



BremHLR

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

Statusbericht 2013
des
Kompetenzzentrums
für
Höchstleistungsrechnen Bremen
– BremHLR –

Bremen, Juni 2014



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

© 2003-2014 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

www.bremhllr.uni-bremen.de

Das Berichtsjahr 2013 in Stichpunkten

- Weiterhin hohe Bremer Nutzung der Computer des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)
- 8. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung
- Inbetriebnahme des neuen Rechnersystems HLRN-III

Inhaltsverzeichnis

1	Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur	4
1.1	Aufgaben.....	4
1.2	Struktur	4
2	Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum	5
2.1	Unterstützung der HLRN-Nutzung im Land Bremen.....	5
2.2	Weitere Aktivitäten des BremHLR	5
3	Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten	6
4	Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR.....	8
5	Informationen zur Infrastruktur: Inbetriebnahme des HLRN-III	10
6	Projektberichte	11
6.1	<i>hbc00011</i> : Defect engineering in bulk and nano-diamonds	11
6.2	<i>hbk00018</i> : Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY.....	14
6.3	<i>hbk00021</i> : Understanding the Dynamics and Change in the Arctic Ocean	18
6.4	<i>hbk00025</i> : Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen	21
6.5	<i>hbk00030</i> : Sea surface topography and mass transport of the Antarctic circumpolar current 25	
6.6	<i>hbk00032</i> : Evaluation of the multi-resolution global climate model ECHAM6-FESOM	28
6.7	<i>hbk00034</i> : Ice sheet – ice shelf – ocean interaction in the marginal seas of the Southern Ocean	33
6.8	<i>hbp00003</i> : Encounters of Neutron Stars	37
6.9	<i>hbp000015</i> : First-principles Study of Surface Chemistry and Doping of Topological Insulators (extension)	41
6.10	<i>hbp000019</i> : First-principles investigations of functionalized semi-conductor nanostructure 44	

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. Die Fachberater des BremHLR leisten Unterstützung für Projekte sowohl in der Konzeption, der Antragstellung als auch der Durchführung. Der Schwerpunkt der Unterstützung liegt hierbei auf Projekten auf dem HLRN-System. Seit 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) gegründet. Seit April 2008 ist auch die Hochschule Bremerhaven (HBHV) Kooperationspartner des BremHLR. Das Kompetenzzentrum wird von den beteiligten Kooperationspartnern sowie der Bremer Senatorin 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:

- Dr. Lars Nerger (AWI/Rechenzentrum, UB/ZeTeM, Leiter Geschäftsstelle)
- Thorsten Coordes (UB/ZARM)
- Dr. Achim Geleßus (JUB/CLAMV)
- Dr. Natalja Rakowsky (AWI/Rechenzentrum)
- Dr. Dirk Barbi (AWI/Rechenzentrum, ab Oktober 2013)

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

- Julitta von Deetzen.

2 Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum

2.1 Unterstützung der HLRN-Nutzung im Land Bremen

Ein Schwerpunkt der Aktivitäten des BremHLR lag auch in diesem Berichtszeitraum in der Unterstützung der HLRN-Nutzung. Neben den Tätigkeiten von Wolfgang Hiller als Mitglied der Technischen Kommission sowie Alfred Schmidt als Mitglied des Wissenschaftlichen Ausschusses bestand die Unterstützung des HLRN durch das BremHLR hauptsächlich in der Fachberatung für Bremer Projekte am HLRN von der Antragstellung bis zur Begleitung rechenintensiver Projekte während der gesamten Projektlaufzeit.

Eine besondere Aufgabe im Berichtsjahr war die Unterstützung des HLRN bei der Inbetriebnahme des neuen HLRN-III Systems sowie die Unterstützung der Nutzer bei der Portierung auf das neue Rechnersystem. Für das neue Rechnersystem haben die Mitglieder des BremHLR vor allem das Erstellen der Nutzer-Dokumentation sowie die Installation von Programmpaketen und –bibliotheken unterstützt.

2.2 Weitere Aktivitäten des BremHLR

Im Veranstaltungsjahr 2013 wurde vom BremHLR der *8. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* organisiert und durchgeführt. Mit 40 Teilnehmern war dieser Workshop wieder sehr gut besucht.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 7. bis zum 11. Januar 2013 an der JUB abgehalten. Als Referent konnte wie bereits bei bisherigen Workshops Dr. Hinnerk Stüben vom Regionalen Rechenzentrum der Universität gewonnen werden, der den Workshop gemeinsam mit dem BremHLR-Fachberater Dr. Lars Nerger abhielt. Für die Studenten der JUB wurde der Workshop auch wieder als offizielle Lehrveranstaltung angeboten. Durch die Bearbeitung eines abschließend bewerteten Programmierprojekts konnten die Studenten Kreditpunkte für ihr Bachelor- und Masterstudium erlangen.

Der sehr gute Zuspruch und der große Erfolg der Veranstaltungen zeigt deutlich den dringenden Bedarf zur Ausbildung im Hoch- und Höchstleistungsrechnen und gibt Anlass dazu, solche Workshops auch weiterhin als regelmäßige Ausbildungs- und Schulungsmaßnahme anzubieten.

Auch im aktuellen Berichtszeitraum war das BremHLR weiteren Veranstaltungen beteiligt. Fachberater des BremHLR beteiligten sich unter anderem an zwei Fachberaterworkshops an denen unterschiedliche Themen des HLRN-Betriebs und der Nutzerbetreuung besprochen wurden. Eine Übersicht über die Veranstaltungen ist in Abschnitt 4 zu finden.

3 Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten

Auch im Jahr 2013 wurde der HLRN intensiv durch Bremer Projekte genutzt. Im Jahresdurchschnitt wurde auf dem HLRN-II System ein prozentualer Anteil von 9,5 % an der gesamten am HLRN-II verfügbaren Rechenleistung erreicht. Dieses liegt deutlich über dem investiven Anteil von etwa 4,5% des Landes Bremen am HLRN. Über die gesamte Laufzeit des HLRN-II Systems wurde ein Anteil von 5,7% der verfügbaren Rechenzeit abgenommen. Ab September 2013 ersetzte in Berlin das neue HLRN-III System das HLRN-II System während in Hannover das HLRN-II System noch bis zum Jahresende weiterbetrieben wurde. Auch das HLRN-III System wurde von den Bremer Nutzern intensiv genutzt. Jedoch wurden in 2013 für das HLRN-III System noch keine Nutzungszahlen erfasst.

Insgesamt wurden im Jahr 2012 etwa 1.007.000 NPL¹ durch Bremer Projekte am HLRN-II System abgenommen. Der entspricht in etwa 15 Millionen CPU-Stunden. Abbildung 3.1 zeigt den monatlichen Verbrauch der Bremer Projekte am HLRN-II System. Im Jahr 2013 hat sich die Bremer Nutzung auf hohem Niveau stabilisiert. Da ab Juli 2013 das HLRN-II System nicht mehr vollständig nutzbar war sind die Nutzungszahlen in dieser Zeit geringer.

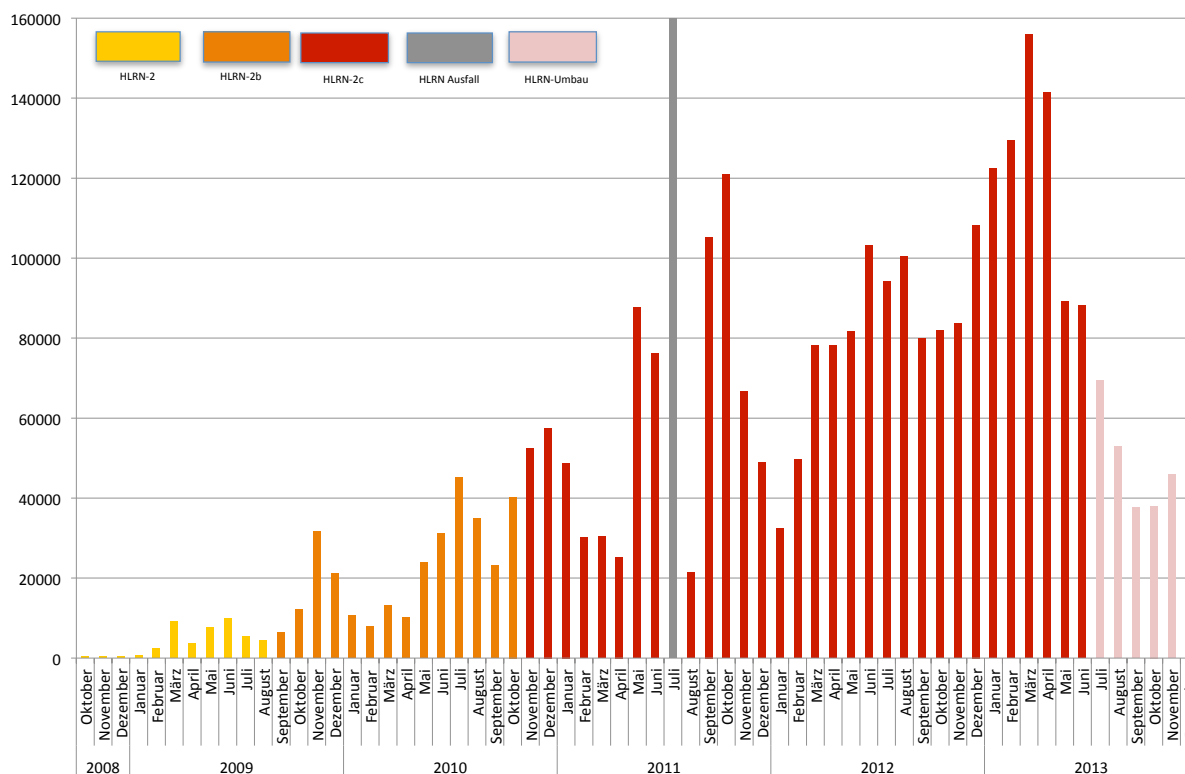


Abbildung 3.1: Grafische Darstellung der monatlichen Rechenzeitnutzung der Bremer HLRN-Großprojekte auf den HLRN-II Systemen in der HLRN-Leistungseinheit NPL. Die Farben zeigen die Verfügbarkeit der unterschiedlichen Ausbaustufen der HLRN-Systeme. Im Juli 2011 waren die HLRN-Systeme nicht und im August 2011 nur teilweise nutzbar. Ab Juli 2013 kam es zu Einschränkungen durch den Aufbau des neuen HLRN-III Systems.

¹ Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit: Auf den Systemen der ersten Ausbaustufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf drei Knoten mit je 8 Prozessorkernen. Auf den Systemen der zweiten Ausbaustufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf 12 Prozessorkernen und auf der dritten Stufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf 16 Prozessorkernen.

Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt Tabelle 3.1. Im Jahr 2013 wurden vom BremHLR 24 Projekte am HLRN betreut. Die Projekte werden von etwa 80 akkreditierten Nutzern durchgeführt. Zehn neue Projekte mit teilweise sehr großem Rechenzeitbedarf wurden im Jahr 2013 beantragt und vom Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN bewilligt. Fünf Projekte wurden im Berichtsjahr beendet.

Tabelle 3.1: Übersicht der Bremer HPC-Projekte, die innerhalb des Berichtszeitraums vom BremHLR betreut wurden. Status: F = Fortsetzung, E = Erstantrag; NPL: Kontingent in NPL im Jahr 2013

Kennung	Projektleiter	Institut	Laufzeit	NPL	Status
hbc00010	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	II/11 – II/13	68000	F
hbc00011	Dr. P. Deák/Dr. B. Aradi	UB/BCCMS	II/12 – II/14	135000	F
hbc00012	Prof. L. Colombi-Ciacchi	UB/BCCMS	IV/12 – III/14	24000	F
hbc00013	Dr. J. Larrucea	UB/BCCMS	IV/12 – III/14	90000	F
hbc00014	Prof. L. Colombi-Ciacchi	UB/BCCMS	IV/13 – III/14	7000	E
hbi00014	Dr.-Ing. R. Groll	UB/ZARM	I/11 – III/13	45000	F
hbi00015	Dr.-Ing. R. Groll	UB/ZARM	III/11 – III/13	50000	F
hbi00019	Prof. U. Fritsching	UB/FB 4	I/13 – II/14	24000	E
hbi00022	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	IV/13 – III/14	13000	E
hbk00018	Dr. K. Weigel	UB/IUP	I/11 – IV/14	20000	F
hbk00021	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	II/09 – II/14	240000	F
hbk00025	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	II/10 – II/14	50000	F
hbk00028	Prof. Dr. P. Lemke	AWI & UB	IV/11 – III/14	120000	F
hbk00030	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	IV/11 – III/14	238000	F
hbk00032	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	II/12 – II/14	321000	F
hbk00034	Prof. Dr. P. Lemke	AWI & UB	III/13 – II/14	100000	E
hbk00035	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	IV/13 – III/14	53000	E
hbk00036	Dr. P. Scholz	AWI & UB	IV/13 – I/14	25000	E
hbm0001	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	III/12 – II/13	28000	E
hbp00003	Prof. Dr. C. Lämmerzahl/ Prof. Dr. S. Rosswog	UB & JUB	IV/10 – III/14	69000	F
hbp00011	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	IV/11 – III/13	40000	F
hbp00015	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	II/12 – II/14	54000	E
hbp00019	Dr. P. Lorke	UB/BCCMS	IV/13 – III/14	14000	E
hbp00020	Prof. T. Wehling	UB/Physik	IV/13 – III/14	14000	E

4 Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

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

Veranstalter: BremHLR

Datum: 7. – 11. Januar 2013

Ort: Jacobs University Bremen

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

Referenten: Dr. Hinnerk Stüben (Regionales Rechenzentrum der Universität Hamburg) und Dr. Lars Nerger (BremHLR).

Teilnehmerzahl: 40

Teilnehmende Institutionen: AWI, JUB, UB (BIPS, Informatik, Mathematik, Physik), Universität Göttingen, Universität Hamburg, Universität Oldenburg

23. HLRN-Fachberater-Workshop

Veranstalter: Rechenzentrum, TU Braunschweig

Datum: 17. – 18. Januar 2013

Ort: TU Braunschweig

Teilnehmerzahl: 19

Teilnehmende Institutionen: BremHLR (AWI, ZARM), BTU Cottbus, FU Berlin, HU Berlin, IOW, LUIS/RRZN Uni Hannover, RZ TU Hamburg-Harburg, RZ Uni Kiel, GITZ TU Braunschweig, Uni Potsdam, ZIB

BremHLR-HLRN User Forum

Veranstalter: BremHLR

Datum: 26. Juni 2013

Ort: Universität Bremen

Beschreibung: Informationsveranstaltung zum Status des HLRN.

Teilnehmerzahl: 10

HLRN-III Cray User-Workshop

Veranstalter: ZIB

Datum: 16. – 19. September 2013

Ort: ZIB/FU Berlin

Beschreibung: Nutzer-Workshop mit Referenten der Firmen Cray und Allinea zur Einführung in die Nutzung des HLRN-III.

Teilnehmerzahl: 30

24. HLRN-Fachberater-Workshop

Veranstalter: ZIB

Datum: 19. – 20. September 2013

Ort: ZIB/FU Berlin

Teilnehmerzahl: 18

Teilnehmende Institutionen: BremHLR (AWI, ZARM), BTU Cottbus-Senftenberg, GITZ Uni Braunschweig, HU Berlin, IOW, ITMZ Uni Rostock, LUIS/RRZN Uni Hannover, RRZ Uni Hamburg, RZ TU Hamburg-Harburg, RZ Uni Kiel, Uni Potsdam, ZIB

5 Informationen zur Infrastruktur: Inbetriebnahme des HLRN-III

Im September 2013 wurde die erste Ausbaustufe des HLRN-III in Betrieb genommen und für die Nutzer geöffnet. Zunächst wurde das HLRN-II System in Berlin ersetzt. In Hannover wurde der HLRN erst zum Jahresende installiert und am 12. Dezember 2013 für die Nutzer geöffnet. Bis Ende des Jahres 2013 wurde in Hannover auch das alte HLRN-II System weiterbetrieben. Die zweite Ausbaustufe des HLRN-III Systems ist für Herbst 2014 geplant.

