



9. Informationszentrum | *Information centre*



9. Wissenschaftliches Rechenzentrum: Zentrale informationstechnische Basis- dienste und Entwicklungsarbeiten für die Wissenschaft

Die Schwerpunkte der Arbeiten des Rechenzentrums im Berichtszeitraum lagen, neben den zentralen informationstechnischen Basisdiensten für die Wissenschaft, im Bezug des neuen Gebäudes E am Handelshafen und seiner informationstechnischen Ausstattung inklusive neuer Rechnerräume sowie der Erweiterung der zentralen Compute Server und Archivsysteme. Der Umzug des Rechenzentrums in das neue Gebäude mit seiner verlässlichen Klima- und Stromversorgung bedeutete auch eine neue Qualitätsstufe für die Sicherheit der operativen Dienste und vielfältigen AWI Informationssysteme für die Wissenschaft und Öffentlichkeit. Die Erweiterung (Abb. 1) der Compute Server des AWI-RZ um die IBM Regatta 655 und Cray XD1 für Modellierungsvorhaben, das IBM Linux Cluster für Bioinformatik Anwendungen sowie die neuen Magnetband-Archivsysteme in den Gebäuden D (in der Columbusstraße) und E waren Arbeitsschwerpunkte nach Bezug des neuen Gebäudes. Insbesondere die auf die Gebäude D und E verteilten Archivsysteme (STK/SL8500) mit jeweils über 100 Terabyte Kapazität bieten eine hohe Datensicherheit für wertvolle Datenarchive des AWI wie die umfangreichen marinen seismischen Daten aus Arktis und Antarktis basierend auf 20 Jahren Polarsternfahrten.

In den Jahren 2004/2005 wurden die Standorte Bremerhaven und Helgoland mit jeweils einem Vi-

9. Computer centre, scientific databases and information systems: Information technology services in support of scientific research

The AWI Computer Centre provides information technology services and technical support for the institute. This includes priority for the support of data storage and retrieval systems for the long-term archiving of scientific data and computer server capacity for numerical models.

The move of the Computer Centre into a new building has been completed and a new mass storage system with a 100-terabyte capacity was implemented. This storage system offers high data security for valuable data archives, including seismic profiles from the Arctic and Antarctic regions as one example. The storage system is a central component of the overall AWI information system (Figure 1). The expansion of the AWI computer servers having an IBM Regatta 655 and a Cray XD1 for modelling and the IBM Linux Cluster for Bio Informatics were also important additions following the move.

In 2004/2005, the Bremerhaven and Helgoland conference rooms were equipped for videoconferencing. The installation included an integrated control system for multiple cameras, allowing transmission of round-table discussions as well as presentation material between groups on the island and the mainland. In addition, preliminary installations at Potsdam and on Sylt offered comparable facilities suitable for smaller groups. These improvements together with planned upgrades for the equipment in

