



BremHLR

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

Statusbericht 2014
des
Kompetenzzentrums
für
Höchstleistungsrechnen Bremen
– BremHLR –

Bremen, Juni 2015



JACOBS
UNIVERSITY



ALFRED-WEGENER-INSTITUT
HELMHOLTZ-ZENTRUM FÜR POLAR-
UND MEERESFORSCHUNG



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

© 2003-2015 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

www.bremhhr.uni-bremen.de

Das Berichtsjahr 2014 in Stichpunkten

- Weitere Steigerung der Bremer Nutzung der Computer des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)
- 9. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung
- Zweite Ausbaustufe des Rechnersystems HLRN-III

Inhaltsverzeichnis

1	Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur	5
1.1	Aufgaben.....	5
1.2	Struktur	5
2	Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum.....	6
2.1	Unterstützung der HLRN-Nutzung im Land Bremen	6
2.2	Weitere Aktivitäten des BremHLR	6
3	Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten	7
4	Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR.....	8
5	Informationen zur Infrastruktur: Installation der zweiten Ausbaustufe des HLRN-III	10
6	Projektberichte	12
6.1	<i>hbc00011</i> : Defect engineering in bulk and nano-diamonds	12
6.2	<i>hbc00012 – hbc00014</i> : Hybrid Materials Interfaces	15
6.3	<i>hbi00019</i> : Large-Eddy-Simulation zur Analyse der Trocknungskinetiken in Sprühtrocknungsprozessen	20
6.4	<i>hbi00024</i> : 3D Simulation einer kompressiblen Edelgasströmung innerhalb eines thermischen Lichtbogentriebwerks.....	25
6.5	<i>hbk00018</i> : Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY	33
6.6	<i>hbk00021</i> : Understanding the dynamics and change in the Arctic Ocean	37
6.7	<i>hbk00025</i> : Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen	40
6.8	<i>hbk00032</i> : Evaluation of the multi-resolution global climate model ECHAM6-FESOM.....	45
6.9	<i>hbk00034</i> : Ice sheet – ice shelf – ocean interaction in the marginal seas of the Southern Ocean	50
6.10	<i>hbk00035</i> : Idealised climate predictability studies with ECHAM6-FESOM.....	56
6.11	<i>hbk00037</i> : Schwankungen des tropischen Regengürtels während des mittleren Miozäns ..	62
6.12	<i>hbk00038</i> : Führt eine Erwärmung im Atlantik zum Abschmelzen der Gletscherzungen im Nordosten Grönlands?	66
6.13	<i>hbk00039</i> : Numerische Untersuchungen zum Mineralstaubkreislauf für quartäre und rezente Klimazustände.....	69
6.14	<i>hbk00041</i> : Verbesserung der Vorhersagefähigkeit eines gekoppelten Ozean- biogeochemischen Modells für die Nord- und Ostsee durch Datenassimilation	72
6.15	<i>hbp00003</i> : Encounters of Neutron Stars	75

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 Jülich Supercomputing Centre (JSC) 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. Seit Januar 2014 ist die JUB als ideelles Mitglied beitragsfrei gestellt.

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)

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 Prof. Dr. Wolfgang Hiller als Mitglied der Technischen Kommission sowie Prof. Dr. 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 wesentliche Aufgabe im Berichtsjahr war die weitere Unterstützung der Bremer Nutzer des HLRN bei der effizienten Nutzung des neuen HLRN-III Systems dessen zweite Ausbaustufe im Berichtsjahr installiert wurde.

2.2 Weitere Aktivitäten des BremHLR

Im Veranstaltungsjahr 2014 wurde vom BremHLR der *9. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* organisiert und durchgeführt. Mit 21 Teilnehmern war dieser Workshop wieder sehr gut besucht.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 13. bis zum 17. Januar 2014 an der JUB abgehalten. Als Referent konnte wie bereits bei bisherigen Workshops Dr. Hinnerk Stüben vom Regionalen Rechenzentrum der Universität Hamburg 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.

Neben dem Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung wurde vom BremHLR im März 2014 ein HLRN-Fachberaterworkshop organisiert, der am ZARM/Universität Bremen abgehalten wurde. Im aktuellen Berichtszeitraum war das BremHLR auch an weiteren Veranstaltungen beteiligt. Fachberater des BremHLR beteiligten sich unter anderem an einem weiteren Fachberaterworkshop in Cottbus in dem 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 2014 wurde der HLRN intensiv durch Bremer Projekte genutzt. Im Jahresdurchschnitt wurde auf dem HLRN-III System ein prozentualer Anteil von 9,9 % an der gesamten am HLRN-III abgenommenen Rechenleistung erreicht. Dieses liegt deutlich über dem investiven Anteil von etwa 3,5% des Landes Bremen am HLRN. Über die gesamte Laufzeit seit Einrichtung des HLRN-Verbunds wurde durch Bremer Projekte ein Anteil von 5,9% der verfügbaren Rechenzeit abgenommen.

Ab September 2013 ersetzte in Berlin das neue HLRN-III System das vorherige HLRN-II System. Die zweite Ausbaustufe des HLRN-III Systems wurde ab September 2014 installiert. Aufgrund der Erweiterungsarbeiten sowie einem IT-Sicherheits-relevanten Zwischenfall im November 2014 konnten die HLRN-Systeme im vierten Quartal 2014 nicht genutzt werden. Die HLRN-Systeme wurden am 18. Dezember wieder für die Nutzer geöffnet. Nutzungszahlen wurden erst ab Januar 2015 wieder erfasst. Trotz des Systemausfalls wurden im Jahr 2014 etwa 1.265.000 NPL¹ durch Bremer Projekte am HLRN-III System abgenommen. **Dieses ist die größte Nutzung seit Einrichtung des HLRN-Verbunds.** Abbildung 3.1 zeigt den monatlichen Verbrauch der Bremer Projekte an den HLRN-II und HLRN-III Systemen.

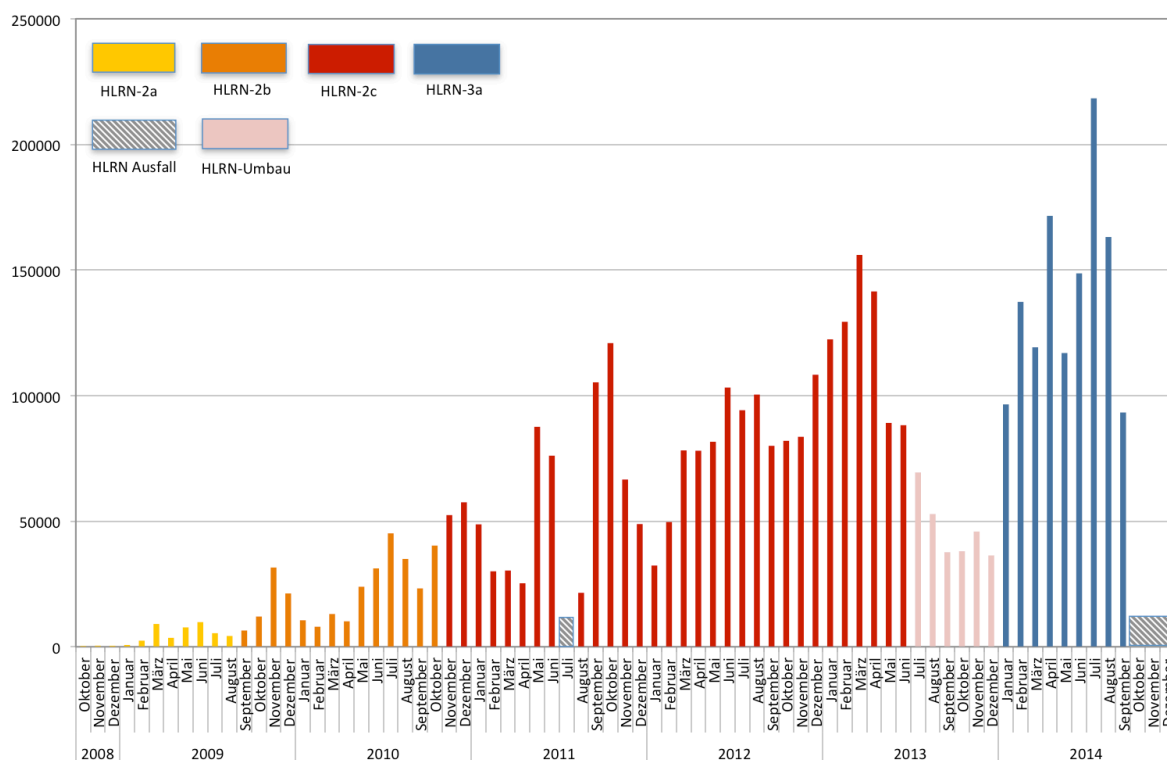


Abbildung 3.1: Grafische Darstellung der monatlichen Rechenzeitnutzung der Bremer HLRN-Großprojekte auf den HLRN-II Systemen in der HLRN-Leistungseinheit NPL. Die Farben zeigen die Verfügbarkeit der unterschiedlichen Ausbaustufen der HLRN-Systeme. Im Juli/August 2011 waren die HLRN-Systeme nicht bzw. nur teilweise nutzbar. Von Juli bis Dezember 2013 kam es zu Einschränkungen durch den Aufbau des neuen HLRN-III Systems. Von Oktober bis Dezember 2014 war das System nicht nutzbar bzw. wurden keine Nutzungszahlen erfasst.

¹Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit: Auf den Systemen der ersten Ausbaustufe des HLRN-III entspricht 1 NPL einer halben CPU-h auf einem Knoten mit je 24 Prozessorkernen.

Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt Tabelle 3.1. Im Jahr 2014 wurden vom BremHLR 28 Projekte am HLRN betreut. Die Projekte werden von etwa 90 akkreditierten Nutzern durchgeführt. Neun neue Projekte mit teilweise sehr großem Rechenzeitbedarf wurden im Jahr 2014 beantragt und vom Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN bewilligt. Sieben Projekte wurden im Berichtsjahr beendet.

4 Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

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

Veranstalter: BremHLR

Datum: 13. – 17. Januar 2014

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: 21

Teilnehmende Institutionen: AWI, JUB, UB (BCCMS, MARUM, Mathematik, Physik, TZI), BSH Hamburg, FU Berlin, Universität Oldenburg

25. HLRN-Fachberater-Workshop

Veranstalter: BremHLR

Datum: 3. – 4. März 2014

Ort: ZARM/Uni Bremen

Teilnehmerzahl: 19

Teilnehmende Institutionen: BremHLR (AWI, ZARM), Cray Inc., BTU Cottbus - Senftenberg, HU Berlin, IOW, LUIS/RRZN Uni Hannover, RZ Uni Hamburg, RZ Uni Kiel, TU Braunschweig, TU Hamburg-Harburg, ZIB

26. HLRN-Fachberater-Workshop

Veranstalter: BTU Cottbus - Senftenberg

Datum: 1. – 2. Dezember 2014

Ort: BTU Cottbus

Teilnehmerzahl: 18

Teilnehmende Institutionen: BremHLR (AWI, ZARM), BTU Cottbus - Senftenberg, Cray Inc., FU Berlin, HU Berlin, IOW, LUIS Uni Hannover, RZ Uni Hamburg, RZ Uni Kiel, ZEIK Uni Potsdam, ZIB

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 2014

Kennung	Projektleiter	Institut	Laufzeit	NPL	Status
hbc00011	Dr. P. Deák/Dr. B. Aradi	UB/BCCMS	II/12 – II/14	157200	F
hbc00012	Prof. Dr. L. Colombi-Ciacchi	UB/BCCMS	IV/12 – IV/15	44600	F
hbc00013	Dr. J. Larrucea	UB/BCCMS	IV/12 – IV/15	113000	F
hbc00014	Prof. Dr. L. Colombi-Ciacchi	UB/BCCMS	IV/13 – IV/15	38900	F
hbi00019	Prof. Dr. U. Fritsching	UB/FB 4	I/13 – II/14	15000	E
hbi00022	Prof. Dr. T. Frauenheim	UB/BCCMS	IV/13 – III/14	65000	E
hbi00024	Dr.-Ing. R. Groll	UB/ZARM	II/14 – II/15	76200	E
hbi00025	Prof. Dr. U. Fritsching	UB/FB 4	IV/14 – III/15	10000	E
hbk00018	Dr. K. Weigel	UB/IUP	I/11 – IV/15	35000	F
hbk00021	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	II/09 – II/15	297000	F
hbk00025	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	II/10 – II/14	49900	F
hbk00028	Prof. Dr. P. Lemke	AWI & UB	IV/11 – II/15	217200	F
hbk00030	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	IV/11 – III/14	175000	F
hbk00032	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	II/12 – III/15	592000	F
hbk00034	Prof. Dr. P. Lemke	AWI & UB	III/13 – III/15	308600	F
hbk00035	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	IV/13 – III/14	169100	E
hbk00036	Dr. P. Scholz	AWI & UB	IV/13 – I/15	172600	F
hbk00037	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	III/14 – III/15	164000	E
hbk00038	Prof. Dr. T. Kanzow	AWI & UB	III/14 – III/15	81000	E
hbk00039	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	III/14 – III/15	45000	E
hbk00040	Prof. Dr. T. Jung	AWI & UB	III/14 – III/15	149500	E
hbk00041	Prof. Dr. W. Hiller	AWI & UB	IV/14 – III/15	67000	E
hbp00003	Prof. Dr. C. Lämmerzahl/ Prof. Dr. S. Rosswog	UB & JUB	IV/10 – III/14	229200	F
hbp00015	Prof. T. Frauenheim	UB/BCCMS	II/12 – II/14	25000	E
hbp00019	Dr. P. Lorke	UB/BCCMS	IV/13 – IV/15	113300	F
hbp00020	Prof. T. Wehling	UB/Physik	IV/13 – III/14	43000	E
hbp00021	Dr. L.-M. Yang	UB/BCCMS	IV/14 – III/15	40000	E
hbp00024	Prof. Dr. T. Wehling	UB/Physik	IV/14 – III/15	16000	E

5 Informationen zur Infrastruktur: Installation der zweiten Ausbaustufe des HLRN-III

Im September 2013 wurde die erste Ausbaustufe des HLRN-III in Betrieb genommen und für die Nutzer geöffnet. Die zweite Ausbaustufe wurde ab September 2014 installiert und hat die verfügbare Rechenleistung um einen Faktor von etwa 3 vergrößert. Das neue HLRN-III System ist ein massiv paralleler (MPP) Hochleistungsrechner der Typen Cray XC30 und XC40.

In der ersten Ausbaustufe wurde pro Standort folgendes MPP-System installiert

- 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
- 64GB 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 10 Gigabit-Ethernet Netzwerk.

In der zweiten Ausbaustufe wurden die MPP-Systeme pro Standort um folgende Komponenten leicht unterschiedlich ausgebaut:

- Rechenknoten:
 - Berlin: 1128 Dual-Socket Knoten, jeweils mit Intel Xeon Haswell (E5-2680v3) Prozessoren mit 2,4 GHz Taktung und jeweils 12 Prozessorkernen
 - Hannover: 936 Dual-Socket Knoten, jeweils mit Intel Xeon Haswell (E5-2680v3) Prozessoren mit 2,4 GHz Taktung und jeweils 12 Prozessorkernen
- Gesamtanzahl Prozessorkerne: 27072 Prozessorkerne (Berlin), 22464 (Hannover)
- 64GB Hauptspeicher pro Knoten (117 TByte Gesamtspeicher in Berlin, 105TByte in Hannover)
- Netzwerk Cray Aries Interconnect mit Dragonfly Topologie
- Peak-Performance: 1,1PFlop/s (Berlin), 0,9 PFlop/s (Hannover)
- 2,3 PB paralleles Lustre-Dateisystem ("WORK" zur Speicherung von Simulationsdaten) über FDR Infiniband-Netzwerk

In Hannover wurde zusätzlich in der ersten und zweiten Ausbaustufe SMP-Systeme der Firma Megaware mit großem RAM-Speicher installiert. Sie bestehen aus

- 1. Ausbaustufe:
 - 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
- 2. Ausbaustufe:
 - 32 Quad-Socket Knoten mit Intel Xeon IvyBridge (E5-4650v2) Prozessoren mit 2,4 GHz Taktfrequenz und jeweils 10 Prozessorkernen
 - 512 GB Arbeitsspeicher pro Knoten
- Dual FDR Infiniband Netzwerk

In der Top500 Liste der weltweit schnellsten Supercomputer vom November 2014 befinden sich die beiden MPP-Systeme auf den Plätzen 51 und 61. In Deutschland finden sich die beiden Systeme auf den Plätzen 5 und 7.

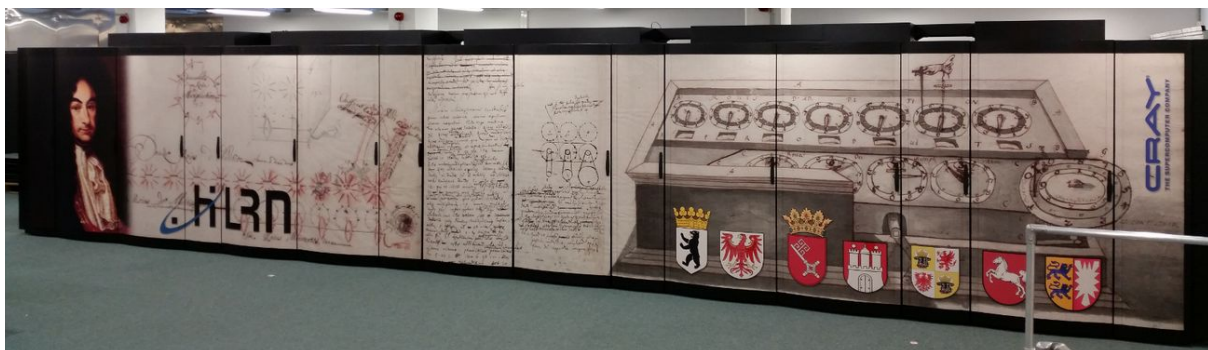


Abbildung 5.1: Frontansichten der Cray XC30/XC40 Systeme nach der zweiten Ausbaustufe des HLRN-III. Oben: System „Konrad“ am ZIB in Berlin; unten: System „Gottfried“ an der Universität Hannover

6 Projektberichte²

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

HLRN-Projektkenung:	hbc00011
Laufzeit:	II/2012 – II/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Peter Deák / Dr. Bálint Aradi
Projektbearbeiter:	Prof. 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].

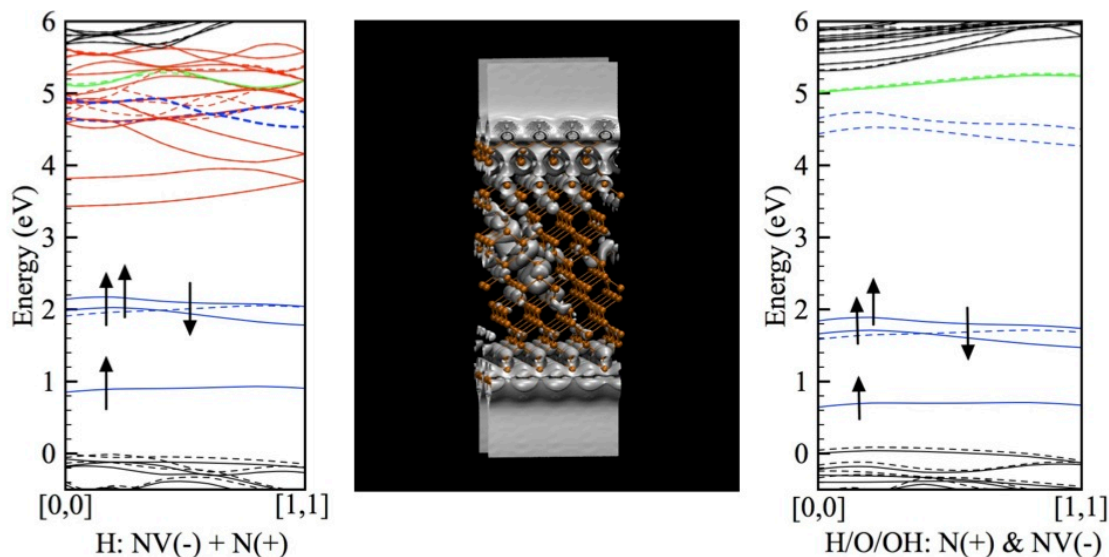


Figure 1: Electronic structure of a thin diamond slab with H- (left) and mixed H/O/OH (right) termination. Blue lines with arrows show the occupied, dashed blue lines the empty states of the defect. Red lines show the surface image states induced by pure H-termination. As shown (middle), there is a strong 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 our 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 *hbc00012 – hbc00014*: Hybrid Materials Interfaces

Projekte:

hbc00012: All-atom molecular dynamic investigations of the adhesion mechanisms at the contact interface of TiO₂ nanoparticles in films and aggregates

Laufzeit: IV/2012 – IV/2014

Projektbearbeiter: J. Laube, S. Potthoff, L. C. Ciacchi

hbc00013: Fabrication of 2D magnetic nanostructures via a knowledge-based biomimetic approach

Laufzeit: IV/2012 – IV/2015

Projektbearbeiter: S. Lid, J. Larrucea, S. Köppen, L.C. Ciacchi

hbc00014: Molecular Dynamic Simulations of the Adsorption of Lysozyme and Chymotrypsin on Silica and Titania

Laufzeit: IV/2013 – IV/2015

Projektbearbeiter: N. Hildebrand, S. Köppen, L. C. Ciacchi

Institut: Hybrid Materials Interfaces Group, Faculty of Production Engineering and Bremen Center for Computational Materials Science, University of Bremen

Overview:

- simulation of hybrid materials interfaces
- downwelling atomistic picture of materials surfaces properties: the presence of charged surface groups → formation of the first water layers above the materials surface with ions included → configuration of adsorbed biomolecules or other materials surfaces in contact
- the detailed picture of the interfaces can lead to new pathways in fabrication of particle aggregates, optimization of biofunctional coatings or to new applications in surface coating with tailored chemical properties
- multiple simulated systems are in the magnitude of several hundred thousands of atoms with simulation times of several hundreds of nanoseconds

Motivation:

The technical and chemical properties not only of the materials bulk but their interfaces determine the field of application. For optimal use materials surfaces can be treated (coated, functionalized) to tune the surface properties. A detailed picture of the interface at the level of atomistic precision is essential for the educated handling of surface processing to successfully tailor the interface properties.

The hybrid materials interfaces group emphasizes atomistic simulations preferentially of metal oxides in contact with an aqueous environment. With the help of classical molecular

dynamics simulations and advanced techniques, nanoscopic effects, like the water structure near a surface, the charge distribution on a surface or a surface surface contact mode are clarified to project it to macroscopic effects.

Preliminary Results:

Complex film structures can be traced back to one first particle particle contact. The nature of this contact determines the properties of the whole complex particle aggregate. In one of our projects (**hbc00012**) the impact that the presence and especially the structuring of adsorbed water molecules have on the adhesion forces of TiO₂ nanoparticles was investigated by means of all-atom Molecular Dynamics simulations. The simulation results are validated by means of accurate AFM force spectroscopy measurements.

One result of the combined experimental and theoretical investigation is, that the dependence of the relative air humidity [4] can be used to differentiate between the capillary and the structure-dependent part of the adhesion forces experimentally and theoretically: Extensive calculations at different water coverages and with different particle sizes are accomplished to highlight the limits of classical capillary theories and to establish novel scaling-laws to describe the contact forces between oxide particles at the nanoscale. One goal is to find modifications of the capillary theory by fitting of the MD data with constitutive capillary equations. On the other hand, the occurrence of a strongly nonlinear force-distance dependency arising from the water structure is analyzed to correctly describe the particle-particle contact. This additional contribution is independent of the amount of humidity and is also present in the limit of complete immersion of the particles in bulk water, when the capillary forces vanish. In further simulations, the particle systems will be extended to small mesoscopic particle aggregates.

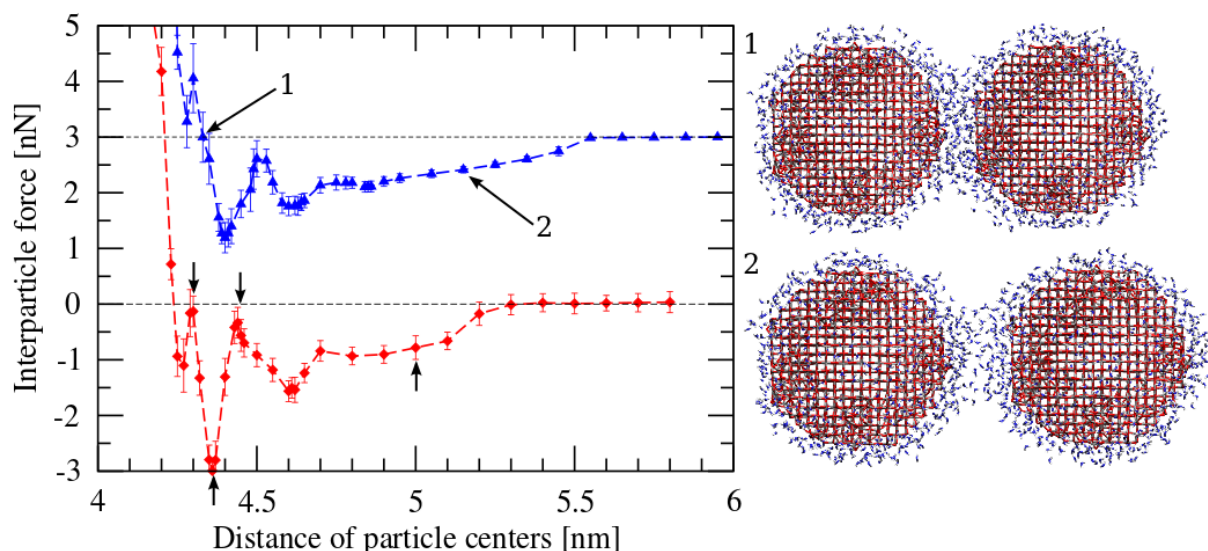


Figure 1: (left) Computed force-distance curves for anatase (blue) and rutile (red) TiO₂ nanoparticles bearing a water coverage of 11 molecules/nm², as obtained from constrained MD simulations. (right) snapshots of two 4 nm TiO₂ particles in contact with intercalated water layers (top) and (down) two particles with no oscillation part but hold by capillary forces.

In complex hybrid systems, the description of the constituent parts sometimes has to be done from scratch. In the project (**hbc00013**) an intermolecular force field for the FeO(OH) – water interface and an intramolecular force field for the Ferrihydrite structure had to be established (Figure 2, (I)) to describe the interaction of iron oxide clusters with ferritin subunits. The development of our intermolecular force field describing FeO(OH)/water/protein interfaces is finished and recently published in [2]. The force field parameters were fitted against the energy profiles for water in different heights and orientations above stable Goethite surfaces and validated with energy profiles of interactions of different small organic molecules on Goethite based on Density Functional Theory (DFT) simulations. Due to good agreements, the transferability of our force field from Goethite to Ferrihydrite is tested as well. The structure of Ferrihydrite is very similar to the iron oxyhydroxide structure which crystallizes in Ferritin and is therefore important for our research. The results received by our force field were in very good agreement with the DFT based results.