Das neue HLRN-III System ist ein massiv paralleler (MPP) Hochleistungsrechner vom Typ Cray XC30. Pro Standort besteht er besteht das MPP-System aus

- 744 Dual-Socket Knoten, jeweils mit Intel Xeon IvyBridge (E5-2695v2) Prozessoren mit 2.4 GHz Taktung und jeweils 12 Prozessorkernen
- 17856 Prozessorkerne pro Standort
- 64 GB Hauptspeicher pro Knoten (46,5 TByte Gesamtspeicher)
- Netzwerk Cray Aries Interconnect mit Dragonfly Topologie
- Peak-Performance: 342,8 TFlop/s
- 1.4 PB paralleles Lustre-Dateisystem („WORK“ zur Speicherung von Simulationsdaten) über FDR Infiniband-Netzwerk
- 0.5 PB Heimat-Dateisystem angebunden an die Knoten per NFS über 10GE-Netzwerk.

In Hannover wurde zusätzlich ein SMP-System der Firma Megware installiert. Es besteht aus

- 32 Quad-Socket Knoten mit Intel Xeon SandyBridge (E5-4650) Prozessoren mit 2.7 GHz Taktfrequenz und jeweils 8 Prozessorkernen
- 256 GB Arbeitsspeicher pro Knoten
- Dual FDR Infiniband Netzwerk

In der Top500 Liste der weltweit schnellsten Supercomputer vom November 2013 befinden sich die beiden MPP-Systeme auf den Plätzen 120 und 121. In Deutschland finden sich die beiden Systeme auf den Plätzen 7 und 8.

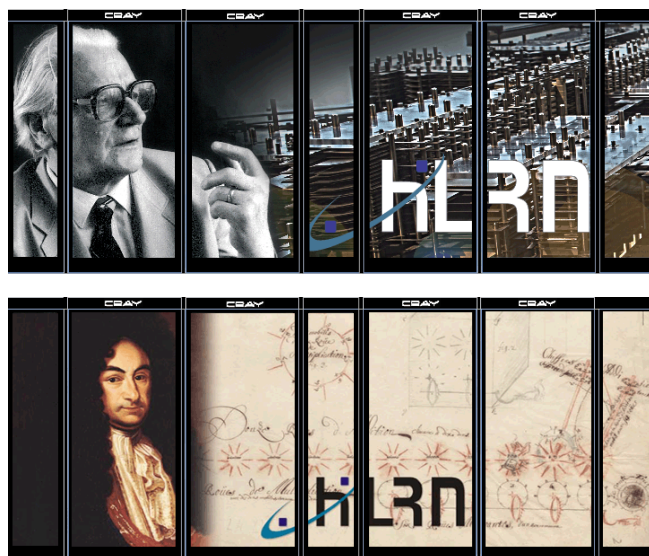


Abbildung 5.1: Frontansichten der Cray XC30 Systeme des HLRN-III. Oben: System „Konrad“ am ZIB in Berlin; unten: System „Gottfried“ an der Universität Hannover

6 Projektberichte²

6.1 *hbc00011*: Defect engineering in bulk and nano-diamonds

HLRN-Projektkenung:	hbc00011
Laufzeit:	II/2012 – II/2014
Projektleiter:	Dr. Peter Deák / Dr. Bálint Aradi
Projektbearbeiter:	Dr. Peter Deák Dr. Bálint Aradi Prof. Dr. Thomas Frauenheim
Institut / Einrichtung:	Bremen Center for Computational Material Science, University of Bremen

- Certain defects in the diamond crystal give rise to stable room temperature photoluminescence (PL) due to transitions between different paramagnetic states. On the one hand, the magnetic states of remote defects can be entangled optically, and such systems are today the most viable candidates for qubits in quantum computing. On the other hand, the sensitivity of the PL to external fields or to the chemical environment can be used for sensing at the nanoscale. Since such defects can also be produced in biocompatible nanodiamonds, they can also be used for bio-labeling.
- The so far most efficient luminescent color center in diamond is the NV(-) defect: a substitutional N atom next to a negatively charged vacancy. Their controlled production is crucial for all applications. Computer simulations may help to optimize the synthesis process. The charge state of the defects is also influenced by interactions with the surface of the crystal which can also be investigated in detail only by quantum mechanical calculations.
- Using high level quantum mechanical methods we investigate: i) the equilibrium concentration of defects in irradiated and annealed N-doped bulk diamond under various conditions, ii) the effect of various surface terminations on the PL of NV(-) centers, and iii) try to answer the question, how small a carbon cluster may be to have its diamond-like core survive the annealing processes necessary to create NV(-) defects.

With the low-pressure low-cost synthesis methods for diamond layers, and the detonation method to produce large quantities of nano-sized diamond particles, diamond has become available to many new applications. Diamond is not only very stable itself, it can have very stable crystal defects, too. Vacancy-related photoluminescent, paramagnetic centers in bulk diamond promise applications as qubits in quantum computing, as sensors in magnetometry on the nanoscale. Diamond is also bio-compatible, and small enough nanodiamonds can be injected in vivo, using their PL to monitor pathways within a living cell. All of these applications require the synthesis of thermodynamically and optically stable defects, in sufficient concentration and in the appropriate charge state. Our project is aimed to clarify the conditions for that by theoretical calculations. We are investigating primarily the NV defect, but also other vacancy related centers. For these investigations high level methods, beyond

² Für den Inhalt der Projektberichte sind ausschließlich die genannten Projektleiter bzw. die Projektbearbeiter verantwortlich.

standard density functional theory (DFT) are needed. Our main tool is the screened hybrid functional HSE06. The calculations have to be carried out on models containing over 2000 valence electrons, making the use of supercomputers inevitable.

The usual way to create NV defects is the irradiation of N-doped diamond. A subsequent heat treatment heals irradiation defects (which would quench any luminescence otherwise), and it was assumed that NV centers also arise during this process by substitutional N capturing mobile V defects. We have calculated the formation energies of all important nitrogen- and vacancy-related defects (N, V, NV, NVH, N₂, N₂V and V₂, in order to establish the conditions under which the optically active, negatively charged NV(-) centers can be formed. Our results have shown that the formation of NV defects through the diffusion of V is unlikely, because the vacancies will form V₂ pairs instead. The NV defects are predominantly produced directly by the irradiation (creating a vacancy next to a substitutional N). We have also found that V₂ pairs may pin the Fermi-level making the NV defects neutral. Based on our results we were able to suggest the proper temperature range of annealing, which would produce a higher concentration of NV(-) defects – in line with a few existing, as yet unexplained experimental data [1].

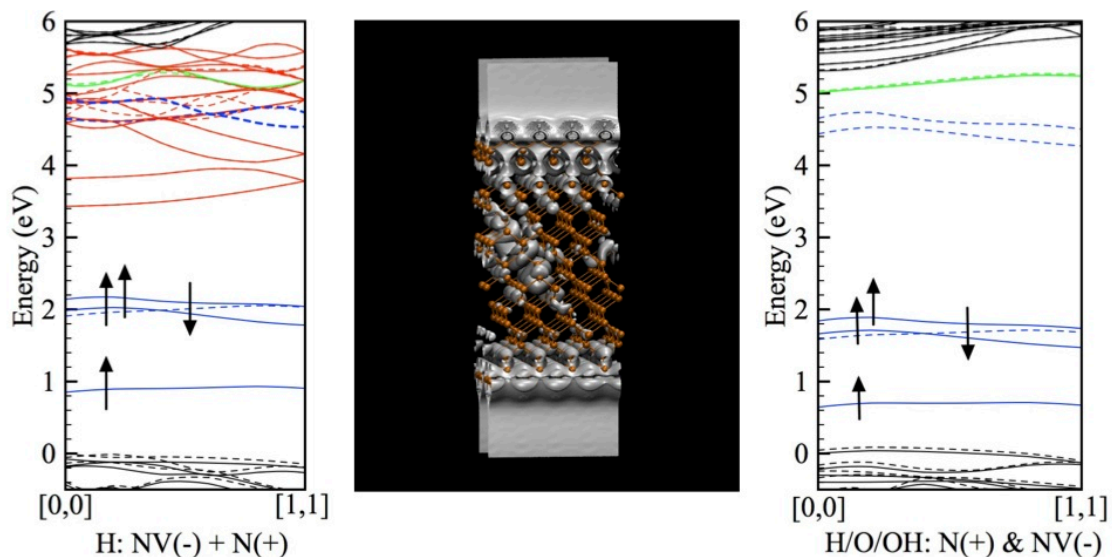


Fig.1: Electronic structure of a thin diamond slab with H- (left) and mixed H/O/OH (right) termination. Blue lines with arrows show the occupied, dashed blue lines the empty states of the defect. Red lines show the surface image states induced by pure H-termination. As shown (middle), there is a strong intermixing of the defect- and the surface related states, leading to delocalization of the excited electron. No such effect occurs if the surface is oxidized. (The green line shows the state of a substitutional N donor, used to charge the NV defect. Black lines are the "bulk" bands.)

It has been established experimentally earlier, that PL of the NV(-) defect is quenched by hydrogen termination of the diamond surface, while oxidation restores it. This was explained by band bending effects. Such an explanation, however, does not hold for very small nanodiamonds, where quenching was observed as well. We have carried out 2D-periodic slab calculations to investigate the effect of a nearby surface with various well controlled surface terminations. We have found that the negative electron affinity of the hydrogen terminated surface gives rise to surface image states, deep below the conduction band edge. As shown in Fig. 2, the empty states of NV(-), which are the final states optical excitation, are masked by these surface states. There is a strong mixing of the defect state with the surface

states in this energy region, so once the NV(-) defect is excited, the electron easily delocalizes along the surface, reducing the charge state of NV(-) to NV(0) and suppressing the intensity of the characteristic NV(-) luminescence. As shown in Fig. 2, even partial oxidation of the surface ensures positive electron affinity, no image states, and so full PL of the NV(-) defects [2].

In preparation to study other termination effects in realistic nanodiamonds, we have carried out simulated annealing of diamondoids with different shapes and sizes in various environments (vacuum, pure O₂, or H₂O). We have found that clusters with predominantly (001) surfaces) remain metastable up to 1500K, if their diameter is above 0.1 nm. This means that if created in a non-equilibrium process, such very small nanodiamonds can survive high temperature annealing even in the presence of oxygen. This is less than half the size necessary for creating diamond structures under equilibrium conditions, and shows that the diamond bio-markers can further be miniaturized [3].

In or ongoing work, we are extending our studies to other transition metal related color centers in diamond.

References

1. P. Deák, B. Aradi, M. Kaviani, T. Frauenheim and A. Gali, *The formation of NV centers in diamond: A theoretical study based on calculated transitions and migration of nitrogen and vacancy related defects*, Phys. Rev. B, submitted.
2. M. Kaviani, B. Aradi, T. Frauenheim, P. Deák, and A. Gali, *The role of image states in controlling the charge state of nitrogen-vacancy centres near diamond surfaces*, Nature Materials, in preparation.
3. M. Kaviani, P. Deák, B. Aradi, T. Köhler, and T. Frauenheim, *How small nanodiamonds can be? MD study of the stability against graphitization*, Diam. Rel. Mater. **33**, 78-84 (2013).

Support

The research was supported by the University of Bremen.

6.2 **hbk00018: Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY**

HLRN-Projektkenung:	hbk00018
Laufzeit:	I/2012 – IV/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. J. P. Burrows
Projektbearbeiter:	Wolfhardt Lotz, Alexej Rozanov, Marco Vountas, Katja Weigel
Institut / Einrichtung:	Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

1. Übersicht

- Messungen von SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography), ein Instrument auf dem Europäischen Satelliten Envisat, erlauben einen Blick in die Erdatmosphäre von August 2002 bis April 2012.
- Wir berechnen aus diesen Daten den Wasserdampf oberhalb der Wolken, d.h. in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre
- Der Wasserdampf dort spielt, als natürliches Treibhausgas, eine wichtige Rolle für das Klima und die Zirkulation in der Atmosphäre
- Wegen der Menge der Profile und weil zur Berechnung des Wasserdampfs aufwändige Strahlungstransportrechnungen nötig sind, ist der Rechenzeitbedarf dabei groß.
- Mit Hilfe der Rechnungen auf dem HLRN haben wir eine fast 10 Jahre lange Wasserdampf-Zeitreihe berechnet und können damit zur Initiative SPARC-DI (engl.: Stratospheric Processes and their Role in Climate - Data Initiative) und SPARC - WAVAS (engl.: Water Vapour Assessment) beitragen.
- Der berechnete Datensatz ist ein Ergebnis der ersten Phase des DFG-Projektes SHARP (engl.: Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction) und des ESA-Projektes SPIN (engl.: ESA SPARC Initiative)
- Im Rahmen der 2. Phase von SHARP arbeiten wir an einem verbesserten Datensatz.

2. Wasserdampf über den Wolken

SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) ist ein Spektrometer auf dem europäischen Satelliten ENVISAT. SCIAMACHY Messungen gibt es seit August 2002 bis zum plötzlichen Kontaktverlust mit Envisat im April 2012. Um Informationen aus verschiedenen Höhen in der Atmosphäre zu bekommen sind Limb-Messungen von SCIAMACHY besonders gut geeignet. Bei diesem Messmodus schaut das Instrument durch die Atmosphäre über den Erdboden hinweg in Richtung des Weltraumes. Dabei wird für Höhenstufen von jeweils 3.3 km ein Spektrum des gestreuten Sonnenlichts gemessen. Aus diesen Spektren berechnen wir Wasserdampfprofile im Höhenbereich zwischen 11km und 23km.

Wasser kommt in vielen Formen in der Atmosphäre vor. Meist denkt man dabei zunächst z.B. an Regen, Schnee, Wolkentröpfchen und Eiskristalle, eine wichtige Rolle spielt aber

auch der Wasserdampf. Dieser ist durchsichtig, das heißt wir können ihn mit unseren Augen nicht sehen, weil Wassermoleküle wenig sichtbares Licht absorbieren.

Im Gegensatz dazu absorbieren Wassermoleküle im langwelligeren, infraroten Bereich der Strahlung besonders stark. Der Wasserdampf spielt für die Strahlung in unserer Atmosphäre eine wichtige Rolle: Er lässt das sichtbare Licht, das von der Sonne kommt ungehindert zum Boden durch, absorbiert aber viel Strahlung im infraroten Bereich und damit die von der Erde emittierte Wärmestrahlung. Das macht ihn zum wichtigsten natürlichen Treibhausgas in der Atmosphäre. Den meisten Wasserdampf findet man nahe des Erdbodens, aber auch oberhalb der Wolken gibt es noch Wasserdampf. Modellstudien haben gezeigt, dass auch er in diesem Höhenbereich, der oberen Troposphäre und untere Stratosphäre, einen deutlichen Einfluss auf unser Klima am Boden hat.

Wie groß dieser Einfluss genau ist, hängt dabei von der Menge des Wasserdampfes in der Luft ab, welche je nach Ort und Zeit stark variiert. Deshalb ist es ein Ziel des DFG Projektes SHARP (siehe auch: www.fu-berlin.de/sharp/) zu einem besseren Verständnis der Verteilung und der zeitlichen Änderung des Wasserdampfgehaltes in der Atmosphäre und dessen Wirkung auf das Klima beizutragen. Dazu braucht man möglichst globale, regelmäßige und dichte Messungen des Wasserdampfes. Wir arbeiten im Rahmen der 2. Phase von SHARP an einer verbesserten Zeitserie des Wasserdampfes aus SCIAMACHY-Messungen.

