields, surface heat and

fresh water fluxes from the NCEP reanalysis. The temperature and salinity at the surface are relaxed to the seasonal Levitus climatological values every month. The sea surface height and the sea surface velocity data are assimilated along the tracks of the TANDEM mission.

## References

Hoteit, I., D. T. Pham, and J. Blum. A simplified reduced order Kalman filtering and application to altimetric data assimilation in Tropical Pacific. *J. Mar. Syst.*, 36:101–127, 2002.

Nerger, L., S. Danilov, W. Hiller, and J. Schröter. Using sea level data to constrain a finite-element primitive-equation ocean model with a local SEIK filter. *Ocean Dynamics*, 56:634–649, 2006

Nerger, L., W. Hiller, and J. Schröter. PDAF - the Parallel Data Assimilation Framework: Experiences with Kalman filtering. In W. Zwiefelhofer and G. Mozdzyński, editors, *Use of High Performance Computing in Meteorology - Proceedings of the 11. ECMWF Workshop*, pages 63–83. World Scientific, 2005.

Pham, D. T. Stochastic methods for sequential data assimilation in strongly nonlinear systems. *Mon. Wea. Rev.*, 129:1194–1207, 2001.

Pham, D. T., J. Verron, and L. Gourdeau. Singular evolutive Kalman filters for data assimilation in oceanography. *C. R. Acad. Sci., Ser. II*, 326(4):255–260, 1998.

Wang, Q., S. Danilov, and J. Schröter. Finite element ocean circulation model based on triangular prismatic elements with application in studying the effect of topography representation. *J. Geophys. Res.*, 113:5015, 2008.

## 6.4. hbk00016: High Resolution Modelling of Particle Fluxes in the Northwest African Upwelling Region

HLRN-Projektkenung: hbk00016  
Laufzeit: I/05–I/09  
Projektleiter: Dr. G. Karakas  
Projektbearbeiter: Dr. G. Karakas  
Prof. Dr. R. Schlitzer  
Institut/Einrichtung: Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung  
and DFG-Research Center MARUM

### Overview

Particle fluxes from the ocean's surface layers to its bottom are important means of carbon export and therefore have a crucial role in the global regulation of atmospheric CO<sub>2</sub>. A great extent of particles sinking into deep layers does so in the form of aggregates, which are produced by the coagulation of smaller particles. Coagulation does not only enhance the removal of material from euphotic zone, but it can also control the maximum phytoplankton concentration in the ocean. Among eastern boundary upwelling systems the NW African Upwelling retain elevated concentrations of aggregates due to high biological productivity, is distinguished by their enhanced export and belongs to the most productive ecosystems of the world's ocean. The system has a complex flow dynamics associated with alongshore Canary Current, eddies, squirts and filaments extending off shore, which affect the regional nutrient and carbon budgets and modifies the high productivity in the coastal transition zone through turbulent mixing processes between nutrient rich coastal and poor offshore waters.

As part of a project, funded by the DFG Research Center, The Ocean in the Earth System at the Bremen University, we conducted numerical experiments for the last four years to investigate particle transport patterns and their downward fluxes. Our project at HLRN runs out by the end of March 2009. During this time the fate of the particles from different origins has been examined under variable atmospheric forcing mechanisms and compared with observations such as satellite imagery, vertical camera profiles or sediment trap recordings.

### Model configurations

In this report we present results from our final two model configurations that were run on the HLRN. In the first configuration the Regional Ocean Modeling System (ROMS) which was coupled to a biogeochemical model was applied to study deep water fluxes and their seasonal variation in the Cape Blanc region. The biogeochemical model was a classical, nitrogen based, NPZD type, which was developed and defined in detail by Gruber et al. (2006). The model comprises seven compartments; nitrate,