With the developed force field, significant larger systems of FeO(OH) clusters and Ferritin subunits can be treated (figure 2, (III)). Investigations started on the basis of molecular dynamics simulations of three to four Ferritin subunits and small Goethite nanoparticles with varied sizes. After a simulation time of 50 ns analyses of the amino acids, to which the particles were attached took place. Analyses of specific anchor points of different sized Goethite nanoparticles at Ferritin show the different contribution of amino acids determining interactions between the FeO(OH) and the H- respectively the L-chain of Ferritin as well as different appearance of surface amino acids. In the H-chain arrangement, the predominant amino acids are the polar serine and the negatively charged amino acid, even though other amino acids with higher frequencies can be estimated. On the L-Chain arrangement, a combination of positively and negatively charged amino acids initiates the cluster – protein contact. In recent simulations, the subunit arrangements around the iron oxide clusters are fixed on a substrate material (figure 2, (II)). A first outcome of the simulations is the change of the used carrier material due to higher interaction forces of the ferritin subunits on silica with respect to alumina surfaces.

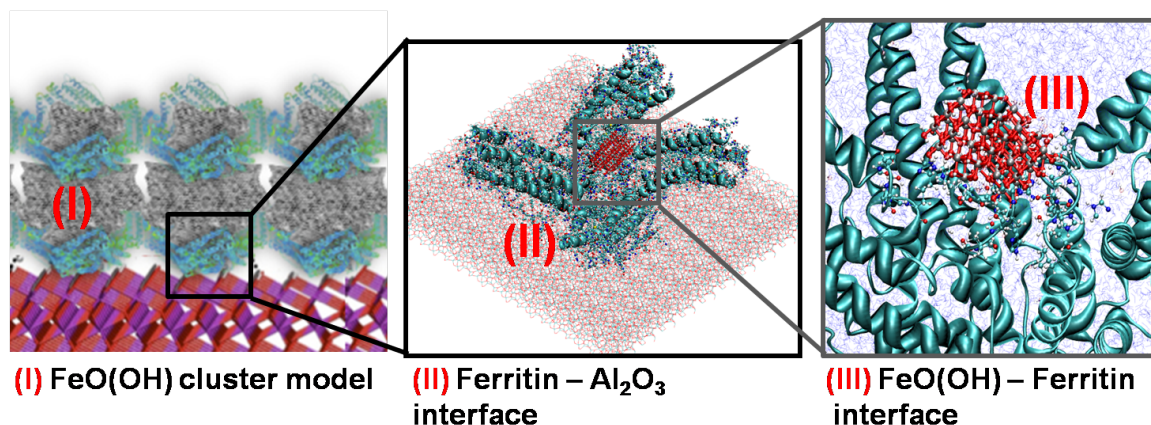


Figure 2: (left) complex interface of layers of small ferrihydrite clusters surrounded by ferritin subunits fixed on an oxide material substrate (middle) zoom into the 2d layer structure, arrangement of four ferritin subunits with an iron oxide cluster, fixed on the substrate (right) zoom into the cluster – subunit contact zone

Sometimes, careful evaluated experiments offer unexpected results and conventional textbook knowledge cannot explain these observing. In adsorption experiments performed by

the advanced ceramics group in the university of Bremen, a significant higher amount of positively charged chymotrypsin compared to the more positively charged lysozyme is found to be adsorbed on negatively charged silica nano particles.

Static single point calculations at different pH levels are performed to evaluate force distance curves of the protein – silica systems [3]. With increasing pH the attractive forces on both proteins are stronger which correlates well with a bigger total amount of adsorbed proteins in the experiment. This correlation breaks down for the comparison between both proteins in experiment and simulation. Lysozyme, which has an about three times higher attraction force on silica compared to chymotrypsin in simulation, is only poorly adsorbed on silica in the experiment. We suggest that the observation of the pure electrostatics on basis of calculating the DLVO forces is describing the behavior of the protein well for distances further away from the surface. Close to the surface the final adsorption is also governed by an induced fit of the protein, a local charge distribution with the resulting hydrophilicity and multiprotein effects of species already adsorbed on the surface. The local charge distribution of lysozyme show a high number of positively charged amino acids well distributed over the surface, resulting in an homogeneous positively potential surface around the binding cleft (Fig. 3). For Chymotrypsin, a clear distinction between positive and negative end of the protein can be drawn [3] and therefore, a preferred orientation of adsorption. This high preference lead to highly ordered compact protein layers attached to the surface in a density, being not favorable for the homogenous lysozyme.

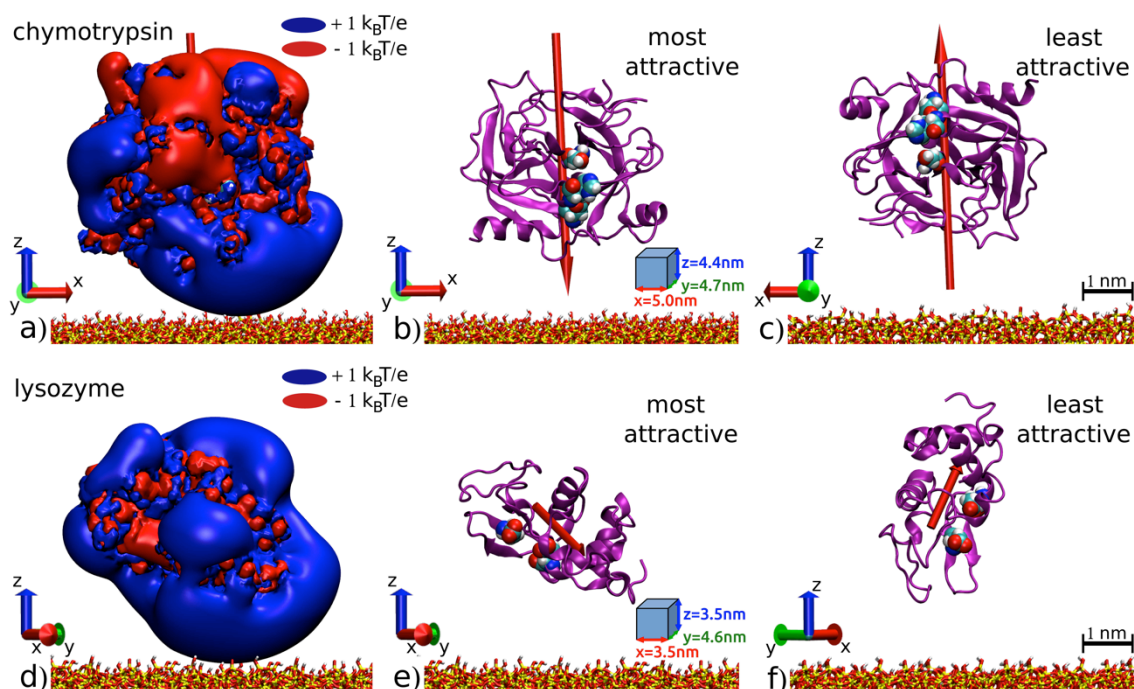


Figure 3: Most and least attractive orientations of chymotrypsin (top) and lysozyme (bottom) over the amorphous SiO₂ surface. The amino acids of the enzymatically active sites are depicted as van der Waals spheres (GLU35 and ASP52 for lysozyme, HIS57, ASP102 and SER195 for chymotrypsin). Isovalue surfaces of the electrostatic potential around the proteins at -1 and +1 kBT/e are colored red and blue, respectively, in (a) and (d). The red arrows represent the enzyme dipole moments (529.1 D or $1.76 \cdot 10^{-27}$ cm for chymotrypsin and 153.8 D or $0.5 \cdot 10^{-27}$ cm for lysozyme) and are scaled by a factor of 0.1 in both cases.

Publications:

- (1) Salameh S., Schneider J., Laube J., Alessandrini A., Facci P., Seo J.W., Colombi Ciacchi L., Mädler L. Adhesion mechanisms of the contact interface of TiO₂ nanoparticles in films and aggregates. *Langmuir* 28, 11457–11464 (2012)
- (2) J. Larrucea, S. Lid, L. Colombi Ciacchi; “Parametrization of a classical force field for iron oxyhydroxide/water interfaces”; *Comp. Mat. Sci.* 92, 343-352, 2014
- (3) N. Hildebrand , S. Köppen , L. Derr , K. Li , M. Koleini , K. Rezwani, L. Colombi Ciacchi, “Adsorption Orientation and Binding Motifs of Lysozyme and Chymotrypsin on Amorphous Silica”, *J. Phys. Chem. C*, Just Accepted Manuscript, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b00560
- (4) J. Laube, S. Salameh, M. Kappl, L. Mädler, L. Colombi Ciacchi, “Contact forces between TiO₂ nanoparticles governed by an interplay of adsorbed water layers and roughness”, under review

Funding:

The project **hbc00012** will be worked out within the framework of the DFG priority program SPP 1486 "Partikel im Kontakt (PIKO) - Mikromechanik, Mikroprozessdynamik und Partikelkollektive". The project **hbc00013** is embedded within the framework of the DFG priority programme SPP 1569, entitled: "Generation of multifunctional inorganic materials by molecular bionics". The project **hbc00014** is funded by the DFG with the project ID: KO3811/3-1 and is entitled "Theoretical investigation of the adsorption of lysozyme on different oxide materials for the development of antibacterial hybrid materials". The HLRN provides computational resources for several projects in the hybrid materials interfaces group in the **magnitude of 2000 kCPU-hours/year**.

6.3 hbi00019: Large-Eddy-Simulation zur Analyse der Trocknungskinetiken in Sprühtrocknungsprozessen

HLRN-Projektkenung:	hbi00019
Laufzeit:	I/2013 – II/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. Udo Fritsching
Projektbearbeiter:	Dipl.-Ing. Aljoscha Lampa
Institut / Einrichtung:	Mechanische Verfahrenstechnik, Universität Bremen

1. Overview

In this project a Large-Eddy-Simulation model is used to simulate the gas flow structures in a spray flow. Therefore, the finite-volume solver package OpenFOAM has been used. The simulated gas eddy structures lead to a preferential distribution of the droplets (dispersed phase) within the spray. The trajectory of droplets in the gas has been calculated with a two-way coupled Lagrangian particle tracking algorithm.

Droplet clustering influences the heat and mass transfer for individual droplets. This effect of droplet clustering is of interest for many spray applications, e.g. in diesel combustion engines. The heat and mass transfer is highly dependent on the local conditions each spray droplet encounters. The hydro-dynamical behaviour, especially the relative velocity and the temperature difference between dispersed (droplets) and continuous (gas) phase is supposed to change significantly. Measurements of this phenomenon in sprays are extremely difficult, because the slip velocity between the continuous and the dispersed phase is difficult to determine when simultaneously a good spatial resolution is demanded for cluster detection. It is the central aspect of this project to analyse the individual heat transfer kinetics of droplets within the spray.

Numerical simulations of the spray flow have been carried out with Large-Eddy-Simulation (LES) models with Lagrangian particle tracking for the droplet motion. The trajectory of droplets, represented by parcels, has been tracked with respect to their environment to estimate the local heat transfer rates. Especially the local droplet concentration and the motion characteristics of the gas phase and its interaction with the droplets have been analysed.

2. Current Results

The specific spray process shows significant clustering of droplets (Figure 1). At the outer edge of the spray, where large velocity gradients and thus high shear rates in the gas can to be found, complex interactions between gas and droplets within vertical structures (shear stream eddies) take place. The Stokes number (St) is the ratio between the characteristic particle response time and the fluid time (1). Droplets with $St \ll 1$ follow the gas flow motion without any delay. Whereas droplets with a larger Stokes number ($St \gg 1$) have trajectories independent of the local gas flow structures. The Stokes number is in the order of 1 in areas of pronounced clustering. Different mechanisms, especially the centrifuging of droplets in vortical structures, lead to the local clustering of droplets.

$$St_{\text{droplet}} = \frac{\tau_{\text{droplets}}}{\tau_{\text{gas}}} \quad (1)$$

In principle a large range of droplet size classes ($St \sim d_{\text{droplet}}^2$) can cluster within the spray, especially since the gas flow within the spray involves a large spectrum of time and length scales ($\rightarrow \tau_{\text{gas}}$) along the droplets trajectories. In the case presented here the interaction of the droplets with coherent gas vortices is the dominating phenomenon for cluster formation. Centrifuging of droplets/particles is taking place in shear stream vortices. For partly responsive droplets ($St \approx O(1)$, $d_{\text{droplet}} = 10 \mu\text{m}$, $30 \mu\text{m}$) droplet concentration inhomogeneities are forming along the spray axis (Figure 1).

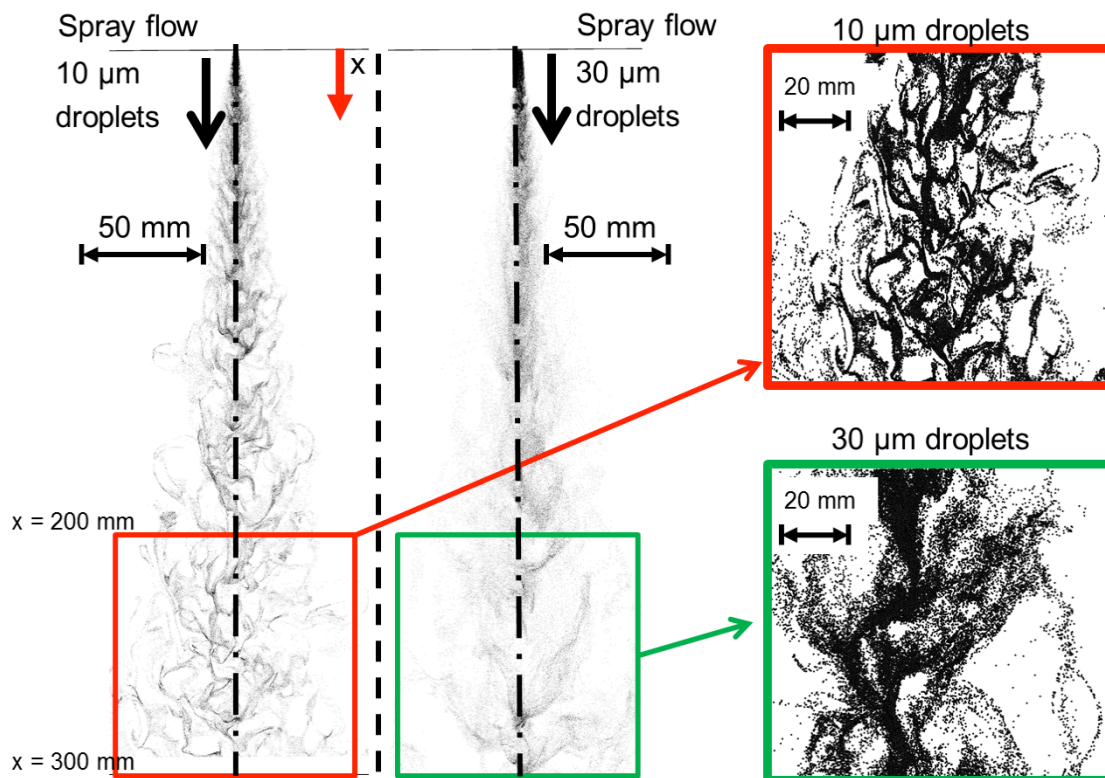


Figure 1: Droplet patterns: LES with $10 \mu\text{m}$ and $30 \mu\text{m}$ droplets ($0 \text{ mm} < x < 300 \text{ mm}$, $-50 \text{ mm} < y < 50 \text{ mm}$, $-1 \text{ mm} < z < 1 \text{ mm}$)

The characteristic fir tree pattern is formed much earlier for the $10 \mu\text{m}$ droplets. The onset of droplet clustering for $30 \mu\text{m}$ droplets is seen at a distance $x > 150 \text{ mm}$. The reason for this effect is that the inertia of the big droplets is high enough not to interact strongly with the gas flow ($St_{\text{droplet}} \gg 1$).

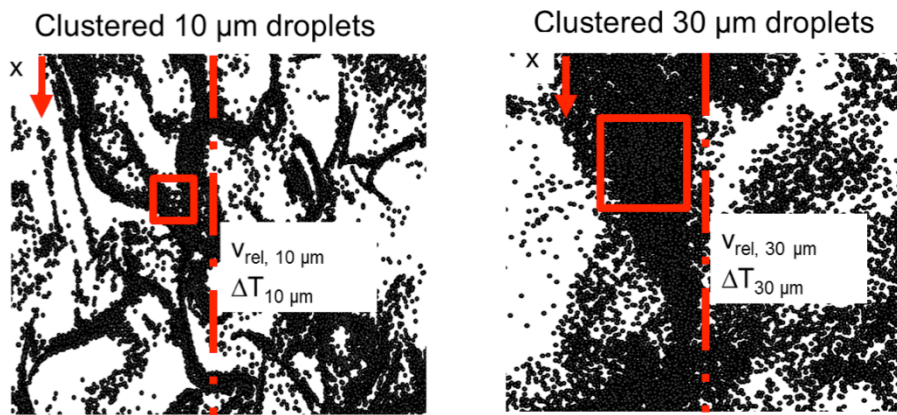


Figure 2: Droplet patterns: LES with 10 µm and 30 µm droplets (0 mm < x < 300 mm, -50 mm < y < 50 mm, 1 mm < z < 1 mm)

The 10 µm droplets are reacting much stronger on the gas velocity fluctuations than the 30 µm droplets. That is the reason why the cluster structures are much more segregated (Figure 2) with a better mixing between the gas phase and the dispersed phase for the smaller droplets. The cluster's lifetime is much shorter than the lifetime of the 30 µm clusters. The 10 µm droplet clusters are spontaneously formed, while the 30 µm droplets are translated over a larger distance without a significant change in cluster shape and density. Thus, droplets in a cluster, that consist of 30 µm droplets, are expected to experience less relative motion with the continuous phase because the surrounding droplets reduce the overall slip. The Nusselt number (2) representing the intensity of the heat transfer, which is proportional to the relative Velocity between droplet and gas, is thereby reduced.

$$Nu_{\text{droplets}} \sim v_{\text{rel}} \quad (2)$$

$$\dot{Q}_{\text{heat,flux}} \sim Nu_{\text{droplet}} d_{\text{droplet}} (T_{\text{droplet}} - T_{\text{gas}}) \quad (3)$$

Along with the slip reduction, which decreases the heat transfer intensity between the droplet in a cluster and the gas phase, the overall temperature difference of the droplets and the gas inside a cluster is also supposed to be reduced, since the droplet concentration is so high, that the gas volume inside the cluster much slower adapts to the temperature outside the cluster. Both effects combined reduce the amount of heat exchanged between droplets and gas (3).

The effect of velocity slip reduction and heat transfer retardation is analysed by calculating the correlation coefficient between the number concentration of the droplets and the Nusselt number and the heat flux per droplet (Figure 3). The temporally averaged correlation coefficient has been calculated on the spray axis (200 mm < x < 300 mm). A large negative correlation coefficient means that high droplet concentration values come with low values for the second variable or vice versa.

For 10 µm droplets no correlation between the droplet concentration and the Nusselt number / Heat flux can be found. The reason for this is that the cluster lifetime is too short to significantly alter the heat transfer kinetics. Also the size of the clusters is much smaller than the droplets cluster consisting of 30 µm droplets (Figure 2).

For clusters of 30 µm droplets the correlations give negative values. But it must be stated, that there is no significant reduction of the heat transfer. The reason for this might be that the standard drag coefficient for the droplets has been used without representing the concentration effects within the cluster explicitly. These effects are incorporated implicitly by

coupling terms in the momentum and energy equations of the continuous phase. The problem for a direct consideration of the spatial concentration for advanced drag force models is that the surrounding droplet concentration field has to be evaluated at every time step. To have a representative number of droplets in the vicinity of the cluster millions of parcels have to be tracked numerically. Since the parcel data is unstructured for lagrangian particle tracking methods, the evaluation of the local droplet concentration field cost much more CPU time than the flow iterations themselves.

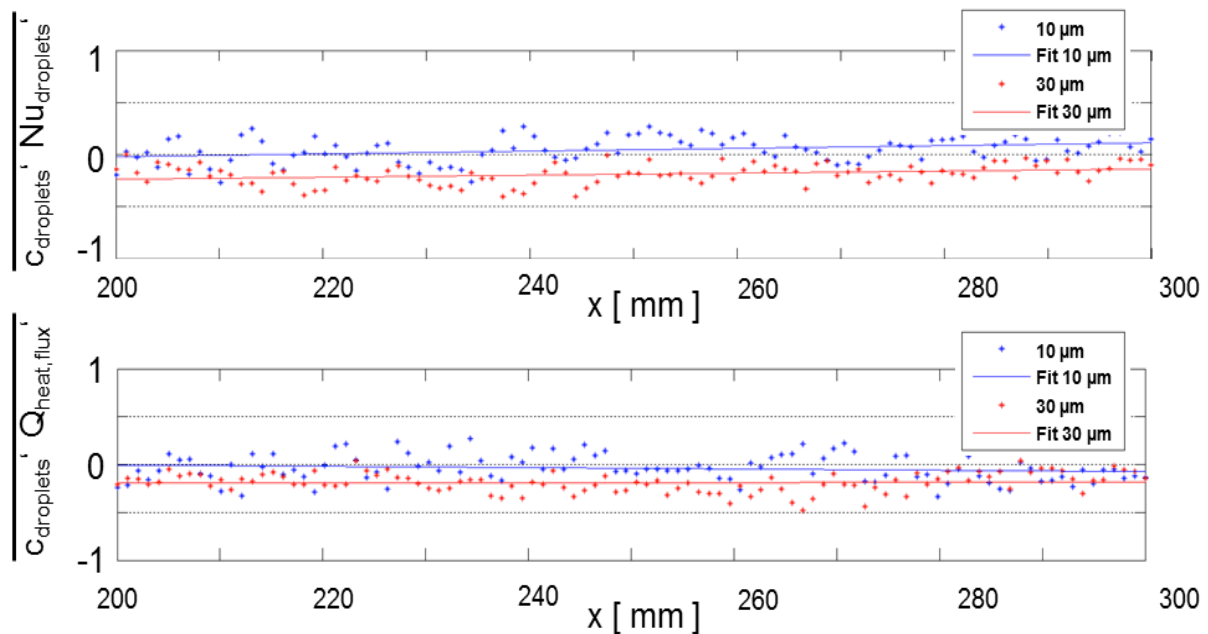


Figure 3: Time averaged correlation coefficients for droplet number concentration and heat transfer intensity ($Nu_{droplet}$) and heat transfer rate per droplet ($Q_{heat, flux}$)

The results highlight the importance and the difficulty to incorporate clustering effects in the simulation of high-speed spray flows. The characteristic clustering pattern of the droplets could be simulated. The spatially resolved Stokes number of the droplets is the most important criterion for predicting the onset of the cluster formation. The most stable clusters in this case can be found for 30 μm droplets. Here the clusters are not spontaneously formed, but are transported over a longer distance. The effect on the heat transfer in those clusters is the greatest, although the effect has a minor manifestation in the simulation results.

3. Outlook

The simulated cases will be compared to simulations performed with other finite-volume solvers (e.g. Fluent 13). Also it is considered to use an Euler-Euler Large-Eddy simulations model, where the two phases will be treated as two immiscible continuous phases. Here the concentration influence on the drag coefficient of the droplets in dense groups can be incorporated more easily in a HPC environment.

4. Publications from this project

4.1 Talks and Conference Papers

Lampa A., Fritsching U.: *Impact of Droplet Clustering on Heat Transfer in Spray Processes*, 26th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems ILASS, 8.-10. September 2014, Bremen, Germany. (Conference paper)

Lampa A., Fritsching U.: LES in Sprays: Local Heat and Mass Transfer, Jahrestreffen der Fachgruppen CFD, Mischvorgänge und Rheologie, 24.-26.2.2014, Würzburg, Germany. (Talk)

6.4 hbi00024: 3D Simulation einer kompressiblen Edelgasströmung innerhalb eines thermischen Lichtbogentriebwerks

HLRN-Projektkenung	hbi00024
Laufzeit	II/2014 – I/2015
Projektleiter	PD Dr.-Ing. habil. Rodion Groll
Projektbearbeiter	Juan Gomez
Institut/Einrichtung	ZARM - Center of Applied Space Technology and Microgravity, Universität Bremen

Kurzgefasst

- Die Abweichungen bezüglich des Brennkammerdruckes können durch geometrische und gasdynamische Zusammenhänge erklärt werden.
- Anhand der gewonnenen Erkenntnisse können die Simulationsergebnisse durch eine von der Knudsen-Zahl abhängige Funktion korrigiert und die Abweichungen zwischen numerischen und experimentellen Ergebnissen stark reduziert werden.
- Die gewonnenen Erkenntnisse dienen als Basis für die Auswertung eines mathematischen Modells für den Heißgas-Betrieb eines thermischen Lichtbogentriebwerks.

Abstract

Als bekanntes Querschnittsthema der Raumfahrttechnik ist die Forschung auf dem Gebiet der Antriebe bekannt, da neben den Anforderungen der unwirtlichen Umgebung im All die Strömungsmechanik transsonischer Strömungen im Vordergrund steht. Wie chemische Triebwerke werden in elektrischen Triebwerken Gasströme erhitzt, um die Schallgeschwindigkeit an der engsten Stelle der Lavaldüse zu erhöhen. Während chemische Triebwerke hierfür einen Verbrennungsprozess nutzen, wird in Lichtbogentriebwerken, welche eine Untergruppe der elektrischen Triebwerke darstellen, der elektrische Überschlag in einem erhitzten Plasma genutzt.

Im Rahmen des Forschungsprojektes *PlasmAccelerator* wird ein mathematisches Modell zur Beschreibung des Lichtbogens innerhalb eines Lichtbogentriebwerks entwickelt. Hierfür wird der Lichtbogen als ein Plasma betrachtet. Der für die Entstehung des Lichtbogens erforderliche Elektronenfluss wird als eine Elektronenströmung behandelt und durch Transportgleichungen mathematisch beschrieben. Die Neutralteilchen werden durch die elektrische Leitfähigkeit des umgebenden Edelgases modelliert und die Ionen durch einen dimensionslosen Korrekturfaktor in Abhängigkeit von der Elektronenverteilung.

Um ein mathematisches Modell für das Lichtbogentriebwerk untersuchen zu können, ist an erster Stelle die numerische und experimentelle Untersuchung des Triebwerks im Kaltgas-Betrieb, d. h. ohne Lichtbogen, von zentraler Bedeutung. Auf diese Weise können Fehlerquellen, die nicht in Verbindung mit dem mathematischen Lichtbogenmodell stehen, identifiziert und korrigiert werden. Im Rahmen der Untersuchungen beim Kaltgas-Betrieb des Lichtbogentriebwerks wurden Abweichungen zwischen den experimentellen und numerischen Ergebnissen festgestellt, die durch geometrische und gasdynamische

Zusammenhänge erklärt und korrigiert werden konnten. Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen kann das mathematische Modell für das Lichtbogentriebwerk in der zweiten Phase des Forschungsprojektes bewertet und optimiert werden.