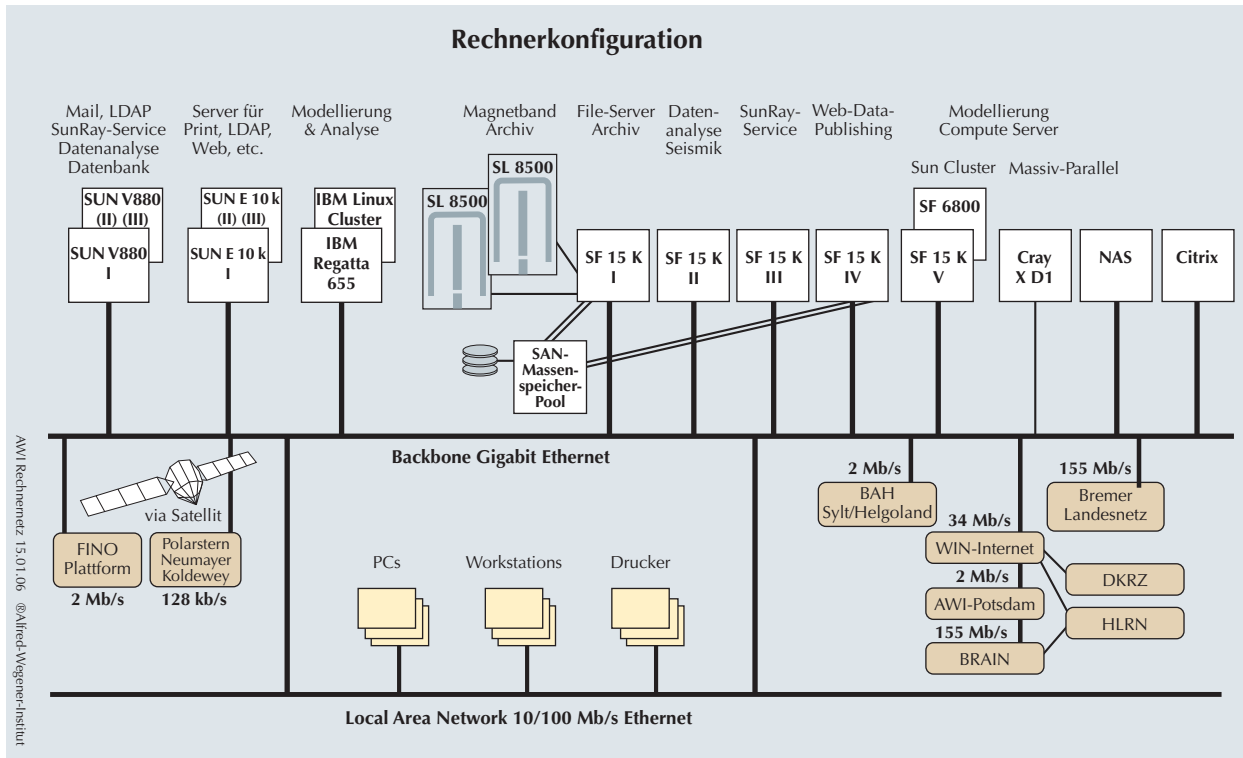


Abb. 1: AWI Rechnernetzkonfiguration

Fig. 1: AWI information system configuration.

deokonferenzraum ausgestattet, in dem eine integrierte Mediensteuerung und jeweils mehrere Kameras dafür sorgen, dass Gesprächsrunden mit Präsentationen, Vorträge oder Ähnliches problemlos übertragen werden können. Zusätzlich wurden die Standorte Sylt und Potsdam mit einem Videokonferenz-System ausgestattet, so dass nun die gleichzeitige Übertragung von Präsentation und Videobild an alle Standorte möglich ist. Durch eine Erhöhung der Bandbreite der Leitung nach Ny-Ålesund (155 MBit/s) können nun Videokonferenzen mit der Koldewey Station abgehalten werden. Dies wurde besonders 2005 von der Öffentlichkeitsarbeit genutzt.

the main lecture hall at Bremerhaven, will allow talks, presentation material and discussion to be distributed to all AWI-sites, including.

In mid-2005, the internet connection to Ny-Ålesund was extended to 155 MBit/s. This allowed the use of high bandwidth, quality videoconferences as a means of outreach as well as for group communication from the Koldewey station located at latitude of 80° North.

AWI Compute Server und Archivsysteme

Im Berichtszeitraum wurde das Konzept zur katastrophensicheren Datenhaltung umgesetzt. Dabei werden die Daten des zentralen Massenspeichersystems in zwei Kopien an verschiedenen Standorten archiviert. Dazu wurden zunächst die beiden Magnetband-Robotiken räumlich getrennt und die Daten zwischen ihnen gespiegelt. Nach Inbetriebnahme des Rechnerraumes in Gebäude E wurde dann eine der Robotiken dorthin verlegt. Anfang 2005 wurde eine neue Robotik vom Typ STK-SL8500 in Gebäude D installiert, die Daten werden seitdem in zwei Kopien in beiden Standorten auf hochvolumigen Bandlaufwerken archiviert.

In der zweiten Hälfte 2005 wurde im Vorgriff auf die Beschaffung eines neuen Großrechners damit begonnen, die Infrastruktur im Massenspeicherbereich an die zu erwartenden deutlichen Zuwächse anzupassen. Diese Maßnahmen umfassen eine Erweiterung des Plattencaches des SAMFS-Archivsystems um 20 TB sowie den Ersatz der alten Robotik durch eine schnellere SL8500 in Gebäude E. Gleichzeitig wurde die Umsetzung der gesamten AWI-Datensicherung auf hochvolumige Laufwerke vorgenommen. Dazu wurden acht LTO/3-Laufwerke neu installiert. Schließlich wurden beide STK-SL8500 Robotiken durch den Einbau zusätzlicher, redundanter Komponenten schneller und ausfallsicherer gemacht. Diese Arbeiten werden im Februar 2006 abgeschlossen sein.

Da der neue Höchstleistungsrechner für Modellierung voraussichtlich erst Ende 2006 installiert werden wird, ergab sich die Notwendigkeit, den Nutzern bis dahin auf anderen Rechnern ausreichend Rechenleistung anzubieten. Dazu wurde Anfang 2005 ein CRAY XD1-System mit 36 Doppelprozessorknoten

AWI Compute Server und Archive System

New measures of data storage and archiving were implemented in the reporting period. The central data storage system now duplicates up to 100 Tera-byte of data, which are stored in separate buildings.