ammonium, phytoplankton, zooplankton, small and large detritus, and a dynamic phytoplankton chlorophyll to carbon ratio. Apart from zooplankton, all particulate compartments sink, which is modelled explicitly. Small particles are represented by slow settling small detritus pool. Small detritus and phytoplankton coagulate to form large detritus, which sink faster. Coagulation is parameterised according to a particle density function based on the assumption that coagulation is proportional to particle concentration. Parameter values of the biogeochemical model are given in Gruber et al. (2006). These values remained unchanged in our configuration apart from the remineralisation rates of small and large detritus, specific coagulation rate between small detritus and phytoplankton, and large detritus sinking velocity. While remineralisation rates for small and large particles were set to  $0.18 \text{ d}^{-1}$  and  $0.06 \text{ d}^{-1}$  respectively, particle coagulation rate was specified as  $0.07 \text{ d}^{-1} (\text{mmol m}^{-3})^{-1}$ . By looking into the delay between chlorophyll maxima at the surface and the corresponding sedimentation peaks in the trap, Helmke et al. (2005) calculated a mean downward particle flux velocity of  $75 \text{ m d}^{-1}$  at this site. We therefore set the sinking velocity of large particles to  $75 \text{ m d}^{-1}$  in the model setup. Due to the seasonal variation we increased sinking velocity by a factor of 2 below the euphotic layer in summer.

In the second configuration we improved the biogeochemical model by implementing an aggregation-disaggregation model. In order to implement the aggregation model we removed large detritus compartment from the original model, which is described above and defined a new compartment representing aggregate number. The aggregation processes and aggregate sinking are based on a continuous size spectrum of aggregates. Not only detritus but also phytoplankton coagulates to produce aggregates. The total number of particles is treated as a separate state variable, which allows dynamical representation of average particle size and sinking rate. We parameterised disaggregation by defining a disaggregation rate which is dependent on the number of aggregates and on the sinking velocity. Aggregation equations due to turbulent shear and differential settlement are solved over the entire range of size spectra.

## Most significant results from the biogeochemical model

The seasonal variation of surface biomass is successfully mimicked in the deep water organic carbon fluxes. Figure 6.11 illustrates modelled fluxes against those recorded by the sediment trap at station CB in 3606 m depth. One has to take into consideration that temporal variability and amount of particles sinking into ocean's floor at a particular station can only be reproduced by capturing filaments and patchiness of the flow field in the right time scales, which transport the biogeochemical properties. We believe that although slightly underrated in winter 2003, the general pattern and carbon mass are notably well calculated by the model. It is also worth mentioning that even though particles of different origin sink in different seasons, setting seasonal sinking velocity makes prediction of deep water fluxes possible, despite the fact that the model has one phytoplankton compartment. During the period from May 2002