Wie kommt man von der gemessenen Strahlung zu Wasserdampfprofilen? Dazu werden die charakteristischen Absorptionen der Wassermoleküle im infraroten Bereich des Spektrums genutzt. SCIAMACHY misst das gestreute Sonnenlicht in der Atmosphäre. Auf dem Weg zum Instrument absorbiert der Wasserdampf einen Teil der Strahlung, so dass man Absorptionslinien im gemessenen Spektrum sieht. Vereinfacht gesagt, verrät die Position der Linien, welche Gase sich in der Atmosphäre befinden. Die Linienstärke spiegelt die Konzentration der jeweiligen Gase wider. Allerdings spielen auch noch andere atmosphärische Größen, zum Beispiel Druck, Temperatur und die Menge von Aerosolen (Schwebeteilchen), eine Rolle. Deshalb kann man nicht direkt aus den Spektren auf die Wasserdampfprofile schließen. Um alle Einflüsse richtig berücksichtigen zu können, berechnen wir mit dem Strahlungstransportmodell SCIATRAN aus einer gegebenen Atmosphärenzusammensetzung die Strahlung, die SCIAMACHY messen würde. Auf Grundlage dessen wird mit Hilfe inverser mathematischer Methoden in einem iterativen Verfahren das am besten zur Messung passende Wasserdampfprofil ermittelt (Rozanov et al., 2011).

Warum ist die Berechnung dieser Wasserdampfprofile besonders aufwändig? Es muss ein relativ breiter Spektralbereich abgedeckt werden, um genügend Informationen über die Wasserdampfabsorptionen zu erhalten. Dabei ist es wichtig, dass die Streuung in der Atmosphäre richtig berechnet wird. Deshalb muss die Mehrfachstreuung in der Atmosphäre berücksichtigt werden, was Rechnungen auf einem horizontal dichten Gitter nötig macht.

3. Ergebnisse

Was ist das Besondere an den Wasserdampfprofilen aus SCIAMACHY Messungen?

Diese Messungen sind mit wenigen Unterbrechungen von August 2002 bis April 2012 verfügbar. Das ist im Vergleich zu vielen anderen Satellitenmissionen bereits eine sehr lange, konsistente Zeitreihe. Der gesamte SCIAMACHY Datensatz umfasst ca. 4.5 Millionen horizontsondierende Messungen bei Tageslicht. Das sind über 1000 pro Tag, von denen sich nach der Filterung für Wolken etwa 700 für die Berechnung von Wasserdampf eignen. Um den gesamten Messzeitraum abzudecken, wurde zunächst nur jeder 8. Tag berechnet, 2012 dann jeder 2. Tag zwischen 45°S und 45°N. Dichtere Daten in dieser Region wurden

zuerst berechnet, da dort besonders oft Profile auf Grund von Wolken herausgefiltert werden müssen.

Was lernen wir aus den bisherigen Rechnungen? Der gewonnene Datensatz V3.01 zeigt ein globales Bild des Wasserdampfes in der UTLS. Um die Qualität dieser Daten zu beurteilen, haben wir sie mit verschiedenen anderen Datensätzen verglichen, beispielsweise mit lokalen Messungen durch Ballon-Sonden und mit Messungen anderer Satelliten. Im Allgemeinen stimmen die Profile gut überein, besonders im Bereich zwischen 14 und 20km sind die Abweichungen meist kleiner als 10% und damit im Rahmen der Erwartungen. Die Daten werden auch im Rahmen internationaler Initiativen wie SPARC-DI (engl.: Stratospheric Processes and their Role in Climate - Data Initiative) und SPARC - WAVAS (engl.: Water Vapour Assessment) zur Erforschung der Stratosphäre genutzt und mit anderen Daten verglichen, siehe z.B. Hegglin et al. (2013). Abbildung 1 zeigt die linearen Änderungen von zonal gemittelten Wasserdampf-Zeitserie für verschiedene Höhen und Breiten aus einer multivariaten linearen Regression für SCIAMACHY und das Instrument MLS (engl.: Microwave Limb Sounder) auf dem Satelliten Aura. Dabei wurde jeweils nur der Zeitraum zwischen August 2004 und April 2012 verwendet, in dem es Messungen beider Instrumente gibt. Man erkennt sowohl Gemeinsamkeiten, beispielsweise den Anstieg in der unteren Stratosphäre in den Tropen (oberhalb von ca. 20km), als auch Unterschiede, insbesondere in hohen nördlichen Breiten. In diesem Bereich gab es 2008 und 2009 größere vulkanische Eruptionen, die zu einer Erhöhung der Aerosolmenge in der UTLS geführt haben. Da die zur Zeit verwendete Aerosolkorrektur vulkanische Aerosole nur eingeschränkt beschreiben kann, und MLS wegen anderer zur Messung verwendeten Wellenlängen unempfindlicher auf Aerosole reagiert, ist das wahrscheinlich die Ursache für den veränderten Verlauf der Zeitserien.

Welche Verbesserungen sind notwendig? Unsere Programme wurden letztes Jahr für das Rechnen auf HLRN III angepasst, aber wir planen Änderungen am Algorithmus um einen verbesserten Datensatz zu berechnen. Die Vergleiche zu anderen Datensätzen und Tests mit simulierten Messungen haben ergeben, dass dazu vor allem Verbesserungen hinsichtlich der Streuung in der Atmosphäre nötig sind. Insbesondere ist es wichtig, die Verteilung der Aerosole in der Atmosphäre besser zu berücksichtigen. Des Weiteren arbeiten wir an einem besser auf die Messhöhen abgestimmtem Höhengitter.

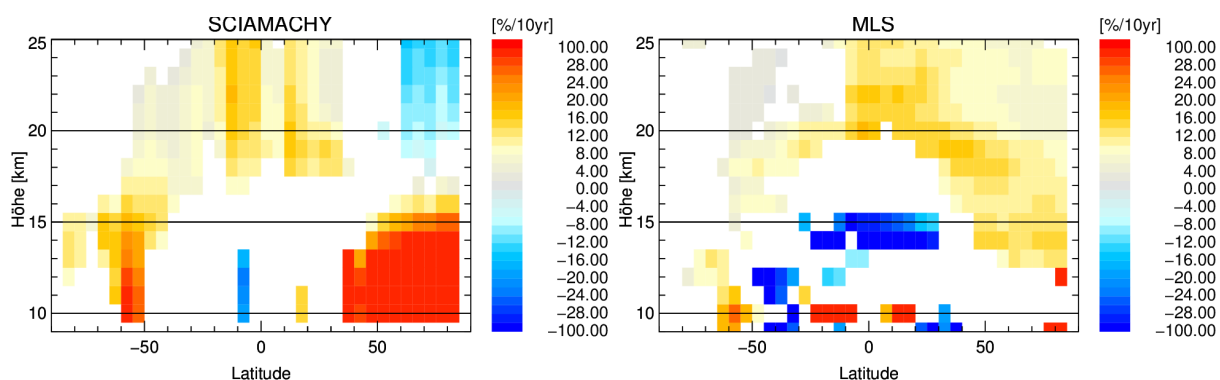


Abbildung 1: Lineare Änderung des Wasserdampfes aus SCIAMACHY Messungen (links) und MLS Messungen (rechts) von August 2008 bis April 2013.

4. Ausblick

Unser Ziel ist es, die Wasserdampfkonzentrationen für den gesamten Messzeitraum zu bestimmen, um mehr über den Wasserdampf in der Atmosphäre und seine Auswirkung auf das Klima lernen zu können. Deshalb arbeiten wir im Rahmen der zweiten Phase von SHARP an einer verbesserten Datenversion. Dazu führen wir zur Zeit Tests durch, um den Algorithmus insbesondere im Hinblick auf die Streuung in der Atmosphäre zu verbessern und im Anschluss eine neue Datenversion zu berechnen.

Literatur

- Rozanov, A., Weigel, K., Bovensmann, H., Dhomse, S., Eichmann, K.-U., Kivi, R., Rozanov, V., Vömel, H., Weber, M., and Burrows, J. P., *Retrieval of water vapor vertical distributions in the upper troposphere and the lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements*, Atmos. Meas. Techn., 4, 933-954, doi:10.5194/amt-4-933-2011, 2011.
- Hegglin, M. I., Tegtmeier, S., Anderson, J., Froidevaux, L., Fuller, R., Funke, B., Jones, A., Lingenfeller, G., Lumpe, J., Pendlebury, D., Remsberg, E., Rozanov, A., Toohey, M., Urban, J., von Clarmann, T., Walker, K. A., Wang, R., Weigel, K.: *SPARC Data Initiative: Comparison of water vapour climatologies from international satellite limb sounders*, J. Geophys. Res., 118, 20, 11824--11846, doi: 10.1002/jgrd.50752, 2013.

Präsentationen 2013

- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Eichmann, K.-U., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *Validation of the SCIAMACHY limb water vapor retrieval*, ESA ACVE, 13.–15. March 2013, Frascati, Italy.
- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Eichmann, K.-U., Gebhardt, C., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *Water vapour from SCIAMACHY limb measurements*, SPARC WAVAS Workshop, 4.–6. December 2013, Pasadena, USA

Poster 2013

- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Bramstedt, K., Eichmann, K.-U., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *Validation of the SCIAMACHY limb water vapor retrieval*, European Geosciences Union General Assembly, 7.–12. April 2013, Vienna, Austria.
- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Bramstedt, K., Eichmann, K.-U., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *SCIAMACHY limb water vapor retrieval V3.01, 2002-2012, SCIAMACHY limb-scatter observation*, 7th Atmospheric Limb Conferences, 17.–19. June 2013, Bremen, Germany
- Weigel, K., Brinkhoff, L. A., Rozanov, A., Ernst, F., Bramstedt, K., Eichmann, K.-U., Weber, M., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *SCIAMACHY Limb Water Vapor Retrieval - Influence of Aerosols and Aerosol Correction*, Living Planet Symposium, 9.–13. September 2013, Edinburgh, Great Britain
- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Bramstedt, K., Eichmann, K.-U., Gebhardt, C., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: *Time series of water vapor in the UTLS from SCIAMACHY limb measurements, 2002-2012, analysis and comparisons*, AGU Fall Meeting, 9.–13. December 2013, San Francisco, USA

6.3 *hbk00021*: Understanding the Dynamics and Change in the Arctic Ocean

HLRN-Projektkenung:	hbk00021
Laufzeit:	II/2009 – II/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Thomas Jung
Projektbearbeiter:	Q. Wang, C. Wekerle, X. Wang
Institut / Einrichtung:	Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven

Abstract

The Arctic Ocean is a very important component in the global climate system. Many processes involved in the Arctic region are key factors controlling the climate variability. In this project the unstructured-mesh ocean model FESOM is used to study the Arctic inflow of Atlantic Water and its circulation in the Arctic basins. The main purpose is to assess the influence of model spatial resolution on the simulated Arctic Ocean. It is shown that model resolutions can impact the simulated results significantly and local mesh refinement in the Arctic region improves the simulated Atlantic Water circulation. As much understanding of the climate system is based on numerical simulations, a faithful numerical representation of the ocean is essential in climate research. By allowing locally resolving key processes at relatively low computational cost, unstructured-mesh models have the potential in their applications as a new generation of models.

1. Introduction

The Arctic ocean has been experiencing significant changes under global warming since the last decade. It is crucial to understand the dynamics and changes in the Arctic Ocean and the impact on the climate system. Due to limited observational data, numerical models are important tools for improving such understanding. However, many key processes are small in space and require very high model resolution and computational resources. The unstructured-mesh model FESOM allows to focus the high model resolution in selected regions in a global model without applying traditional nesting and using open boundaries. In this study we set up variable resolution global models with increased resolution in the Arctic Ocean, and the purpose is to assess the role of local mesh refinement on the Arctic Ocean, particularly, on the Atlantic Water (AW) layer circulation.

2. Model setup

Two simulations were performed on two different meshes. We use a nominal 1.5° horizontal resolution in the bulk of the global ocean, with it slightly refined (resolution doubled) along the coastlines. The resolution is refined to 24 km north of 50°N. This mesh is used in the reference run (LOW). The mesh in the second simulation (HIGH) has the Arctic region further refined to 9 km (see Figure 1). Both simulations are carried out for the time period 1948-2007. The CORE-II interannual atmospheric forcing data-set is used. The ocean is initialized with temperature and salinity fields from the PHC3. The sea ice is initialized with climatological fields obtained from previous simulations. Two passive tracers with value one

are injected at Barents Sea Opening and Fram Strait separately. Each of them represents the associated branch of AW inflow.

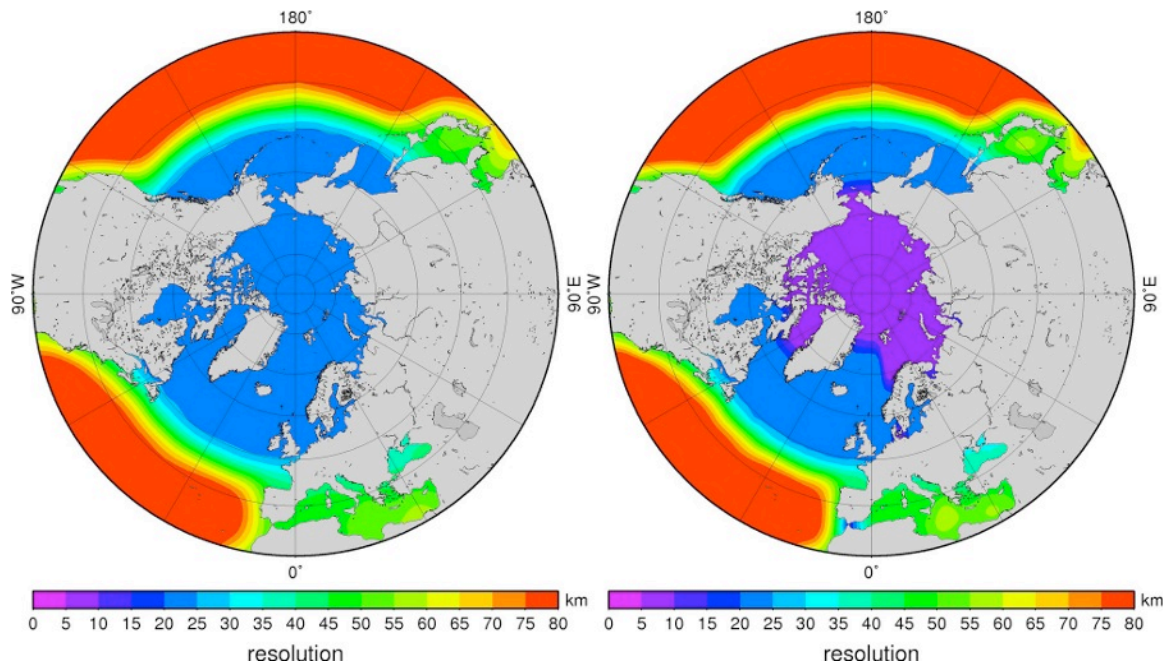


Figure 1: Meshes with (left) 24 km and (right) 9 km resolution in the Arctic region. Both meshes are global.

3. Results

The temporal evolution of the two passive tracers at 350 m depth is shown in Figures 2 and 3. The AW via Fram Strait is the major water mass source for the deep Eurasian Basin. It penetrates eastwards along the continental slope and returns along the Lomonosov Ridge toward the Fram Strait, as suggested from previous studies. However, compared to the 9 km simulation, the AW in the 24 km simulation has significantly larger tendency to leave the Eurasian Basin to enter the Amerasian Basin across the Lomonosov Ridge. The BSO branch enters the Eurasian Basin at the St. Anna Trough and circulates anti-clockwise along the outer rim of the Fram Strait branch. The circulation on the two meshes is considerably different after it passes Laptev Sea. It mainly continues eastward along the continental slope in the 24 km simulation, while in the 9 km simulation a large part of the BSO branch returns along the Lomonosov Ridge toward Fram Strait. Analysis shows that the water mass properties of the AW before reaching the Laptev Sea are very different in the two simulations, and it is one of the main reasons for the difference in the circulation regime.

Numerical models are often used to understand the dynamics of the AW circulation; the sensitivity of the ocean circulation to model configuration (resolution here) indicates that caution should be taken when drawing any conclusions based on an individual model, especially when observational data are not fine enough to verify the details of the simulation.

