

Project: 617
Project title: Multiscale Earth System Chemistry Modelling
Principal investigator: Patrick Jöckel
Report period: 2017-01-01 to 2017-12-31

(1.1) Die geplanten MECO(4) Simulationen zur Sensitivität von Ozon gegenüber den NO_x Emissionen konnten leider nicht wie geplant durchgeführt werden, da die hierfür benötigten Emissionskataster vom Projektpartner erst im 4. Quartal 2017 zur Verfügung gestellt wurden (siehe auch Report Projekt 80). Diese Simulationen sollen 2018 in einem neuen DKRZ Projekt (1063) durchgeführt werden.

Das dafür benötigte Modellsetup wurde jedoch im Berichtszeitraum fertiggestellt und ausführliche Skalierungstests wurden damit auf Mistral durchgeführt. Hierbei hat es sich gezeigt, dass es günstiger ist, ein großes regionales Gebiet in 0.0625° Auflösung statt zwei kleinere Gebiete in gleicher Auflösung zu nutzen, da sich dadurch der Rechen- und -kommunikationsaufwand für Interpolationen reduziert. Ein verbleibendes Problem ist jedoch die Wartezeit der unterschiedlichen Modellinstanzen aufeinander, welche nur noch bedingt reduziert werden kann. Leider unterstützt das Allinea "map" Werkzeug MPMD Anwendungen nur rudimentär, weshalb weitergehende Analysen des Laufzeitverhaltens derzeit noch nicht möglich sind. Der Kontakt der DKRZ Benutzerberatung mit Allinea besteht diesbezüglich aber bereits. Da bei räumlich hoch aufgelösten Simulationen Ausgaben mit hoher zeitlicher Auflösung wünschenswert sind, stellt zudem das Fehlen einer korrekt funktionierenden parallel-netCDF Lösung eine Performancelimitierung dar.

Auf Basis dieses Modellsetups läuft aktuell eine erste Simulation welche den Zeitraum der **HALO EMeRGe-Europe**¹ Kampagne abdeckt (Juli 2017). Mit EMeRGe-Europe wurden spezifische atmosphärenchemische Fragestellungen untersucht. Dadurch eignen sich die Messdaten hervorragend für weiterführende Prozessstudien mit dem o.a. Modellsetup. Bei der bisherigen Simulationen zu EMeRGE wurde zunächst auf die dritte Verfeinerung verzichtet und nur zwei Nestingstufen (0.44° und 0.11° über Europa, siehe Abbildung 1) verwendet. Sobald die Simulation fertiggestellt ist, folgen erste Auswertungen sowie ein Vergleich mit den Beobachtungsdaten. Die verwendete "tagging"- Methode sowie zusätzliche diagnostische Tracer aus Punktquellen helfen dabei insbesondere bei der Interpretation der Messdaten. Für 2018 sind weitere Simulationen mit höherer Auflösung sowie angepassten Emissionskatastern geplant (siehe Antrag für 2018).

Da die ursprünglich beantragten Simulationen nicht wie geplant durchgeführt werden konnten, wurden stattdessen zwei Simulationen mit einer Verfeinerung über Europa durchgeführt, um eine Erweiterung des "tagging"-Verfahrens zu evaluieren. Eine erste Publikation, in welcher diese Simulationsergebnisse eingeflossen sind, wurde bei GMD(D) eingereicht (*Rieger et al. (2018)*, siehe auch Projekt 80).