Übersicht

Bei der Auslegung von Satelliten spielen ihre Lageregelungssysteme eine der Hauptrollen. Nur durch eine geeignete Lageregelung kann der Missionserfolg gewährleistet werden. Die Lageregelung wird durch eine Kombination von Sensoren und Aktuatoren durchgeführt, die mittels eines Regelkreises bzw. eines Regelalgorithmus miteinander gekoppelt sind. Gastriebwerke zählen zu den üblich angewendeten Aktuatoren zur Lageregelung. Diese werden oft in Gruppen eingesetzt und haben als Aufgabe die Bereitstellung einer ausreichenden Schubkraft, um die Solllage eines Satelliten im dreidimensionalen, inertialen Koordinatensystem zu erreichen und um diese über die Lebensdauer des Satelliten beizubehalten. Bei Kaltgastriebwerken wird die in den Satellitentanks als Druck gespeicherte Energie in kinetische Energie umgewandelt. Die entstehende Kaltgasströmung wird durch ein konvergentes/divergentes Rohr, eine sogenannte Lavaldüse, in den Überschallbereich beschleunigt. Der von dem Triebwerk gelieferte Schub kann in einer vereinfachten Form aus dem zweiten Newtonschen Gesetz (Gleichung 0.1) ermittelt werden:

$$\frac{d_i}{d_t} = \frac{d}{d_t} (mu) = \dot{m}u = F_N \quad (0.1)$$

Nach Gleichung 0.1 entspricht der vom Triebwerk gelieferte Schub F_N dem Produkt aus dem ausgestoßenen Massenstrom und seiner Austrittsgeschwindigkeit. Ein Satellit kann seine Solllage solange beibehalten, bis die Triebwerke die für die Korrektur von Störmomenten und die Durchführung von gewünschten Manövern im Weltraum notwendige Schubkraft liefern. Demzufolge wird die Gesamtlebensdauer eines Satelliten von der verfügbaren Treibstoffmenge begrenzt. Da das Befördern von Masse ins All mit sehr hohen Kosten verbunden ist, spielt die effiziente Nutzung von dem in den Satellitentanks gelagerten Treibstoff eine zentrale Rolle. Das bedeutet, dass vergleichbare Schubkräfte bei geringerem Treibstoffmassenstrom erreicht werden sollen. Nach Gleichung 0.1 kann dies durch eine Erhöhung der Austrittsgeschwindigkeit der Gasströmung erreicht werden.

Im Forschungsprojekt *PlasmAccelerator* wird der Ansatz mit einem Lichtbogentriebwerk untersucht. Durch einen angelegten elektrischen Strom wird ein Lichtbogen zwischen einer Kathode und einer Anode im konvergenten Teil einer Lavaldüse erzeugt. Eine Edelgasströmung wird infolge einer Druckdifferenz beschleunigt und durchquert dabei den Lichtbogen. Dies führt zu einer Teilionisierung der Edelgasströmung. Der damit verbundene Temperaturanstieg der Edelgasströmung hat eine Erhöhung der lokalen Schallgeschwindigkeit an der engsten Stelle der Lavaldüse zur Folge. Da an der engsten Stelle der Lavaldüse eine Machzahl von eins stets erreicht wird, führt die Erhöhung der lokalen Schallgeschwindigkeit zu einem Anstieg der Strömungsgeschwindigkeit im Düsenhals- und im Diffusorbereich. Auf diese Weise kann bei konstant bleibendem Massenstrom eine höhere Austrittsgeschwindigkeit erreicht werden. Gleichzeitig bedeutet dies, dass mit niedrigeren Treibstoffmassenströmen eine vergleichbare Schubkraft erreicht werden kann.

Im Forschungsprojekt *PlasmAccelerator* wird die Entwicklung und Validierung eines mathematischen Modells, welches die Beschreibung des Lichtbogens und der ionisierten Edelgasströmung innerhalb eines Lichtbogentriebwerks ermöglicht, angestrebt. Als zweites

Ziel gilt die Optimierung des am ZARM konstruierten Lichtbogentriebwerks mittels des entwickelten Modells. Um das Modell für das Lichtbogentriebwerk bewerten zu können, ist an erster Stelle die numerische und experimentelle Untersuchung des Triebwerks beim Kaltgas-Betrieb, d. h. ohne Lichtbogen, von zentraler Bedeutung. Im Rahmen der Untersuchungen für den Kaltgas-Betrieb wurden Abweichungen zwischen den experimentellen und numerischen Ergebnissen festgestellt, die durch geometrische und gasdynamische Parameter erklärt werden konnten. Anhand dieser Ergebnisse wurde eine von der Knudsen-Zahl abhängige Korrekturfunktion ermittelt, die zusammen mit einer Anpassung des Düsenhalsdurchmessers des Triebwerks zu einer Verbesserung der Simulationsergebnisse und zu einer starken Reduzierung der Abweichungen gegenüber den experimentellen Ergebnissen geführt hat. Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen kann das mathematische Modell für das Lichtbogentriebwerk in der zweiten Phase des Forschungsprojektes bewertet und optimiert werden.

Experimentelle Versuche

Für die Untersuchung des Lichtbogentriebwerks im Kaltgas-Betrieb werden experimentelle Versuche am ZARM (Center Of Applied Space Technology And Microgravity, Universität Bremen) und numerische Simulationen auf dem HLRN (Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen) durchgeführt. Dabei werden die Edelgase Neon, Argon, Krypton und Xenon mit jeweils 10 bis 12 Massenstromwerten zwischen 0,18 mg/s und 3,57 mg/s untersucht. Das am ZARM entwickelte Lichtbogentriebwerk wird in Abb. 1 schematisch dargestellt. Für die experimentellen Versuche wird das Lichtbogentriebwerk innerhalb einer sphärischen Vakuumkammer platziert. Die Vakuumkammer hat ein Gesamtvolumen von ca. 10 Liter und wird mit einer Drehschieberpumpe betrieben. Die somit erreichten Druckwerte in der Vakuumkammer liegen ohne Gasströmung stets unter 1 Pa und steigen mit zunehmendem Massenstrom an. Der maximale Druckwert in der Vakuumkammer wird bei den Versuchen mit Neon und einem Massenstrom von 1,78 mg/s erreicht und beträgt 19 Pa. Bei den experimentellen Versuchen werden Vakuumkammerdruck und Druckdifferenz zwischen der Brennkammer des Lichtbogentriebwerks und der Vakuumkammer gemessen. Die Summe aus Druckdifferenz und Vakuumkammerdruck ergibt den Druck in der Brennkammer des Triebwerks bzw. am Inlet der Lavalldüse. Die Geometrie der am Lichtbogentriebwerk eingesetzten Lavalldüse wird in Abb. 2 schematisch dargestellt. Der Düsenhalsdurchmesser beträgt 1,8 mm und der Öffnungswinkel des Diffusors 20°. Die untersuchten Edelgase werden aus Standard-Gasflaschen in das Triebwerk eingeleitet und durch die Lavalldüse beschleunigt. Der Massenstrom wird durch einen Massenstromregler geregelt. Die maximalen Werte für den Massenstrom betragen für Ar, Kr und Xe 3,57 mg/s. Wegen des Kalibrierungspunktes des Massenstromreglers liegt der maximale Massenstrom für Neon bei 50% des Wertes der übrigen Gase, d. h. 1,78 mg/s.

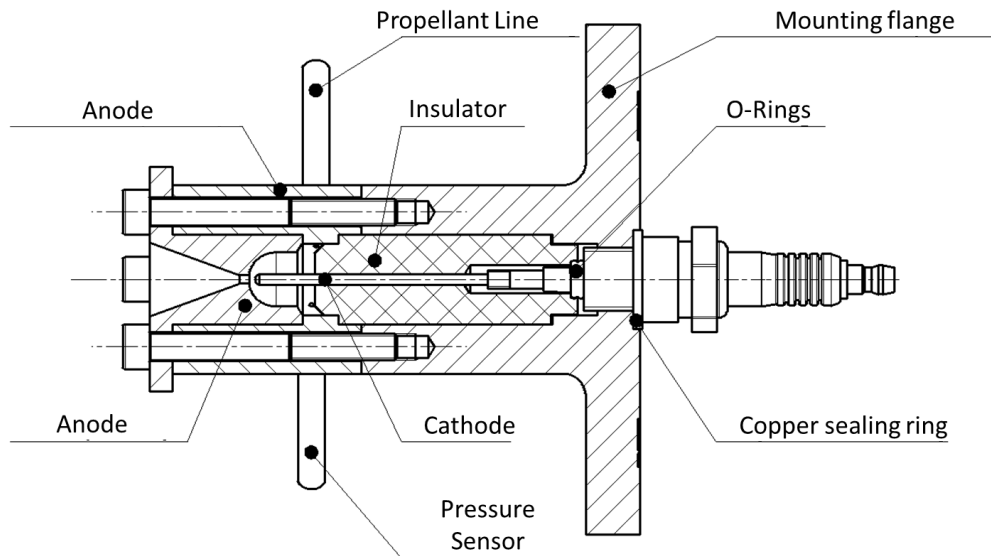


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Lichtbogentriebwerks am ZARM

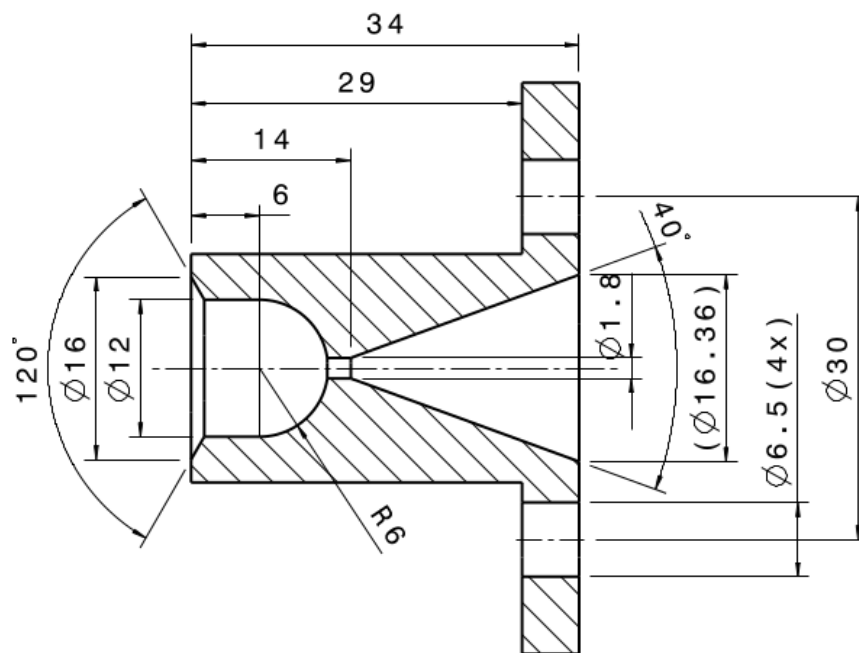


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Lavaldüse mit allen Maßen in mm

Numerische Simulationen

Für die numerischen Simulationen des Kaltgas-Betriebs des Lichtbogentriebwerks werden die bei den Experimenten vorgegebenen Massenströme und die gemessenen Vakuumkammerdrücke als Randbedingungen genutzt. Darüber hinaus wird die Gastemperatur am Inlet der Lavaldüse als 298,15 K definiert und Haftbedingung an allen Wänden angenommen. Basierend auf der in Abb. 2 dargestellten Lavaldüse wird mittels des 3D-Mesh-Generators Gmsh [1] ein numerisches Gitter erzeugt. Die Simulationen wurden mit

dem quelloffenen CFD-Paket OpenFOAM [2] durchgeführt. Die Gasströmung durch die Lavaldüse wird mathematisch durch die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (0.2)$$

die Navier-Stokes-Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) \quad (0.3)$$

und eine Transportgleichung für die innere Energie e :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho e u_j) = -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\lambda_q}{c_v} \left(\frac{\partial e}{\partial x_j} \right) \right] \quad (0.4)$$

modelliert. Das resultierende Gleichungssystem wird mittels des Solvers rhoCentralFOAM, eines auf den Central-Upwind-Diskretisierungsschematen von Kurganov and Tadmor [3] basierenden Solvers, gelöst. Die Simulationen werden auf dem HLRN (Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechen) durchgeführt. Anschließend werden die experimentellen und die numerischen Brennkammerdrücke miteinander verglichen. Die festgestellten Abweichungen werden im Rahmen dieser Untersuchung durch geometrische und gasdynamische Parameter erklärt. Die Ergebnisse werden dazu genutzt, Abweichungen in der angenommenen Düsengeometrie zu identifizieren und eine von der Knudsen-Zahl abhängige Korrekturfunktion für die Simulationsergebnisse zu entwickeln.

Ergebnisse

Abb. 3 zeigt als Beispiel die Stromlinien für die Simulation mit Xenon als Treibgas und einem Massenstrom von 3,57 mg/s. Stationäre Simulationsergebnisse werden nach einer simulierten Zeit von 80 ms erreicht. Das Gas wird vom Inlet (auf der linken Seite der Abbildung) durch die Lavaldüse und zum Outlet hin beschleunigt. Im Düsenhals wird die Schallgeschwindigkeit des Gases erreicht. Nach dem Wirkungsprinzip der Lavaldüse nehmen Mach-Zahl und Strömungsgeschwindigkeit im Diffusor der Lavaldüse zu. Die maximale Geschwindigkeit beträgt in dem dargestellten Fall ca. 272 m/s. Darüber hinaus haben die hohen Austrittsgeschwindigkeiten ein Druckabfall am Outlet des Triebwerks zur Folge. Der daraus resultierende Druckgradient im Outlet-Volumen erzeugt eine Gasströmung von Außen in Richtung der Rotationsachse, was in Abb. 3 durch die Stromlinien im Outlet-Volumen deutlich erkennbar ist.

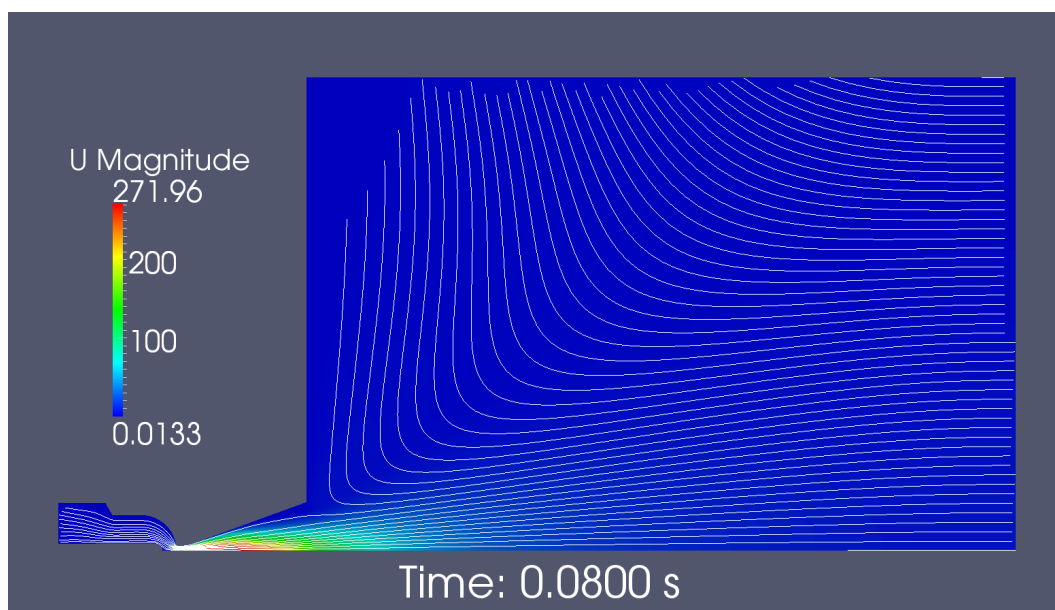


Abbildung 3: Stromlinien für die Simulation mit Xenon und einem Massenstrom von 3,57 mg/s.

Abb. 4 (links) zeigt die experimentellen und die numerischen Brennkammerdrücke des Triebwerks für alle untersuchten Gase. Hierbei werden die Massenstromwerte als Prozentwert des maximalen Massenstromes (3,57 mg/s) dargestellt. Die relativen Abweichungen zwischen den experimentellen und den numerischen Ergebnissen für den Brennkammerdruck werden in Abb. 4 (rechts) dargestellt. Aus Abb. 4 sind folgende Tendenzen zu erkennen. Die numerisch ermittelten Brennkammerdrücke sind für niedrige Massenströme deutlich größer als die experimentellen Ergebnisse. Mit über 40 % ist die Abweichung bei Krypton mit einem Massenstrom von 0,18 mg/s am größten. Die prozentualen Abweichungen zwischen den numerischen und den experimentellen Ergebnissen nehmen mit steigenden Massenstromwerten grundsätzlich ab. Bei einem Massenstrom von ca. 40 % liegen die Abweichungen im Durchschnitt bei ca. 0 %. Aus Abb. 4 ist jedoch ersichtlich, dass Massenströme über 40 % negative Abweichungen zur Folge haben. Dies bedeutet, dass die numerisch ermittelten Brennkammerdrücke in diesem Bereich kleiner als die experimentell ermittelten Werte sind. Demzufolge kann der Vergleich zwischen den numerischen und den experimentellen Brennkammerdrücken folgendermaßen zusammengefasst werden: Bei niedrigen Massenströmen liegen die numerischen Druckwerte deutlich über die experimentellen Ergebnisse. Bei hohen Massenströmen trifft das Gegenteil zu.

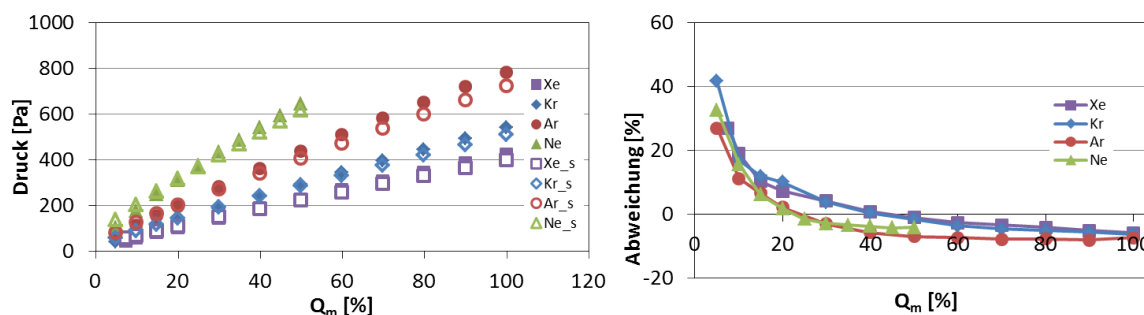


Abbildung 4: Vergleich zwischen numerischen (s) und experimentellen Brennkammerdrücken für Xe, Kr, Ar und Ne. Links: Absolute Druckwerte in Abhängigkeit vom Massenstrom. Rechts: Prozentuale Abweichungen

Als Grund für dieses Verhalten wurden im Rahmen der Untersuchungen zum Kaltgas-Betrieb zwei Faktoren identifiziert: Der Durchmesser des Düsenhalses und die Knudsen-Zahlen in der Gasströmung. Die negativen Abweichungen im hohen Massenstrombereich können durch einen kleineren Düsenhalsdurchmesser im Versuchsaufbau gegenüber dem für die numerischen Simulationen angenommenen Wert erklärt werden. Als Hauptgrund für diese Diskrepanz wird die nicht vermeidbare Ablagerung von Kathoden-Material im Düsenhalsbereich vermutet. Die aus Wolfram bestehende Kathode des Lichtbogentriebwerks wird beim Zündvorgang im Heißgas-Betrieb stark belastet und über die Zeit immer kürzer, was mit einem Materialverlust einhergeht. Ein Teil dieses Materials könnte sich im Düsenhals der Lavaldüse ablagern und die sehr wichtigen geometrischen Maßen der Lavaldüse verändern. Durch eine numerische Parameterstudie wird eine Reduzierung des Düsenhalsdurchmessers von 5% gegenüber dem angenommenen Wert von 1,8 mm (s. Abb. 2) festgestellt. Simulationen mit dem reduzierten Durchmesser liefern sehr gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Druckwerten im hohen Massenstrombereich.

Die Abweichungen im niedrigen Massenstrombereich lassen sich durch gasdynamische Zusammenhänge erklären. Sehr niedrige Massenströme haben sehr niedrige Drücke und somit auch sehr niedrige Dichten zur Folge. Die Knudsen-Zahlen, die das Verhältnis zwischen der mittleren freien Weglänge der Gasteilchen und der charakteristischen Länge der Geometrie darstellen, sind in diesem Fall groß und die Grenze zwischen einer Kontinuums- und einer Gleitströmung (s. Hänel [4] S. 11) werden deutlich überschritten. Aus diesem Grund ist die in der Strömungsmechanik üblich angewendete und im Rahmen der Simulationen für den Kaltgas-Betrieb angenommene Haftbedingung nicht ausreichend, um die Wechselwirkung zwischen den Gasteilchen und den Wänden der Lavaldüse zu beschreiben. Um dieses Phänomen zu berücksichtigen, wurde im Rahmen dieses Forschungsprojektes eine von den Knudsen-Zahlen abhängige mathematische Funktion entwickelt, welche auf den numerischen und experimentellen Ergebnissen basiert. Die entwickelte Knudsen-Zahl-Funktion ermöglicht es, die Simulationsergebnisse in Abhängigkeit von den numerisch ermittelten Knudsen-Zahlen zu korrigieren, ohne hierzu neue Simulationen mit neuen Randbedingungen für die Wand-Wechselwirkung durchführen zu müssen. Darüber hinaus werden durch die Knudsen-Zahl-Abhängigkeit der Korrekturfunktion nur die Simulationen im niedrigen Massenstrombereich korrigiert, während die bereits korrekten Ergebnisse für den Brennkammerdruck im hohen Massenstrombereich wegen der dazugehörigen niedrigen Knudsen-Zahlen kaum verändert werden. Die daraus resultierende Flexibilität des entwickelten Korrekturansatzes ist somit für die Untersuchung strömungsmechanischer Fragenstellungen nahe der Grenze zwischen einer Kontinuums- und einer Gleitströmung von großem Vorteil.

Die beschriebenen Erkenntnisse bezüglich Wolfram-Ablagerung im Düsenhals-Bereich und Knudsen-Zahl-Einfluss in der Kaltgas-Strömung wurden anschließend dazu genutzt, die numerischen Ergebnisse in Abb. 4 zu korrigieren. Abb. 5 zeigt den Vergleich zwischen den numerischen und den experimentellen Ergebnissen unter Berücksichtigung des reduzierten Düsenhalsdurchmessers und unter Anwendung der Knudsen-Zahl-Korrekturfunktion. Aus Abb. 5 ist die sehr gute Übereinstimmung der numerischen und experimentellen Druckwerte deutlich zu erkennen. Hierbei liegen die prozentualen Abweichungen stets unter 3 %. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen tragen dazu bei, die Zusammenhänge innerhalb eines thermischen Lichtbogentriebwerks mit niedrigen Massenströmen zu verstehen und bilden die Grundlagen für die Auswertung eines mathematischen Modells für den Heißgas-Betrieb des Lichtbogentriebwerks.

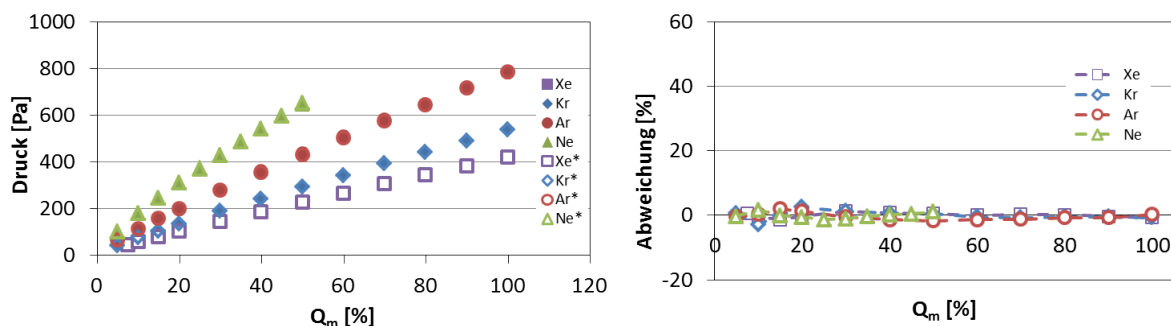


Abbildung 5: Vergleich zwischen korrigierten (*) und experimentellen Brennkammerdrücken für Xe, Kr, Ar und Ne. Links: Absolute Druckwerte in Abhängigkeit vom Massenstrom. Rechts: Prozentuale Abweichungen.

Ausblick

Ziel der nächsten Phase dieses Forschungsprojektes ist die Durchführung dreidimensionaler kompressibler Simulationen mit einem vollständigen Modell für das Lichtbogentriebwerk, d.h. für seinen Heißgas-Betrieb. Die Auswertung des numerischen Modells soll auf den festgestellten Zusammenhängen bezüglich Wolfram-Ablagerung im Düsenhalsbereich und Knudsen-Zahl-Abhängigkeit im Kaltgas-Betrieb basieren. Die Ergebnisse der Simulationen mit dem Modell für den Lichtbogen können mit am ZARM experimentell gewonnenen Daten verglichen und zur Validierung bzw. Weiterentwicklung des mathematischen Modells genutzt werden. Darüber hinaus wird die Optimierung des am ZARM vorhandenen Lichtbogentriebwerks anhand der Simulationsergebnisse angestrebt.

Publikationen

J. Gomez, R. Groll: Cold gas expansions and thrust measurements, Experiments in Fluids (in Vorbereitung)

WWW

<http://www.zarm.uni-bremen.de>

Weitere Informationen

[1] <http://geuz.org/gmsh/>

[2] <http://www.openfoam.com/>

[3] A. Kurganov, E. Tadmor, *J. Comput. Phys.* **160** (1), 241-282 (2000).
doi:10.1006/jcph.2000.6459

[4] D. Hänel, *Molekulare Gasdynamik*, Springer, Berlin (2004).

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

HLRN-Projektkenung	hbk00018
Laufzeit	I/2012 bis IV/2015
Projektleiter	Prof. J. P. Burrows
Projektbearbeiter	Alexei Rozanov, Katja Weigel, Wolfhardt Lotz, Marco Vountas
Institut/Einrichtung	Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

1 Übersicht

Im Rahmen der DFG-Forschergruppe SHARP (engl.: Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction) und des ESA-Projektes SPIN (engl: ESA SPARC Initiative) haben einen Wasserdampfdatensatz der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre berechnet. Grundlage der Berechnung sind SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) Messungen. SCIAMACHY, ein Instrument auf dem europäischen Satelliten Envisat, lieferte Messungen von August 2002 bis April 2012. Wegen der Länge dieses Zeitraumes und da die Berechnung des Wasserdampfes sehr aufwändig ist, wurde ein Teil der Rechnungen auf dem HLRN durchgeführt. Die Zeitserie wird auch durch die Initiativen SPARC-DI (engl.: Stratospheric Processes and their Role in Climate - Data Initiative) und SPARC - WAVAS (engl.: Water Vapour Assessment) genutzt. Zur Zeit arbeiten wir an Verbesserungen der Berechnungsmethode hinsichtlich Qualität und Parallelisierbarkeit.

2 Ergebnisse

Wasserdampf in der Atmosphäre ist im Gegensatz zu Wassertröpfchen, die man als Wolken oder Nebel sehen kann, für das menschliche Auge unsichtbar. Trotzdem spielt er eine wichtige Rolle für den Strahlungstransport in der Atmosphäre, denn er absorbiert besonders gut Strahlung im infraroten Bereich und somit z.B. die von der Erde emittierte Wärmestrahlung. Für das kurzwelligere, sichtbare Licht ist er dagegen fast vollständig transparent. Dadurch ist er das wichtigste natürliche Treibhausgas. Der Wasserdampfgehalt der Atmosphäre schwank stark, sowohl örtlich als auch zeitlich. Den höchsten Wasserdampfgehalt findet man üblicherweise nahe des Erdbodens. An der Tropopause, d.h. am Übergang zwischen Troposphäre und Stratosphäre gibt es meist besonders wenig Wasserdampf. Die Troposphäre reicht bis in eine Höhe von etwa 10 bis 18 km und ist die Schicht, in der sich die meisten Wetterphänomene abspielen. Auch Wolken findet man nur unter bestimmten Bedingungen in der Stratosphäre. Dieses Wasserdampfminimum über den Wolken hat aber einen großen Einfluss auf den Strahlungstransport, Modellstudien haben gezeigt, dass Änderungen des Wasserdampfgehaltes dort auch das Klima am Boden beeinflussen können. Ziel des DFG Projektes SHARP (siehe auch: www.fu-berlin.de/sharp/) ist es, zu einem besseren Verständnis der Verteilung und der zeitlichen Änderung des Wasserdampfgehaltes in der Atmosphäre und dessen Wirkung auf das Klima beizutragen.