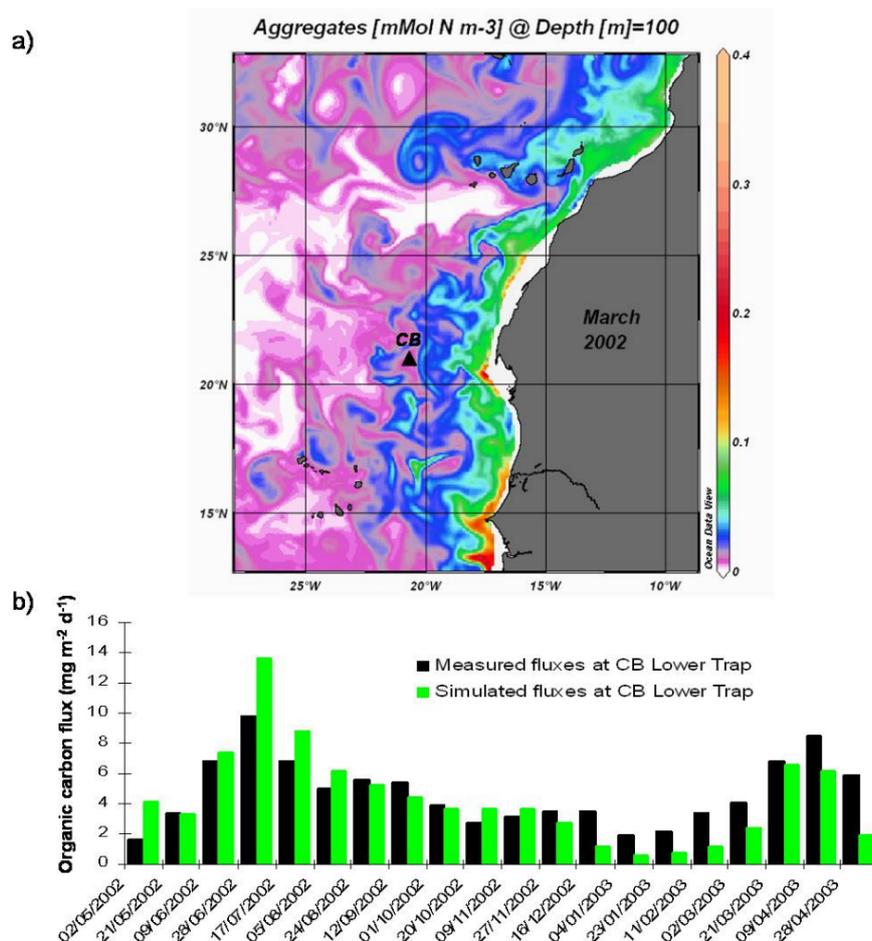


Abbildung 6.11.: a) A snapshot of aggregated particles at 100m depth indicates the significance of flow dynamics on the particle distribution pattern, b) Seasonally varying particle sinking rates prescribed in the biogeochemical model successfully simulates seasonal variation of organic carbon fluxes at the mesotrophic sediment trap site CB over one year of deployment ( $r^2 = 0.67$ ).

until April 2003, our model calculations give a total organic carbon flux of 292 Gg down to the 3000 m depth contour line off the NW African upwelling region between 5°N and 35°N.

## Most significant results from the biogeochemical-aggregation model

Various model experiments were carried out by applying an aggregation model into the phytoplankton and detritus compartments of a biogeochemical model. The simulations covered maximum aggregate sizes ranging between 0.4 and 5 mm. Both porous

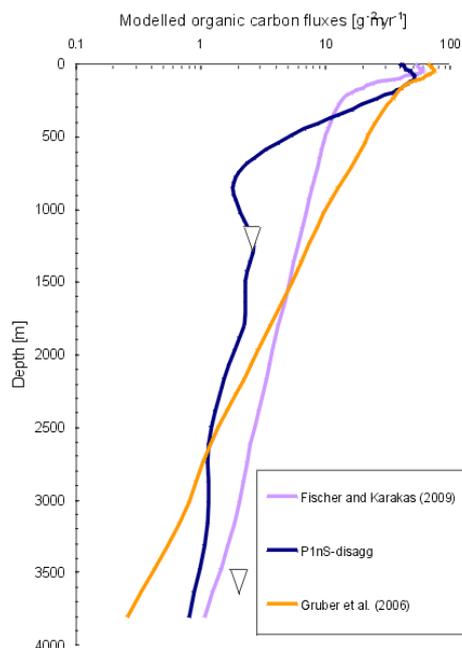


Abbildung 6.12.: Flux curves from the biogeochemical model of Gruber et al. (2006) and Fischer and Karakas (2009) along with the aggregation model are shown against the recorded flux values for the traps (inverse triangles), which are located at 1228 m and 3606 m depths, between May 2002 and April 2003.

and dense aggregates were considered with reduced stickiness in order to yield limited collision between particles. One experiment also involved a disaggregation term to reduce the size of aggregates and produce more particles that sink slower.

In order to evaluate the impact of implementing an aggregation model into the original biogeochemical model, in Figure 6.12 we plotted the flux curves produced by the original model of Gruber et al. (2006) as well as of Fischer and Karakas (2009), who modified the Gruber's model by using realistic mean sinking velocities as described above. The velocities in their work were seasonally changing and they were specified from the estimations based on the time difference between chlorophyll maxima at the surface and sedimentation peaks at the deep trap. While the fluxes generated by the original model overestimated the upper and underestimated the deeper recorded flux values, the model with modified sinking velocity could capture the deep flux but still overestimated the upper flux. With the implementation of aggregation the prediction capability of the original model has therefore been significantly improved.

Setting the remineralisation rate proportional to the sinking velocity of smallest particles generated similar distributions in all experiments and a relatively good match of surface chlorophyll fields to the satellite data. The following conclusions can be drawn from the simulation results in the water column:

- The porous approximation with disaggregation and reduced stickiness gave the

best agreement with the measurements at the mesotrophic sediment trap site CB off Cape Blanc provided that the particle decay rate is  $0.2 \text{ d}^{-1}$ .