4. Summary

Two global meshes with different resolution in the Arctic region are used to simulate the AW circulation in the Arctic Ocean using FESOM. The AW circulates anti-clockwise in the Arctic basins in both cases. However, the simulated water mass properties are very different and the high resolution simulation shows more significant topographic confinement and separation between the Eurasian and Amerasian Basins, which is closer to the circulation regime suggested in previous studies. Although higher resolution improves the simulated results, not all the details of the simulated ocean can be improved just by using better resolution. Other model components, for example, physical parameterizations, should also be advanced in order to improve the overall model fidelity.

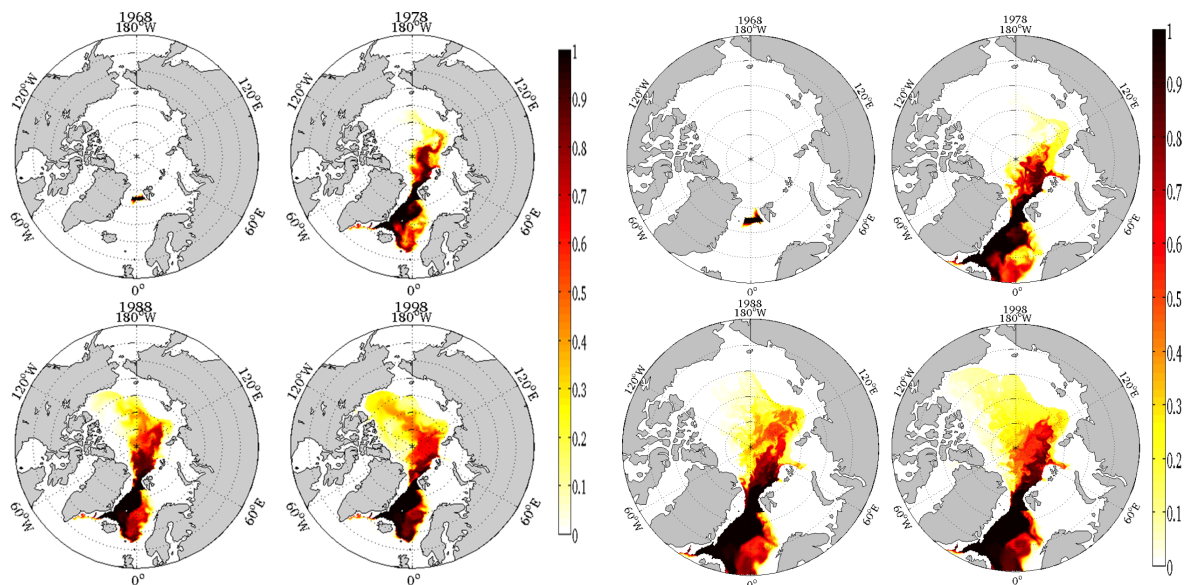


Figure 2: Temporal evolution of the passive tracer released at Fram Strait in the experiment (left four) LOW and (right four) HIGH. The time interval between each panel is 10 years.

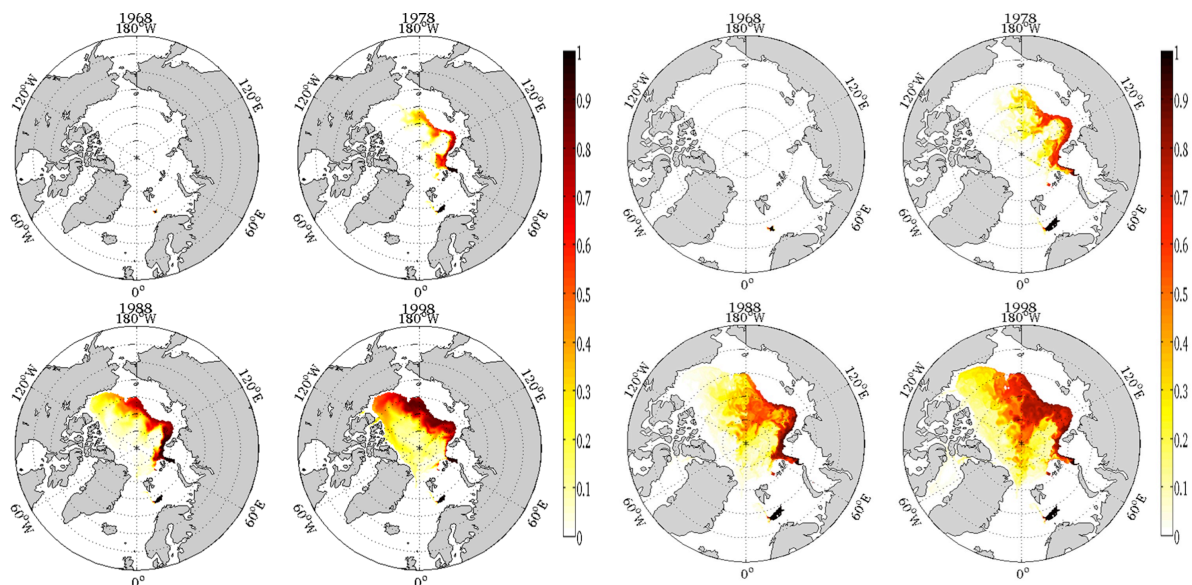


Figure 3: Temporal evolution of the passive tracer released at BSO in the experiment (left four) LOW and (right four) HIGH. The time interval between each panel is 10 years.

6.4 hbk00025: Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen

HLRN-Projektkenung:	hbk00025
Laufzeit:	II/2010 – II/2013
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	Dr. G. Jung, Dr. M. Prange
Institut / Einrichtung:	DFG-Forschungszentrum / Exzellenzcluster „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen

Kurzfassung

- Der Schwerpunkt des Projekts liegt auf der Modellierung des Einflusses tektonischer Faktoren, insbesondere Gebirgshebung, auf das Klima und die Vegetationsbedeckung Afrikas.
- Das verwendete Modell ist das gekoppelte parallele Community Climate System Model (Version 3), welches Atmosphäre, Ozean, Meereis, Landoberfläche und Vegetationsbedeckung explizit berücksichtigt.
- Ein Effekt der Hebung Afrikas ist eine oberflächennahe Abkühlung der Meerestemperatur in der Benguela-Region um bis zu 3,5 °C aufgrund einer Verstärkung des küstennahen Auftriebs.
- Diese Verstärkung des Auftriebs kann ursächlich auf eine Verstärkung des küstenparallelen bodennahen Starkwindbandes, des Benguela Jets, zurückgeführt werden.
- Die Verstärkung des (atmosphärischen) Jets wird begünstigt durch eine „Kanalisation“ der Strömung, sowie einer Zunahme des Land-See-Temperaturgradienten aufgrund einer verstärkten Erwärmung der unteren/mittleren Troposphäre im Bereich der erhöhten Topographie.
- Weitere Sensitivitätsexperimente haben gezeigt, dass die Verstärkung des küstennahen Auftriebs insbesondere auf eine Hebung des südlichen Afrika, zu geringerem Anteil auch auf die Hebung Ostafrikas, zurückgeführt werden kann.
- Die Hebung Afrikas wirkt sich auch auf die Vegetationsbedeckung Afrikas aus, wobei es zu einer starken (niederschlagsbedingten) Zunahme der Vegetationsbedeckung und Ausbreitung der Regenwälder in Zentralafrika und zu einer Abnahme der Vegetationsbedeckung in Ostafrika aufgrund zunehmender Trockenheit kommt.
- Es kann auch für das Experiment mit reduzierter afrikanischer Topographie keine geschlossene Regenwaldbedeckung für das tropische Afrika simuliert werden.

Model simulations

In the following paragraphs we will describe the results of selected experiments that were performed:

- 1) control simulation with present-day topography (CTRL)

The sensitivity experiments are identical to 1) but with lowering the respective topographies to half the present-day level:

- 2) lowered East and southern African topography (ALOW)
- 3) lowered East African topography (EALOW)
- 4) lowered southern African topography (SALOW)

Benguela upwelling intensification due to African uplift

Coastal upwelling off the West coast of southern Africa has, according to proxy evidence, progressively intensified during the past 12 million years¹. Contrasting hypotheses on the cause of this long-term change during the Miocene-Pliocene epoch have been proposed. These range from increasing Antarctic glaciation² and global cooling to the closing of the Central American isthmus³. Geological evidence also suggests phases of major uplift in the East African Rift system as well as in South and South-West Africa during the Late Miocene and Pliocene^{4,5} but their potential climatic impact remains to be quantified. Our sensitivity experiments test the effect of regional uplift of East and southern Africa (in combination and separately) on the atmospheric and ocean circulation.

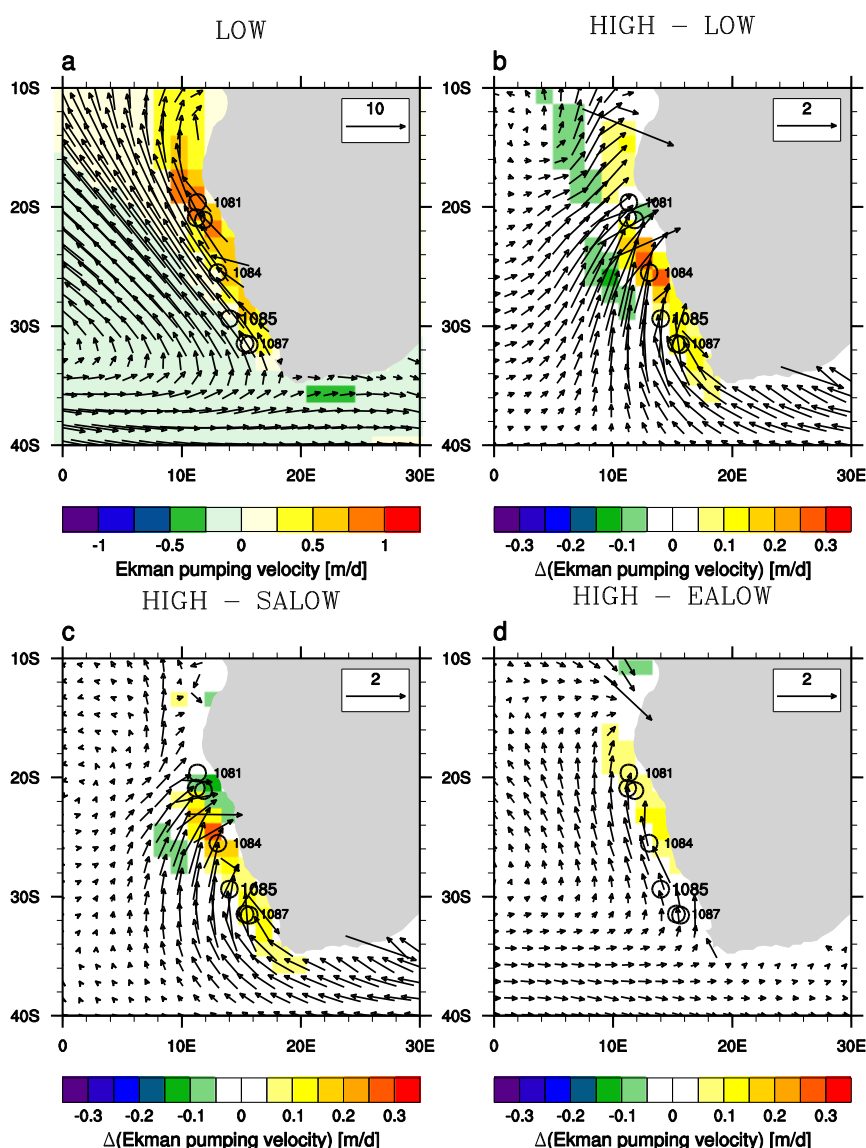


Figure 1: Annual mean wind vectors [m/s] and Ekman pumping velocity. **a**, For lowered African topography (LOW). **b**, Effect of eastern and southern African uplift (HIGH – LOW). **c**, Effect of southern African uplift (HIGH – SALOW). **d**, Effect of eastern African uplift (HIGH – EALOW); positive values indicate a strengthening of upwelling. Note different scaling of panels. The black circles indicate the positions of drill sites from the International Ocean Drilling Program.

The model results for southern and East African uplift clearly indicate a strengthening of the low-level southerly Benguela jet along the southwestern African coast due to mountain uplift from half to full present-day altitude. This induces increased Ekman pumping and upwelling in the Benguela region (Fig. 1a, b). Consequently simulated temperature regionally decreases by up to 3.5°C in the surface ocean. The sensitivity runs show that only considering uplift of South-West Africa cannot explain the entire magnitude of change, which indicates that also East African topography impacts upwelling intensity in the Benguela region (Figure 1b, c). We conclude that African uplift played a key role in strengthening the Benguela upwelling system during the late Neogene.

African vegetation development due to African uplift

Hominid evolution, specifically the split of the hominid-chimpanzee lineages in the late Miocene has long been hypothesized to be linked to the retreat of the tropical rainforest in Africa in the late Miocene. A main cause for the climatic and vegetation change often considered was uplift of Africa⁶. In contrast, more recent proxy data suggest that open grassland habitats were available to human ancestors and apes long before their divergence and that there is no evidence for a closed rainforest in the late Miocene⁷.

With our model experiments we test the impact of the uplift processes on the African-Asian monsoon circulation and consequent changes in tropical African vegetation. According to the model simulations topographic uplift of Africa significantly altered rainfall in Central Africa, which coincides with proxy records from the Congo basin showing a change towards more humid conditions in the late Miocene⁸. In our model simulation this leads to a large increase in the forested area in Central Africa (Fig. 3a) and especially an increase in broadleaved evergreen forest taxa, whereas deciduous forest and grasses decrease. In East Africa also under low-topography conditions a savannah type vegetation coverage characterized by grassland and shrubs exists. Uplift leads to a significant drying which goes along with a reduction in vegetation cover density (Fig. 3b). Hence, despite a drying trend with uplift, also with lowered African topography the conditions were not favorable enough to maintain a closed rainforest in eastern Africa, which is in agreement with the most recent proxy data⁷.

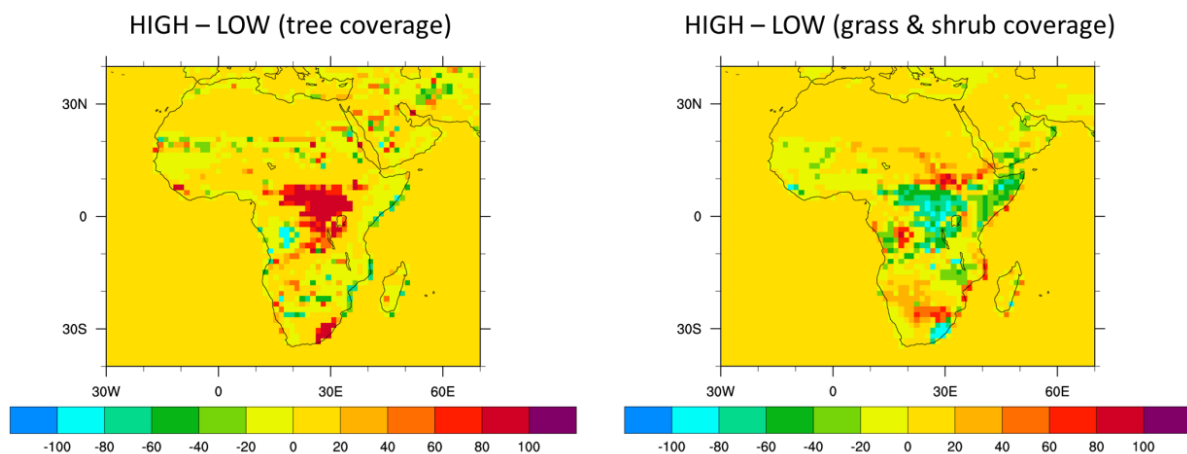


Figure 2: Changes of percentage tree (left) and grass coverage (right) with African uplift.