Um diese Wasserdampfminimum beobachten zu können, braucht man sehr empfindliche Instrumente. Bodengebundene Messverfahren erreichen diesen Höhenbereich oft nur schlecht, Messungen von Ballonen und Flugzeugen sind nicht global und regelmäßig in

ausreichender Qualität verfügbar. Limb-Messverfahren von Satelliteninstrumenten sind besonders gut geeignet, um den Bereich der Tropopause zu beobachten. Bei diesem Messverfahren schaut das Instrument durch die Atmosphäre über den Erdboden hinweg in Richtung des Weltraumes und kann so verschiedene Höhen abtasten.

Solche Messungen wurden, neben anderen Messverfahren, von SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric CHartography) durchgeführt, einem Spektrometer an Bord des europäischen Satelliten Envisat. Beim Limb-Messverfahren tastet SCIAMACHY die Atmosphäre mit Höhenschritten von jeweils 3.3 km ab. Bei jedem Höhenschritt wird das Spektrum des in der Atmosphäre gestreuten Sonnenlichts über einen breiten Wellenlängenbereich aufgezeichnet. Absorptionslinien des Wasserdampfes im nahen infrarot Bereich des Spektrums ermöglichen es, den Wasserdampfgehalt der Atmosphäre zu bestimmen. Das gemessene Spektrum wird außer vom Wasserdampfgehalt auch durch Druck, Temperatur und die Streuung in der Atmosphäre z.B. an Aerosolen und Wolken beeinflusst. Um Wasserdampfprofile aus den gemessenen Spektren zu bestimmen verwenden wir SCIATRAN (Rozanov et al., 2011). Dabei wird mit einem Strahlungstransportmodell aus einer gegebenen Atmosphäre ein solches Spektrum berechnet, wobei muss auch die Mehrfachstreuung modelliert wird. Um aus den Messungen und den modellierten Spektren auf Wasserdampfprofile in der Atmosphäre zu schließen sind aufwändige, inverse mathematische Verfahren nötig. Das Ergebnis sind Wasserdampfprofile zwischen ca. 10 und 25 km Höhe. Die Berechnung erfolgen iterativ und der Zeitaufwand ist groß, unter anderem weil ein breiter Spektralbereich und ein dichtes Höhengitter verwendet werden muss.

Dazu kommt die große Zahl von Profilen, die berechnet werden kann. SCIAMACHY Messungen gibt es von August 2002 bis zum plötzlichen Kontaktverlust mit Envisat im April 2012. Damit ist es möglich, einen relativ lange Datenreihe mit globaler Abdeckung aus Messungen eines einzelnen Instrumentes zu berechnen. In diesem Zeitraum gibt es etwa 4.5 Millionen Limb-Messungen bei Tageslicht, die sich prinzipiell für die Berechnung des Wasserdampfgehaltes eignen. Das sind über 1000 pro Messtag. Mit einem Wolkenfilter werden zunächst die Profile identifiziert, bei denen hohe Wolken eine Auswertung erschweren. Nach der Filterung bleiben etwa 700 Profile pro Messtag übrig, die Zahl der Profile reduziert sich besonders in der Nähe des Äquators. Um schneller den gesamten Messzeitraum auswerten zu können und dabei mehr Profile in Regionen mit vielen hohen Wolken auszuwählen, wurde bisher jeder 8. Tag global und jeder 2. Tag zwischen 45°N und 45°S berechnet.

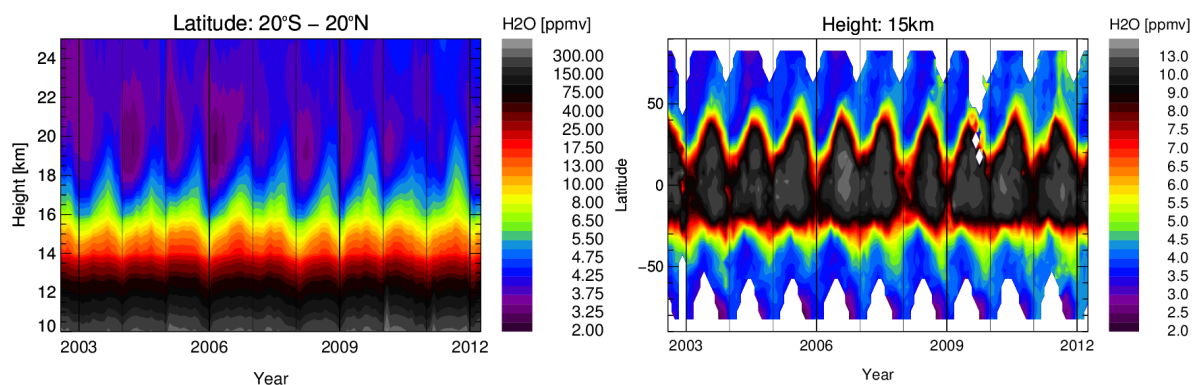


Abbildung 1: Zeitserien des zonal gemittelten Wasserdampfes aus den SCIAMACHY Limb-Messungen, gemittelt für 20°N – 20°S (links) und auf 15 km Höhe (rechts).

Abbildung 1 zeigt Ergebnisse der aktuellen Datenversion V3.01 zonal gemittelt für den ganzen Messzeitraum, im linken Teil gemittelt über den Breitenbereich zwischen 20°N und 20°S und im rechten Teil global in 15 km Höhe. Der Wasserdampfgehalt wird hier im Volumenmischungsverhältnis ppmv (engl.: parts per million, volume) angegeben. Im linken Teil sieht man gut, dass der Wasserdampfgehalt mit zunehmender Höhe bis zu einem Minimum oberhalb von 18 km abnimmt. Deutlich sind auch ein Jahresgang und Änderungen im Verlauf der Zeitreihe erkennbar. Rechts sieht man, dass auf 15 km Höhe besonders in den Tropen und nördlichen Subtropen deutlich mehr Wasserdampf ist als in Hohen Breiten. Das liegt vor allem daran, dass 15 km in Hohen Breiten meist schon innerhalb der wesentlich trockeneren Stratosphäre liegen, während die Troposphäre in Äquatornähe bis etwa 18 km Höhe reicht.

Die Datenversion V3.01 haben wir mit verschiedenen Datensätzen von anderen Satelliteninstrumenten und Ballonmessungen verglichen und die Berechnung anhand von simulierten Messungen überprüft. Die Qualität der Daten ist gut, allerdings gibt es Hinweise darauf, dass die Korrektur für Aerosole für vulkanische Aerosole verbessert werden sollte und die vertikale Auflösung im oberen Teil der Wasserdampfprofile erhöht werden kann. Dabei soll auch die neuste Datenversion der gemessenen Spektren verwendet werden. Außerdem testen wir, inwieweit die Berechnung beschleunigt werden kann.

Die Wasserdampfdaten 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); Hegglin et al. (2014). Im letzten Jahr haben wir an der Umstellung auf eine neue SCIATRAN Version, der Verbesserung des Algorithmus und der Publikation der bisherigen Ergebnisse gearbeitet.

3 Ausblick

In der 2. Phase von SHARP arbeiten wir an einer verbesserten Version des Wasserdampfretrievals. Dabei testen wir zur Zeit eine neue SCIATRAN Version (V3.5), die es auch ermöglicht statt OpenMP MPI vollständig zu nutzen um die Berechnung auf mehr HLRN Kerne zu verteilen. Nach Abschluss der Arbeit an den Verbesserungen soll die gesamte Zeitserie erneut berechnet werden.

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., Lingenfelser, 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.

Hegglin, M. I., Plummer, D. A., Shepherd, T. G., Scinocca, J. F., Anderson, J., Froidevaux, L., Funke, B., Hurst, D., Rozanov, A., Urban, J., von Clarmann, T., Walker, K. A., Wang, H. J., Tegtmeier, S., and Weigel, K.: Vertical structure of stratospheric water vapour trends derived from merged satellite data, *Nature Geosci.*, 7, 768--776, doi:10.1038/ngeo2236, 2014.

Präsentationen 2014

K. Weigel, A. Rozanov, F. Azam, K. Bramstedt, K.-U. Eichmann, C. Gebhardt, M. Weber, G.P. Stiller, H. Bovensmann, and J.P. Burrows: Water vapour profiles retrieved from SCIAMACHY Limb measurements for SHARP II: Achievements and new goals, SHARP Annual Meeting, Heidelberg, 04.07.2014

Poster 2014

Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Bramstedt, K., Eichmann, K.-U., Gebhardt, C., Weber, M., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: Water vapor time series in the UTLS from SCIAMACHY limb measurements, European Geosciences Union General Assembly, 01. May 2014, Vienna, Austria.

6.6 hbk00021: Understanding the dynamics and change in the Arctic Ocean

HLRN Projektkennung:	hbk00021
Projektleiter:	Prof. Thomas Jung ^{1,2}
Projektbearbeiter:	Qiang Wang ² , Sergey Danilov ² , Xuezhong Wang ²
Laufzeit:	II/2009 bis III/2015
Institut:	¹ University of Bremen ² Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven

The Arctic Ocean is connected to the world ocean through both surface and deep circulations (Figure 1). At depth it has a relatively warm and salty Atlantic Water (AW) layer that feeds the lower part of the East Greenland Current towards the Denmark Strait. The Arctic AW layer is supplied by the AW inflow in two branches. One branch of AW enters the shallow Barents Sea where it experiences strong atmospheric cooling. Another inflow branch is the West Spitsbergen Current through Fram Strait. Observations have indicated a series of anomalously warm AW intrusion into the Arctic Ocean during the past (Karcher et al., 2003; Dmitrenko et al., 2008; Polyakov et al., 2012). It was suggested that the warming AW can contribute to reduced polar ice cap recently observed (Polyakov et al., 2010).

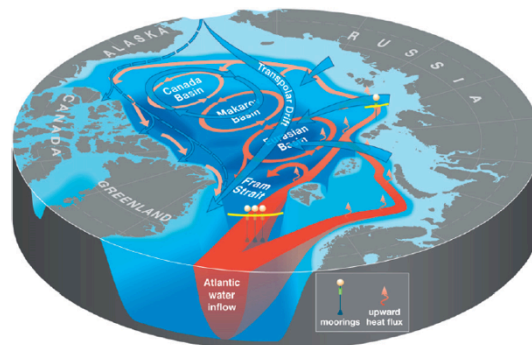


Figure 1: Schematic of the Arctic Ocean surface (blue) and intermediate depth (red) circulations. Taken from Polyakov et al. (2012).

The potential climate impact of the Arctic AW layer warrants adequate representation of the AW circulation in the Arctic Ocean in numerical simulations. In this work we studied the model sensitivity to both the horizontal resolution and tracer advection schemes. The model used is the unstructured-mesh ocean-ice model FESOM (Wang et al., 2014). The model is global, with locally refined resolution in the Arctic Ocean and coarse (1 degree) in other parts of the ocean. In one setup the resolution is 24 km in the Arctic region, while it is 4.5 km in the other setup. To assess the impact of numerical mixing, we used two options in the tracer advection scheme, which have different strength of numerical mixing.

The model reproduced the two AW branches, the warmer Fram Strait branch and the colder Barents Sea branch (Figure 2). They meet north of Kara Sea, with the Barents Sea branch at the outer rim of the Arctic basin. The horizontal mesh resolution has a significant impact on the simulated results. At the eddy permitting resolution, the cyclonic circulation in the Eurasian Basin is much better simulated. The warm AW reaches the Laptev Sea region and part of it returns along the Lomonosov Ridge towards the Fram Strait as suggested in previous studies (Karcher et al., 2007; Aksenov et al., 2011). The coarse resolution shows lower temperature north of Laptev Sea and misses the clear signal of cyclonic circulation in the Eurasian Basin. The comparison shows that numerical mixing associated with the tracer advection scheme also has significant impact on the representation of AW circulation, especially at the eddy permitting resolution. With less numerical mixing, the narrow boundary current of AW is better captured, which has higher temperature and a stronger cyclonic circulation. The model results will be further analyzed to improve the understanding of the dynamics of the AW circulation and the possible impact of its warming trend.

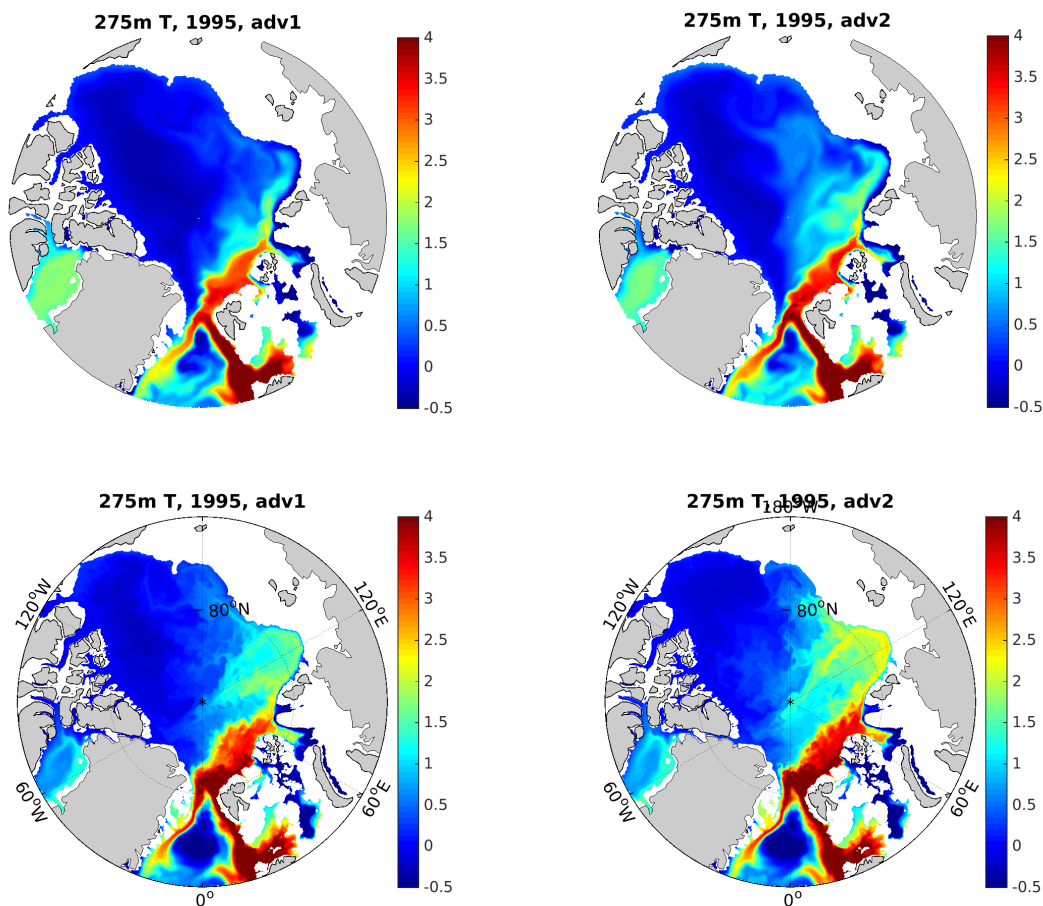


Figure 2: Potential temperature at 275 m depth in the Arctic Ocean in 1995. The upper panels are for the simulations with 24 km resolution, and the lower panels are for those with 4.5 km resolution. The left panels are for the cases with higher numerical mixing, while the right panels are for the cases with lower numerical mixing.

Literature:

Aksenov, Y., V. V. Ivanov, A. J. G. Nurser, S. Bacon, I. V. Polyakov, A. C. Coward, A. C. Naveira-Garabato, and A. Beszczynska-Moeller (2011), The Arctic Circumpolar Boundary Current, *J. Geophys. Res.*, 116, C09017

Dmitrenko, I., I. V. Polyakov, S. A. Kirillov, L. A. Timokhov, I. E. Frolov, V. T. Sokolov, H. L. Simmons, V. V. Ivanov, and D. Walsh (2008), Toward a warmer Arctic Ocean: Spreading of the early 21st century Atlantic Water warm anomaly along the Eurasian Basin margins, *J. Geophys. Res.*, 113.

Karcher, M. J., R. Gerdes, F. Kauker, and C. Koberle (2003), Arctic warming: Evolution and spreading of the 1990s warm event in the Nordic seas and the Arctic Ocean, *J. Geophys. Res.*, 108.

Karcher, M., F. Kauker, R. Gerdes, E. Hunke, and J. Zhang (2007), On the dynamics of Atlantic Water circulation in the Arctic Ocean, *J. Geophys. Res.*, 112, C04S02.

Polyakov, I. V. et al. (2010), Arctic Ocean warming contributes to reduced polar ice cap. *J. Phys. Oceanogr.* 40, 2743–2756.

Polyakov, I. V., A. V. Pnyushkov, and L. Timokhov (2012), Warming of the Intermediate Atlantic Water of the Arctic Ocean in the 2000s, *Journal of Climate*, 25, 8362–8370.

Q. Wang, S. Danilov, D. Sidorenko, R. Timmermann, C. Wekerle, X. Wang, T. Jung, and J. Schröter (2014), The Finite Element Sea Ice-Ocean Model (FESOM) v.1.4: formulation of an ocean general circulation model, *Geosci. Model Dev.*

6.7 hbk00025: Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen

HLRN-Projektkenung:	hbk00025
Laufzeit:	II/2010 – II/2014
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	Dr. G. Jung, Dr. M. Prange
Institut/Einrichtung:	MARUM – Zentrum für Marine Umweltwissenschaften, Universität Bremen

Kurzfassung

- Der Schwerpunkt des Projekts liegt auf der Modellierung des Einflusses tektonischer Faktoren, insbesondere von Gebirgshebungen auf Klima und Vegetation der Tropen, insbesondere in Afrika.
- Das verwendete Modell ist das gekoppelte parallele Community Climate System Model (Version 3), welches Atmosphäre, Ozean, Meereis, Landoberfläche und Vegetationsbedeckung explizit berücksichtigt.
- Es wurden verschiedene Simulationen zur Absenkung von Gebirgsregionen durchgeführt (Süd- und Ostafrika, Himalaya/Tibet, Nordamerikanische Kordillieren/Colorado Plateau, Anden)
- Die afrikanische Topografie ist von besonderer Bedeutung für die Entwicklung des tropischen Regenwaldes in Zentralafrika.
- Es kann auch für das Experiment mit reduzierter afrikanischer Topographie keine geschlossene Regenwaldbedeckung für das tropische Afrika simuliert werden. Die Absenkung von Himalaya und Tibetischem Plateau führt zu gegenüber der Absenkung Afrikas vernachlässigbaren Änderungen der Vegetationsbedeckung und des Klimas Afrikas
- 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, hervorgerufen durch eine Intensivierung des küstenparallelen bodennahen Benguela Jets.
- Durch die Hebung der Anden kommt es im Pazifik südlich von 22°S trotz einer Verstärkung der Auftriebsintensität zu einer Erwärmung, sowie nördlich davon bei verringertem Auftrieb zu einer Abkühlung. Gründe dafür werden derzeit genauer untersucht und liegen vermutlich in einer veränderten zonalen Strömung und einer Bewölkungszunahme.
- Die Hebung der Nordamerikanischen Kordillieren und des Colorado Plateaus bewirkt einen verstärkten Auftrieb im Bereich des kalifornischen Auftriebsgebiets im Sommer. Die vorherrschende Abkühlung im Bereich des nördlichen Pazifiks kann aber zum größeren Teil auf eine Verstärkung des Zustroms kalter Wassermassen zurückgeführt werden.

Introduction

Mountain uplift processes are important tectonic processes that strongly impact the climate system and hence also vegetation coverage (Hay, 1996). Mountains and high plateaus change for example the regional rainfall distribution through lee and luv effects and impact moisture and heat transport in the atmosphere. Several model simulations were performed to

investigate the climatological effect of different mountain uplift processes that might help to explain the climate evolution and related feedback mechanisms of the late Miocene/early Pliocene.

Model simulations

In the following paragraphs we will describe the results of selected experiments that were performed. Besides a control simulation with present-day topography, six sensitivity experiments with altered topography were carried out. Specifically topographies were lowered to half the present-day level in 1) east and southern Africa, 2) east Africa, 3) southern African, 4) Himalaya and Tibetan Plateau, 5) Andes, and 6) North American Cordillera and Colorado Plateau.

Results

African vegetation development due to uplift of Africa and the Himalaya/Tibet Plateau

Our simulations confirm a dominant impact of African topography for climate and vegetation development of the African tropics (Fig. 1). Only a weak influence of prescribed Asian uplift on African climate could be detected. The model simulations show that rainforest coverage of Central Africa is strongly determined by the presence of elevated African topography. In East Africa, despite wetter conditions with lowered African topography, the conditions were not favorable enough to maintain a closed rainforest, which is also in agreement with recent proxy records (Feakins et al., 2013).

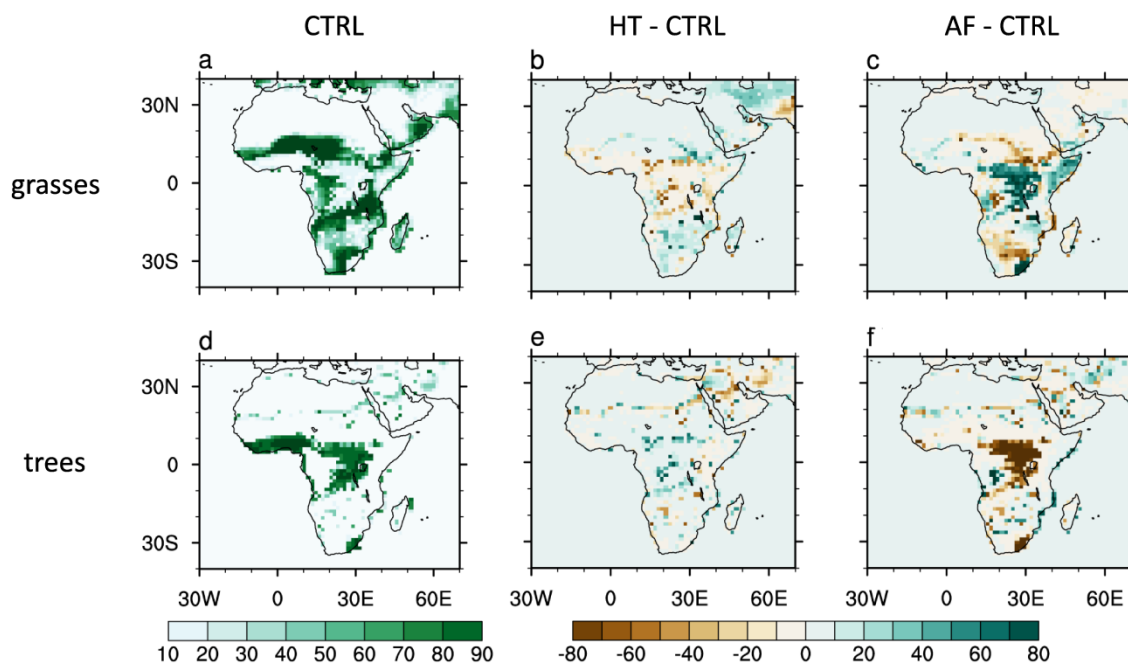
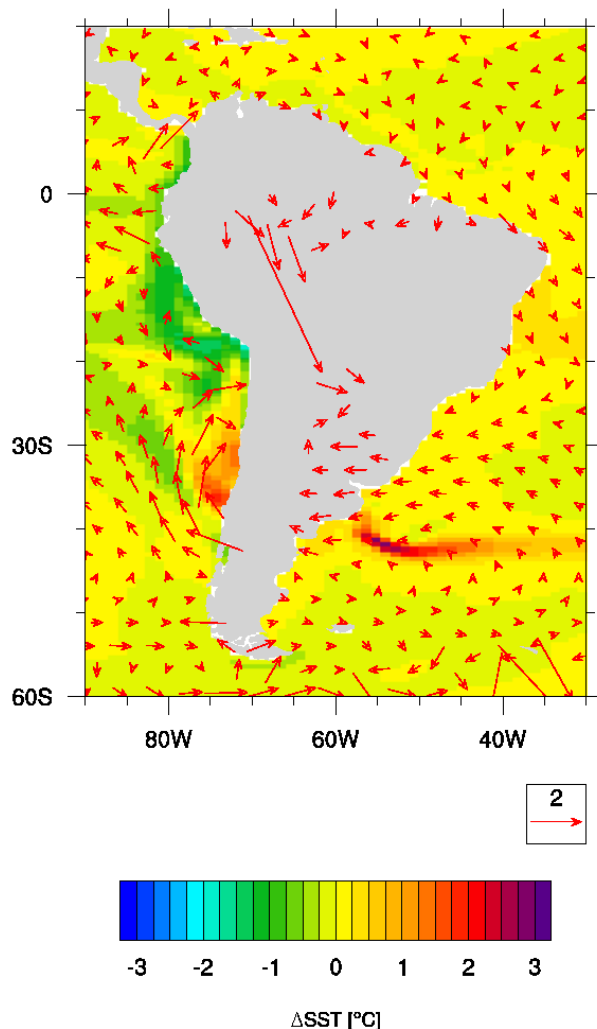


Figure 1: Percentage coverage with grass and shrub type vegetation for the control simulation (CTRL) (a) and response to a lowering of model topography in Himalaya/Tibetan Plateau (HT) (b) and East and Southern Africa (AF) (c); Percentage coverage with tree type vegetation for CTRL (d) and response to a lowering of model topography in Himalaya/Tibetan Plateau (e) and East and Southern Africa (f).

Continental-scale Neogene mountain uplift and the effect on eastern boundary currents and coastal upwelling systems

As illustrated and discussed in (Jung et al., 2014) our model results for southern and East African uplift clearly indicate a strengthening of the low-level Benguela jet along the southwestern African coast. This induces increased upwelling of cool subsurface waters in the Benguela region. In comparison to simulations testing the effects of the Central American seaway closure, Indonesian Throughflow restriction and Antarctic glaciation it could be demonstrated that uplift of Africa was an important factor in driving the cooling and strengthening of the Benguela Current and coastal upwelling during the past 10 million years (the late Miocene and Pliocene).

Also other continental-scale uplift processes occurred during the Neogene, e.g. in the Andes as well as the North American Cordillera region and the Colorado Plateau (Hoorn et al., 2010; Ruddiman and Kutzbach, 1989). We also analyzed our model experiments of South and



North American uplift processes with respect to a potential upwelling intensification and sea surface cooling. The model results indicate a wind-stress induced increase in upwelling intensity in the southern Humboldt region (South of $\sim 22^\circ\text{S}$) and a decrease in the northern Humboldt region (North of $\sim 22^\circ\text{S}$). Nevertheless the model results show a cooling in the northern part and a warming in the southern part (Fig. 2). This counterintuitive picture results from reduced wind-driven surface oceanic flow to the west and, consequently, reduced meridional flow of cooler waters from the south, despite increased surface wind stress in that area. One reason that might explain the temperature decrease in the Northern region is enhanced cloud coverage and a decrease in net radiative heat flux to the surface ocean. Whether that mechanism alone can explain the temperature decline of $\sim 1.5^\circ\text{C}$ is currently under investigation.