(1.2) Um den Luftverkehrseffekt mit Flugzeugmessungen im Rahmen der Projekte **FORUM-AE** (EU) und **WeCare** (DLR) zu untersuchen, wurden MECO(1) Simulationen mit unterschiedlichen vertikalen Auflösungen durchgeführt. Es wurden sowohl Sensitivitätssimulationen mit verschiedenen Emissionskatastern durchgeführt, als auch rein dynamische Simulationen (d.h. ohne Chemie) für die Modellevaluation: Im Hinblick auf die Untersuchung der Klimawirkung des Luftverkehrs spielt die regionale Verteilung der Emissionen eine wichtige Rolle. Aus diesem Grund wurden Sensitivitätssimulationen für Luftverkehrsemissionen in unterschiedlichen Flughöhen und geographischen Regionen durchgeführt. Es zeigte sich, dass besondere Sorgfalt auf die vertikale Verteilung der Emissionen gelegt werden muss. Für die Luftverkehrsstudien wurde ein MECO(1)-setup entwickelt, das COSMO mit 61 Schichten in EMAC nested, die einen Oberrand in 40 km (anstatt 24 km) Höhe hat. Mit diesem MECO(1)-setup (L90/L61) wurden rein dynamische Simulationen (d.h. ohne Chemie) für die 2000er Jahre durchgeführt, um die Modellmeteorologie zu evaluieren. Ergebnisse wurden beim HALO Symposium, Oberpfaffenhofen (März 2017), beim FORUM-AE Abschlusstreffen, Paris (Juni 2017) und beim EMAC Symposium, Mainz (Juni 2017) vorgestellt.

1 Effect of Megacities on the Transport and Transformation of Pollutants on the Regional to Global Scales (<http://www.iup.uni-bremen.de/emerge/home/home.html>)

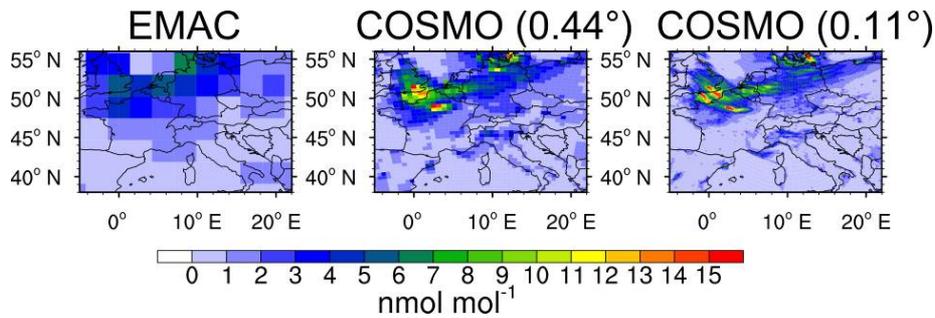


Abbildung 1: Schnappschuss des bodennahen NO_x Mischungsverhältnisses (in nmol mol⁻¹) aus den MECO(2) Simulationen für die EMeRGE-Europa Kampagne. Gezeigt sind die Ergebnisse für allen drei Modellinstanzen.

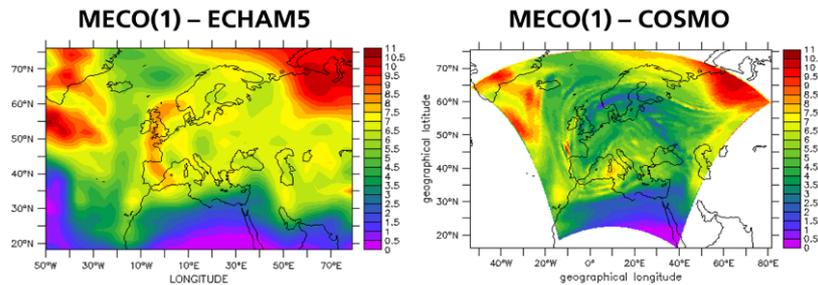


Abbildung 2: PV Analyse auf der 340 K Isentrope in MECO(1) am 26 März 2014 bei 250hPa. EMAC(ECHAM5) (T42L90MA, links) verglichen mit der eingeschachtelten Instanz COSMO (0,44°, rechts). Die feiner aufgelöste Simulation zeigt auf synoptischer Skala Strukturen des Transport von Luftmassen aus arktischen Regionen in den Nordatlantischen Flugkorridor.