In the second half of 2005 measures were taken to adapt the data storage infrastructure to the expected increase in usage due to the installation of a mainframe computer server in 2006. These measures cover an extension of the disk-cache of the SAMFS-archiving system in the order of approx. 20 TB as well as the replacing the Powderhorn tape library in building E with a faster SL8500 robotic system. At the same time, moving of the complete AWI-backup-facilities to higher capacity tape drives and type media (LTO/3) was carried out. After completion, all of the faster tape devices will be available for the archiving of user-data stemming from the new computer server as well as other data sources. To achieve this goal, eight new LTO/3 tape drives have been installed. Finally, the speed and reliability of the tape libraries was considerably increased by installing redundant components.

As the new computer server, which replacing a CRAY T3e system, will be installed in the second half of 2006, it has been necessary to offer computing power to the users on other machines. For this purpose, a CRAY XD1 system with 36 double processor nodes was installed in early 2005. In the meantime, this machine works as one of the AWI computer servers and has proven itself well. In order to further improve the usability of this machine, a RAID disk subsystem with 6 TB capacity was installed at the end of 2005.

installiert, das inzwischen im Produktionsbetrieb arbeitet und sich gut bewährt hat. Um die Nutzungsmöglichkeiten des Systems weiter zu verbessern, wurde Ende 2005 ein RAID-Magnetplattensystem mit 6 TB Kapazität für Modellierungsdaten integriert.

Neuer Schwerpunkt: Bioinformatik am Rechenzentrum

Nach der 2003 erfolgten gemeinsamen Berufung einer Kooperations-Professur „Algorithmik in der Molekularbiologie“ mit der Hochschule Bremerhaven wurde eine Forschungsgruppe Bioinformatik am Rechenzentrum eingerichtet. In Zusammenhang mit dem im Oktober 2005 angelaufenen Master-Studiengang „Bio-Analytik“ der Hochschule Bremerhaven werden Studierende in aktuelle Forschungsthemen der angewandten Bioinformatik und der Molekularen Genetik einbezogen. Im Fokus der Forschungsgruppe steht die Anwendungsentwicklung von Werkzeugen zur Gen-Annotation, dem Micro-Array Chip-Design sowie der Multiplex-PCR. Als Rechenplattform zur Sequenzanalyse für Gen-Annotation und Probe-Design (Hochspezifische Molekulare Marker) dient der Linux-Cluster des Rechenzentrums, der auch intensiv für die Biodiversitätsforschung im Fachbereich Biologie eingesetzt wird.

Wissenschaftliche Informationssysteme und Datenbanken

Das „World Data Center for Marine Environmental Sciences“ (WDC-MARE) wird von nationalen und internationalen Projekten für die Archivierung und Publikation von georeferenzierten Daten der Erdsystemforschung genutzt. Große, zurzeit laufende EU-Projekte sind Carbocean, Euroceans, Hermes und Sensor, deren Daten in dem von WDC-MARE genutzten Archivsystem PANGAEA erfasst werden. Die Da-

Bioinformatics at AWI-Computing Centre

The cooperation professorship „algorithmics in molecular biology“ between Hochschule Bremerhaven and AWI was established at the end of 2003. Connected with a research group at the AWI computing centre a master study course “Bioanalytics“ was launched in 10/2005, which enables students to participate in current research projects in applied bioinformatics and molecular genetics at AWI. The research group focuses on the development of application tools for gene annotation, the design of micro arrays and the optimization of multiplex PCR-primers (as computer platform for gene sequence analysis (sequence annotation and probe/primer design)). The linux-cluster at the computing centre is used, and is also strongly used for biodiversity research in the biology department.

Scientific Information Systems and Databases

The „World Data Centre for Marine Environmental Sciences“ (WDC-MARE) has been established and is routinely used by national and international projects for archiving and the publication of geo-referenced earth system research data. Currently, Carbocean, European, Hermes and Censore are large EU projects, the data of which are collected within PANGAEA, the archive system employed by WDC-MARE. The WOCE data are mirrored via this system, the JGOFS data (64,000 data sets) have been transferred into a consistent format, supplemented by metadata and published. As operators of the WDC, AWI and MARUM have launched the series „WDC-MARE Reports“ for the publication of project data. In 2005, the first three issues appeared for the (SFB313, ORFOIS, and JGOFS) projects . The issues are circu-

ten von WOCE werden über dieses System gespiegelt, die Daten von JGOFS (64 000 Datensätze) wurden in ein konsistentes Format überführt, mit Metadaten versehen und publiziert. AWI und MARUM, die Betreiber des WDC, haben für die Veröffentlichung von Projektdaten die Reihe „WDC-MARE Reports“ gegründet; 2005 sind die ersten drei Hefte zu den Projekten SFB313, ORFOIS und JGOFS erschienen; die Hefte werden über den Verteiler der „Berichte zur Polar- und Meeresforschung“ in 500 Bibliotheken weltweit verbreitet. Für die Publikation und dauerhafte Identifizierung von Datensätzen wurde in einem Projekt mit der TIB (Technische Informationsbibliothek Hannover) und anderen WDCs die DOI (Digital Object Identifier) eingeführt. Das GeoPortal.Bund ist das erste Portal für geowissenschaftliche Daten, an dem das AWI mit PANGAEA beteiligt ist.