F

figure 2: Response in sea surface temperature (SST) and 1000hPa wind [m/s] to an uplift of the Andean mountain range from 50% of present-day altitude to present-day altitude.

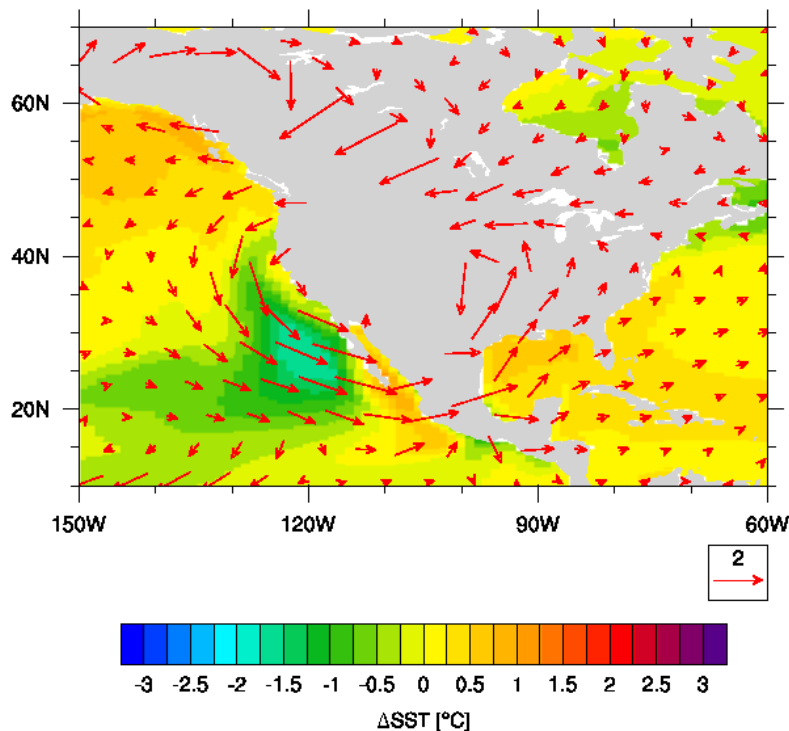


Figure 3: Response in sea surface temperature (SST) and 1000hPa wind [m/s] to an uplift of the North American Cordillera from 50% of present-day altitude to present-day altitude.

In comparison to the Humboldt Current and upwelling region, uplift of the North American Cordillera and the Colorado Plateau leads to a cooling caused by enhanced upwelling in the California upwelling region due to enhanced wind stress and Ekman pumping velocities. But preliminary results indicate that the mechanism via wind stress intensification and increased Ekman pumping is not the only reason for the temperature reduction with uplift (Fig.3). The change in oceanic heat flux, due to increased transport of cooler water masses from the North seems to be more important than summertime upwelling intensification.

References:

- S.J. Feakins *et al.*, Northeast African vegetation change over 12 m.y., *Geology* **41**(2013), pp. 295-298.
- W. Hay, Tectonics and climate, *Geologische Rundschau* **85**(1996), pp. 409-437.
- C. Hoorn *et al.*, Amazonia Through Time: Andean Uplift, Climate Change, Landscape Evolution, and Biodiversity, *Science* **330**(2010), pp. 927-931.
- G. Jung, M. Prange and M. Schulz, Uplift of Africa as a potential cause for Neogene intensification of the Benguela upwelling system, *Nature Geoscience* **7**(2014), pp. 741-747.
- W. Ruddiman and J. Kutzbach, Forcing of late Cenozoic Northern Hemisphere climate by plateau uplift in southern Asia and the American west, *Journal of Geophysical Research* **94**(1989), pp. 18409-18418.

Publications and presentations related to the project

Publications:

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2014), Uplift of Africa as a potential cause for Neogene intensification of the Benguela upwelling system. *Nature Geoscience*, **7**, 741-747.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (*Climate Dynamics*, in revision), Influence of topography on tropical African vegetation coverage.

Oral presentations:

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2015), Mountain uplift and Neogene climate evolution. Invited talk, seminar about recent research topics, IMK-IFU , Campus Alpine, Garmisch-Partenkirchen, Germany.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2014), Causes of Neogene intensification of the Benguela Upwelling System. EGU General Assembly, Vienna, Austria.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2013), African uplift and the intensification of the Benguela Upwelling System in the Neogene, MARUM, palaeoceanography workshop.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2012), Mountain uplift and the development of the African tropical rainbelt in the late Neogene. EGU General Assembly, Vienna, Austria.

Poster presentations:

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2014), Topographic development in the late Neogene and the impact on African vegetation, EGU General Assembly, Vienna, Austria.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2014), Potential causes of Neogene intensification of the Benguela Upwelling, ICDP/IODP/ODP Kolloquium, Erlangen, Germany.

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.

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.

Jung, G., M. Prange, and M. Schulz (2010), Modeling the impact of Neogene mountain lifting on the African-Asian monsoon circulation and vegetation development. Global Monsoon Symposium, Shanghai, China.

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

HLRN-Projektkenung:	hbk00032
Laufzeit:	II/2012 – III/2015
Projektleiter	Prof. Dr. Thomas Jung ^{1,2}
Projektbearbeiter:	Dmitry Sidorenko ² , Thomas Rackow ² , Tido Semmler ² , Qiang Wang ² , Xuezhu Wang ² , Sergey Danilov ² , Jens Schröter ² , Claudia Wekerle ²
Institut / Einrichtung:	¹ University of Bremen ² Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven

Summary

A new climate model has been developed that employs a multi-resolution dynamical core for the sea ice-ocean component. The multi-resolution approach allows to use enhanced horizontal resolution in dynamical active regions while keeping a coarse-resolution setup everywhere else. The new model consists of the atmospheric model ECHAM6 and the Finite Element Sea Ice-Ocean Model (FESOM).

The two major aims of this project are (i) to compare the performance of the ECHAM6-FESOM to other existing climate models and (ii) to develop strategies for improving the climate model biases by means of increasing resolution in the ocean. The current computations have been performed on multi-centennial time scales using refinement in the different parts of the global ocean. Benefits from the local refinement have been analyzed. It is found that already with moderate refinement of the unstructured ocean grid, ECHAM6-FESOM performs at least as well as some of the most sophisticated climate models participating in CMIP5. It is also found that locally increased resolution in different areas helps to improve the simulated climate.

Currently ECHAM6-FESOM is used in a broad spectrum of research activities starting with the analysis of the modeled El Niño-Southern Oscillation (ENSO) and ending with the analysis of biases in the Labrador Sea and sensitivity experiments on the response of the climate system to vanishing Arctic sea-ice.

1. Coupled model setup

The sea ice-ocean component (FESOM) has been already described and validated in numerous studies with prescribed atmospheric forcing (see e.g. Danilov et al., 2004; Wang et al., 2008; Timmermann et al., 2009, Sidorenko et al., 2011, Wang et al., 2014). Three FESOM configurations with different meshes (see Fig. 1) are used in this work. They include a coarse mesh R0, used for the technical tuning of the system, a medium resolution mesh R1, and the R2 mesh with slightly increased spatial resolution in key regions of the global ocean. The R2 configuration has already been used for the comparison of FESOM with other ocean-only models under Coordinated Ocean-ice Reference Experiments - Phase II

(CORE2) forcing. It has been demonstrated that FESOM performs well in this configuration compared to other ocean models (Griffes et al., 2014; Danabasoglu et al., 2014).

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

The coupling between FESOM and ECHAM6 is achieved via the parallel OASIS3-MCT coupler.

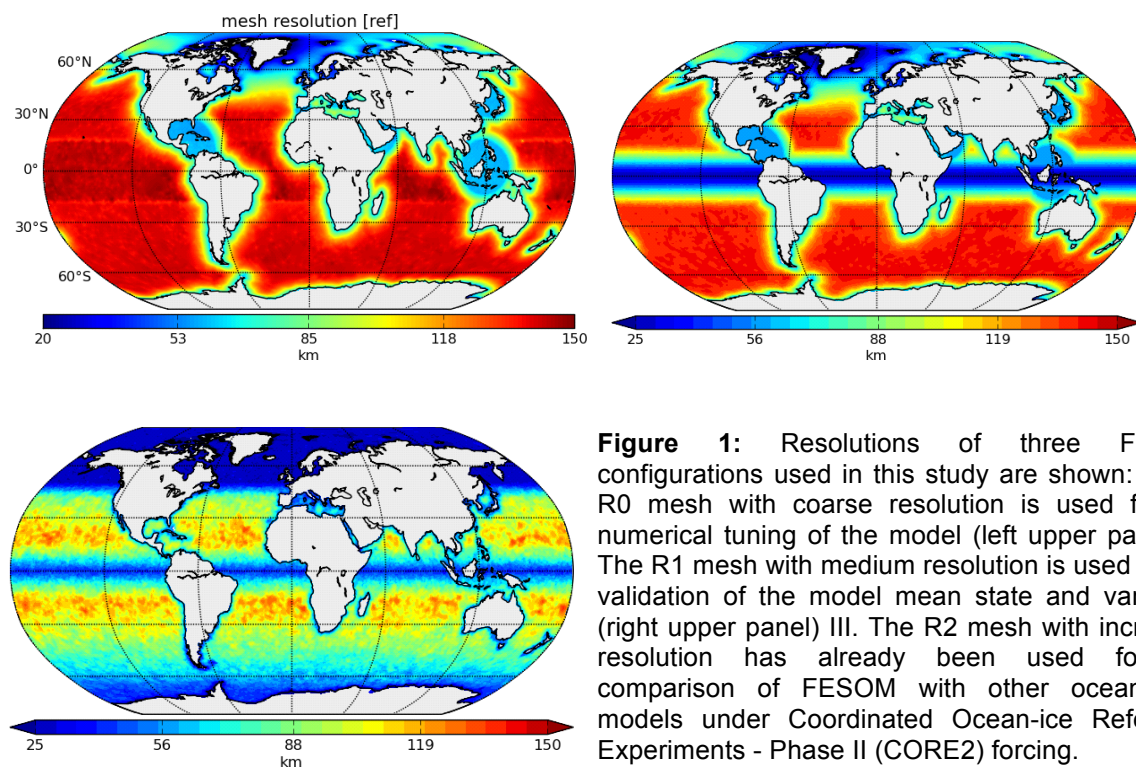


Figure 1: Resolutions of three FESOM configurations used in this study are shown: I. The R0 mesh with coarse resolution is used for the numerical tuning of the model (left upper panel) II. The R1 mesh with medium resolution is used for the validation of the model mean state and variability (right upper panel) III. The R2 mesh with increased resolution has already been used for the comparison of FESOM with other ocean only models under Coordinated Ocean-ice Reference Experiments - Phase II (CORE2) forcing.

2. Technical achievements

The main technical progress within this phase of the project was the removal of the regular exchange mesh on the FESOM side which was used for the coupling. This means that the coupling is completely done via OASIS3-MCT. This also made possible to use a proper restart strategy as implemented in the coupler.

In addition, the new setup makes use of the collective transfer feature provided by OASIS3-MCT meaning, that all model fields are 'packed together' prior to the coupling and then transferred as one between the model components. The coupling is now also implemented in a fully parallel mode. All these improvements in the model lead to a significant noticeable speedup of the system.

Moreover, the system was compiled together with the newest version of ECHAM, version 6.3 and the physical validation of this setting is in progress.

3. Bias in simulated climate with R0 and R1

The R1 model setting has been run for 1500 years under constant radiative conditions from the year 1990. The validation of the mean climate and variability is summarized in two papers (Sidorenko et al., 2015; Rackow et al., 2015). It is shown that both the R0 and R1 configurations of ECHAM6-FESOM perform as well as some of the most sophisticated climate models participating in CMIP5. However, ECHAM6-FESOM also shares similar model biases. Those include warming and salinization of the deep ocean being most pronounced in the northern North Atlantic, reduced deep water formation in the Labrador Sea which is accomplished by the sporadic ice coverage of the whole Labrador Sea, an extensive ice presence in the Barents Sea, and the typical 'cold tongue' SST bias in the tropical Pacific. All these biases are often attributed in literature to the lack of oceanic resolution. The latter 'cold tongue' bias could already be significantly improved with the higher oceanic resolution of R1 in the tropical belt compared to R0 (Sidorenko et al., 2015), contributing to the higher realism of the simulated ENSO (Rackow et al., 2015).

Figure 2 (upper panel) shows the mean ice extent over 50 years in the Arctic in March and September (after ca. 250 years of the R1 integration) and reflects some of the above artifacts. Sidorenko et al. (2015) showed that the deep ocean bias is at least partially responsible for the reduced deep convection in Labrador and the extensive Arctic sea ice.

4. Bias reduction in R2

As was mentioned above, the R2 mesh features increased resolution over key regions of the global ocean compared to R0 and R1 (in high latitudes). Those include the northern North Atlantic, the Canadian Arctic Archipelago, overflow regions across the Greenland-Iceland-Scotland ridge and generally in the Arctic. Based on the hypothesis that the lack of oceanic resolution contributes to some of the above biases, we expect that the R2 configuration will at least partially reduce the climate model biases obtained with the R0 and R1 runs. To this end, the R2 run has been integrated for more than 250 years and we compared it with R1 using a common integration interval.

Figure 3 depicts the timeseries of the Labrador Sea mixed layer depth maximum in winter for the R1 (marked as 'before') and R2 (marked as 'after') runs. It shows that the increase of resolution indeed improved the deep water production in the Labrador Sea. In turn, the ice edge is better simulated with R2 as seen from Figure 2 (lower panel) and most of the biases mentioned in section 3 vanish. Furthermore, the deep ocean bias is also reduced (not shown) in line with the hypothesis suggested by Sidorenko et al. (2015). A deeper comparison between R2 and R1 under longer integrations and different radiative conditions is an ongoing work.

5. Works published within the project

The validation of simulated by ECHAM6-FESOM mean climate and variability has been summarized in two papers (Sidorenko et al., 2015; Rackow et al., 2015). As it is mentioned in the beginning, besides model validation activity, ECHAM6-FESOM is also used in a broad spectra of research. This led to two master's theses (Stulic, 2015; Campos, 2015); peer-reviewed publications are in preparation.

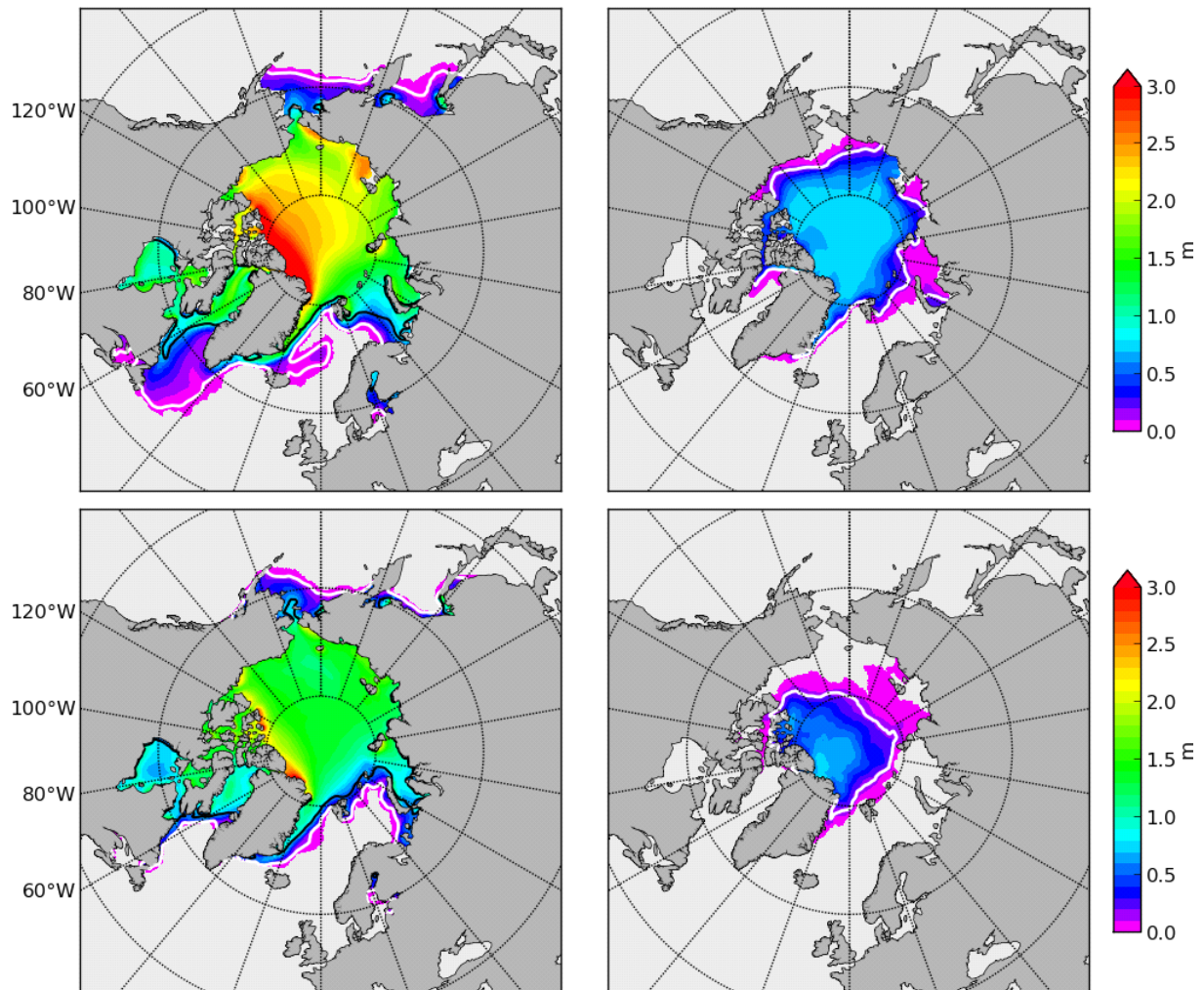


Figure 2: Ice thickness (m) in March (left) and September (right) for the Northern Hemisphere. The thick and thin contours indicate mean ice concentrations of 15 and 85%, respectively. Results from the model simulations with R1 (upper panel) and R2 (lower panel) are shown. Mean over last 50 years of the common integration interval is shown

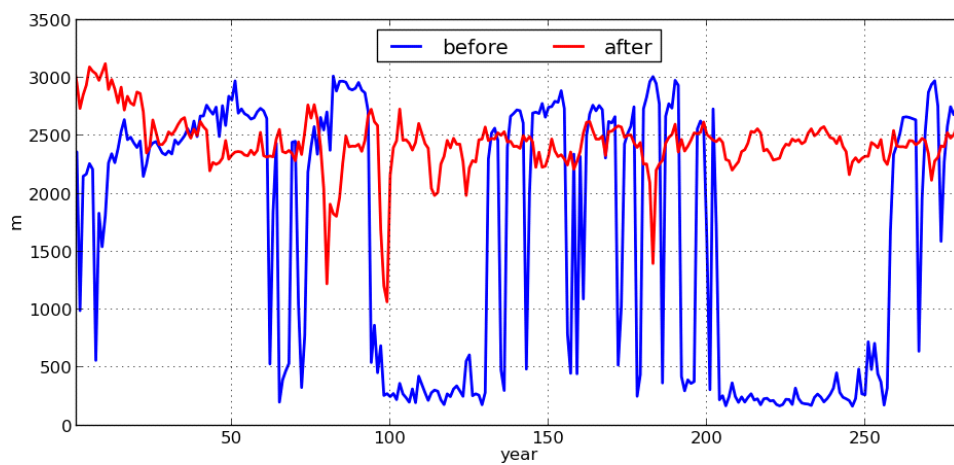


Figure 3: winter maximum mixed layer depth simulated by the R1 (marked as 'before') and R2 (marked as 'after') configurations with ECHAM6-FESOM.

References

- Campos, C. (2015), *Assessment of Arctic Ocean Circulation Sensitivity to Sea Ice Decline. Master thesis at the University of Bremen.*
- Danabasoglu, G. and others (2014), North Atlantic simulations in Coordinated Ocean-ice Reference Experiments phase II (CORE-II). Part I: Mean states, *Ocean Modelling*, 73 , pp. 76-107. doi:10.1016/j.ocemod.2013.10.005
- Danilov S., G. Kivman, and J. Schröter (2004), *A finite-element ocean model: principles and evaluation, Ocean Modell.*, 6(2):125–150
- Griffies, S. and others (2014), *An assessment of global and regional sea level for years 1993–2007 in a suite of interannual CORE-II simulations, Ocean Modelling*, 78, 35-89. doi:10.1016/j.ocemod.2014.03.004
- Rackow, T., Goessling, H., Jung, T., Semmler, T., Sidorenko, D., Barbi, D., Handorf, D. (2015), *Towards multi-resolution global climate modeling with ECHAM6-FESOM. Part II: Climate variability. Submitted to Clim. Dyn.*
- Sidorenko, D., Rackow, T., Jung, T., Semmler, T., Barbi, D., Danilov, S., Dethloff, K., Dorn, W., Fieg, K., Gößling, H. F., Handorf, D., Harig, S., Hiller, W., Juricke, S., Losch, M., Schröter, J., Sein, D. and Wang, Q. (2015), *Towards multi-resolution global climate modeling with ECHAM6–FESOM. Part I: model formulation and mean climate, Climate Dynamics*, doi:10.1007/s00382-014-2290-6
- Stulic, L. (2015), *Impact of removed Arctic Summer Sea Ice on atmosphere and ocean circulation in an ensemble of coupled model simulations. Master's thesis at the University of Split, Croatia.*
- 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.
- Wang, Q., Danilov, S., Sidorenko, D., Timmermann, R., Wekerle, C., Wang, X., Jung, T. and Schröter, J. (2014), *The Finite Element Sea Ice-Ocean Model (FESOM) v.1.4: formulation of an ocean general circulation model, Geoscientific Model Development*, 7 (2), 663-693. doi:10.5194/gmd-7-663-2014

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

HLRN Project-ID:	hbk00034
Project runtime:	III/2013 – III/2015
Project lead:	I/2014-II/2014: Prof. Dr. Peter Lemke ^{1,2} III/2014-IV/2014: Prof. Dr. Torsten Kanzow ^{1,2}
Project members:	Dr. Ralph Timmermann ² , Marta Anna Kasper ² , Yoshihiro Nakayama ² , Catalin Patilea ²
Institutes:	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 (FESOM) 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 a correct representation of water mass exchange between the deep ocean and the continental shelves, and the pathways of water in the sub-ice cavities. Coupling with an efficient ice sheet/shelf model will allow for a complete and consistent representation of the relevant processes in decadal to multicentennial simulations. 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 on resources provided through the HLRN.

2. Current Results

2.1 Workpackage 1: Filchner-Ronne Ice Shelf

2.1.1: Effect of a varying ice-shelf geometry

This sub-workpackage promotes the coupling between FESOM and the *Revised Ice Model Based on frAnk pattYn* (Rimbay). Work in the reporting period has concentrated on implementing the machinery necessary to handle a varying ice shelf geometry in FESOM. 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 of Filchner-Ronne Ice Shelf (FRIS), the initial grid thus also comprises the adjacent areas of ice that is grounded now but may become floating as the groundig line retreats.

Horizontal resolution in this area is about 1.5 km to describe a possible grounding line migration as smoothly as possible. Compared to the simulations of Timmermann and Hellmer (2013), resolution in the Filchner trough area has been doubled to reduce the unavoidable amount of smoothing applied to the ice shelf draft.

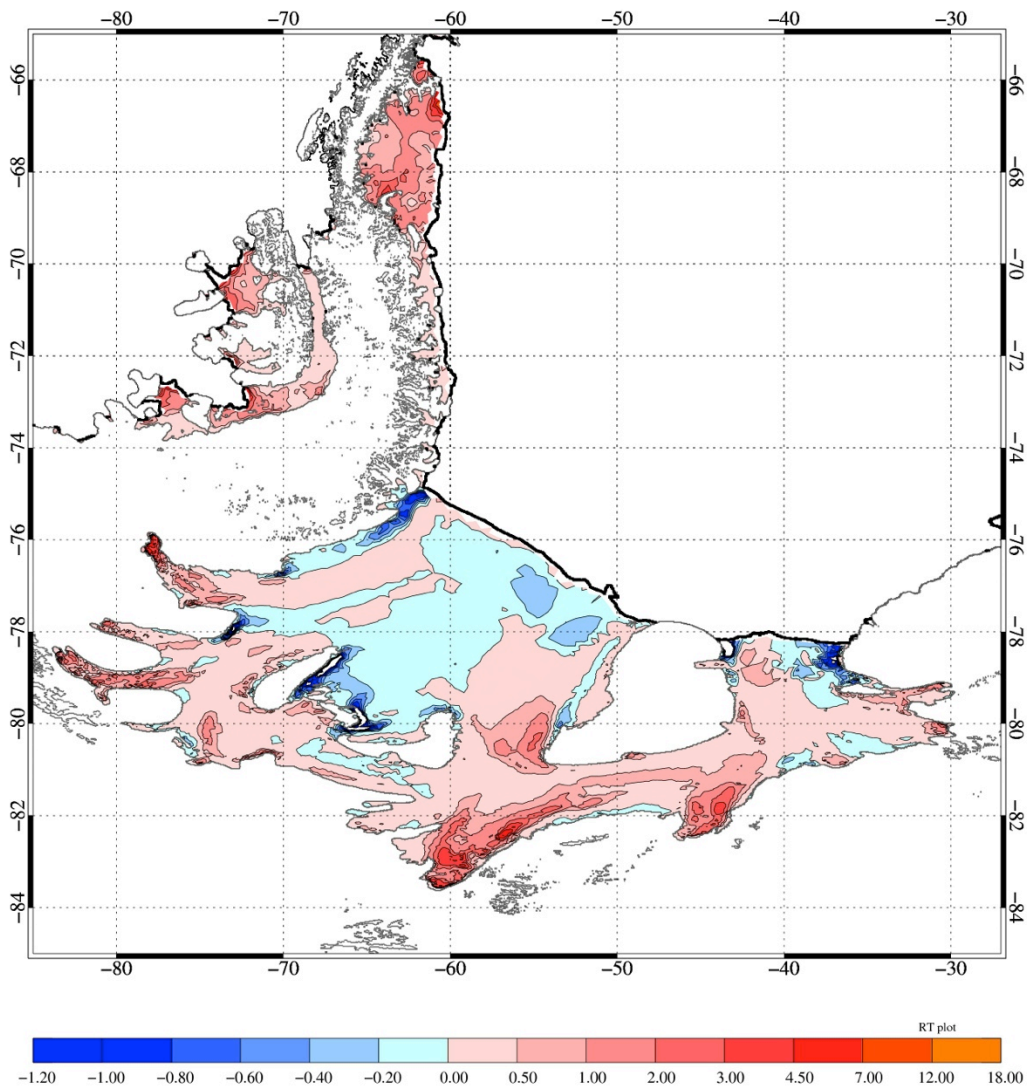


Figure 1.1: Present-day basal melt rates for Filchner-Ronne Ice Shelf in a high-resolution FESOM configuration forced with atmospheric output from a 20th century simulation of the HadCM3 climate model. Ice shelf geometry in this configuration is based on the Bedmap-2 data set and thus consistent with the bedrock representation in Rimbay.

Model runs have been initialized with present-day geometry (now based on Bedmap-2 for both FESOM and Rimbay), removing all the triangles that are in areas that are characterized by grounded ice, renumbering nodes accordingly, and then subsequently restoring pre-computed elements in areas that Rimbay suggests to be under floating ice. Ocean properties in newly ungrounded areas of the cavity are derived by extrapolation from existing floating ice regions with a suite of auxiliary conditions applied to avoid overshoots. Present-day melt rates in this configuration reproduce many details of observation-based estimates, especially

the distribution of marine ice formation at the ice shelf base, better than previous versions of the model (Fig. 1.1).