- The model failed to reproduce observed particle size spectrum in particular for the upper layers. Simulation of particle size spectra could be improved by limiting the fractal dimension in the model.
- The rectilinear aggregation kernels could be less appropriate for flux predictions due to exaggerated collision rates that they generate.
- Disaggregation is a crucial mechanism in predicting the deep water fluxes and particle size spectra.
- In order to improve the representation of aggregation dynamics, variation in stickiness and size dependent remineralisation could be the areas that should be focussed on in further numerical studies of aggregation.

## References

Gruber, N., Frenzel, H., Doney, S.C., Marchesiello, P., McWilliams, J.C., Moisan, J.R., Oram, J.J., Plattner, G.-K., Stolzenbach, K.D., 2006. Eddy-resolving simulation of plankton ecosystem dynamics in the California Current System. *Deep-Sea Research Part I*, 53 (9), 1483-1516.

Helmke, P., Romero, O., Fischer, G.: Northwest African upwelling and its effect on off-shore organic carbon export to the deep sea, *Global Biogeochem. Cycles*, 19, doi:10.1029/2004GB002265, 2005.

## Peer-reviewed papers published last year based on the computations on HLRN

Karakas, G., Nowald, N., Schäfer-Neth, C., Iversen, M., Barkmann, W., Fischer, G., Marchesiello, P. and Schlitzer, R. (2009) Impact of particle aggregation on fluxes of organic matter. *Progress in Oceanography*, in press.

Fischer, G., Reuter, C., Karakas, G., Nowald, N. and Wefer, G. (2009b) Offshore advection of particles within the Cape Blanc filament, Mauritania: results from observational and modelling studies. *Progress in Oceanography*, in press.

Fischer, G. and Karakas, G. (2009) Sinking rates and ballast composition of particles in the Atlantic Ocean: implications for the organic carbon fluxes to the deep ocean. *Biogeosciences*, 6, 85-102.

## Acknowledgments

We would like to thank all BremHLR staff who were extremely helpful during the whole project and looking forward to work together again in a new project.

## A. Bericht über die Begutachtung des BremHLR am 11. Dezember 2007

### Bericht über die Begutachtung des BremHLR

11. Dezember 2007

Gutachter: Prof. Christian Bischof, Ph.D, RWTH Aachen  
Prof. Dr. Wilfried Juling, Universität Karlsruhe (TH)

#### Hintergrundinformation:

BremHLR, das Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen, wurde am 1. Juli 2003 in Kooperation zwischen der Universität Bremen, der Jacobs University Bremen und dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung gegründet, um Wissenschaftler im wissenschaftlichen Rechnen in Bezug auf die Konzeption, Antragstellung und Durchführung von Projekten auf dem Hochleistungsrechner Nord (HLRN) zu unterstützen. Als Bestandteil des Kompetenznetzwerkes des HLRN beteiligt sich BremHLR z. B. an der Nutzerberatung, der Pflege von Software-Paketen und veranstaltet überregionale Workshops. Die Geschäftsstelle von BremHLR ist im Zentrum für Technomathematik (ZeTeM) der Universität Bremen untergebracht und wird vom Senator für Bildung und Wissenschaft Bremen im Umfang von einem vollzeitbeschäftigten koordinierenden Fachberater (aktuell Dr. Schröter) und einer Halbezeit-Sekretariatsstelle (aktuell Fr. von Deetzen) zunächst bis Mitte 2008 finanziell getragen. Darüber hinaus wurde von jedem der beteiligten Partner ein Fachberater zu 50% einer Vollzeitstelle in das BremHLR delegiert. Aktueller Sprecher des BremHLR ist Prof. Dr. Wolfgang Hiller vom Alfred-Wegener-Institut.