Zur Deckung des gewachsenen Bedarfs an Geografischen Informationssystemen (GIS) hat das Rechenzentrum einen speziellen Datenbankserver eingerichtet, der räumlich spezifizierte Geo-Daten mit Verweisen zu GIS-Anwendungen bereithält. Außerdem wurden Web-Dienste installiert, um die Zugriffsmöglichkeiten auf georeferenzierte und in Kartenform vorliegende Forschungsdaten zu erweitern.

Die Arbeiten zur Anbindung der taxonomischen Datenbanken des AWI (Makroalgen/Helgoland und Friedrich-Hustedt-Diatomeensammlung) an die „Global Biodiversity Information Facility“ (GBIF – www.gbif.org) wurden fortgesetzt. Da die jeweiligen WissenschaftlerInnen diese Daten mit unterschiedlichen Datenbanksystemen pflegen, bildet die einheitliche Überführung der Daten in eine MySQL-Datenbank den Kern der Verbindung zu GBIF.

lated to 500 libraries all over the world via the distributor of the journal “Reports on Polar and Marine Research”. The DOI (Digital Object Identifier) has been introduced in cooperation with the TIB (Technische Informationsbibliothek Hannover) and other WDCs for the publication and permanent identification of data sets. With PANGAEA, AWI is participating in GeoPortal.Bund, the first web portal for geoscience data.

To support a growing demand for Geographic Information Systems (GIS) in many AWI research areas, the computing centre has implemented a specialized database server for the storage of spatially explicit „geodata“ with links to GIS software. Web services have also been implemented to extend access to geospatial research data, including data in the form of maps.

The connection of AWI taxonomic databases (Macro algae of Helgoland and the Friedrich Hustedt diatom collection) to the „Global Biodiversity Information Facility“ (GBIF – www.gbif.org) is nearing completion. As the respective scientists maintain these data with different database systems, a consistent transfer of the data into a MySQL database constitutes the core of the GBIF link.

AWI Information Systems

Improvements to ePIC, electronic publication system at AWI, as well as several other web-based applications enable the assignment of multi-valued organizational units (AWI section and MARCOPOLI work packages) for any given timeframe. In addition, the directory system has been accordingly changed to allow a more flexible and extensible structuring of organizational information at the AWI in future.

AWI Informationssysteme

Damit die neue AWI-Struktur in verschiedenen Anwendungen, besonders dem Publikationsverzeichnis ePIC zur Verfügung steht, wurde das Datenschema des AWI Verzeichnisses dafür angepasst.

Um für zukünftige Standards beim Offenen Zugang zu wissenschaftlichem Wissen (Open Access) vorbereitet zu sein, wurden verschiedene Softwarepakete getestet, die das dazu gehörige Standard-Netzwerkprotokoll OAI-PMH (Open Archives Initiative- Protocol for Metadata Harvesting) realisieren. Das Product FEDORA der Cornell University wurde ausgewählt, da es besonders skalierbar ist, so dass auch große Mengen von Dokumenten und Datensätzen verwaltet werden können. Seitdem werden Beschreibungen oder auch Inhalte aller AWI-Publikationen – Artikel, Präsentationen und Poster – regelmäßig in diesem Repository abgelegt.

Außerdem wurde ein OAI-PMH Harvester aufgesetzt, der Metadaten aus den Publikations-Repositories des AWI und dem Küstenforschungsbereich der GKSS sowie dem Datenrepository PANGAEA – insgesamt ca. 160 000 Datensätze - sammelt. Dies ermöglicht die gemeinsame Suche und integrierte Anzeige über alle drei Repositories.

Wissenschaftliches Rechnen

Die hohe Rechenkapazität moderner paralleler Höchstleistungsrechner bietet unter Anwendung von Methoden des wissenschaftlichen Rechnens neue Möglichkeiten der numerischen Implementierung hochkomplexer Modelle zur Simulation von klimarelevanten Prozessen im System Erde. Die Arbeitsgruppe „Wissenschaftliches Rechnen“ bietet als Bindeglied zwischen den Entwicklern neuer numerischer Verfah-

After testing several open source software packages OAI-PMH (Open Archives Initiative Protocol for Metadata Harvesting) in 2004, a final decision for the highly scalable FEDORA (Flexible and Extensible Digital Object Repository Architecture) took place mid 2005. This is a collection of APIs to support access and management of digital objects. Since then, all AWI publications, events (oral presentations and posters) and granted intellectual property material (patents, trademarks and utility models) have been imported and regularly updated in AWI's own FEDORA repository. FEDORA has also been officially chosen in December 2005 as the repository architecture for eSciDoc (a Max-Planck 5-year BMBF-funded project on Open Access) which will facilitate future collaboration and information integration.