2.1.2: Effect of high-resolution atmospheric forcing data

In order to reduce the uncertainty arising from atmospheric forcing fields, we plan to use results from a circumpolar Antarctic configuration of the Regional Atmospheric Climate Model (RACMO). As part of a joint project funded by the Dutch Organization for Scientific Research (NWO), RACMO is being run at the University Utrecht in collaboration with W.J. van de Berg and M. van den Broeke. ERA-interim data are used to constrain the regional atmosphere model at the open boundaries.

Work during the reporting period has concentrated on (1) conducting a reference experiment with ERA-interim forcing and (2) adjusting the FESOM code to the use of nested forcing data. Crucial atmospheric parameters especially in polar regions are air temperature and wind velocities. Offshore winds may export newly formed ice from the coastal polynyas, creating areas of sustained new ice formation. This can happen very localized, therefore a sufficiently fine resolution of the atmospheric data is essential to represent the relevant processes in the model with high accuracy.

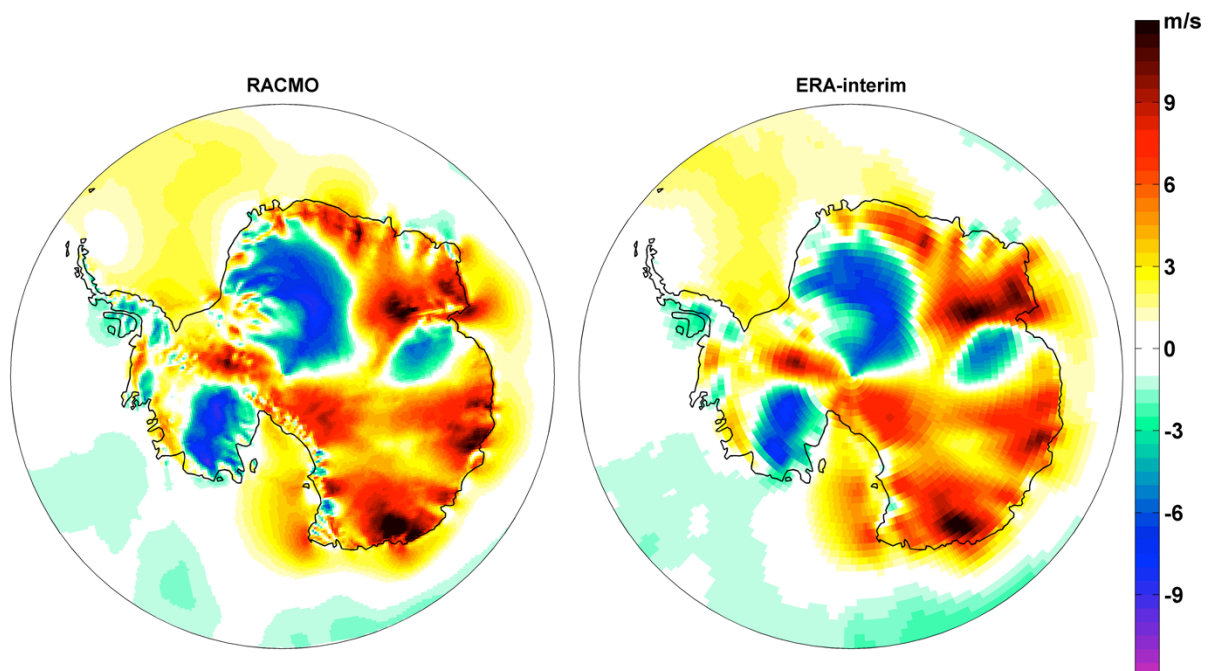


Figure 1.2: Meridional wind component in May averaged over 1991-2000 in RACMO (left) and ERA-interim data (right).

We plan to use data from RACMO2.3 (van Meijgaard, 2008; van Wessem et al., 2014) as atmospheric boundary conditions for FESOM's Southern Ocean sector, with ERA-interim reanalysis as the backbone data set in the remaining areas. In the Antarctic, RACMO2.3 has up to three times higher resolution (approx. 25 km). Comparing RACMO2.3 and ERA-interim meridional wind fields in the freezing season (Fig. 1.2) shows that offshore winds are resolved with much more detail in RACMO2.3. Given that ice-shelf basal melt rates in the Weddell Sea have been shown to critically depend on the sea ice net freezing rates on the continental shelf (Timmermann and Hellmer, 2013), we expect that the new forcing will help

us to better constrain sub-ice cavity circulation and basal melt rates for Filchner-Ronne Ice Shelf.

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

Analysis of observational data has shown that the continental shelf in front of Larsen Ice Shelf is a source of a lighter flavour of the dense water that is produced on the Weddell Sea (van Caspel et al., 2015a). Idealized simulations performed with the Finite Element Ocean Model showed that waters from this source leave the Weddell Sea and feed the stream of Antarctic Bottom Water directly (van Caspel et al., 2015b).

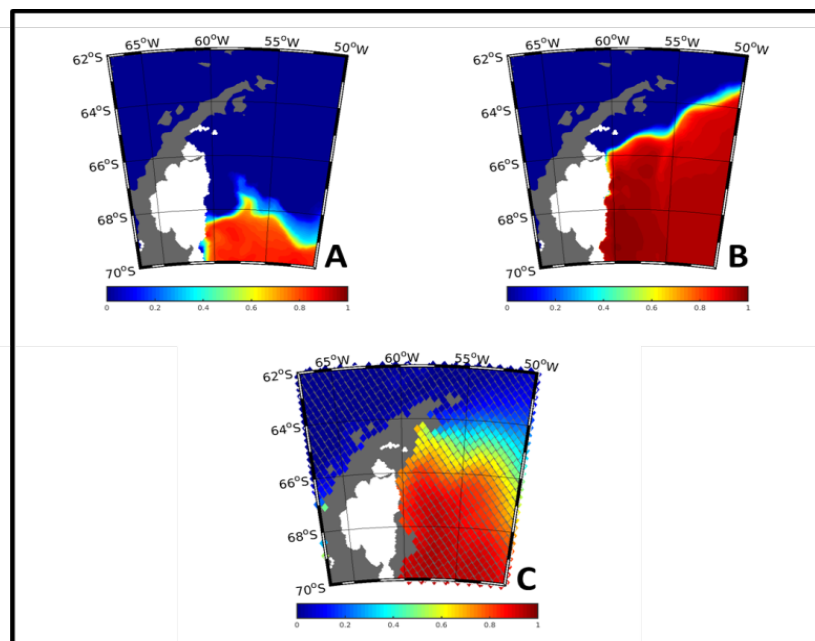


Figure 2: Simulated sea ice concentration off Larsen Ice Shelf as represented by the traditional “zero-layer” sea ice model (A), the new two-layer sea ice model (B), and as observed with satellite data (C).

Our simulations revealed that FESOM’s traditional sea ice module has difficulties to reproduce the ice cover observed in front of Larsen Ice Shelf, especially in summer. We found that overcoming simplification in the thermodynamic component of the sea ice model is a necessary step to cure this deficiency. For this purpose we are currently implementing a new sea ice module that considers sea ice enthalpy in a threedimensional set of equations. First results look very promising (Figure 2).

2.3 Workpackage 3: Modeling Amundsen Sea

Work in the Amundsen Sea has been successfully completed. Using FESOM with a high resolution along the continental shelf break, we are now able to simulate the intrusions of Circumpolar Deep Water (CDW) onto the Amundsen Sea continental shelf and obtain realistic basal melt rates for the ice shelves in West Antarctica (Nakayama et al., 2014a). Using passive tracers which are released at the same rate as melting occurs at the ice shelf bases, we investigated the spreading of glacial melt water from the ice shelves in the Amundsen and Bellingshausen Seas. We found that melt water from the Abbot and Pine Island Ice Shelves mostly flows westward; it forms about 20 % and 25 %, respectively, of the melt water that reaches the Ross Sea after 10 years of simulation (Fig. 3, panels a and b). Melt water from the Getz Ice Shelf flows westwards as well and forms more than 50 % of the total meltwater reaching the Ross Sea (Fig. 3c). Sensitivity experiments with artificially increased ice shelf basal melt rates indicate that the increased freshwater flux into the continental shelf water increases the transport of meltwater into the Ross Sea; a doubling of melt rates was found to increase the meltwater transport by a factor of 4.9 (Nakayama et al., 2014b). These findings indicate that an increased melting of continental ice in the Amundsen and Bellingshausen Seas is likely to (at least partly) cause the observed freshening of Ross Sea water.

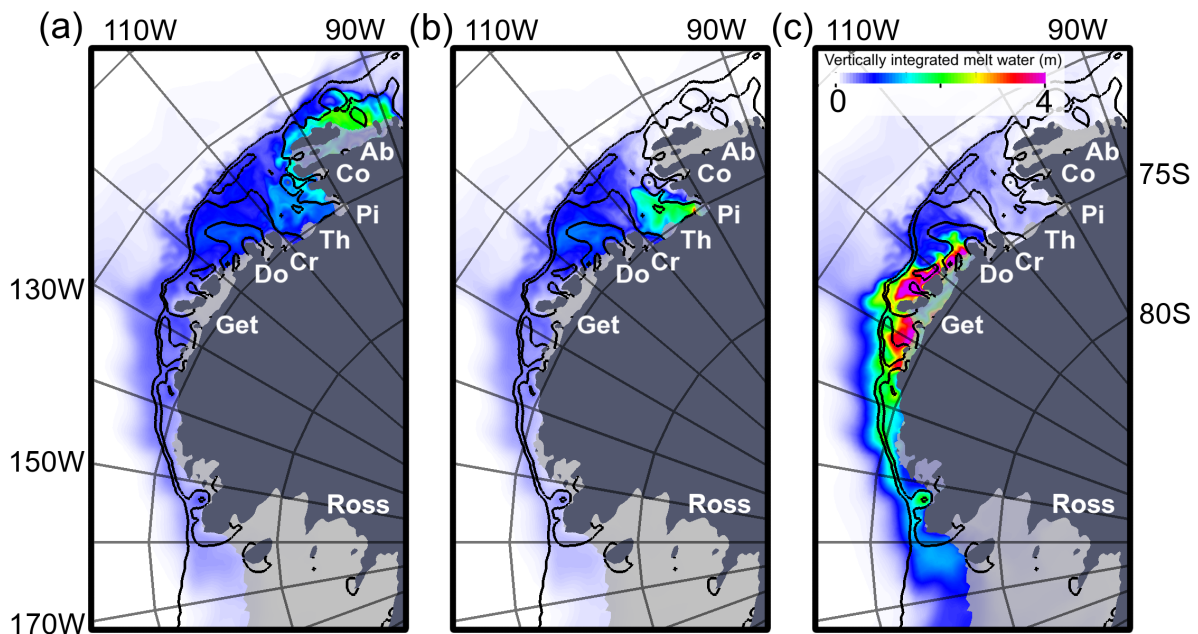


Figure 3: Spatial distributions of vertically integrated melt water content after 10 years of simulation showing the basal melt water from (a) Abbot Ice Shelf, (b) Pine Island Ice Shelf, and (c) Getz Ice Shelf. The bathymetry contours of 500 and 1000 m are shown as black lines. "Ab", "Co", "Pi", "Th", "Cr", "Do", and "Get" denote Abbot, Cosgrove, Pine Island, Thwaites, Crosson, Doston, and Getz Ice Shelves, respectively.

4. Outlook

Ongoing and future work concentrates on coupled simulations with the FESOM+Rimbay model system, on running FESOM simulations with RACMO forcing nested into ERA-interim data, and on modelling the ice shelf water outflow / dense water formation in the Larsen Ice Shelf area in a realistic model environment.

5. Publications from this project

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

van Caspel, M., J.M. Absy, Q. Wang, H. Hellmer, M. Schröder (2015b): The Flow of Dense Water Plumes in the Western Weddell Sea simulated with the Finite Element Ocean Model (FEOM). In: G. Lohmann, H. Meggers, V. Unnithan, D. Wolf-Gladrow, J. Notholt, A. Bracher (eds.), *Towards an Interdisciplinary Approach in Earth System Science*, SpringerBriefs in Earth System Sciences, Springer, Heidelberg, Germany. ISBN 978-3-319-13864-0, DOI 10.1007/978-3-319-13865-7, pages 125-129

Nakayama, Y., Timmermann, R., Schröder, M., and Hellmer, H. (2014a): On the difficulty of modeling Circumpolar Deep Water intrusions onto the Amundsen Sea continental shelf, *Ocean Modelling*, 84, pp. 26-34, doi:10.1016/j.ocemod.2014.09.007.

Nakayama, Y., Timmermann, R., Rodehacke, C.B., Schröder, M., and Hellmer, H.H. (2014b): Modeling the spreading of glacial meltwater from the Amundsen and Bellingshausen Seas. *Geophysical Research Letters*, 41 (22), pp. 7942-7949, doi:10.1002/2014GL061600.

Other references

Timmermann R. and H.H. Hellmer, 2013: Southern Ocean warming and increased ice shelf basal melting in the twenty-first and twenty-second centuries based on coupled ice-ocean finite element modelling, *Ocean Dynamics* 63, 1011-1026.

van Caspel, M., M. Schröder, O. Huhn, H.H. Hellmer, 2015a: Precursors of Antarctic Bottom Water formed on the continental shelf off Larsen Ice Shelf, *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, Volume 99, Pages 1-9, ISSN 0967-0637, <http://dx.doi.org/10.1016/j.dsr.2015.01.004>.

Van Meijgaard, E. et al., 2008: The KMNI regional atmospheric climate model RACMO version 2.1, Tech. Rep. 302, KMNI, Box 201,3730 AE De Bilt, Netherlands.

Van Wessem, J.M. et al. 2014: Updated cloud physics in a regional atmospheric climate model improves the modelled surface energy balance of Antarctica, *The Cryosphere* 8, 125-135.

6.10 hbk00035: Idealised climate predictability studies with ECHAM6-FESOM

HLRN Project ID:	hbk00035
Runtime:	IV/2013 – III/2014
Project Leader:	Prof. Dr. Thomas Jung ^{1,2}
Project Scientists:	Helge Goessling ¹ , Stephan Juricke ¹ , Dmitry Sidorenko ¹ , Thomas Rackow ¹ , Tido Semmler ¹
Affiliation:	¹ Alfred Wegener Institut, Helmholtz Zentrum für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven ² Universität Bremen

2. Overview

In this project we have performed simulations with a new (and unique) climate model following the experimental protocol of the international model intercomparison project APPOSITE. The simulation data of all contributing climate models are currently in the process of being published in a UK-based data archive for public access.

The APPOSITE project in a nutshell: The main scientific goals of the „Arctic Predictability and Prediction On Seasonal to Inter-annual Timescales“ (APPOSITE) project are to quantify the predictability of the Arctic environment on seasonal to inter-annual timescales, and provide recommendations on required developments in operational prediction systems. The basis to achieve these goals are idealised ensemble simulations with global climate models, conducted by the respective international modelling groups following a common protocol that is suitable to determine the model-inherent predictability of the Arctic climate, in particular the sea-ice cover. In short, each model produces a multi-century equilibrium control run from which many pseudo-prediction ensembles are initialised at certain times of the year with small (10^{-4} K) uncorrelated white-noise SST initial perturbations.

In this report we first describe the set of simulation experiments we have performed using the computational resources provided by HLRN. Second we present some main results we obtained from these simulations. Here we focus on a new metric we have developed to quantify sea-ice forecast error based on the position of the ice edge. Since we applied this metric to the complete set of APPOSITE model experiments, the results are based not only on simulations performed at HLRN, but also on analogous simulations performed by other APPOSITE groups at supercomputing centres outside Germany.

3. Simulation experiments

In this project we used the newly developed coupled climate model ECHAM6-FESOM (E6F). The atmospheric component, ECHAM6, has been developed at the Max Planck Institute for Meteorology, Hamburg, Germany, over the past several decades. The ocean-sea-ice component, FESOM (Finite-Element Sea-ice Ocean Model), developed at the Alfred Wegener Institute, Bremerhaven, Germany, uses an unstructured numerical mesh to discretise the physical equations that govern the ocean and sea ice. This feature makes E6F the first coupled climate model of its kind.

The first column of Tab. 1 summarises the E6F experiments for which we contributed data to the APPOSITE data base. These simulations sum up to 1172 simulation years, and ~300 more simulation years have been produced within hbk00035 that are not listed here because they are not used for the final analysis.

	e6f	mpiesm	hadgem1-2	gfdlcm3	MIROC5-2	CanCM4
control-run length (years)	200	200	249	200	100	45 ¹
ensemble size	9	9 / 16 ²	16	16	8	10
prediction length (years)	3	3	3	3	3 / 3.5 ³	1
number of start dates						
1 st January	18	-	10	8	8	32
1 st May	-	-	10	-	-	-
1 st July	18	12	10	8	8	32
1 st November	-	16	-	-	-	-

Table 1: Summary of the model contributions to the APPOSITE data base. EC-earth data are not listed because no daily sea-ice data was provided for the control run, preventing the analysis presented in section 2.3 which is constrained to the ensembles initialised 1st July.

1) The control run of CanCM4 is a transient (historical/scenario) integration from 1970—2014.

2) The ensemble size of mpiesm is 9 for the ensembles initialised in July and 16 for those initialised in November

3) The prediction length of MIROC5-2 is 3 years for the ensembles initialised in January and 3.5 years for those initialised in July

In past „ocean-only“ model intercomparison projects to which FESOM has already contributed (e.g. to the Coordinated Ocean Reference Experiments, CORE1 and CORE2), the unstructured-grid data had to be interpolated to a regular grid to enable the use of the data with standard postprocessing tools. The interpolation implied a suboptimal trade-off between loss of information and data volume, depending on the target resolution. Given the prospect that stand-alone FESOM and E6F will be used increasingly in future model intercomparison projects, such as CMIP6, we have enabled the evaluation of FESOM data on the native unstructured grid with standard postprocessing tools like the Climate Data Operators (CDOs). All results from E6F reported below are obtained directly from data on the native grid and are thus more accurate than previously possible.

4. Results: Potential predictability of the Arctic sea-ice edge

Past studies on the predictability of the Arctic sea-ice have been focussing largely on simple pan-Arctic measures, foremost the sea-ice extent (SIE; the integrated area with at least 15% sea-ice concentration) and the sea-ice volume (SIV). Of these two quantities, the SIE, which loses predictability considerably faster than the SIV (e.g. Tietsche et al. 2014), is arguably more relevant from a forecast user perspective. However, also (error in) SIE is not a satisfactory quantity to measure sea-ice forecast quality because states with identical SIE can have vastly different sea-ice edges when the ice is in the wrong place. A more user relevant pan-Arctic sea-ice forecast error metric is the Integrated Ice Edge Error (IIEE), which I have defined as the symmetric difference between the two shapes enclosed by the forecasted ice edge and the true ice edge (Fig. 1). That is, the IIEE is the integral of all areas where the forecast is in error regarding the criterium whether the sea-ice concentration is above or below 15%.

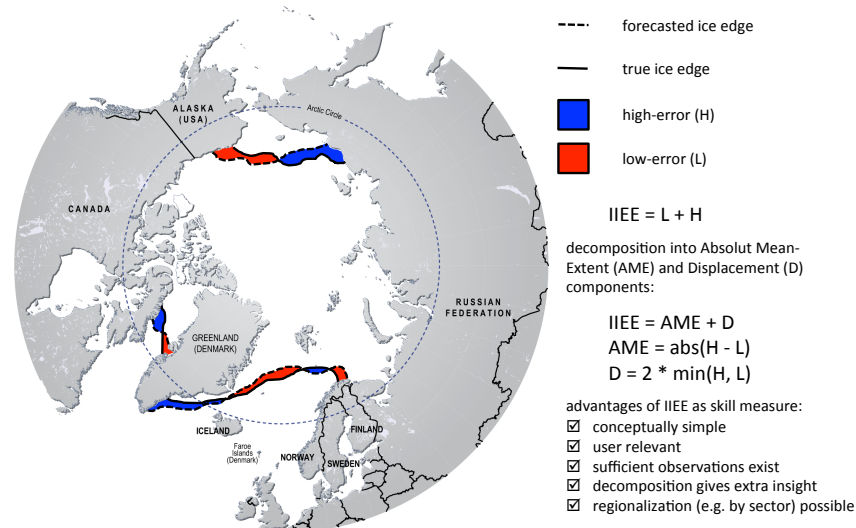


Figure 1: Definition of the Integrated Ice Edge Error (IIEE) and its components. Note that the drawn ice edges are fictitious. Source of the underlying map: Ohio State University.

Apart from augmented user relevance compared to the SIE, the IIEE shares the advantages with the SIE of being (i) conceptually and computationally simple and (ii) derivable from satellite data that exist in sufficient quality since the late 70's. Another desirable property of the IIEE is its natural decomposability into an Absolute Mean Extent (AME) and a Displacement (D) error component, of which the former is just the absolute SIE error. This decomposition allows further insights, as illustrated in the following.

To assess the model-internal potential predictability of a quantity one can compute errors between all possible pairs of members of perturbed ensembles and average over a large number of ensembles (Collins 2002). Following this approach we computed the IIEE and its components for all APPOSITE models and all start dates for which the sea-ice output data for both the reference run and the prediction ensembles was given at daily resolution (Tab. 1). The following analysis is however constrained to the ensembles initialised 1st July.

To interpret the results in terms of how much predictability is left after a certain lead time, the intra-ensemble error needs to be normalised with a climatological error. The long-term climatological error (at a certain time of the year) is the expected error between two states of a very long equilibrium model integration that are sufficiently lagged to ensure they are not related to each other in terms of their internal variability state. We computed approximate climatological errors as a function of lag for all reference integrations, which span on the order of 200 years for most models (Tab. 1). The approximate climatological errors still tend to grow with increasing lag, e.g. from 30-years lag to 100-years lag (Fig. 2, coloured curves), implying that the reference integrations are not sufficiently long to derive long-term climatological errors. Moreover it is not possible to distinguish slow modes of internal variability from remaining model drift. While some drift due to the slow equilibration of the deep ocean can be detected in all models with constant „present-day“ forcing (not shown), the CanCM4 reference integration is a transient („historical“) integration and thus includes strong drift by design. We therefore decided to use the 10-year lag climatological errors to normalise the intra-ensemble errors. This way decadal and slower internal variations and model drift are largely precluded, whereas sub-decadal internal variations are retained in the analysis.

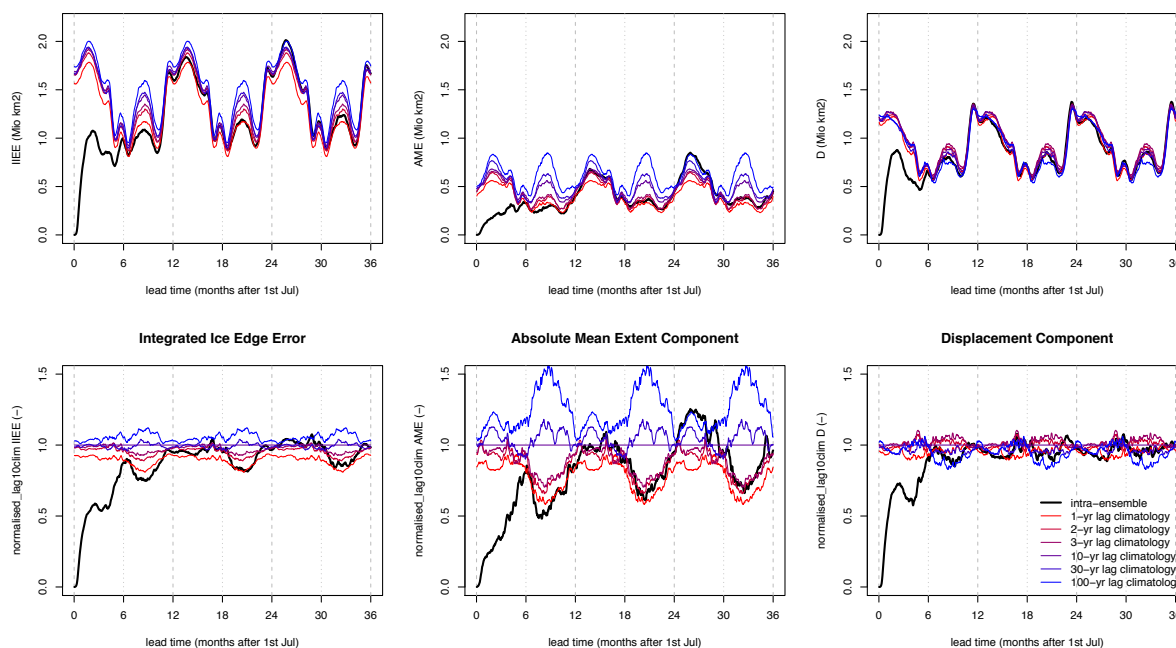


Figure 2: Mean IIEE (left), AME (middle), and D (right) in E6F. Black curves denote intra-ensemble errors for the ensembles initialised 1st July; coloured curves denote approximate climatological errors at different lags (see legend bottom right). Top: absolute errors; bottom: errors normalised with 10-year lag climatological errors, with 0 indicating exact predictability and 1 indicating no predictability.

The climatological absolute SIE error (i.e. the AME) contributes on average about 35-40% to the IIEE, with a certain seasonality and model dependence (not shown). First this moderate fraction highlights that high forecast skill in terms of SIE does not guarantee skilful predictions of the sea-ice edge. Second, under the simplistic assumption that the ice-edge variations can be described by a certain number of independently varying segments (e.g. described by independent AR(1)-processes) alone, this fraction suggests that the ice edge varies with approximately 6-8 degrees of freedom. This can be derived with the simple formula $1/\sqrt{N} = \text{AME}/\text{IIEE}$, with the AME and the IIEE corresponding to the standard error and the standard deviation, respectively, of a sample of size N.

All models exhibit some potential predictability of the SIE (the AME component) up to three years ahead, with considerable model dependence (Fig. 3, red curves); while gfdlcm3 exhibits a high AME predictability fraction through the year, e6f, hadgem1-2, and MIROC5-2 exhibit substantial predictability mainly in the first half of the calendar year. The seasonality in the latter models suggests that the peripheral regions of the Arctic ocean where the ice edge is located in late winter, in particular the northern North-Atlantic, exhibit more long-term memory than the inner Arctic in these models. In contrast, the mpiesm exhibits relatively low predictability beyond six months, with weak seasonality. These results are consistent with the findings of Tietsche et al. (2014) which are based on the same data for mpiesm, hadgem1-2, and gfdlcm3. Finally, CanCM4 exhibits an average level of SIE predictability up to one year ahead, with no robust conclusions concerning seasonality being possible because of the shorter ensemble integration length.