References:

1. Rommerskirchen, F., Condon, T., Mollenhauer, G., Dupont, L. & Schefuss, E. Miocene to Pliocene development of surface and subsurface temperatures in the Benguela Current system. *Paleoceanography* **26**, PA3216, doi:10.1029/2010pa002074 (2011).
2. Diekmann, B., Falker, M. & Kuhn, G. Environmental history of the south-eastern South Atlantic since the Middle Miocene: evidence from the sedimentological records of ODP Sites 1088 and 1092. *Sedimentology* **50**, 511-529, doi:10.1046/j.1365-3091.2003.00562.x (2003).
3. Prange, M. & Schulz, M. A coastal upwelling seesaw in the Atlantic Ocean as a result of the closure of the Central American Seaway. *Geophysical Research Letters* **31**, L17207 doi:10.1029/2004gl020073 (2004).
4. Roberts, G. G. & White, N. Estimating uplift rate histories from river profiles using African examples. *J Geophys Res-Sol Ea* **115**, B02406, doi:10.1029/2009jb006692 (2010).
5. Chorowicz, J. The East African rift system. *J Afr Earth Sci* **43**, 379-410, doi:10.1016/j.jafrearsci.2005.07.019 (2005).
6. Sepulchre, P. *et al.* Tectonic uplift and Eastern Africa aridification. *Science* **313**, 1419-1423, doi:10.1126/science.1129158 (2006).
7. Feakins, S. J. *et al.* Northeast African vegetation change over 12 m.y. *Geology* **41**, 295-298, doi:10.1130/G33845.1 (2013).
8. Senut, B., Pickford, M. & Segalen, L. Neogene desertification of Africa. *Cr Geosci* **341**, 591-602, doi:10.1016/j.crte.2009.03.008 (2009).

Poster Presentations:

- (1) Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2014): Possible causes of Neogene intensification of the Benguela Upwelling, ICDP/IODP/ODP Kolloquium, Erlangen, Germany.
- (2) Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2013): Mountain uplift and the strength of the Benguela Current and Upwelling System, EGU General Assembly, Vienna, Austria.
- (3) Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2012): Simulating mountain uplift and African climate and vegetation evolution in the late Neogene, 3rd International Conference on Earth System Modelling, Hamburg, Germany
- (4) Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2010): Modeling the impact of mountain lifting in the late Neogene on the African-Asian Monsoon circulation and African vegetation development, PAGES 2nd Global Monsoon Symposium, Shanghai, China.

Oral Presentations:

- (1) Jung, G.; Prange, M.; Schulz, M. (2012): Mountain uplift and the evolution of the African rainbelt in the late Neogene, EGU General Assembly, Vienna, Austria.

Publications:

Jung, G., Prange, M., Schulz, M. (Nature Geoscience, in revision): African uplift – a potential driver of Neogene intensification of the Benguela Upwelling System.

6.5 *hbk00030*: Sea surface topography and mass transport of the Antarctic circumpolar current

HLRN-Projektkenung:	hbk00030
Laufzeit:	IV/2011 – III/2013
Projektleiter:	Prof. Dr. Thomas Jung ^{1,2}
Projektbearbeiter:	L. Nerger ¹ , J. Schröter ¹ , F. Kauker ^{1,3} , R. Schnur ^{1,3} , A. Androsov ¹
Institut / Einrichtung:	¹ Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven ² University of Bremen ³ O.A.Sys GmbH, Hamburg

Introduction

This compute project is related to the DFG-funded project “GEOTOP 3” whose main objective was the determination of the absolute, but temporally changing ocean circulation flow field, and of associated mass and heat transports. The focus is on the Atlantic sector of the Antarctic Circumpolar Current (ACC). A particular focus is on the Weddell Sea, which is one of the most dynamic ocean areas and one of the most critical regions for global climate. The project requires extended runs of a state-of-the-art ocean circulation model including the assimilation of dynamic ocean topography (DOT) derived from satellite altimetry combined with gravimetry and oceanographic in-situ data. The Finite Element Sea-ice Ocean Model (FESOM) with unstructured meshes is used with a global mesh and locally refined resolution in the Atlantic section of the Southern Ocean. The assimilation is performed using ensemble-based methods provided by the Parallel Data Assimilation Framework (PDAF), which makes excellent use of supercomputers. As a large number of processors is required for the assimilation, the project strongly benefits from the resources provided by HLRN.

Methodology

This project uses the Finite Element Sea-ice Ocean Model (FESOM) that solves the hydrostatic ocean primitive equations using the finite element method. FESOM uses unstructured triangular meshed and simulated both the ocean and sea ice on the same unstructured triangular 2D mesh. Regional processes can be simulated with increased local resolution without traditional nesting.

Previous work in this project was performed with a model configuration of constant resolution and without a dynamical oce-ice component (Janjic et al. 2012a,b). Following recent developments in data assimilation algorithms, we apply the Error Subspace Transform Kalman Filter (ESTKF, Nerger et al. 2012) with localization for the assimilation. In addition, a smoother extension is used, which transports the observational information also backward in time. The algorithms are implemented within the Parallel Data Assimilation Framework (PDAF, Nerger and Hiller 2013). In the analysis step of the ESTKF the full model state, consisting of temperature, salinity, sea surface height (SSH), and velocity fields is updated. The fields describing the sea ice are not modified during the analysis step of the assimilation system.

Assimilation Results

The smoother methodology has been assessed using experiments with synthetic observations. A large number of experiments, each over one year of simulation time, were performed. These experiments served to adjust data assimilation parameters.

Next to the experiments with synthetic observations, the real DOT data was assimilated. The experiments show a significant reduction of the deviation of the model state from the observations by the data assimilation. Here, the smoother can reduce the deviation even more than the filter of the ESTKF. Figure 1 shows the root mean square (RMS) deviations from the 10-day forecasts during an assimilation experiment. Combined with the RMS deviations of the filter analysis, a saw-tooth curve is visible that shows to which extent the filter analysis reduces the RMS deviation of each forecast. The RMS deviations from the smoother show smaller deviations with the largest reduction close to the beginning of the experiments.

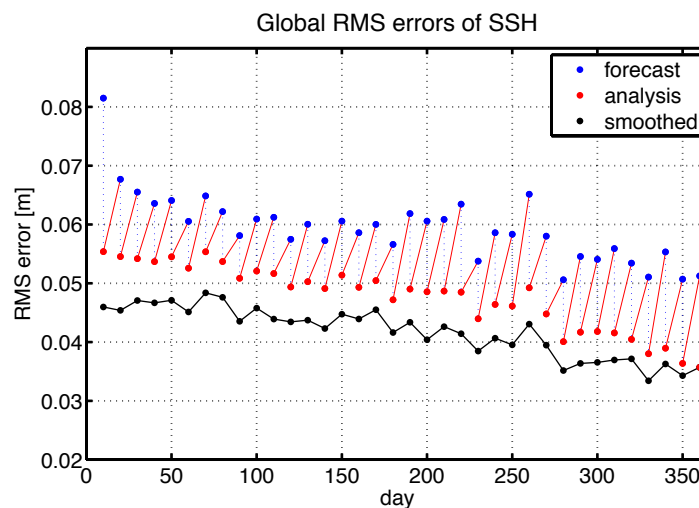


Figure 1: Root mean square differences between the model state and the observations.

Maps of the deviations between the estimated model state and the observations averaged over the one-year experiment are displayed in Figure 2. The left side shows the deviations for the filter analysis while the right hand side shows the deviations for the smoother. The smoother reduces the deviations significantly. However, there are still regions with larger deviations up to about 0.25m. These are caused by biases in the model forecasts.

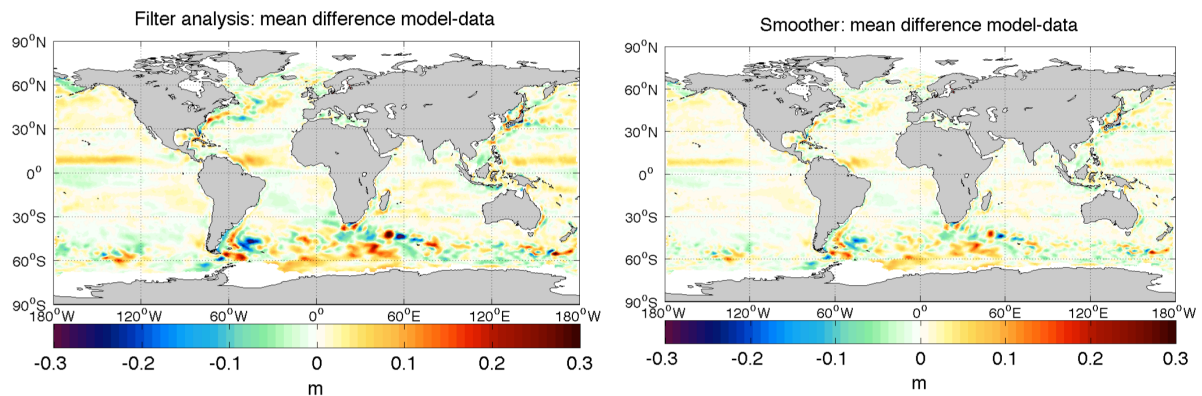


Figure 2: Annual mean difference between the model state and the observations. (left) Difference for the filter analysis; (right) difference for the smoother estimates.

References

- Janjic, T., J. Schröter, A. Albertella, W. Bosch, R. Rummel, R. Savcenko, J. Schwabe, and M. Scheinert, 2012a: *Assimilation of geodetic dynamic ocean topography using ensemble based Kalman filter*. *J. of Geodynamics* **49**, 92-98
- Janjic, T., J. Schröter, R. Savcenko, W. Bosch, A. Albertella, R. Rummel, and O. Klatt, 2012b: *Impact of combining GRACE and GOCE gravity data on ocean circulation estimates*. *Ocean Sci.* **8**, 65-79.
- Nerger, L., T. Janjic, J. Schröter, and W. Hiller, 2012: *A unification of ensemble square-root filters*. *Mon. Wea. Rev.* **140**, 2335-2345.
- Nerger, L., and W. Hiller, 2013: *Software for Ensemble-based Data Assimilation Systems - Implementation Strategies and Scalability*. *Computers and Geosciences*. **55**, 110-118

Poster Presentation

- Nerger, L., A. Albertella, W. Bosch, T. Janjic, R. Schnur, R. Savcenko, M. Scheinert, J. Schröter, and J. Schwabe, 2013: *Assimilation of dynamic topography in a global ocean model*. *Geophys. Res. Abstracts* 15, EGU2013-10271

6.6 *hbk00032*: Evaluation of the multi-resolution global climate model ECHAM6-FESOM

HLRN-Projektkenung:	hbk00032
Laufzeit:	II/2013 – I/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Thomas Jung ^{1,2}
Projektbearbeiter:	Dmitry Sidorenko ² , Thomas Rackow ² , Tido Semmler ² , Qiang Wang ² , Xuezhong Wang ² , Sergey Danilov ² , Jens Schröter ² , Claudia Wekerle ²
Institut / Einrichtung:	¹ also at University of Bremen ² Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven

Abstract

In this project we evaluate a newly established coupled climate model in terms of its fidelity in representing important aspects of the climate system. The coupled model consists of the Finite-Element Sea-Ice Ocean Model (FESOM) and the atmospheric general circulation model ECHAM6. The major difference of this setup to other climate models is the sea ice-ocean component, which employs an unstructured dynamical core. Therefore, FESOM allows refined mesh resolution in areas of particular interest such as the North Atlantic, the tropics, the coastlines, or narrow straits. The aim of this study is to exploit the new setup in order to improve the climate simulations by increasing horizontal resolution in certain key regions of the climate system. The current computations have been performed on multi-centennial time scales, using different spatial resolutions in the tropical region. Extension of these simulations, improvement of the model biases by means of local refinement as well as sensitivity experiments for the Arctic sea-ice extent are planned.

1. Coupled model setup

The *sea ice-ocean* component (FESOM) has been already described and validated in numerous studies with prescribed atmospheric forcing (see eg. Danilov et al., 2004; Wang et al., 2008; Timmermann et al., 2009, Sidorenko et al., 2011). Two FESOM configurations with different meshes are used in this work. The reference mesh (further referred to as **ref**) is shown in figure 1 (*left* panel) and has a nominal resolution of 120km in the open ocean and about 20km in the Arctic. The second mesh (further referred to as **tropics**) is shown in figure 1 (*right* panel) and is identical to the **ref** mesh except for the equatorial belt, where the resolution gradually increases to 20km. It was felt important to use increased resolution in the tropics since biases in the tropical regions are known to have a detrimental effects on the climate of the extratropics (through atmospheric teleconnections), especially over the Northern Hemisphere.

The **atmosphere** is simulated by the 6th generation of the ECHAM general circulation model (ECHAM6), developed at the Max Planck Institute for Meteorology. We use the T63L47 configuration with constant greenhouse gas concentrations for the year 1990.

The **coupling technique** follows the standard practice where moisture and heat fluxes are computed in the atmospheric part. The technical complexity of this setup is linked to an exchange between unstructured and structured meshes. These have different geometry, representation of coastlines, and different rules for the flux definition. New strategies have been developed in order to preserve the flux conservation. The coupling itself has been achieved via the parallel OASIS3-MCT coupler and additional exploitation of a regular exchange mesh. The latter has been introduced in the ocean part.

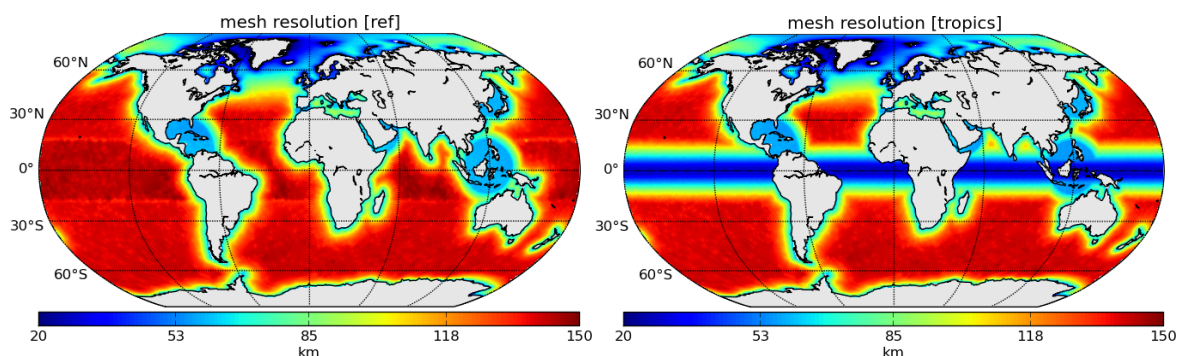


Figure 1: resolutions of the **ref** mesh (*left* panel) and the **tropics** mesh (*right* panel)

2. Model simulations

The system has been run with the **ref** and **tropics** meshes for FESOM and the T63L47 configuration for ECHAM6. We initialize FESOM with the state the ocean attained after a 60 year ocean-only FESOM simulation driven by the CORE2 Global Air-Sea Flux Dataset [Large and Yeager, 2008], and ECHAM6 with the output from the cold start after 5 years. The simulations under constant radiative conditions of the year 1990 with the **tropics** mesh have been extended to ca. 2000 years in order let the model reach the near equilibrium state. In order to address the remedies for improving the mean climate state as compared to observations, some other short simulations (from 100 to 300 years) were performed as well. This was needed to understand the model sensitivity to the change in the parametrization of gravity wave drag in the atmosphere and turbulent mixing in the ocean.

3. Technical achievements

1. The model has been successfully ported to the new HLRN-III machine based on Cray platform. Intel and Cray Fortran compilers were tried to produce the executable binaries and the performance of both was tested. It appeared that the binaries produced with the Cray compiler resulted in a memory leakage which was causing the model to crash after few years of simulation. The cause of the problem was not possible to detect due to the lack of the memory debugging tools for the multi executable applications on the new machine. On another hand, the binaries produced with the Intel Fortran compiler were giving stable runs but the model results were not reproducible unless the compiler options `-fp-model precise -no-fast-transcendentals` were specified. This is why all model

binaries produced after migration to the new HLRN-III machine are compiled with the Intel Fortran compiler and *-fp-model precise -no-fast-transcendentals* options switched on.