As a proof-of-concept in the open access framework, we are running an OAI-PMH compliant service provider which harvests, indexes and selectively displays (based on digital object type and/or discipline) all metadata from AWI, PANGAEA and GKSS repositories (currently a total of ~160,000 records). In addition, test cases for web-based SOAP clients, which selectively display AWI and PANGAEA records simultaneously, have been successfully implemented. This clearly demonstrates that the architectural framework of the AWI institutional publication repository, built on international standards/protocols, and PANGAEA can be integrated to coordinate publications using primary data. For 2006/2007, implementation of FEDORA is planned using EU and ESF funding as repository architecture for digital objects of type image/taxonomy.

ren sowie den Anwendern im Bereich der Klimasystem-Modellierung umfangreiche Unterstützung bei der Nutzung der am AWI-Rechenzentrum betriebenen Höchstleistungsrechner. Das wissenschaftliche Rechnen ist als Schlüsseltechnologie in den HGF-Zentren von großer Bedeutung. Drei Projekte am AWI sind direkt damit verknüpft: C3-Grid, MARCOPOLI Aufwuchsprojekt COM und DEKLIM Forschungsvorhaben PLASMA.

C3-Grid

Das AWI beteiligte sich aktiv an der nationalen D-GRID e-Science Initiative des BMBF. In diesem Rahmen hat für die Erdsystemforschung ein breites Konsortium aller wesentlichen Einrichtungen der Klimaforschung in Deutschland unter Führung des AWI das C3 Grid Projekt (**Collaborative Climate Community Data and Processing Grid**) beantragt. Im Jahr 2005 wurden diese Aktivitäten mit den Vorhaben anderer Communitys (Hochenergiephysik, Astrophysik, Medizin, Ingenieurwissenschaften) abgestimmt. Das C3-Grid versammelt wesentliche Einrichtungen der Erdsystemforschung in Deutschland, die in der oben abgebildeten Struktur organisiert sind (s. Abb. 2).

In der Erdsystemforschung beruhen wissenschaftlich abgesicherte Aussagen auf einem Workflow, bei dem Daten aus Modellrechnungen mit Messdaten sowie Ergebnisse verschiedener Modellrechnungen untereinander verglichen werden. Damit können Modelle verifiziert und stabile dynamische Phänomene herausgefiltert werden.

Sowohl für Modell- als auch für Beobachtungsdaten lässt sich in den vergangenen Jahren eine enorme Zunahme verzeichnen. Die Daten lagern in verteilten Archiven der einzelnen Einrichtungen. Eine zentrale Datenhaltung ist aufgrund des hohen Volumens der

C3-Grid Scientific Computing Project

*The AWI took an active roll in the national D-GRID e-Science initiative, which resulted in a call for research proposals. Within the broad topic of earth system sciences, the AWI took a leadership role to establish a consortium of key climate research institutions to propose the C3 Grid project (**Collaborative Climate Community Data and Processing Grid**). In a 2005 preliminary project phase, these activities were aligned with the plans of other communities (high energy physics, astrophysics, medicines, engineering science) and the project started on 1. September 2005.*

The C3-Grid integrates important institutions of earth system science in Germany (Figure 2). The partners underlined (AWI, MPI for meteorology Hamburg, University of Cologne, Zuse Institute Berlin, University of Dortmund, DLR, PIK, DWD) are the direct applicants and mandated to the central project management, which is located at AWI. The other partners are integrated within sub-groups.

In earth system science, scientific collateralized statements are based on a workflow, which compares data from simulations with measurement data as well as results of various simulations amongst each other. Thus, it is possible to verify models and filter out stable dynamic phenomena.

An enormous volume of both model- and observation data has been produced in the last few years. These data are stored in distributed archives of the various parent institutions. Central data management is impracticable because of the large data volume and long access times for remote users. In the current distributed data system, searches for specific records are very circuitous, time-consuming, and the access to foreign archives is often impossible. The

Daten und der damit verbundenen langen Zugriffszeiten für entfernte Nutzer nicht praktikabel. Damit sind aber derzeit Recherchen nach bestimmten Datensätzen sehr umständlich und zeitaufwändig, teilweise ist der Zugriff an fremde Archive gar nicht möglich. Die Verknüpfung von unterschiedlichen Daten ist jedoch essentiell für den weiteren Erkenntnisgewinn. Der fehlende einheitliche Zugriff auf die Daten stellt damit einen Engpass in der heutigen Erdsystemforschung dar und behindert auch die internationale Vernetzung. Das C3-Grid zielt daher auf eine gridbasierte Arbeitsumgebung für den Wissenschaftler, mit dem ein effizientes verteiltes Datenprocessing und interinstitutioneller Datenaustausch ermöglicht wird.