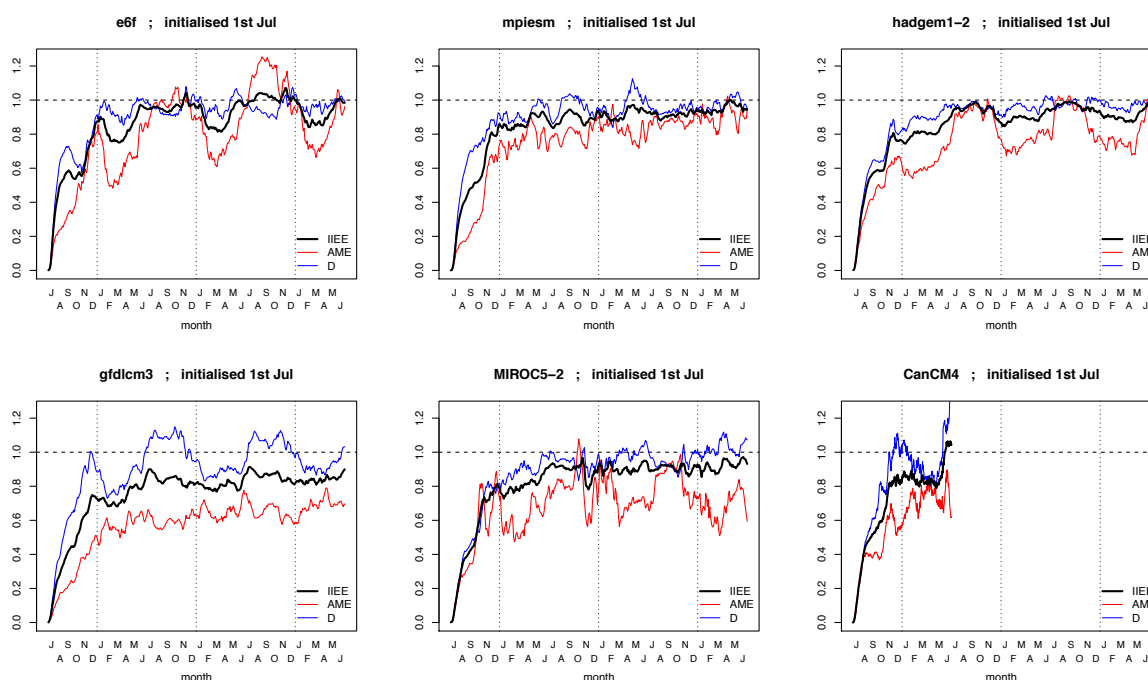


Figure 3: Mean 10-years lag normalised IIEE, AME, and D for the ensembles initialised 1st July for the six models (see labels above each panel). 0 indicates exact predictability and 1 indicates no predictability.

The displacement component (D) of the IIEE and, thus, also the IIEE lose predictability considerably faster than the AME in all models (Fig. 3). Averaged over all models, in September (the month of minimum SIE) the normalised AME is ~ 0.3 whereas the normalised IIEE is ~ 0.5 . This reveals that predictability estimates based on the SIE alone can not be transferred to the predictability of the sea-ice edge. In other words, the potential for user-relevant sea-ice forecasts is lower than SIE-based estimates may suggest.

Finally one may wonder whether the faster loss of predictability of the IIEE compared to the AME is trivial, where the difference may be considered trivial if it can be explained with the simplistic ice-edge model introduced above. This is not the case: If an ice-edge is simulated by N independent AR(1)-processes, the AME and the IIEE lose predictability at the same rate (not shown). Starting from this simple model, the split-up between the normalised AME and the normalised IIEE can be obtained either with an additional „pan-Arctic“ mode of variability that occurs on a longer time scale compared to the individual AR(1)-processes, or with additional error terms acting on a shorter time scale added to each of the AR(1)-processes with the constraint that they sum up to zero (i.e. pureredistribution errors). One can formulate plausible physical hypotheses for the real (complex model) climate system based on either of these possibilities. For more details we refer to the following publications that are currently in preparation.

5. Publications in preparation

Goessling, H. F. and Tietsche, S. and Day, J. and Hawkins, E. and Jung, T. et al.: *Prospects for seasonal forecasts of the Arctic sea-ice edge*, in prep.

Goessling, H. F. and Tietsche, S. and Day, J. and Hawkins, E. and Jung, T. et al.: *Predictability of the Arctic sea-ice edge in current global climate models*, in prep.

Day, J. and Hawkins, E. and Tietsche, S. and Goessling, H. F. et al.: *The Arctic Predictability and Prediction On Seasonal to Inter-annual Timescales (APPOSITE) model-intercomparison project*, in prep.

6. Acknowledgements

We thank HLRN for providing the required computing resources. We also thank Uwe Schulzweida for the cooperation related to the CDOs. Helge Goessling thanks the German Research Foundation for funding a research fellowship in Reading (DFG-GO-2464/1-1) in the course of which some of the work presented here has been conducted.

7. References

Collins, M. (2002), *Climate predictability on interannual to decadal time scales: The initial value problem*, *Clim. Dyn.*, 19(8), 671–692, doi:10.1007/s00382-002-0254-8

Tietsche, S., J. J. Day, V. Guemas, W. J. Hurlin, S. P. E. Keeley, D. Matei, R. Msadek, M. Collins, and E. Hawkins (2014), *Seasonal to interannual Arctic sea ice predictability in current global climate models*, *Geophys. Res. Lett.*, 41, 1035–1043, doi:10.1002/2013GL058755

6.11 *hbk00037*: Schwankungen des tropischen Regengürtels während des mittleren Miozäns

HLRN-Projektkenung:	hbk00037
Laufzeit:	III/2014 – II/2015
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	A. Frigola, Dr. M. Prange
Institut/Einrichtung:	DFG-Forschungszentrum / Exzellenzcluster „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen

Kurzfassung

- Vor ca. 14 Millionen Jahren erlebte der antarktische Eisschild eine drastische Wachstumsphase.
- Geologische Befunde zeigen, dass zur selben Zeit starke Veränderungen in tropischen Niederschlägen statt fanden.
- Mit Hilfe eines komplexen Klimamodells soll untersucht werden, in wie weit Änderungen des antarktischen Eisschildes die Tropen beeinflussen können.
- Die Untersuchung von Wechselwirkungen zwischen den Tropen und Polarregionen soll helfen, die Bedeutung sich verändernder Eisschilde für das globale Klimasystem der Zukunft besser zu verstehen.

Wissenschaftlicher Hintergrund

Paläoklimatische Befunde zeigen, dass der tropische Regengürtel in der Erdgeschichte immer wieder erheblichen Schwankungen unterworfen war. Insbesondere deuten geowissenschaftliche Rekonstruktionen begleitet von Klimamodellstudien auf Nord-Süd-Verlagerungen des tropischen Regenbandes auf der Jahrtausend- und der orbitalen Zeitskala hin (z.B. Collins et al., 2011; Schefuß et al., 2011; Zariess et al., 2011; Bouimetarhan et al., 2012; Handiani et al., 2013; Mohtadi et al., 2014; Steinke et al., 2014; Govin et al., 2014; Rachmayani et al., 2015). Prinzipiell liegt diesen Schwankungen ein asymmetrischer thermischer Antrieb zwischen den Hemisphären bzw. ein anomaler interhemisphärischer Temperaturgradient zu Grunde. Der asymmetrische thermische Antrieb zwischen den Hemisphären wird potenziell durch variierende Sonneneinstrahlung (durch Änderungen der Erdorbitalparameter), Schwankungen in der großräumigen Ozeanzirkulation oder auch durch asymmetrische Vereisung gesteuert. Letzteres ist bislang am wenigsten untersucht und daher kaum verstanden, obgleich Hypothesen hinsichtlich des Einflusses unipolarer Vereisung während der Erdgeschichte auf tropische Winde und Niederschläge schon früh formuliert wurden. Untermuert wurde die Hypothese einer Verlagerung des tropischen Regenbandes durch antarktische Vereisung jüngst durch geochemische Untersuchungen an einem Sedimentkern aus dem Südchinesischen Meer, die das Zeitintervall des mittleren Miozäns (ca. 17 bis 12 Millionen Jahre vor heute) beleuchten (Holbourn et al., 2010). Das mittlere Miozän ist geprägt durch global höhere Temperaturen als heute. Eismassen waren auf der Nordhemisphäre kaum vorhanden und der antarktische Eisschild war deutlich kleiner als heute. Vor ca. 14 Millionen Jahren fand schließlich eine

erhebliche Ausdehnung der antarktischen Eismassen statt, der Meeresspiegel sank entsprechend um mehrere Zehnermeter (Holbourn et al., 2005; Langebroek et al., 2010). Anhand von Oberflächensalzgehaltsrekonstruktionen konnte eine schrittweise Abnahme der Salzgehalte im Südchinesischen Meer während des mittleren Miozäns festgestellt werden (Holbourn et al., 2010). Die Autoren erklären diese Salzgehaltsabnahme mit erhöhten Niederschlägen aufgrund einer sukzessiven Verlagerung des tropischen Regengürtels nach Norden infolge antarktischen Eiswachstums (unipolare Vereisung) im mittleren Miozän. Mit Hilfe von numerischen Experimenten mit dem komplexen Klimamodell CCSM3 (Community Climate System Modelversion 3) soll diese Hypothese getestet werden. Bislang ist unklar, inwieweit die Ausdehnung antarktischer Eismassen tatsächlich einen Einfluss auf das tropische Klima hatte oder ob die Rekonstruktionen eventuell neu bewertet werden müssen. Sollte sich ein Einfluss der Antarktis auf den tropischen Regengürtel zeigen, müssen die Prozesse, die diese Fernwirkungen steuern, untersucht und verstanden werden. Dieses Verständnis ist insbesondere im Hinblick auf zukünftiges Abschmelzen von Teilen polarer Eisschilde von Bedeutung, um einen möglichen Einfluss auf den tropischen hydrologischen Zyklus und die damit verbundenen Monsunsysteme besser bewerten zu können.

Methode

Das voll gekoppelte globale Klimamodell CCSM3 besteht aus Teilkomponenten für die Simulation von Atmosphäre, Ozean, Meereis sowie Landoberflächenprozessen. Aus technischer Sicht ist es ein MPMD-Modell ('Multiple-Program-Multiple-Data'), das für Hybrid-Parallelisierung unter Verwendung von MPI und OpenMP konzipiert wurde. Zur Simulation des miozänen Klimas müssen Randbedingungen bezüglich Vegetationsbedeckung, Land-See-Verteilung, Topografie und atmosphärischer Treibhausgaskonzentrationen vorgeschrieben werden. Dabei wurde der aktuelle geologische und paläozeanografische Kenntnisstand berücksichtigt, insbesondere im Hinblick auf den globalen Meeresspiegel und Gebirgsbildung.

Erste Ergebnisse

Numerische Experimente mit verschiedenen Ausdehnungen des antarktischen Eisschildes werden zurzeit durchgeführt. Die erste Simulation mit einer nur partiell vereisten Antarktis (relativ kleine Eiskappen über dem Transantarktischen Gebirge und der östlichen Antarktis), wie sie vor der Eisausdehnung im mittleren Miozän charakteristisch war, ist bereits in der Auswertung. Abbildung 1 zeigt die hieraus errechneten miozänen Oberflächentemperatur- und Niederschlagsverteilungen im Jahresmittel. Die Modellergebnisse werden in einem nächsten Schritt mit paläoklimatologischen Befunden verglichen, um Stärken und Schwächen der Modellsimulation aufzudecken. Die weiteren Experimente mit veränderten Eisschildrandbedingungen werden dann Aufschluss darüber geben, inwieweit und auf welche Art Fernwirkungsmechanismen aus der Südpolarregion das tropische Klima beeinflussten und auch in Zukunft beeinflussen können.

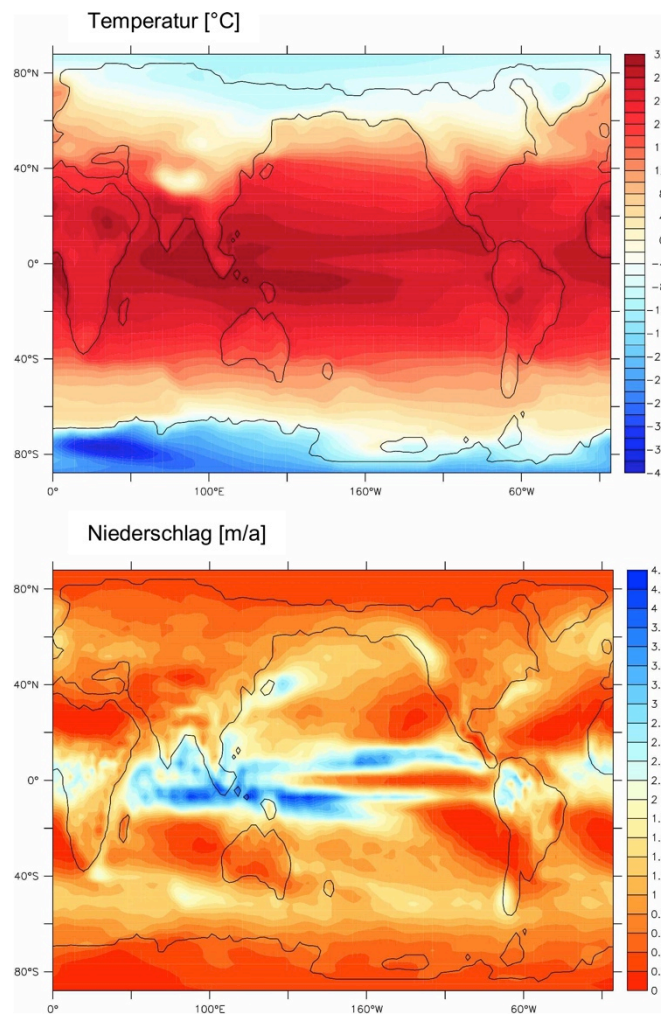


Abbildung 1. Miozäne Oberflächentemperatur- und Niederschlagsverteilungen im Jahresmittel simuliert mit dem globalen KlimamodellCCSM3. Im Niederschlagsmuster ist der tropische Regengürtel deutlich zu erkennen. Die Umrisse der Kontinente vor ca. 15Millionen Jahren sind ebenfalls dargestellt.

Referenzliste(Projektleiter/-bearbeiter **fett** gedruckt)

Bouimetarhan, I., **M. Prange**, E. Schefuß, L. Dupont, J. Lippold, S. Mulitza, and K. Zonneveld, 2012: Sahel megadrought during Heinrich Stadial 1: evidence for a three-phase evolution of the low- and mid-level West African wind system. *Quaternary Science Reviews*, 58, 66-76.

Collins, J. A., E. Schefuß, D. Heslop, S. Mulitza, **M. Prange**, M. Zabel, R. Tjallingii, T. M. Dokken, E. Huang, A. Mackensen, **M. Schulz**, J. Tian, M. Zariess, and G. Wefer, 2011: Interhemispheric symmetry of the tropical African rainbelt over the past 23,000 years. *Nature Geoscience*, 4, 42-45.

Govin, A., V. Varma, and **M. Prange**, 2014: Astronomically forced variations in western African rainfall (21°N-20°S) during the Last Interglacial period. *Geophysical Research Letters*, 41, 2117-2125, doi:10.1002/2013GL058999.

Handiani, D., A. Paul, **M. Prange**, U. Merkel, L. Dupont, and X. Zhang, 2013: Tropical vegetation response to Heinrich Event 1 as simulated with the UVic ESCM and CCSM3. *Climate of the Past*, 9, 1683-1696, doi:10.5194/cp-9-1683-2013.

Holbourn, A., W. Kuhnt, M. Regenberg, **M. Schulz**, A. Mix, and N. Andersen, N., 2010: Does Antarctic glaciation force migration of the tropical rain belt? *Geology*, 38, 783-786, doi:10.1130/G31043.1.

Holbourn, A., W. Kuhnt, **M. Schulz**, and E. Erlenkeuser, 2005: Impacts of orbital forcing and atmospheric carbon dioxide on Miocene ice-sheet expansion. *Nature*, 438, 483-487.

Langebroek, P., A. Paul, and **M. Schulz**, 2010: Simulating the sea-level imprint on marine oxygen-isotope records during the Middle Miocene using an ice sheet-climate model. *Paleoceanography*, 25, PA4204, doi:10.1029/2008PA001704.

Mohtadi, M., **M. Prange**, D. W. Oppo, R. De Pol-Holz, U. Merkel, X. Zhang, S. Steinke, and A. Lückge, 2014: North Atlantic forcing of tropical Indian Ocean climate. *Nature*, 509, 76-80, doi:10.1038/nature13196.

Rachmayani, R., **M. Prange**, and **M. Schulz**, 2015: North African vegetation-precipitation feedback in early and mid-Holocene climate simulations with CCSM3-DGVM. *Climate of the Past*, 11, 175-185, doi:10.5194/cp-11-175-2015.

Schefuß, E., H. Kuhlmann, G. Mollenhauer, **M. Prange**, and J. Pätzold, 2011: Forcing of wet phases in southeast Africa over the past 17,000 years. *Nature*, 480, 509-512, doi:10.1038/nature10685.

Steinke, S., M. Mohtadi, **M. Prange**, V. Varma, D. Pittauerova, and H. W. Fischer, 2014: Mid- to Late-Holocene Australian-Indonesian summer monsoon variability. *Quaternary Science Reviews*, 93, 142-154, doi:10.1016/j.quascirev.2014.04.006.

Zarriess, M., H. Johnstone, **M. Prange**, S. Steph, J. Groeneveld, S. Mulitza, and A. Mackensen, 2011: Bipolar seesaw in the northeastern tropical Atlantic during Heinrich stadials. *Geophysical Research Letters*, 38, L04706, doi:10.1029/2010GL046070.

6.12 **hbk00038: Führt eine Erwärmung im Atlantik zum Abschmelzen der Gletscherzungen im Nordosten Grönlands?**

Ozean-Gletscher-Wechselwirkung auf dem Kontinentalschelf Nordost-Grönlands

HLRN-Projektkenung	hbk00038
Laufzeit	III/2014 – III/2015
Projektleiter:	Prof. Dr. T. Kanzow ^{1,2}
Projektbearbeiter:	Prof. Dr. T. Kanzow ^{1,2} , J. Schaffer ¹ , Dr. R. Timmermann ¹
Institut/Einrichtung:	1) Universität Bremen 2) Alfred-Wegener-Institut, Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung

Kurzgefasst

- Meereis-Schelfeis/Gletscher-Ozeanmodell auf Basis der Methode der Finiten Elemente
- Untersuchung der Pfade und des Transports von warmem Wasser atlantischen Ursprungs auf dem Kontinentalschelf vor Nordost-Grönland und in die Kaverne der schwimmenden Gletscherzunge des 79° N-Gletschers
- Wechselwirkung zwischen dem Ozean und den Gletschern im Nordosten Grönlands könnten den Nordost-Grönland-Eisstrom destabilisieren und das Abtauen des Grönländischen Eisschildes beschleunigen

Das Schmelzen des grönländischen Eisschildes trägt ein Drittel bis ein Viertel zum gegenwärtigen Anstieg des globalen Meeresspiegels bei. Der Ozean spielt durch seine Wechselwirkungen mit den Gletschern eine Schlüsselrolle für Veränderungen der Massenbilanz des Eisschildes. Langzeit-Beobachtungen haben gezeigt, dass sich östlich von Grönland in der Framstraße die Schicht des rezirkulierenden Atlantikwassers in den letzten 20 Jahren um ein Grad Celsius erwärmt hat [1]. Das Einsetzen des Abtauens der Gletscher wurde mit dieser Erwärmung und dem Akkumulieren von relativ warmem Wasser im subpolaren Nordatlantik in Zusammenhang gebracht [2]. Dies deutet auf eine mögliche Änderung des externen Antriebs der Ozean-Gletscher-Wechselwirkung hin.

Eine Schlüsselregion für die Massenbilanz des Grönländischen Eisschildes und folglich für den gegenwärtigen und den zukünftig zu erwartenden Meeresspiegelanstieg ist der Nordost-Grönland-Eisstrom. Dieser relativ schnell fließende Eisstrom bildet den Abfluss aus dem zweitgrößten Becken Grönlands und speist drei Gletscher. Der größte von ihnen ist der Nioghalvfjærdsfjorden Gletscher (79° N-Gletscher). Dieser ist durch eine 80 km lange, schwimmende Gletscherzunge gekennzeichnet und einem Abschmelzen an der Eisunterseite ausgesetzt. Jegliche dynamische Instabilität des Gletschers könnte sich mit dem Nordost-Grönland-Eisstrom stromaufwärts in das Innere des Grönländischen Inlandeises fortpflanzen.

Die bodennahe Ozeanzirkulation auf dem Kontinentalschelf vor Nordost-Grönland und die Fjordzirkulation unter den schwimmenden Gletscherzungen sind weitgehend unbekannt. Ziel dieses Projektes ist es, die Versorgungswege des Atlantischen Wassers zu den Gletschern und unter die Gletscherzungen in Nordost-Grönland zu bestimmen (Abb. 1a). Dabei sollen sowohl die dynamischen Prozesse, die das warme Wasser auf den Schelf transportieren, als auch jene, die den Einstrom des Wassers in die Kaverne unter den 79° N-Gletscher beeinflussen, untersucht werden. Beobachtungen haben gezeigt, dass man etwa ein Grad Celsius warmes Wasser in der Kaverne findet [3], wo es vermutlich zum basalen Abschmelzen des Gletschers führt. Ein weiteres Ziel des Projektes ist es daher, den Eintrag von Schmelzwasser und dessen Einfluss auf die Schichtung und Zirkulation auf dem Schelf abzuschätzen.

Die Untersuchungen basieren auf den Ergebnissen von numerischen Simulationen und Beobachtungsdaten. Für die Simulationen wird das globale Meereis-Schelfeis-Ozean-Model FESOM [4] verwendet. Hierfür wurde eine Konfiguration für den Schelf vor Nordost-Grönland entwickelt, welche neueste Daten zur Kavernen-Geometrie und zur Bathymetrie auf dem Kontinentalschelf berücksichtigt (Abb. 1b). Das Modell wurde bereits erfolgreich auf die Schelfeisgebiete der Antarktis angewandt [5]. Die Kleinheit der schwimmenden Gletscherzungen Grönlands und der für die Wechselwirkung relevanten räumlichen Skalen (Abb. 1c) in diesem Projekt stellt jedoch eine erhebliche Herausforderung dar. Für die Untersuchung der relevanten klein- und großskaligen Prozesse bildet FESOM ein hervorragendes Werkzeug. Allerdings ist der Rechenaufwand sehr hoch. In einem akzeptablen zeitlichen Rahmen können Ergebnisse nur durch massive parallele Prozessierung realisiert werden. Für unser Forschungsprojekt im Rahmen des 79° N-Gletschers sind wir daher auf die vom HLRN zur Verfügung gestellte Rechenleistung angewiesen.

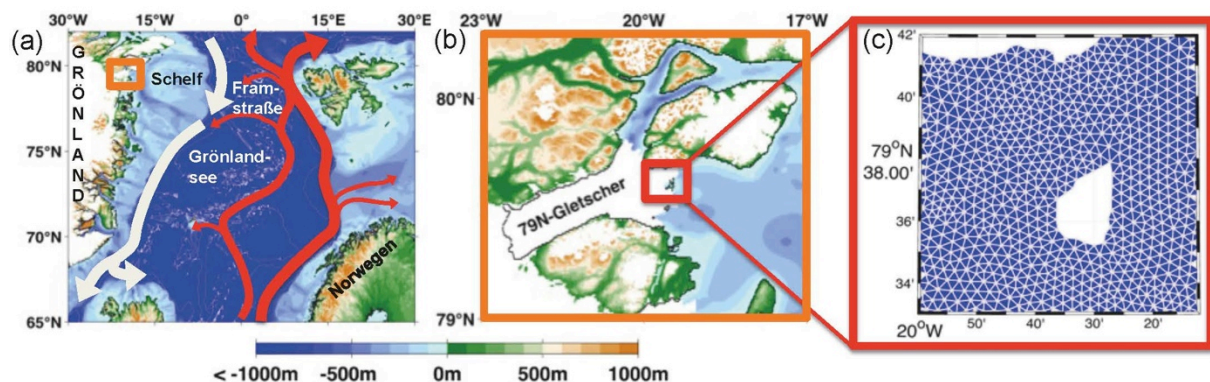


Abbildung 1: (a) Übersichtskarte und Zirkulationsschema für das Europäische Nordmeer. Rote Pfeile zeigen Pfade des Zustroms von Atlantik Wasser in die Arktis, graue Pfeile signalisieren Pfade des Abflusses von Wasser aus der Arktis. (b) Relief des Gebirges und Topographie des Meeresbodens in der direkten Umgebung des 79° N-Gletschers (orange Box, siehe Abb. 1(a)). Die Küstenlinie (schwarz) gibt für die Gletscherzunge die Grenze zwischen schwimmenden und aufliegenden Eis wieder. (c) Horizontales FESOM-Gitter mit 500m Auflösung an der Gletscherfront des 79° N-Gletschers (rote Box, siehe Abb. 1(b)). Weiße Flächen geben Festland und Inseln wieder, blaue Flächen signalisieren Wasserflächen (offenen Ozean, Wasser unter der Gletscherzunge des 79° N-Gletschers).

Literatur

- [1] Beszczynska-Möller, A., E. Fahrbach, U. Schauer, and E. Hansen, Variability in the Atlantic water temperature and transport at the entrance of the Arctic Ocean, 1997-2010, *ICES Journal of Marine Science*, (2012). doi 10.1093/icesjms/fss056
- [2] Straneo, F., and P. Heimbach, North Atlantic warming and the retreat of Greenland's outlet glaciers, *Nature*, **504(36-43)** (2013). doi10.1038/nature12854
- [3] Mayer, C., N. Reeh, F. Jung-Rothenhäusler, P. Huybrechts, and H. Oerter, The subglacial cavity and implied dynamics under Nioghalvfjærdsfjorden Glacier, NE-Greenland, *Geophysical Research Letters*, **27.15(2289-2292)** (2000). doi: 10.1029/2000GL011514
- [4] Timmermann, R., Q. Wang and H.H. Hellmer, Ice shelf basal melting in a global finite-element sea ice/ice shelf/ocean model, *Annals of Glaciology*, **53(60)** (2012). doi: 10.3189/2012AoG60A156
- [5] Timmermann, R. and H.H. Hellmer, 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* **63(9)** 1011-1026 (2013). doi:10.1007/s10236-013-0642-0

6.13 *hbk00039*: Numerische Untersuchungen zum Mineralstaubkreislauf für quartäre und rezente Klimazustände

HLRN-Projektkenung:	hbk00039
Laufzeit:	III/2014 – III/2015
Projektleiter:	Prof. Dr. Michael Schulz
Projektbearbeiter:	Dr. Ute Merkel
Institut/Einrichtung:	MARUM - Zentrum für Marine Umweltwissenschaften, Universität Bremen
Förderung:	Exzellenzcluster/DFG-Forschungszentrum „Der Ozean im System Erde“ (EXC 309 / FZT 15)

Der Mineralstaubkreislauf stellt im Klimasystem in mehrfacher Hinsicht eine relevante Komponente dar (Merkel et al., 2014). Mittlerweile geht man davon aus, dass die Rolle von Mineralstaub über rein atmosphärische Prozesse, d.h. die direkte Beeinflussung der Strahlungsbilanz und die Wechselwirkung mit der Wolkenmikrophysik, hinausreicht. So wurde für den Zeitraum 1982-2007 eine Absenkung der Meeresoberflächentemperatur im tropischen Atlantik als Folge einer staubbedingten Einstrahlungsreduktion diskutiert.

Ferner ist davon auszugehen, dass durch anthropogene Landnutzungsänderungen eine Verschiebung der als potentielle Staubquellen in Frage kommenden Regionen erfolgt. Auf Beobachtungsdaten basierende Studien legen zudem nahe, dass Mineralstaub auch zwischenjährliche Variabilität aufweist und dem Einfluss von Klimamoden wie der Nordatlantischen Oszillation (NAO) oder der *El-Niño/Southern-Oscillation* (ENSO) unterliegt.