2. The Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc) solver which is required by the ocean component has been replaced with the pARMS solver package. The usage of pARMS facilitated porting to the new platform.

4. Some model results

Existing simulations have been analyzed for differences between model results and observations, long term trends and variability. As an illustration of model skill, Fig. 2 depicts the mean sea ice thickness and concentration patterns in ECHAM6-FESOM in the Northern and Southern hemispheres, which are comparable to reanalysis and observational estimates. The comprehensive analysis is summarized in the works by *Sidorenko et al. (2014)* and *Rackow et al. (2014)*. It is shown that under moderate resolutions the climate state obtained by ECHAM6-FESOM mainly resembles those from other state-of-the-art coupled climate models. The comparison of model results on **ref** and **tropics** meshes reveals that an isotropically increased tropical resolution leads to a more realistic equatorial current system and a smaller cold SST bias in the tropical Pacific.

However, the moderate resolution settings of ECHAM6-FESOM still have a number of model shortcomings, shared with many other climate models. Those include intermittent periods of winter 'freezing' of the whole Labrador Sea, and the development of large temperature and salinity biases in the deep North Atlantic. The former has an imprint on the mean sea ice patterns (Fig. 2). The sensitivity study performed within this project suggests us to argue that the deep ocean bias, presumably caused by a systematic shift in the surface winds, is likely a prerequisite for the Labrador freezing events. Understanding and rectifying these issues will be the subject of future research.

5. Ongoing activities

The current activities in the group enclose four different scopes:

1. Comparison of performance of the ECHAM6-FESOM to other existing climate models
2. El Niño-Southern Oscillation (ENSO) and North Atlantic Oscillation (NAO) and the influence of locally increased resolution
3. Developing strategies for improving the cold Labrador Sea bias by means of increasing resolution over Northern North Atlantic.
4. Sensitivity experiments on the response of the climate system to vanishing Arctic sea-ice. Simulations branching off from one of the existing simulations (dependent on the over-all performance for current climate conditions) with reduced sea-ice cover are planned.

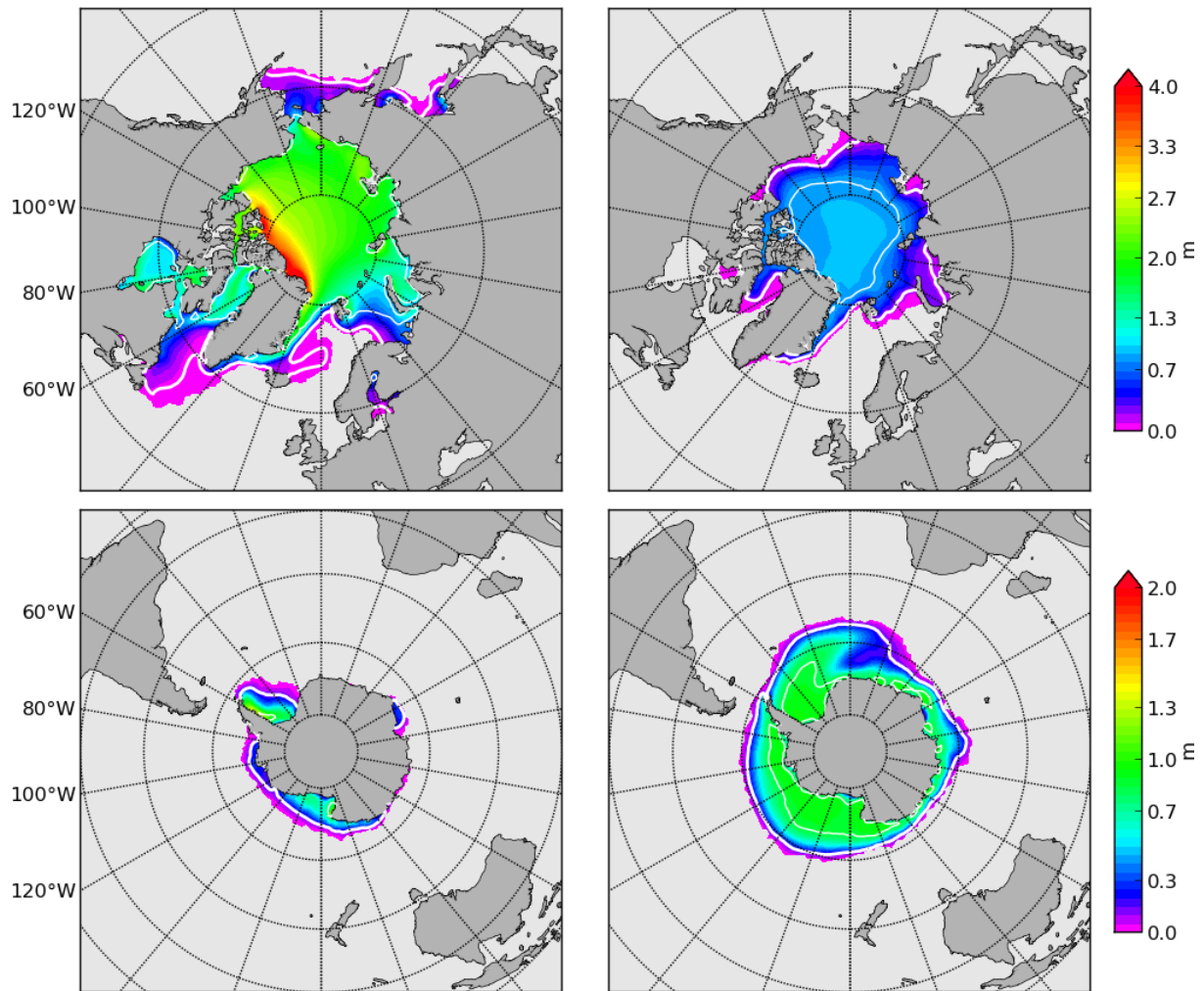


Figure 2: The time averaged ice thickness (m) in March (left) and September (right) for the Northern Hemisphere (upper panel) and the Southern Hemisphere (lower panel). The time average was taken over years 51 to 350 of the coupled model run. The thick and thin contours indicate mean ice concentrations of 15 and 85%, respectively.

References

Danilov S., G. Kivman, and J. Schröter, 2004, *A finite-element ocean model: principles and evaluation*, *Ocean Modell.*, **6**(2):125–150

Rackow, T., Goessling, H., Jung, T., Semmler, T., Sidorenko, D., Handorf, D., 2014. *Towards multi-resolution global climate modeling with ECHAM6-FESOM. Part II: Climate variability*. *Clim. Dyn.* In preparation.

Sidorenko, D., Rackow, T., Jung, T., Semmler, T., Barbi, D., Danilov, S., Dethloff, K., Dorn, W., Fieg, K., Goessling, H. F., Handorf, D., Harig, S., Hiller, W., Juricke, S., M. Losch, Schröter, J., D. Sein, Wang, Q. 2014. *Towards multi-resolution global climate modeling with ECHAM6-FESOM. Part I: Model formulation and mean climate*. *Clim. Dyn.* submitted.

Sidorenko, D., Wang, Q., Danilov, S., Schröter, J., 2011. *FESOM under Coordinated Ocean-ice Reference Experiment forcing*. *Ocean Dynamics*, **61** (7), 881–890.

Timmermann R., S. Danilov, J. Schröter, C. Böning, D. Sidorenko, and K. Rollenhagen, 2009, *Ocean circulation and sea ice distribution in a finite element global sea ice-ocean model*, *Ocean Modell.*, **27** (3–4), 114–129.

Wang Q., S. Danilov, and J. Schröter, 2008, *Finite element ocean circulation model based on triangular prismatic elements, with application in studying the effect of topography representation*, *J. Geophys. Res.*, **113**, C05015, doi:10.1029/2007JC004482.

6.7 *hbk00034*: Ice sheet – ice shelf – ocean interaction in the marginal seas of the Southern Ocean

HLRN-Projektkenung:	hbk00034
Laufzeit:	III/2013 – II/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Peter Lemke ^{1,2}
Projektbearbeiter:	Dr. Ralph Timmermann ² , Mathias van Caspel ² , Yoshihiro Nakayama ² , Catalin Patilea ²
Institut / Einrichtung:	¹ University of Bremen ² Alfred-Wegener-Institut Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung

1. Overview

In this project we use a global sea ice-ice shelf-ocean model to study the interaction between the deep Southern Ocean off the continental slope, the ice shelves fringing the Antarctic continent, and the Antarctic Ice Sheet. With its unstructured grid, the Finite Element Sea ice Ocean Model considering Ice Shelves (FESOM-IS; Timmermann et al., 2012) allows for an adequate resolution of the key regions, namely the grounding lines, the ice shelf fronts, and the shelf break / slope that surrounds the Antarctic continent. Special emphasis is laid on the water mass exchange between the deep ocean and the continental shelves, the pathways of water in the sub-ice cavities, and the implications for the Antarctic ice sheet mass budget. With the high computational burden imposed by the use of a finite-element model (to which there is no alternative if local processes are to be represented in a global system), the project depends heavily on resources provided through the HLRN.

2. Current Results

2.1 Workpackage 1: Filchner-Ronne Ice Shelf

FESOM simulations forced with the atmospheric output from two climate models for present-day climate and two future climate scenarios have revealed the potential of a rapidly increasing basal mass loss particularly for the large cold-water ice shelves in the Ross and Weddell Seas (Timmermann and Hellmer, 2013). The large spread in model results could be traced back to uncertainties in the freshwater budget on the continental shelf, which is governed by sea ice formation. Differences in sea ice formation, in turn, follow the regional differences between the atmospheric heat fluxes imprinted by the climate models. In simulations with output from two newer climate models engaged in the IPCC's Fifth Assessment Report, we now find that uncertainties arising from inter-model differences in high latitudes have reduced considerably. Projected heat fluxes and thus sea ice formation over the Southern Ocean continental shelves have converged to an ensemble with a much smaller spread. For most of the ten larger Antarctic ice shelves, a gradual, but accelerating, increase of basal melting during the 21st century is a robust feature throughout the various realisations.

To investigate the dynamic response of the ice streams/ice sheet to increased ice shelf basal melt rates, we combine the FESOM-IS with the *Revised Ice Model Based on frAnk pattYn* (Rimbay) with an asynchronous coupling technique, where the asynchronicity results from the different response times of ice and ocean. While adjustment of the modelling domain to a

modified ice shelf geometry is rather straightforward for a finite-difference model, the FESOM mesh only exists in the ocean and has to satisfy certain criteria in order to ensure computational stability. To avoid extensive remapping of properties, we initially generate a grid that covers the full region that may potentially become “ocean” during the course of the integration. Next to the now-existing cavity, the initial grid thus also comprises the adjacent areas of ice that is now grounded but may become floating as the grounding line retreats (Fig. 1). Horizontal resolution in this area is about 1.5 km to describe a possible grounding line migration as smoothly as possible. Model runs are then initialized with a present-day geometry, removing all the elements that are in areas that are characterized by grounded ice now, renumbering nodes accordingly, and then subsequently restoring pre-computed elements in areas where the grounding line retreats.

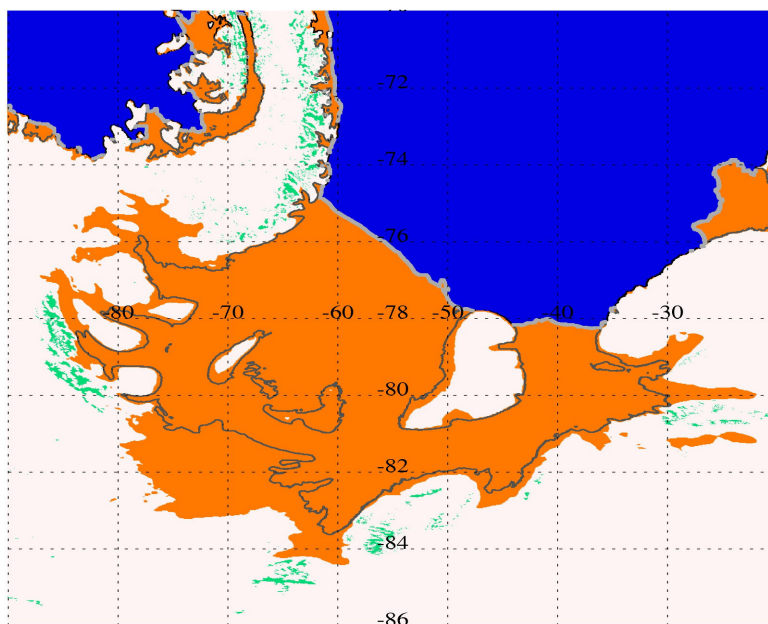


Figure 1: Region of potential grounding line migration for Filchner-Ronne Ice Shelf in the Weddell Sea. Blue areas denote the open ocean, orange areas indicate the area of floating ice assuming a 30% ice thickness reduction. Dark grey lines represent the current location of the grounding line (BEDMAP-2), light grey lines mark the ice shelf front (which is assumed to remain unchanged in our setup). Green patches represent bare rock outcrops.

Next to the horizontal gridding issues outlined above, this new FESOM-IS configuration differs from the previous setup also in that a terrain-following coordinate with a fine vertical resolution not only near the surface but also towards the bottom is used. Results from the first 50 years of model simulations indicate that this improves the representation of the near-bottom currents on the continental shelf considerably.

2.2 Workpackage 2: Larsen Ice Shelf and western Weddell Sea shelf processes

Work in this workpackage so far has concentrated on the analysis of observational data. We have found strong indications that the Larsen shelf is a source region for a lighter flavour of the dense water that is produced on the Weddell Sea continental shelves (van Caspel et al., 2014). In contrast to the Weddell Sea Bottom Water originating from the southern continental

shelf, this water seems likely to leave the Weddell Sea and feed the stream of Antarctic Bottom Water directly. Modelling studies are being designed to test this hypothesis.

2.3 Workpackage 3: Modeling Amundsen Sea

In the Amundsen Sea, warm Circumpolar Deep Water (CDW) intrudes onto the continental shelf and flows into ice shelf cavities of West Antarctic Ice Sheet, resulting in high basal melt rates. However, none of the high resolution circumpolar or global-domain models resolving all the small ice shelves around Antarctica was able to reproduce a realistic CDW flow onto the Amundsen Sea continental shelf so far; most of the previous studies show far too low simulated bottom potential temperatures at the Pine Island Ice Shelf front. Using FESOM-IS with a high resolution along the continental shelf break, we are now able simulate the CDW intrusion onto the Amundsen Sea continental shelf and reproduce realistic melt rates of ice shelves in West Antarctica. The model results show CDW intrusion through submarine glacial troughs (consistent with observations and regional model studies); the simulated CDW properties at the bottom are close to observations (Fig. 3).

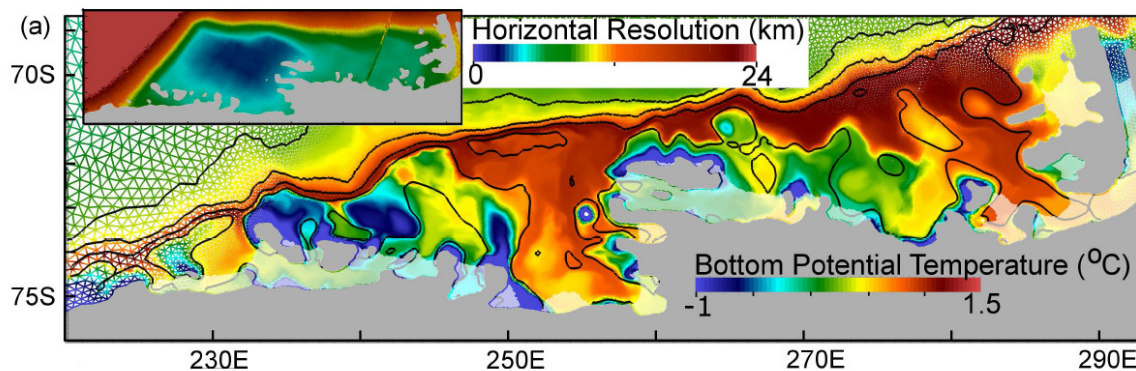


Figure 3: Simulated bottom potential temperature in the Amundsen Sea sector of a global FESOM-IS configuration that uses 2.5 km horizontal resolution over the eastern Amundsen Sea continental shelf (Nakayama et al., 2014)

To investigate the sensitivities, parameter studies addressing horizontal resolution, atmospheric forcing dataset, horizontal diffusivity, and the effect of grounded icebergs were conducted. We find that to simulate the CDW intrusion in a realistic way, a horizontal resolution of about 5 km or smaller is required. The choice of the atmospheric forcing dataset is also important, as a cold bias in the NCEP reanalysis prevents warm CDW to intrude onto the continental shelf. Results are currently being prepared for publication in Ocean Modelling.