(1.3) Im Rahmen des BMBF finanzierten Projektes AIRSPACE² zur Bestimmung von Methanquellen und -senken wurde zudem ein Vorhersagesystem zur Begleitung der CoMet-0.5 Kampagne (August 2017) aufgesetzt. Hierfür wurde ein MECO(3) setup mit drei Nestingschritten (Europa 0.44°, Zentral-Europa 0.0625°, Polen 0.025°) aufgesetzt. EMAC wurde gegen die ECMWF Vorhersagedaten relaxiert ("nudged"). Dabei wurde alle zwölf Stunden eine Vorhersage für die nächsten 5 Tage automatisiert angestoßen. Fokus der Vorhersage war die Ausbreitung von Methan aus Kohleminenlüftungsschächten im Zielgebiet (Oberschlesien). Dafür wurden sowohl das gesamte Methan mithilfe einer vereinfachten Methanchemieparameterisierung, als auch mittels passiver Tracer das Methan aus den Schächten der Kohleminen simuliert (siehe Abbildung 3).

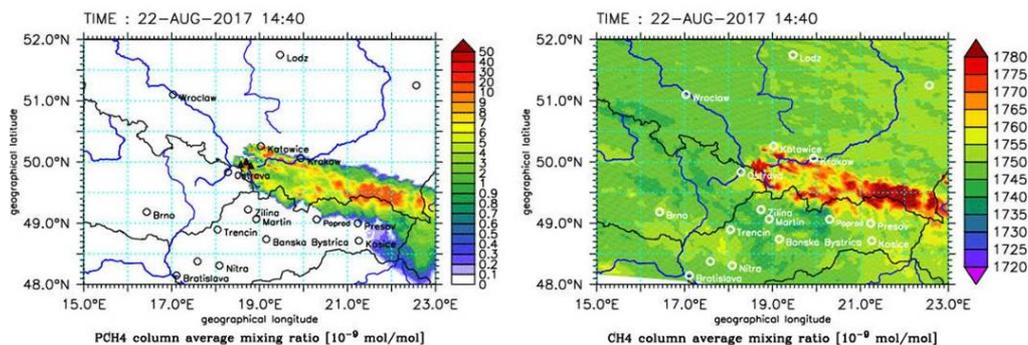


Abbildung 3: Schnappschuss der Simulationsergebnisse für die COMET-0.5 Vorhersage. Links: Mischungsverhältnis des passiven Tracers welcher nur die Emissionen der Kohleminen sieht, rechts das Mischungsverhältnis von Methan, inklusive des Hintergrunds. Dargestellt ist jeweils das säulengemittelte Mischungsverhältnis in nmol mol⁻¹.

In 2017 wurden folgende Publikationen veröffentlicht bzw. eingereicht, für welche in den vergangenen Jahren Rechenzeit auf 617 genutzt wurde:

Grewe, V., Tsati, E., Mertens, M., Frömming, C., & Jöckel, P.: Contribution of emissions to concentrations: the TAGGING 1.0 submodel based on the Modular Earth Submodel System (MESSy 2.52), *Geoscientific Model Development*, 10, 2615–2633, doi: 10.5194/gmd-10-2615-2017, URL <https://www.geosci-model-dev.net/10/2615/2017/> (2017)

Mertens, M. B.: Contribution of road traffic emissions to tropospheric ozone in Europe and Germany, Ph.D. thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, URL <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bvb:19-207288> (2017)

Mertens, M., Grewe, V., Rieger, V. S., and Jöckel, P.: Revisiting the contribution of land transport and shipping emissions to tropospheric ozone, *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/acp-2017-747>, in review (2017)

Rieger, V. S., Mertens, M., and Grewe, V.: An advanced method of contributing emissions to short-lived chemical species (OH and HO₂): The TAGGING 1.1 submodel based on the Modular Earth Submodel System (MESSy 2.53), *Geosci. Model Dev. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/gmd-2017-227>, in review, (2017).