Neue Erkenntnisse im Hinblick auf den Mineralstaubkreislauf erhofft man sich auch vom Blick in die Klimageschichte. So zeigen Konzentrationen von Mineralstaub in grönländischen Eisbohrkernen für das Letzte Glaziale Maximum (LGM, 21.000 Jahre vor heute) eine Zunahme um den Faktor 80 verglichen mit dem Holozän an. Mineralstaub-Aufzeichnungen in grönländischen und antarktischen Eisbohrkernen, aber auch in marinen Sedimentkernen legen zudem erhebliche Glazial-Interglazial-Schwankungen nahe (Lamy et al., 2014). Dies deutet darauf hin, dass Schwankungen in der Quellstärke, dem Transport und der Deposition von Mineralstaub auf Zeitskalen von Jahrhunderten bis zu Jahrtausenden in einen Kontext mit der großskaligen Dynamik im Ozean-Atmosphäre-Land-System gestellt werden müssen. Diese Dynamik wiederum wird durch Schwankungen in den paläoklimatischen Randbedingungen wie den Erdbahnparametern und Treibhausgaskonzentrationen, aber auch durch die Lage und Höhe kontinentaler Eisschilde beeinflusst, wie mit bereits am HLRN durchgeführten Experimenten gezeigt werden konnte (Merkel et al., 2010). Insbesondere bei abrupten Klimaschwankungen (Heinrich- und Dansgaard-Oeschger-Ereignisse) können Schmelzwassereinträge in den Nordatlantik Störungen der ozeanischen Zirkulation, aber auch Klimaanomalien weltweit auslösen (Kageyama et al., 2013; Mohtadi et al., 2014). Ferner zeigte sich, dass atmosphärische Zirkulations- und Telekonnektionsmuster in verschiedenen glazialen Klimazuständen in Muster und Amplitude deutlich unterschiedlich ausgeprägt sein können (Merkel et al., 2010), was ebenfalls Implikationen für die Staubtransportmuster erwarten lässt.

Im vorliegenden Projekt wird daher anhand numerischer Modellstudien für heutiges Klima und verschiedene Klimazustände des Quartärs untersucht, wie Klimafluktuations Einfluss

auf den Mineralstaubkreislauf nehmen und welche Rückkopplungen dabei eine Rolle spielen. Dies erfolgt im Rahmen geeignet definierter Simulationen mit einem komplexen Klimamodell (CCSM3), welches neben den Komponenten für Atmosphäre, Landoberfläche, Ozean und Meereis zudem eine aktive Staubkomponente enthält.

Das CCSM3-Modell ist in Fortran90 formuliert und stellt technisch gesehen ein MPMD-Modell ('Multiple-Program-Multiple-Data') dar. Es ist somit für Hybrid-Parallelisierung unter Verwendung von MPI und OpenMP konzipiert. Das Modell inklusive aktivem Staubmodul konnte erfolgreich am HLRN-3 implementiert werden. Das Modell arbeitet mit verschiedenen Grössenklassen für Staubpartikel, die entsprechend der atmosphärischen Zirkulation verfrachtet und deponiert werden.

Als Beispiel für eine Modellausgabe ist die globale Verteilung von Mineralstaub für alle Grössenklassen über die gesamte Atmosphärensäule im mehrjährigen Jahresmittel in Abbildung 1 gezeigt. Deutlich erkennbar ist hier der grosse Staubgehalt in der Atmosphäre nahe der Hauptquellregion Sahara, aber auch über dem östlichen Asien und Südafrika.

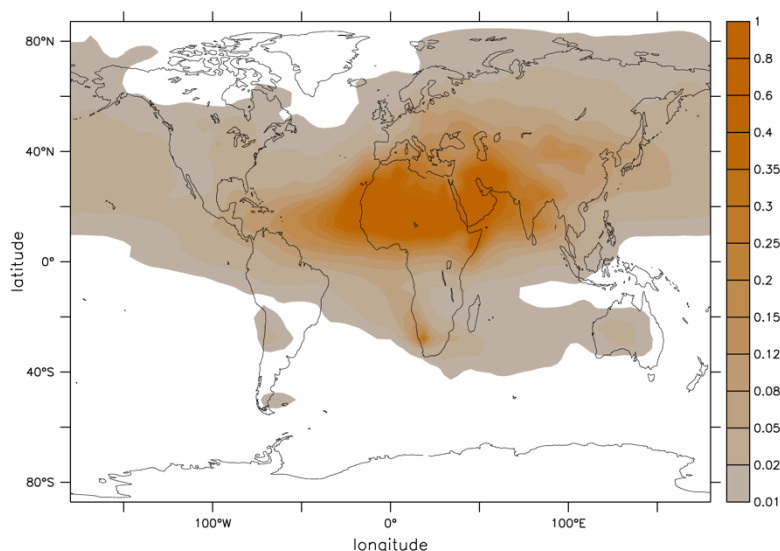


Abbildung 1: Atmosphärischer Mineralstaubgehalt [kg/m³] im mehrjährigen Mittel aus einer CCSM3-Modellkontrollsimulation. Hohe Werte verdeutlichen die Nähe zu den Hauptquellregionen des simulierten Staubs. Berücksichtigt sind alle Modell-Grössenklassen der simulierten Staubpartikel.

Im Hinblick auf den aus der Atmosphäre auf die Ozeanoberfläche ausfallenden Mineralstaub sind auch unterschiedliche meteorologische Gegebenheiten zu berücksichtigen und Gegenstand unserer Untersuchungen. Hier deutet das Modell auf unterschiedliche Saisonalität in den Arten der Staubdeposition hin. Während die trockene Staubdeposition über dem östlichen tropischen Nordatlantik ihren Höhepunkt in der borealen Wintersaison erreicht, erfolgt die Staubdeposition in Verbindung mit Niederschlag im Wesentlichen in der borealen Sommersaison (ohne Abb.). Dieser Aspekt ist insbesondere für die Interpretation von Daten aus der Satellitenfernerkundung bzw. aus marinen Sedimentfallen und Staubsammlerbojen von großer Bedeutung.

Prozesse und Dynamik der Staubbildung, -transporte und Staubdeposition auf verschiedenen Zeitskalen sind derzeit Gegenstand unserer Forschung.

Kooperationen:

Arbeitsgruppe Prof. Dr. Natalie Mahowald, Cornell University, Ithaca, NY, USA; Dr. Jan-Berend Stuut, NIOZ, Texel, Niederlande; Arbeitsgruppe Prof. Dr. John Burrows, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

Referenzen:

Kageyama, M., **U. Merkel**, B. Otto-Bliesner, M. Prange, A. Abe-Ouchi, G. Lohmann, R. Ohgaito, D. M. Roche, J. Singarayer, D. Swingedouw, X. Zhang: Climatic impacts of fresh water hosing under Last Glacial Maximum conditions: a multi-model study, *Clim. Past* **9**, 935-953, doi:10.5194/cp-9-935-2013 (2013).

Lamy, F., R. Gersonde, G. Winckler, O. Esper, A. Jaeschke, G. Kuhn, J. Ullermann, A. Martinez-Garcia, F. Lambert, R. Kilian: Increased Dust Deposition in the Pacific Southern Ocean During Glacial Periods, *Science* **343**, 403-407, doi:10.1126/science.1245424 (2014).

Merkel, U., D.-D. Rousseau, J.-B. W. Stuut, G. Winckler, L. von Gunten, T. Kiefer (editors): Dust - Special issue of *Past Global Changes Magazine* **22** (2014).

Merkel, U., M. Prange, **M. Schulz**: ENSO variability and teleconnections during glacial climates, *Quat. Sci. Rev.* **29**, 86-100, doi:10.1016/j.quascirev.2009.11.006 (2010).

Mohtadi, M., M. Prange, D. W. Oppo, R. De Pol-Holz, **U. Merkel**, X. Zhang, S. Steinke, A. Lückge: North Atlantic forcing of tropical Indian Ocean climate, *Nature* **509**, 76-80 doi:10.1038/nature13196 (2014).

6.14 *hbk00041*: Verbesserung der Vorhersagefähigkeit eines gekoppelten Ozean-biogeochemischen Modells für die Nord- und Ostsee durch Datenassimilation

HLRN Projektkennung:	hbk00041
Laufzeit	IV/2014 – IV/2015
Projektleiter:	W. Hiller ^{1,2}
Projektbearbeiter:	L. Nerger ¹ , S. N. Losa ¹
Institut/Einrichtung:	1) Universität Bremen 2) Alfred-Wegener-Institut Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung Bremerhaven

Kurzgefasst

- Numerische Modelle werden zur Vorhersage des Meereszustands in der Nord- und Ostsee verwendet.
- Neben den Modellen gibt es Messdaten verschiedener Zustandsgrößen des Meeres, wie von Satelliten gemessene Oberflächentemperaturen oder Chlorophyllkonzentrationen.
- Datenassimilation kombiniert das numerische Modell mit den Messdaten und führt zu realistischeren Modellvorhersagen.
- Durch Erweiterung des physikalischen Modells durch eine Ökosystemkomponente lassen sich auch biologische Zustandsgrößen wie Algenkonzentrationen vorhersagen.

In der Nord- und Ostsee werden numerische Strömungsmodelle für operationelle Vorhersagen verwendet. Unter anderen bilden sie beim Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH) in Hamburg die Grundlage für Vorhersagen der Wasserpegel im Fall von Sturmfluten. Die Modelle haben üblicherweise eine sehr gute Vorhersagefähigkeit. Um die Vorhersagefähigkeit noch weiter zu verbessern wurde in dem Verbundprojekt DeMarine-Umwelt von 2008 bis 2011 das Modell des BSH am Alfred-Wegener-Institut (AWI) mit einer Datenassimilationskomponente versehen. Unter Datenassimilation versteht man die quantitative Kombination des numerischen Modells mit Messdaten mit dem Ziel den Anfangszustand des Modells so zu verbessern, dass es eine verbesserte Vorhersage liefern kann.

Für die Datenassimilation wird das am AWI entwickelte Datenassimilationsframework PDAF [1, 2] eingesetzt, das mit dem Modell des BSH gekoppelt wurde. Mit PDAF werden ensemble-basierte Datenassimilationsmethoden, sogenannte Ensemble Kalmanfilter, bereitgestellt. Diese Methoden sind hochskalierend und nutzen die Ressourcen des HLRN optimal aus, da ein Ensemble von 10 bis 100 Modellvorhersagen berechnet werden muss um eine Fehlerschätzung des Modellzustands zu erhalten. Anhand dieser Fehlerschätzung wird dann im sog. Analyseschritt die Zustandsschätzung des Modells mit den Beobachtungen kombiniert und damit die Zustandsschätzung verbessert.

Das in diesem Projekt betrachtete Modellgebiet ist in Abb. 1 dargestellt. Genutzt werden zwei verschachtelte Modellgitter. Innerhalb des rot markierten Bereichs hat das Modell in der Nord- und Ostsee eine Auflösung von 3 Seemeilen (ca. 5 km). Im grün markierten Küstenbereich wird eine Modellauflösung von einer halben Seemeile (ca. 900 m) verwendet. Im Bereich außerhalb der roten Markierung wird ein separates Modell betrieben,

das im Projekt aber nicht betrachtet wird. Felder dieses Modells werden nur verwendet um Randwerte für das Modellgebiet innerhalb der roten Markierung zu erhalten.

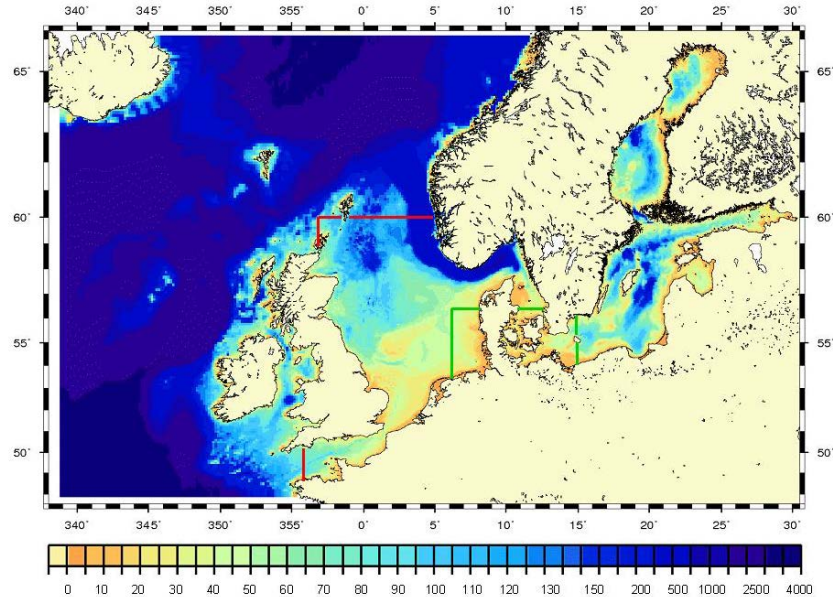


Abbildung 1: Modellgebiet in der Nord- und Ostsee. Verwendet wird der rot umrandete Bereich mit einer Auflösung von 3 Seemeilen. Der grün umrandete Küstenbereich ist mit 900 Metern höher aufgelöst.

Bisherige Arbeiten haben sich auf die Assimilation von Beobachtungen der Oberflächentemperatur konzentriert, die von Satelliten gemessen wird. Durch Assimilation dieser Beobachtungen, lässt sich die Modelltemperatur im gesamten Modellgebiet nicht nur an der Oberfläche, sondern auch in die Tiefe korrigieren. Auch können andere Modellfelder, wie der Salzgehalt oder das Geschwindigkeitsfeld positiv beeinflusst werden. Die Untersuchungen zum Einfluss der Assimilation der Oberflächentemperatur sind in zwei Studien von Losa et al. [3, 4] beschrieben wurden.

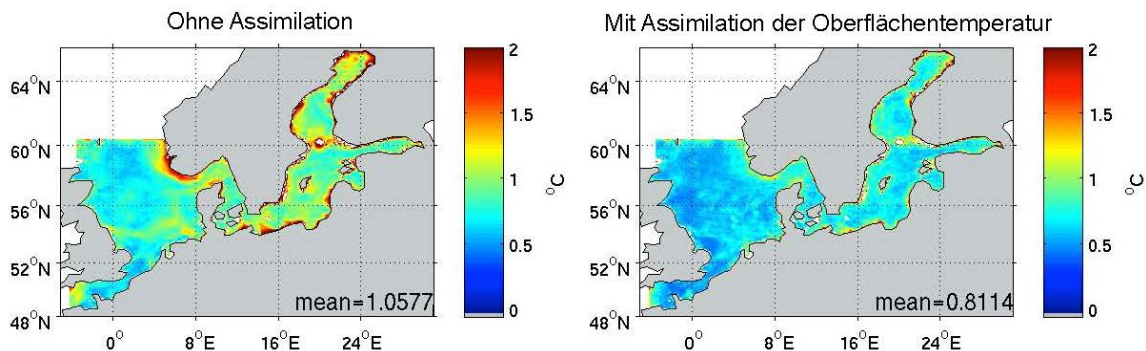


Abbildung 2: Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers der Oberflächentemperatur über ein Jahr (Oktober 2007–September 2008). Links: Fehler ohne Datenassimilation; rechts: Fehler nach Datenassimilation (Nach Losa et al. 2014)

Abbildung 2 zeigt die Fehler in der Oberflächentemperatur gemittelt über ein Jahr. Ohne Datenassimilation finden sich die größten Fehler von bis zu 2°C dicht an der Küste. Diese Fehler, aber auch die Fehler in größerer Entfernung von den Küsten, werden durch die Datenassimilation deutlich reduziert. Im Mittel über ein Jahr wird der Fehler in 12-Stunden Vorhersagen um etwa 0,25°C reduziert. Diese Verbesserung hält auch bei längeren Vorhersagen bis zu fünf Tagen weitgehend an. Durch die Verwendung eines Ensembles wird außerdem eine Schätzung der Unsicherheit in den Vorhersagen bereit gestellt.

Als Erweiterung der physikalischen Datenassimilation wird im aktuellen Projekt die Assimilation von biologischen Beobachtungen betrachtet. Hierfür gibt es Daten der sog. Ozeanfarbe mit dem Hauptprodukt der Chlorophyllkonzentration. Für die Assimilation der biologischen Daten wurde das Modell am BSH mit dem Ökosystemmodell ERGOM (siehe [5]) erweitert. Dieses Modell simuliert biogeochemische Kreisläufe, d.h. das Wachstum unterschiedlicher Planktongruppen in Abhängigkeit von der Temperatur, dem verfügbaren Licht, sowie unterschiedlichen Nährstoffen. Die Hinzunahme des Ökosystemmodells führt zu einer signifikanten Erhöhung der benötigten Rechenzeit. Durch die Rechenleistung des HLRN sind aber weiterhin Ensemble-Vorhersagen auch über mehrere Jahre Modellzeit möglich.

Da Ökosystemmodelle empirisch konstruiert sind, sind die Parameter die die Wechselwirkungen der unterschiedlichen Komponenten des Modells beschreiben nicht vollständig bekannt. Ein Arbeitspaket dieses Projekts ist daher die Schätzung optimierter Modellparameter. Ein weiteres Arbeitspaket ist dann die Zustandsschätzung mit Hilfe der Assimilation der biologischen Beobachtungen. In früheren Studien mit globalen Ozeanmodellen, z.B. [6], wurden hierbei gute Ergebnisse erzielt.

Weitere Informationen und Veröffentlichungen

- [1] L. Nerger, W. Hiller. Software for Ensemble-based Data Assimilation Systems - Implementation Strategies and Scalability. *Computers and Geosciences*, **55**, 110-118 (2013). doi:10.1016/j.cageo.2012.03.026
- [2] <http://pdaf.awi.de>
- [3] S.N. Losa, S. Danilov, J. Schröter, L. Nerger, S. Massmann, F. Janssen. Assimilating NOAA SST data into the BSH operational circulation model for the North and Baltic Seas: Inference about the data. *Journal of Marine Systems*, **105-108**, 152-162 (2012). doi 10.1016/j.jmarsys.2012.07.008
- [4] S.N. Losa, S. Danilov, J. Schröter, T. Janjic, L. Nerger, F. Janssen. Assimilating NOAA SST data into the BSH operational circulation model for the North and Baltic Seas: Part 2. Sensitivity of the forecast's skill to the prior model error statistics. *Journal of Marine Systems*, **129**, 259-270 (2014). doi 10.1016/j.jmarsys.2013.06.011
- [5] M. Maar, E.F. Möller, J. Larsen, K.S. Madsen, Z. Wan, J. She, L. Jonasson, T. Neumann. Ecosystem modelling across a salinity gradient from the North Sea to the Baltic Sea. *Ecological Modelling*, **222**, 1696-1711 (2011). doi 10.1016/j.ecolmodel.2011.03.006
- [6] L. Nerger, W.W. Gregg. Assimilation of Sea-WiFS data into a global ocean-biogeochemical model using a local SEIK Filter. *Journal of Marine Systems*, **68**, 237-254 (2007). doi: 10.1016/j.jmarsys.2006.11.009

Förderung

Verbundprojekt DeMarine-II gefördert vom BMWi über den Projektträger DLR.

6.15 *hbp00003*: Encounters of Neutron Stars

HLRN-Projektkenung:	hbp00003
Laufzeit:	IV/2010 – IV/2015
Projektverantwortlicher:	Prof. Dr. C. Lämmerzahl, Prof. Dr. S. Rosswog
Projektbearbeiter:	Emanuel Gafton, Emilio Tejeda, Lars Linsen
Institut:	Universität Bremen, Jacobs University Bremen / Oskar Klein Centre for Cosmoparticle Physics, Stockholm University, Stockholm, Sweden

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. A new generation of detectors will start taking data in the second half of 2015, i.e. the era of gravitational wave astronomy may actually be inherent.
- Such mergers eject very neutron-rich matter which (via a so-called "rapid neutron capture process") produces the **heaviest elements in the Universe** (like platinum, gold or uranium).
- 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 with properties close to our predictions. This observation boosts the confidence that mergers of compact objects are major sources of the heaviest elements in the cosmos.

2. Introduction

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 central densities substantially exceed $3 \times 10^{14} \text{ gcm}^{-3}$ 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. An example of a neutron star collision is shown in Fig. 1.

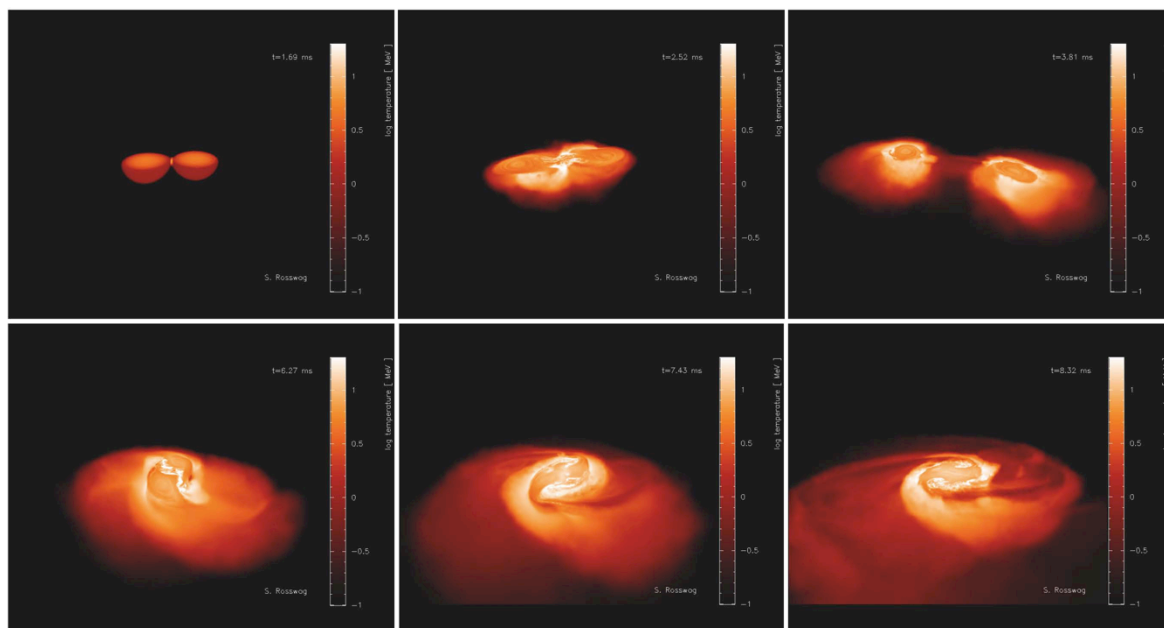


Figure 1: Collision of a 1.3 and a 1.4 M_{\odot} neutron star. Shown are volume renderings of the temperature. To allow a view inside, only the lower part of the matter distribution is visualized. From Rosswog et al. (2013).

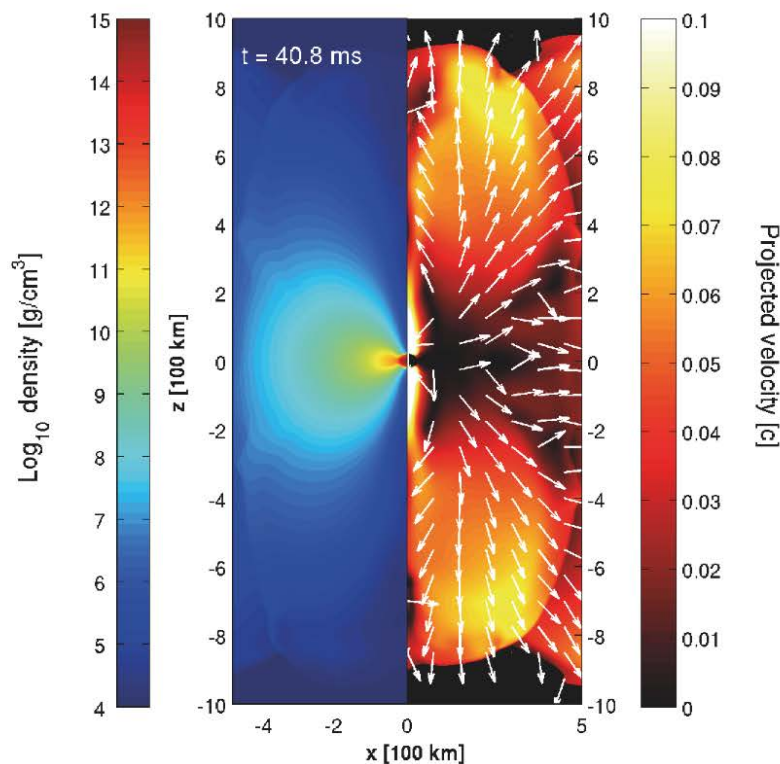
In our HLRN project we study the question how different mergers and collisions are in a) their gravitational wave, b) neutrino and c) electromagnetic emission. Moreover, we want to understand d) what their contribution to the cosmic inventory of heavy nuclei is.

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. 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 bursts, enormously bright flashes of gamma-rays, gravitational waves and – of course – the formation of the heaviest elements in the cosmos. Macronovae may be instrumental in

identifying gravitational wave sources. Their importance comes through the complementary information they provide: from the gravitational wave signal one can extract the parameters of the merging system (masses, spins etc.), but – since the sky localisation through gravitational waves is very poor (of order 100 square degrees; such a patch can contain thousands of galaxies) – 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. 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: Neutrino-driven wind blown of the remnant of two merged neutron stars. The left panel



shows the density, the right one the velocity (in units of the speed of light). From Perego et al. (2014).

Very recently, we had also explored the impact of neutrinos that are emitted by the remnant of a merger. A remnant emits neutrinos at enormous luminosities: they are about 20 orders of magnitude(!) larger than the (electromagnetic) luminosity of our Sun. As we have found in a recent study (Perego et al. 2014), neutrinos emitted in one part of the remnant can be absorbed in another part and this blows off a strong wind from the remnant, see Fig 2. This

wind should cause a different type of electromagnetic emission, directly following a gravitational wave event.

4. 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 ("macronova"). 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 2014 HLRN results

- [1] *Europium production: neutron star mergers versus core-collapse supernovae*, Matteucci, F. et al.; MNRAS 438, 2177 (2014)
- [2] *The long-term evolution of neutron star merger remnants - I. The impact of r-process nucleosynthesis*, Rosswog, S. et al., MNRAS 439, 744 (2014)
- [3] *The long-term evolution of neutron star merger remnants - II. Radioactively powered transients*, Grossman, D. et al., MNRAS 439, 757 (2014)
- [4] *Neutrino-driven winds from neutron star merger remnants*, Perego, A. et al.; MNRAS 443, 3134 (2014)
- [5] *MODA: a new algorithm to compute optical depths in multidimensional hydrodynamic simulations*, A. Perego et al., A & A 568, 11 (2014)
- [6] *The Role of Fission in Neutron Star Mergers and the Position of the Third r-Process*, Eichler et al., arXiv:14110974
- [7] *Multi-messenger picture of compact binary mergers*, S. Rosswog, International Journal of Modern Physics D 24, 1530012 (2015)

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
- *A new pseudo-potential for accurate dynamics around a Schwarzschild black hole*
Seminar ITC Harvard, Boston, USA, March 13, 2014
- *The Multi-Messenger picture of compact binary mergers*
Colloquium Uppsala, Sweden, April 17, 2014
- *Physical Processes during the merger of compact objects*
Colloquium Jena, Germany, May 14, 2014
- *Short Gamma-ray Bursts: what is going on at the engine?*
GMT Meeting, Washington, USA, Oct 08, 2014
- *Gravitational waves and electromagnetic transients*
Colloquium Leiden, the Netherlands, Feb 02, 2015
- *Towards a multi-physics view of compact binary mergers*
Colloquium Turku, Finland, Mar 26, 2015