3. Outlook

Ongoing and future work concentrates on the simulations with the FESOM+Rimbay coupled model and on modelling the ice shelf water outflow / dense water formation in the Larsen Ice Shelf area. In the Amundsen Sea, simulations and publications of results will be finalized before the end of the year.

4. Publications from this project

van Caspel, M., M. Schröder, O. Huhn, and H. Hellmer: Dense water production in the Larsen Ice Shelf region. *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 16, EGU2014-2556, 2014.

Nakayama, Y., R. Timmermann, M. Schröder, and H. H. Hellmer: On the difficulty of modeling the Amundsen Sea embayment. *Ocean Modelling* (in prep.)

Other references

Timmermann R., Wang Q., Hellmer H.H., 2012. Ice shelf basal melting in a global finite-element sea ice-ice shelf-ocean model. *Annals of Glaciology*, 53(60), 303-314, doi:10.3189/2012AoG60A156.

Timmermann, R., Hellmer, H.H., 2013. Southern Ocean warming and increased ice shelf basal melting in the 21st and 22nd centuries based on coupled ice-ocean finite-element modelling. *Ocean Dynamics* (submitted)

6.8 *hbp00003*: Encounters of Neutron Stars

HLRN-Projektkenung:	hbp00003
Laufzeit:	IV/2010 – III/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. C. Lämmerzahl ¹ , Prof. Dr. S. Rosswog ²
Projektbearbeiter:	C. Lämmerzahl, S. Rosswog
Institut / Einrichtung:	1: Universität Bremen 2: Jacobs University Bremen

1. Overview

- Mergers of two compact objects (either two neutron stars or a neutron star and a black hole) are the prime targets of existing **gravitational wave** detectors
- Such mergers eject very neutron-rich matter which (via a so-called “rapid neutron capture process”) produces the **heaviest elements in the Universe** (like lead, platinum or gold)
- There is an interesting link between these two topics: it is expected that the first gravitational wave detections will be helped by coincident electromagnetic transients that are produced from the radioactive decay of freshly produced heavy elements (so-called “**Macronovae**”)
- We had used a large part of our HLRN computing time to predict such Macronovae. In June 2013, the first ever example of a Macronova has been detected (Tanvir et al. Nature 500, 547 (2013)) with properties close to our predictions.

2. Introduction

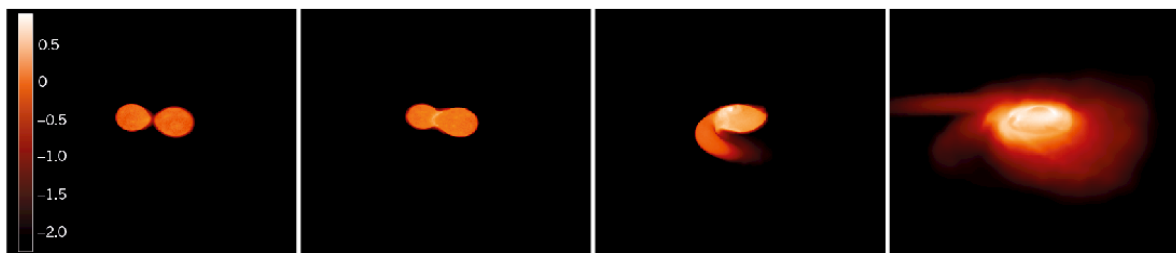


Figure 1: Merger of a 1.3 and a 1.4 M_{\odot} neutron star. Shown are volume renderings of the temperature. From Rosswog, Nature 500, 535 (2013).

Stars with more than eight solar masses end their lives in cataclysmic fireworks called supernovae. During this explosion their luminosity rivals those of whole galaxies. Supernovae eject most of their mass into space where it forms the basis for the next generation of stars. The stellar centres, however, become enormously compressed and – if the star was not too massive – the explosion produces a neutron star, or otherwise a black hole of a few solar masses. Neutron stars can be thought of as gigantic atomic nuclei: with a mass of about 1.4 solar masses and radii of only 12 km their densities exceed 10^{14} gcm^{-3} , the density of an atomic nucleus.

In some cases these exotic stars are observed in binary systems where they orbit their common centre of mass. Due to their enormous compactness such stars can revolve around each other at very small separations and in such systems strong-field gravity effects become important, making such systems excellent laboratories to test theories such as Einstein's theory of General Relativity. In fact, the first indirect evidence for the existence of gravitational waves came exactly from such a system and it earned its discoverers, Russel Hulse and Joseph Taylor, the Nobel Prize for Physics in 1993. One implication of the emission of gravitational waves is that the binary orbit shrinks further until the stars finally merge. This releases gigantic amounts of gravitational energy, more than the Sun could radiate away during the whole lifetime of the Universe. The final merger most likely causes (a fraction) of the brightest explosions in the Universe since its beginning in the Big Bang, so-called Gamma-Ray Bursts.

A variant to this theme are dynamical collisions of compact objects. In the solar neighbourhood the density of stars is only moderate, there is about one star in every cube of 3 light years of edge length. There are however, regions in the Universe where this is very different: in the cores of Globular Star Clusters the same volume can contain as many as 100 millions of stars and under these conditions stars frequently suffer direct collisions. If two compact objects collide their overall energetics is similar to merger but their dynamics – and therefore their gravitational wave emission – is very different.

In our HLRN project we study the question how different mergers and collisions are in a) their gravitational wave, b) neutrino and c) electromagnetic emission. Moreover, we want to understand d) what their contribution to the cosmic inventory of heavy nuclei is.

3. Recent Results

We have performed a very large set of simulations where we have explored the parameter space of neutron star mergers with unprecedented breadth. One example of a merger between a 1.3 and 1.4 solar mass neutron star is shown in Fig.1. Such a merger ejects $\sim 1\%$ of a solar mass in extremely neutron rich matter: out of 100 nucleons only 3 are protons, the rest are neutrons. These are ideal conditions for the formation of heavy elements via "rapid neutron capture" or "r-process". Indeed our calculations show that in this way a very robust pattern of nuclear abundances is produced that is very similar to what is observed throughout the Universe (the solar system and various stars). A major focus in the last year has been this type of element formation and in particular the electromagnetic transients that are produced by the radioactive decays of the freshly produced nuclei. These transients called "Macronovae" are a crucial link between different phenomena: gamma-ray burst, enormously bright flashes of gamma-rays, gravitational waves and – of course – the formation of the heaviest elements in the cosmos. Macronovae are a very important electromagnetic signal that is expected to accompany the gravitational waves from the inspiral of two neutron stars or of a neutron star and a black hole. It gains its importance from the complementary information it provides: from the gravitational wave signal one can extract the parameters of the merging system (masses, spins etc.), but – since the sky localization through gravitational waves is very poor (of order 100 square degrees) – one is essentially blind with respect to the astrophysical environment in which the merger occurs. If detected coincidentally in electromagnetic waves, one learns in addition to the binary parameters also about the astrophysical environment, say the type of host galaxy, the density of the surrounding medium etc. This can provide on the one hand confidence about the nature of the gravitational wave source, but on the other hand also constrains the stellar evolution of binary stars.

We had predicted such electromagnetic transients several years ago (e.g. Rosswog, ApJ 634, 1202 (2005)), but have recently substantially refined our models on this topic [7,8]. In particular, our calculations indicated that the electromagnetic signal should peak in the infrared on a time scale of several days, see Fig. 2. On June 3, 2013 the first ever such Macronova had been observed (Tanvir et al. Nature 500, 547 (2013); Berger et al., ApJ 774, 23) in coincidence with the short gamma-ray burst GRB130603B and – as predicted – peaking after several days in the infrared. If this interpretation is correct, this is the first evidence for a link between Gamma-ray bursts, neutron star mergers and heavy element nucleosynthesis.

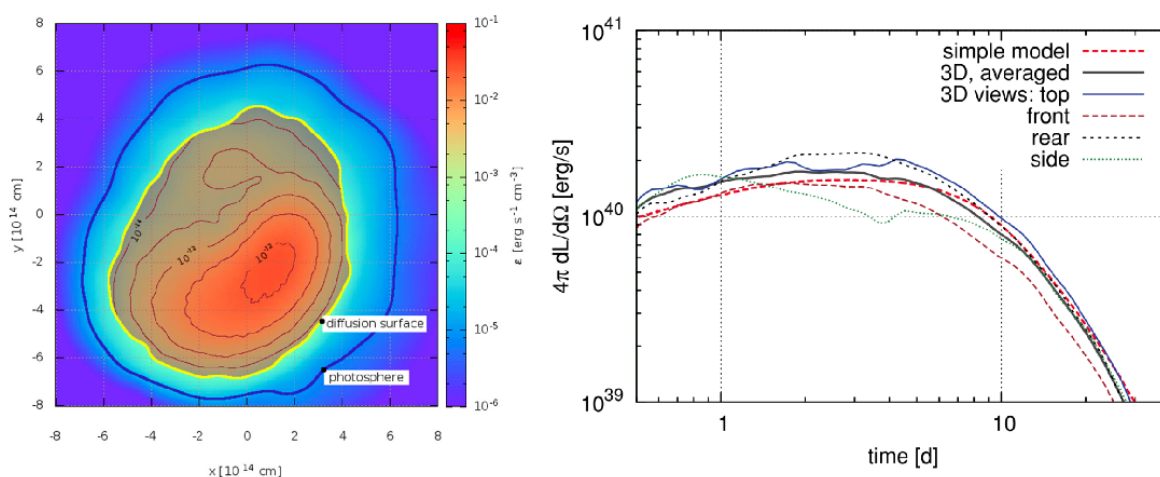


Figure 2: The merger remnant long (100 years) after the actual merger event. The remnant has been inflated through the radioactive decays of the freshly produced heavy elements. Shown is the radiating volume, split up into a diffusion volume and a photosphere. Right: time evolution of the expected near-infrared transient resulting from the production of the heavy elements. Both figures from Grossman et al., MNRAS 439, 757 (2014). This prediction was made in May 2013 (our arXiv number: arXiv:1307.2943) and on June 3, 2013 such an event has actually been observed for the first time (Tanvir et al., Nature 500, 547 (2013); see also Rosswog, Nature 500, 535 (2013)).

Outlook

We have investigated in detail the fate of two compact objects, either neutron stars or a neutron star with a stellar-mass black hole, that either merge after having been driven together by the emission of gravitational waves or that collide dynamically, say, in a Globular Star Cluster. We have predicted in detail the observable signatures in various channels: gravitational waves, neutrinos and electromagnetic emission. It seems that in June 2013 the first ever Macronova event has been detected, with properties close to our predictions. Such predictions will substantially enhance the effective sensitivity of existing gravitational wave detector facilities such as Geo600, LIGO, VIRGO. Our future efforts will focus on enhancing and refining further the physics input in our simulations (more General Relativity, more refined nuclear heating physics) and implementing computationally more efficient gravity solvers.

Publications from 2013 HLRN results

- [1] *The dynamic ejecta of compact object mergers and eccentric collisions*, S. Rosswog, Philosophical Transactions A, vol. 371, issue 1992, pp. 20120272 (2013)
- [2] *An accurate Newtonian description of particle motion around a Schwarzschild black hole*, E. Tejeda, S. Rosswog, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 433, 1930 (2013)
- [3] *The electromagnetic signals of compact binary mergers*, T. Piran, E. Nakar, S. Rosswog, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 430, 2121 (2013)
- [4] *The multimessenger picture of compact object encounters: binary mergers versus dynamical collisions*, S. Rosswog, T. Piran, E. Nakar, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 430, 2585 (2013)
- [5] *Radioactive glow as a smoking gun*, S. Rosswog, Nature 500, 535 (2013)
- [6] *Europium production: neutron star mergers versus core-collapse supernovae*, Matteucci, F.; Romano, D.; Arcones, A.; Korobkin, O.; Rosswog, S.; Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 438, 2177 (2014)
- [7] *The long-term evolution of neutron star merger remnants - I. The impact of r-process nucleosynthesis*, Rosswog, S.; Korobkin, O.; Arcones, A.; Thielemann, F.-K.; Piran, T., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 439, 744 (2014)
- [8] *The long-term evolution of neutron star merger remnants - II. Radioactively powered transients*, Grossman, D.; Korobkin, O.; Rosswog, S.; Piran, T., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 439, 757 (2014)

Selection of scientific talks where this work was presented

- *The Multi-Messenger picture of compact binary mergers*
Colloquium at the Centre for Astrophysics, Harvard, Boston, USA, March 13, 2014
- *The longterm evolution of neutron star merger ejecta*
Conference on Supernovae and Gamma-ray Bursts, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Nov 14, 2013
- *The first century in the nuclear and dynamic evolution of neutron star merger remnants*,
Longterm workshop *Gravitational waves and numerical relativity*,
Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, May 31, 2013
- *Compact binary mergers as possible production sites for heavy nuclei*
WE-Heraeus-Seminar: Nuclear Masses and Nucleosynthesis, Bad Honnef, April 26, 2013
- *Compact binary mergers as factories for heavy nuclei*
Kolloquium Sternwarte Hamburg, April 17, 2013

6.9 *hbp000015*: First-principles Study of Surface Chemistry and Doping of Topological Insulators (extension)

HLRN-Projektkenung:	hbp00015
Laufzeit:	01.07.2013 – 30.06.2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Thomas Frauenheim ¹ ,
Projektbearbeiter:	Dr. Liangzhi Kou ¹ , Dr. Binghai Yan ²
Institut / Einrichtung:	1: Bremen Center for Computational Materials Science, Universität Bremen, Am Fallturm 1, 28359 Bremen 2: Max-Planck-Institut f. Chemische Physik fester Stoffe, 01187 Dresden

Overview

Recent discovery of the TIs represents a new quantum state of matter, which is characterized by peculiar metallic edge state due to a topological character of the bulk wave functions. The finding of a Bi₂Se₃ family represents a great accomplishment in identifying three-dimensional (3D) TIs since they are composed of materials with very strong SOC. In stark contrast, the search for 2D TIs has so far been much less fruitful. This situation calls for a strong effort in both experimental exploration and theoretical design to identify robust 2D TIs, which are highly desirable in electronic nanodevices. In the project, we proposed to reveal a family of new heterogeneous 2D TI with a large nontrivial band gap and high structural stability using first-principle calculations and tight binding modeling. By the extensive simulations in HLRN, our theoretical results will pave a way to utilize these novel topological surface states for transport experiments and device fabrications.

Current results

In the past year, the applicants made a significant progress in the research area, has produced a few original findings in this area. In particular, the key contributions related to the current research programs are as follows:

(a) the theoretical predicted a new 2D heterogeneous TI for the first time, see figure 1. This work has been published in *Nano Letters* in 2013 and has attracted extensive research interesting along the direction. It's demonstrated, a new 2D TI comprising a graphene layer sandwiched between two Bi₂Se₃ slabs that exhibits a large intrinsic bulk band gap of 30–50 meV, making it viable for room-temperature applications. Distinct from previous strategies for enhancing the intrinsic spin-orbit coupling effect of the graphene lattice, the present graphene-based TI operates on a new mechanism of strong inversion between graphene Dirac bands and Bi₂Se₃ conduction bands. Strain engineering leads to effective control and substantial enhancement of the bulk gap. Recently reported synthesis of smooth graphene/Bi₂Se₃ interfaces demonstrates the feasibility of experimental realization of this new 2D TI structure, which holds great promise for nanoscale device applications.