Basierend auf vorhandenen Grid-Technologien soll eine neue Generation eines kollaborativen Gesamtsystems entstehen, bestehend aus einem Meta-Directorysystem zur konsistenten Beschreibung der Daten, effektivem Zugriff auf Massendaten in föderierten Speichersystemen, integrierten Analysemöglichkeiten, Replikativverwaltung und Schedulingmechanismen zur Vermeidung von unnötigem Datentransfer. Von entscheidender Bedeutung wird die Einführung einer einheitlichen Beschreibung aller Daten sein. Dann kann der Nutzer von einem Portal aus nach Daten mit einer bestimmten Spezifikation suchen und diese dann in einer Prozesskette bearbeiten (s. Abb. 3).

COM

In Zusammenarbeit mit Mitarbeitern des Fachbereiches Klimasystem wurde das auf Finiten Elementen beruhende Community Ocean Model (COM) weiterentwickelt. Insbesondere im numerisch aufwändigen Löserteil des Modells, in dem große Gleichungssysteme aufgelöst werden, konnte durch Optimierung

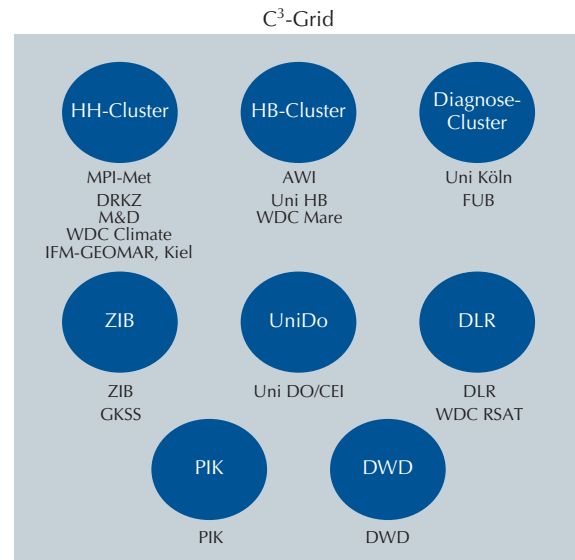


Abb. 2: Teilnehmende Einrichtungen im C3-Grid

Fig. 2: C3-Grid partners.

lack of access to the data is a bottle neck in today's internationally-oriented earth system science. The goal of C3-Grid is a grid-based working environment for scientists, providing an efficient, internationally distributed data processing and data exchange network.

Based on existing grid technologies, a new generation of collaborative systems is envisaged. These contain a meta-directory system for consistent description of the data, effective access for mass data in a federation of storage systems, integrated capabilities of analysis, data replica management and sche-