#### Zusammenfassung der Begutachtung:

In einem Überblick über das BremHLR wurde deutlich gemacht, dass das BremHLR sich bei der Softwarebetreuung auf Lösungsmethoden mit unstrukturierten Gittern konzentriert, wobei durch eine Vereinheitlichung der Nutzerschnittstellen mittels des am AWI entwickelten FoSSI (Family of Simplified Solver Interfaces) Rahmenwerks der Zugang und das Experimentieren mit diesen Lösern erleichtert wird. Die im Anwendungszusammenhang erworbene Expertise fließt auch in Benchmark-Aktivitäten ein. So entwickelte das BremHLR insbesondere das Rankingverfahren für die HLRN-II Beschaffung und steuerte Codes für die Neubeschaffung des Rechners am Deutschen Klimarechenzentrum bei. Auch wurden z.B. in den Jahren 2006 und 2007 über Fachberatertreffen hinaus Workshops zu den Themen LinuxCluster, Grid Computing, und parallele Programmierung veranstaltet.

Eine genauere Betrachtung der vom BremHLR betreuten Projekte zeigt, dass der Anwendungsfokus in der Betreuung aktuell in der Erdsystemforschung liegt, wo insgesamt 7 Projekte betreut werden, 5 am HLRN und 2 am John-von-Neumann Institut for Computing (NIC) am FZ Jülich. Insgesamt sind aus Bremen 13 Projekte mit 42 Nutzern am HLRN eingetragen. Der effektiv genutzte Teil des HLRN liegt bei 150% des nominellen Landesanteils, darüber hinaus wird ungefähr noch einmal soviel Rechenkapazität am NIC in Anspruch genommen. Eine genauere Analyse der Anwendungen zeigt, dass in der Anwendungspalette auch Bedarf an hoher Rechenleistung gekoppelt mit hoher I/O Bandbreite besteht, der mit lokalen Clusterinstallation nicht abgedeckt werden kann. Die Kurzvorstellungen von aktuellen

HPC-Projekten von BremHLR Partnern verdeutlichte die Bedeutung der HLRN-Nutzung für die wissenschaftliche Wettbewerbsfähigkeit dieser Forscher und den Mehrwert der BremHLR Beratungsaktivitäten für diese Forscher.

Das neue HLRN-II System trägt neben einer Fortsetzung der bisher praktizierten Verteilung des Systems auf die Standort Hannover und Berlin der Heterogenität sowie der Größenanforderungen der HLRN-Nutzer Rechnung. Das von der Fa. SGI gelieferte System wird eine massiv-parallele Komponente mit verteiltem Speicher und ein Parallelsystem mit gemeinsamem Speicher enthalten, und im Endausbau das über 60-fache der Rechenleistung des aktuellen Systems erreichen. Für die Nutzer bedeutet das neue System aber auch, dass die Anwendung von bisher nur in Ausnahmefällen praktizierten parallelen Programmiertechniken für die Nutzer unvermeidbar wird, und sie hier Unterstützung benötigen werden. Auch erfordert das MPP-System Skalierungsstudien und Laufzeitmodellierungen, welche bei der bisherigen Nutzung des HLRN nicht notwendig waren.

Die Bedeutung des Hochleistungsrechnens wird durch das Bremen Center für Scientific Computing und Anwendungen (BreSCA), das vom Bremer Zentrum für Technomathematik (ZeTeM), dem Bremer Zentrum für Computational Material Science (BC-CMS) sowie vom BremHLR getragen wird, auf eine breitere Basis gestellt. Insbesondere werden dadurch die Kompetenzen in den Bereichen Modellierung, Methodenentwicklung, Simulation und Optimierung noch weitreichender gebündelt. Des Weiteren werden Projekte im Rahmen des MARUM Exzellenzclusters, der Helmholtz Research School on Earth System Science, oder beim neuen Partner Hochschule Bremerhaven im Rahmen der Bioinformatik und Life Sciences für erhöhte Nachfrage und auch eine thematische Verbreiterung Bremer HPC-Projekte sorgen.

Belegen Charakteristika der HLRN-Anwendungen die Notwendigkeit des Zuganges zu einem genügend schnellen und großen HPC-Rechner, so ist komplementär dazu auch Kapazität für Durchsatz-orientierte Rechnungen nötig. Hierzu wurde ein Konzept für das BremGrid vorgestellt, das über ein Campusgrid an der Uni Bremen zu einem Landesgrid heranwachsen kann. Softwaretechnische Grundlage wäre die im Rahmen des vom AWI koordinierte Collaborative Climate Community Data and Processing Grid (C3-Grid) D-Grid Projektes entwickelte Middleware. Neben der verteilten Nutzung von Rechnerressourcen wird hierdurch auch eine verteilte Datenhaltung zur Verfügung gestellt.