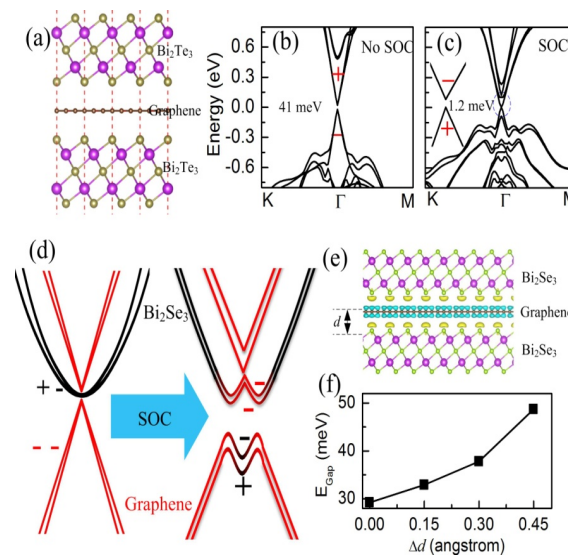


Fig.1: (a) Bi₂Te₃/graphene QW structure. Calculated electronic band structure of the QW (b) without and (c) with the SOC. (d) Mechanism illustration. (f) Pressure dependence of the energy gap.

(b) the discovery of proximity enhanced Quantum Spin Hall (QSH) in Graphene. Graphene is the first model system of two-dimensional topological insulator, known as QSH insulator. The QSH effect in graphene, however, has eluded direct experimental detection because of its extremely small energy gap due to the weak spin-orbit coupling. A giant (three orders of magnitude) proximity induced enhancement of the TI energy gap is predicted in the graphene layer that is sandwiched between thin slabs of Bi₂Te₃. This gap (1 meV) is accessible by existing experimental techniques. The tight-binding study shows the QSH state in graphene is driven by the Kane-Mele interaction in competition with Kekule deformation and symmetry breaking. The present work identifies a graphene-based TI with an observable and controllable bulk energy gap in the graphene layer, thus opening a new avenue for direct verification and exploration of the long-sought QSH effect in graphene.

(c) demonstrated an economic strategy to opening the band gap of bilayer graphene that places a bilayer graphene sheet sandwiched between two cladding layers of Bi₂Te₃. Ab initio and tight-binding calculations show that proximity enhanced spin-orbit coupling effect opens a large (44 meV) band gap in bilayer graphene without breaking its lattice symmetry, the band gap can be effectively tuned by interlayer stacking pattern and significantly enhanced by interlayer compression. The quantum-well structure is expected to be especially robust since it does not require an external power supply to open and maintain a band gap. The paper has been accepted by **Nanoscale**.

Outlook

Although some progresses have been made based on the simulations, the larger nontrivial bulk gap and more significant quantum spin hall effects are still expected in 2D topological insulators. By using the strategy of enhancing the proximity spin orbit coupling interaction in sandwiched graphene, the 2D TI, which is suitable for using in room environments and practical application, will be theoretical predicted. Along the direction, there are numerous strong spin orbit coupling candidates that can be used as cladding layers, including transition metal dichalcogenides, BiTeI and so on. A further extensive searching and confirming is required.

Publications (resulting from work done at HLRN)

1. **L. Kou**, B. Yan, F. Hu, S.-C. Wu, T. Wheling, C. Felser, C. Chen and T. Frauenheim, Graphene-Based Topological Insulator with an Intrinsic Bulk Band Gap above Room Temperature, *Nano Lett.* **13**, 6251 2013.
2. **L. Kou**, F. Hu, B. Yan, T. Wheling, C. Felser, T. Frauenheim and C. Chen, Proximity Enhanced Quantum Spin Hall State in Graphene, arXiv:1309.6653 (2013). (Phys. Rev. Lett. Under Review)
3. **L. Kou**, F. Hu, B. Yan, T. Frauenheim and C. Chen, Opening Band Gap without Breaking Lattice Symmetry: A New Route toward Robust Graphene-Based Nanoelectronics, arXiv:1402.6498 (2014). (Nanoscale. Accepted)

6.10 *hbp00019*: First-principles investigations of functionalized semiconductor nanostructure

HLRN-Projektkenung:	hbp00019
Laufzeit:	IV/2013 – III/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Thomas Frauenheim,
Projektbearbeiter:	Dr. Michael Lorke
Institut / Einrichtung:	Bremen Center for Computational Materials Science, Universität Bremen, Am Fallturm 1, 28359 Bremen

I. Überblick

Das Verständnis der atomistischen Details und der physikalischen Prozesse organischer Moleküle an Halbleiteroberflächen ist essentiell für den Einsatz solcher Systeme für Anwendungen in der Optoelektronik, in der Photovoltaik oder für Sensoren. In diesem Projekt werden theoretische Untersuchungen durchgeführt, um den Einfluss von Oberflächenmodifikationen auf die optoelektronischen von ZnO basierten Halbleiternanostrukturen zu bestimmen.

II. Aktuelle Resultate

Festkörper und Halbleiterlaser zählen zu den verbreitetsten Lasertypen, z.B. für optische Kommunikation, medizinische Anwendungen sowie zum Schneiden und Schmelzen in der Materialbearbeitung. Elektrisch gepumpte Halbleiterlaser basieren auf der Rekombination von Elektronen und Löchern an pn-Übergängen oder in Nanostrukturen. Zusätzlich benötigen sie Reflektion des Lichts die im einfachsten Fall von den Seiten des Resonators geliefert wird.

Es gibt aktuell starkes technologisches Interesse an der Oberflächenfunktionalisierung von Halbleiter Nanostrukturen um neuartige sogenannte „Hybridmaterialien“ zu erzeugen die neuartige Eigenschaften besitzen. Dazu gehören Sensoren mit hoher Selektivität und Sensitivität genauso wie Solarzellen und Leuchtdioden. Im Vergleich zu zweidimensionalen planaren Materialien wo eine Funktionalisierung nur die Oberflächenschicht betrifft, ist die zur Verfügung stehende Fläche in Nanostrukturen erheblich größer. Solch eine höhere effektive Oberfläche ist im Besonderen für Solarzellen und Biosensoren wünschenswert. Eins der aktuell vielversprechendsten zugrundeliegenden Materialsysteme ist Zinkoxid (ZnO), das in diesem Projekt untersucht wird.

Das Ziel dieses Projektes ist die Untersuchung struktureller, elektronischer und optischer Eigenschaften von oberflächenmodifizierten ZnO Nanodrähten unter Verwendung von Dichtefunktionaltheorie und Vielteilchenmethoden wie z.B. der GW Selbstenergie und der Bethe-Salpether Gleichung. Eine mögliche Strategie zur Oberflächenmodifikation involviert das Anlagern von (organischen) funktionalen Molekülgruppen an die Oberfläche der Nanodrähte. Zusätzlich können die optischen Eigenschaften solcher Nanodrähte durch Dotierung verändert werden. Durch die Kontrolle des Interfaces zwischen Halbleiter und organischer Molekülgruppe und durch Kontrolle des Dotierprofils auf atomistischer Ebene kann die optimale Funktionalisierung für optoelektronische Anwendungen identifiziert werden.

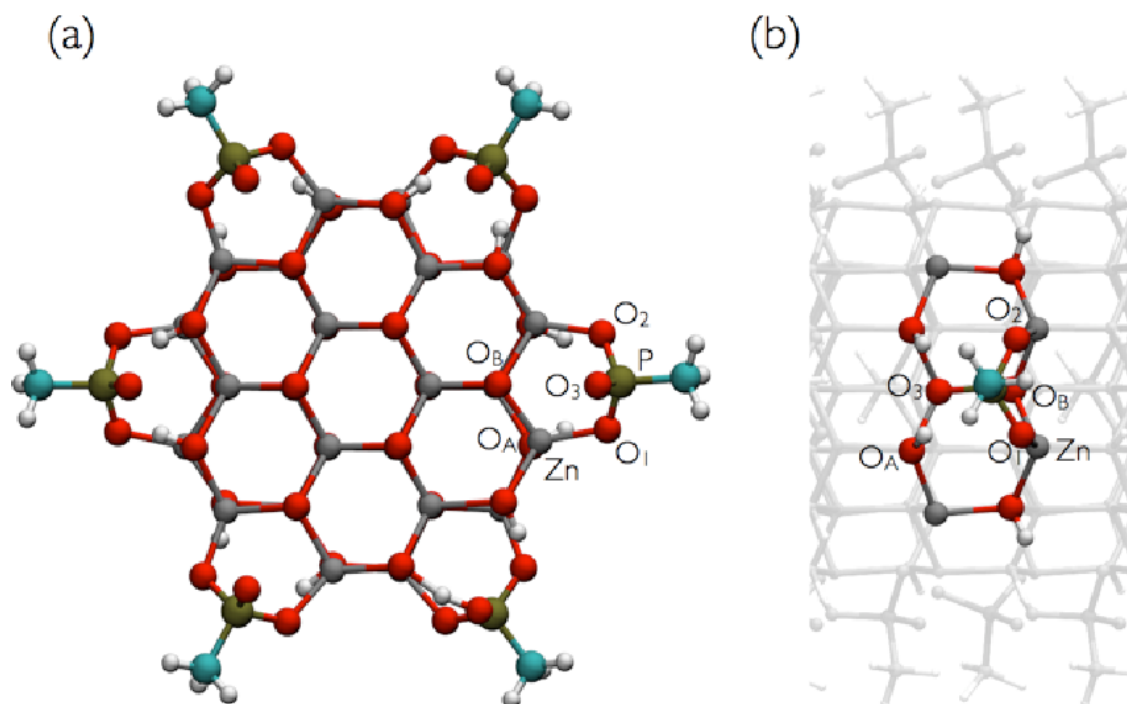


Fig. 1: (a) Draufsicht (b) Seitenansicht des ZnO Nanodrahtes, funktionalisiert mit Phosphonsäure

Theoretische Einsicht kann an dieser Stelle helfen die Kosten für die Entwicklung zu minimieren, da die Zielstruktur vordefiniert werden kann. Unsere berechneten Eigenschaften werden in enger Kooperation mit experimentellen Gruppen mit realen Nanodrahtstrukturen verglichen.

Unsere Berechnungen werden mit dem im VASP-Paket implementierten DFT im Rahmen der generalisierten Gradientennäherung (GGA) durchgeführt. Dabei wird sowohl das Perdew-Burke-Ernzenhof (PBE) Austauschkorrelationspotential als auch das PBE0 Hybrid-Austauschkorrelationspotential eingesetzt. Optimierungen der Geometrie wurden mit PBE durchgeführt, im weiteren wurden die optischen Eigenschaften für die relaxierte Geometrie mit PBE0 berechnet.

Wir untersuchen hier Phosphonsäure ($-PO(OH)_2$) als funktionale Gruppe auf der Oberfläche von dünnen ZnO Nanodrahtstrukturen. Die Struktur ist in Abb. 1 dargestellt. Wir finden eine zweizählige Bindung der O_1 und O_2 Atome an die Zink Atome der Oberfläche. Dies stimmt mit experimentellen Befunden in Referenz [1] überein, in denen gefunden wurde das die Bindung an die Oberfläche zwei- oder dreizählig sein muss. Die Bindung ist hochsymmetrisch, da die Bindungslängen O_1 -Zn und O_2 -Zn praktisch identisch sind. Diese Bindung ist mit einem Transfer von 2 Wasserstoffatomen der Molekülgruppe zu den O_A Atomen der Oberfläche verbunden. Desweiteren relaxiert die Nanodraht Oberfläche im Vergleich zum nicht-funktionalisiertem Nanodraht und die Zn-O Bindungslänge nimmt vergleichbare Werte wie im ZnO Volumenkristall an.

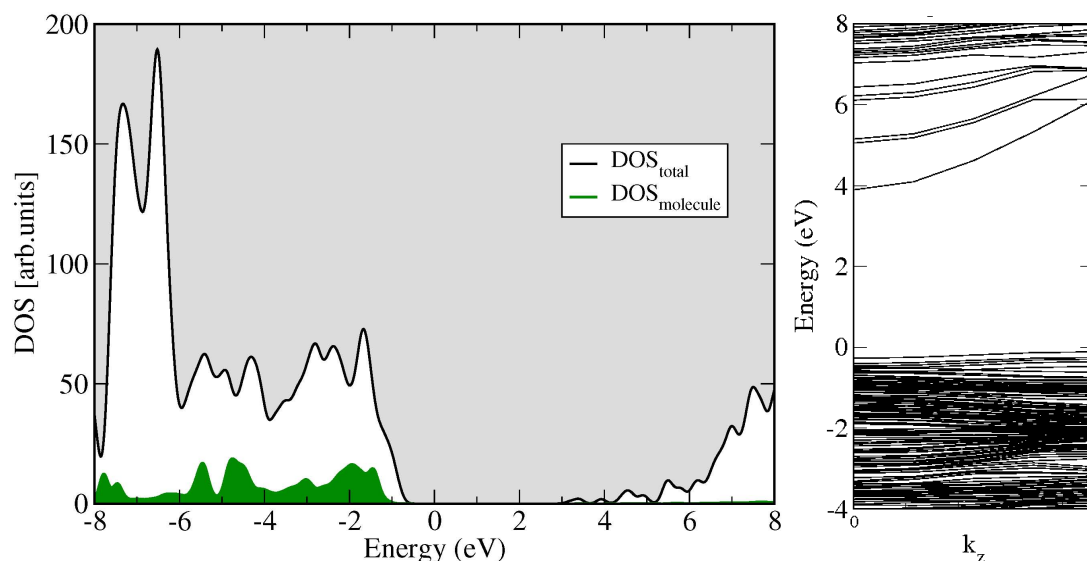


Fig. 2: Projizierte Zustandsdichte und (rechts) Bandstruktur des mit Phosphonsäure funktionalisierten ZnO Nanodrahtes.

Die elektronische Struktur des funktionalisierten Drahtes ist in Abb. 2 dargestellt. Die Molekularen Zustände befinden sich in der Nähe der Valenzbandkante. Wir finden das die O_1 und O_3 p -Zustände stark mit den O - p -Zuständen des Nanodrahten hybridisieren. Die weiteren Zustände der funktionalen Gruppe zeigen zwei peaks bei $-4,5\text{eV}$ und $-5,5\text{eV}$, die zu der in Referenz [1] beobachteten Erhöhung der UV-Photolumineszenz beitragen können. Das Leitungsbandminimum wird von Zn-S Zuständen dominiert und die Bandlücke erhöht sich auf $3,9\text{eV}$ im Vergleich zu $3,7\text{eV}$ im nicht-funktionalisierten Nanodraht. Die Hybridisierung an der Valenzbandkante kann zu einer reduzierten Krümmung am Γ -Punkt führen, was einen positiven Einfluss auf die Elektronenmobilität im Nanodraht haben würde.

III. Ausblick

Im Rahmen des Projektes sollen in einem zweiten Schritt die optischen Eigenschaften unter Berücksichtigung der Vielteilcheneffekte berechnet werden. Dazu wird die sogenannte „Bethe-Salpeter Gleichung“, die die Coulomb Wechselwirkung der Elektronen und Löcher berücksichtigt und exzitonische Effekte korrekt mitbeschreibt, verwendet. Diese numerisch extrem anspruchsvollen Rechnungen können nur unter Zuhilfenahme von Großrechnern wie dem HLRN3 durchgeführt werden.

IV. Veröffentlichungen

- Atomistic investigations on the structural and electronic properties of ZnO nanowires modified with methyl-phosphonic acid (submitted)
- First principles investigations on the electronic structure of anchor groups on ZnO nanowires and surfaces (submitted)
- Intense intra-shell luminescence of single Eu-doped nanowires at room temperature (in preparation)

V. Konferenzbeiträge

- SPIE Photonics West 2014, San Francisco, USA “Theoretical investigations of the electronic and optical properties of functionalized zinc-oxide nanowires”