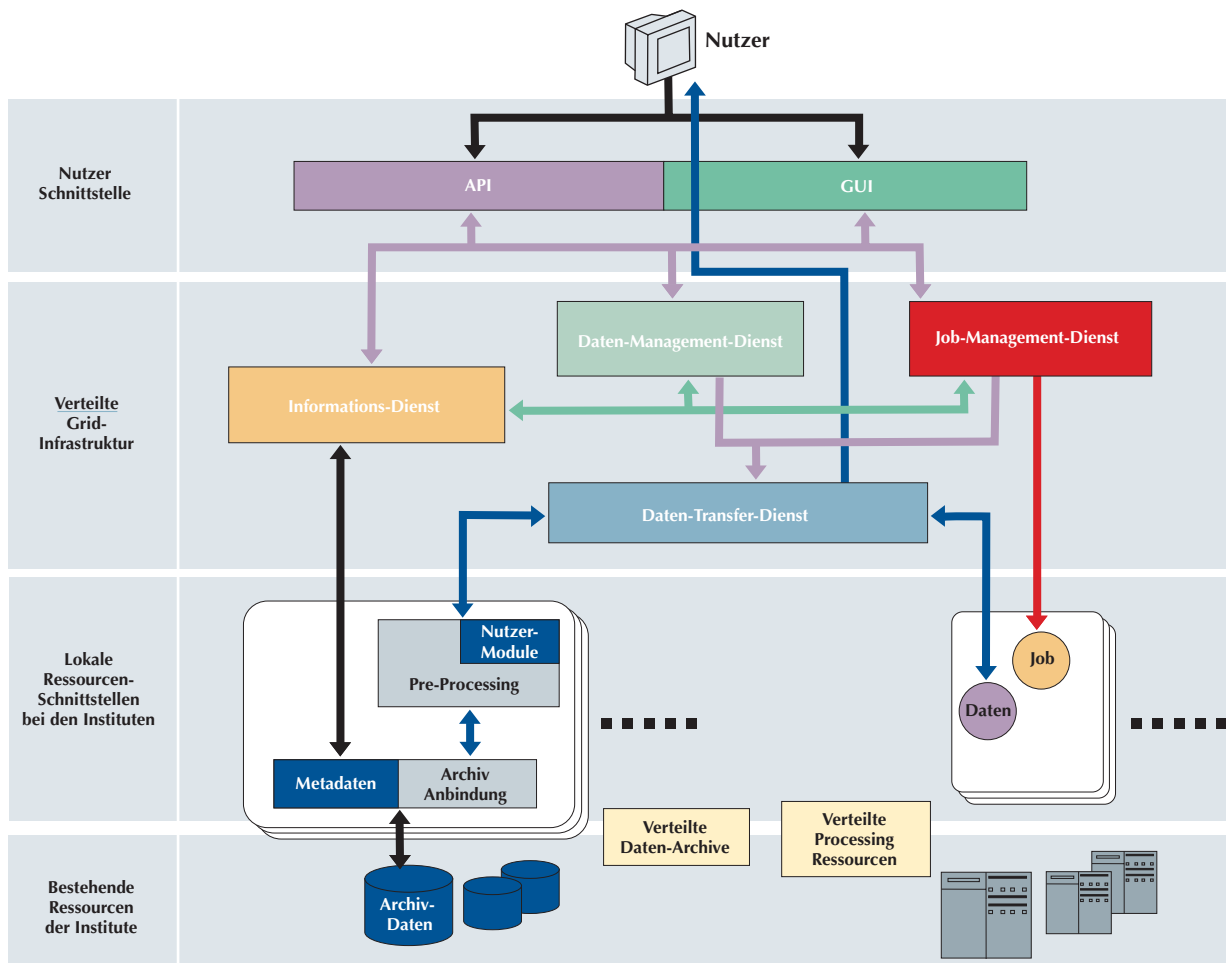


Abb. 3: Architektur Diagramm C3-Grid

Fig. 3: Architecture diagram for C3-Grid

der verwendeten Solverbibliotheken Rechenzeit eingespart werden. Zum Vergleich verschiedener Löserkonfigurationen kam dabei das vom Rechenzentrum bereitgestellte Interface-Paket FoSSI (Family Of Simplified Solver Interfaces) zur Anwendung.

Bei der Datenassimilation spielen Kalman-Filter eine wichtige Rolle. Im Rahmen einer Dissertation wurden verschiedene Filter dieses Typs (Ensemble Kalman Filter EnKF, Singular Evolutive Extended Kalman-Filter SEEK sowie der Singular Evolutive Interpolated Kalman-Filter SEIK) systematisch miteinander verglichen. Weiterhin wurden entsprechende Algorithmen auf Parallelrechnern implementiert und so in Form eines parallelen Kalman-Filter Frameworks den Modellierern am AWI zur Verfügung gestellt.

DEKLIM Forschungsvorhaben PLASMA

Im Rahmen des Deutschen Klimaforschungsprogramms DEKLIM beteiligt sich die Arbeitsgruppe Wissenschaftliches Rechnen in Zusammenarbeit mit den Wissenschaftlern des Projekts "PLASMA – Parallel Large Scale Self-adaptive Model of the Atmosphere" an der Entwicklung eines Finite-Elemente-Komponentenmodel der Atmosphäre. Dabei konzentrieren sich die Aktivitäten der Rechenzentrumsgruppe auf die effiziente Lösung der auftretenden linearen Gleichungssysteme. Dazu wird vorrangig das für das AWI-Ozeanmodell FEOM entwickelte Löserinterface-Paket "Family of Simplified Solver Interfaces (FoSSI)" zur Verfügung gestellt, gepflegt und ständig an Weiterentwicklungen angepasst. FoSSI ermöglicht über einfache vereinheitlichte Schnittstellen schnellen und komfortablen Zugriff auf die parallelen Löser-Bibliotheken (Bibliotheken Petsc, Aztec, Hypre, Pilut und Mumps). Darüber hinaus wird an der Entwicklung des Stand-Alone Löserpakets "ScOPES – Scalable Open Parallel Environment for the Solution of Large

duling mechanisms for efficient data traffic (Figure 3). The implementation of a standardized description of all data is vitally important is allowing the user to search specific data using a portal and to work using the results in a process chain.