#### Empfehlungen:

Es ist unstrittig, dass das BremHLR eine Schlüsselrolle für die effektive Nutzung des HLRN und anderer HPC-Ressourcen einnimmt. Insbesondere wird die Meinung vertreten, dass die Betreuungsaktivitäten des BremHLR notwendige Voraussetzung für die effektive Nutzung des HLRN durch Bremer Nutzer waren, und die zusätzlichen Investitionen des Landes Bremen in die Geschäftsstelle sich aufgrund der tatsächlichen Rechnernutzung um ein Vielfaches amortisiert haben. Die mit dem neuen System gestiegene Programmierkomplexität, die (aus Effizienzgründen durchaus sinnvolle) architektonische Heterogenität des Systems sowie die durch weitere simulationsgetriebene Projekte in neuen Themenbereichen sichtbare Ausweitung der Nutzerschaft im Rahmen von erfordert darüber hinaus zusätzliche



HPC-Beratungskapazitäten um die optimale Nutzung des Systems durch das Land wie gehabt zu optimieren.

Die BremGrid Aktivität erscheint notwendig, um die Nutzung lokaler Ressourcen zu optimieren und komplementär zum HLRN die infrastrukturelle Grundlage für durchsatzorientierte Rechnungen zu schaffen. Das Land und insbesondere die Universität Bremen sollten diese Aktivität zielstrebig vorantreiben und durch Pools von Ressourcen sowohl Beschaffung als auch Betrieb optimieren. Durch die Expertise des AWI werden diese Anstrengungen erleichtert, aber das Fehlen hochschul- und landesübergreifender IT-Strukturen erfordert mindestens je einen Mitarbeiter um den technischen Betrieb sowie die Anwendungsunterstützung und –ausbildung sicherzustellen und so die Grundlage für einen nachhaltigen Betrieb zu schaffen. Die Nutzungsdurchdringung der Grid-Aktivitäten in der Hochschule könnte durch flankierende Maßnahmen wie z.B. die Einführung eines Identity Managements oder eines zentralisierten Hostingkonzepts beschleunigt werden. Die von Prof. Hiller in diesem Zusammenhang angebotene Nutzung des C3-Grid Datenpools würde z.B. für Anwendungen aus dem Bereich der Datenassimilation oder der Satellitenfernerkundung signifikanten Mehrwert bei der Organisation und langfristigen Machbarkeit der Simulationsrechnungen liefern.

Dem AWI kommt im Kontext der BremHLR Aktivitäten aktuell eine entscheidende Rolle zu. Es drängt sich der Eindruck auf, dass einige der beteiligten Institutionen dies als Grund nehmen, eigentlich notwendigen Investitionen in lokale IT-Infrastruktur oder IT-Organisation nicht zu tätigen. Diese Strategie ist längerfristig nicht zielführend, im Gegenteil, die Institutionen und das Land sollten den Rückenwind des AWI nutzen, um jetzt nachhaltig effiziente und effektive IT-Strukturen zu schaffen, die auch in Zeiten einer Flaute aus eigener Kraft voran kommen.

In Anbetracht der demonstrierten Expertise des BremHLR, die im HLRN-Verbund der Fachberater auch anderen Ländern zugute kommt, waren die Gutachter auch überrascht darüber, dass das HLRN nach außen hin nicht nachdrücklicher als HPC-Player in Deutschland geschlossen auftritt und im Vergleich zu Institutionen wie den Bundeshöchstleistungsrechenzentren oder dem DKRZ deutlich an Sichtbarkeit vermissen lässt. Das HLRN bündelt immerhin erfolgreich die HPC-Aktivitäten von 6 Bundesländern! Es ist auch anzunehmen, dass eine stärkere gemeinsame Darstellung nach außen im HLRN den Verbundcharakter nach innen verstärken würde.

Aachen, den 26. Februar 2008

(Univ.-Prof. C. Bischof, Ph.D.)

Karlsruhe, den 29. Februar 2008

(Univ.-Prof. Dr. W. Juling)