Modern parallel high-speed computers offer new possibilities for numerically implementing highly complex models for simulating climate relevant processes within the earth system. The working group "Scientific Computing" supports users in the area of climate system modeling with new numerical methods for high performance computing.

COM

The Community Ocean Model (COM) relating finite elements has been further developed in collaboration with members of the Climate System section. Computing time can be saved by optimizing the computing time of the solver libraries used, especially in the numerically involved solution part of the model in which large-scale equations. The interface package FoSSI (Family of Simplified Solver Interfaces) which has been developed at the AWI Computing Centre allows for easy comparison of various solver configurations.

Kalman Filters play an important role in the field of data assimilation. The subject of a PhD thesis completed in 2004 was the consistent and systematic comparison of different kinds of Kalman Filters: Ensemble Kalman Filters EnKF, Singular Evolutive Extended Kalman-Filters SEEK and the Singular Evolutive Interpolated Kalman-Filter SEIK. Furthermore, corresponding algorithms were implemented and the resulting framework of parallel Kalman Filters is ready to be used for data assimilation.

Linear Equation Systems“ gearbeitet, die vergleichbare Funktionalität sowohl mit dem OpenMP- als auch mit dem MPI-Parallelisierungsparadigma bereitstellt.

BremHLR: Das Bremer Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen

Als Kooperation zwischen der Universität Bremen (UB), dem Alfred-Wegener-Institut Bremerhaven (AWI) und der International University Bremen (IUB) wurde im Berichtszeitraum die Arbeit in dem vom Bremer Senator für Bildung geförderten Bremer Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen BremHLR voll aufgenommen (www.bremhhr.uni-bremen.de). Neben der Beratung Bremer Forschungsvorhaben im wissenschaftlichen Rechnen – sowohl auf dem System des „Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen HLRN“ als auch an anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren (z. B. NIC in Jülich) – hat die Koordination und Durchführung von Nutzerworkshops und -schulungen zu einer der Haupttätigkeiten des BremHLR entwickelt. Wie bisher sind dem BremHLR Fachberater aus den beteiligten Zentren ZARM/UB, CLAMV/IUB und dem Rechenzentrum des AWI, das auch die Koordination der Geschäftsstelle leitet, zugeordnet. Neben dem 2004 auf 40 Prozessoren erweiterten IBM-Regatta System wird seit Anfang 2005 mit einer Cray XD1 ein weiteres Hochleistungssystem am AWI betrieben, das intensiv zur Projektvorbereitung und zur Abwicklung kleinerer Projektarbeiten der AWI-Fachbereiche „Klimasystem“ und „Geowissenschaften“ genutzt wird. Im Jahre 2005 war eine wichtige Aufgabe des BremHLR die Unterstützung des HLRN-Verbundes bei der Antragstellung und der Neubeschaffung des HLRN-Nachfolgesystems (HLRN-II), das 2006 beschafft werden soll.

DEKLIM Project PLASMA

Within the scope of (DEKLIM) the German Climate Research Program, the Scientific Computing working group participates in the development of a finite element component model of the atmosphere together with scientists of the (“PLASMA – Parallel Large Scale Self-adaptive Model of the Atmosphere”) project. In the project, activities of the computer centre group concentrate on efficient solution of the linear equations systems to be solved in the model. For this purpose, the solver interface package “Family of Simplified Solver Interfaces (FoSSI)” is mainly provided, maintained and constantly adapted to new developments. FoSSI gives easy access to the Petsc, Aztec Hypre Pflut and Mumps parallel solver libraries. Furthermore, the development of the Stand-Alone solution packade “SCOPES-Scalable Open Parallel Environment for the Solution of Carge Linear Equation Systems“ is worked upon, which also makes comparable functionality as well as OpenMP with MPI paralleling paradigms available.

BremHLR: The competence centre for high-performance computing Bremen

The competence centre for high-performance computing Bremen (BremHLR, www.bremhhr.uni-bremen.de) which is supported by the “Bremer Senator für Bildung” was set up in 2003 as a cooperation of the University Bremen (IUB) the International University Bremen (IUB), and the Alfred Wegener Institute Bremerhaven (AWI). The BremHLR centre supports linkages to the “Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)” as well as other national computing centres (e.g. NIC in Jülich) in addition to coordinating and organizing

user workshops and user training courses. Scientific consulting in high performance computing is conducted by consultants from participating centres ZARM/UB, CLAMV/IUB as well as the Computer Centre of AWI. The AWI computer centre as, from the start of 2005, operated the IBM Regatta system and the high performance Cray XD1 computing system used intensively for the preparation of projects and for modeling by AWI "climate system" and "geoscience" departments. Supporting the HLRN in the procurement of the next generation of HLRN-system (HLRN-II) will be a major task of the BremHLR in 2006.