

Project: **617**

Project title: **Multiscale Earth System Chemistry Modelling**

Principal investigator: **Patrick Jöckel**

Report period: **2020-01-01 to 2020-12-31**

## 1.1 Ozonchemie Europa/Asien

Im Rahmen des **DLR Projekts TraK** und begleitend zu den **HALO EMeRGe**-Europa und Asien Messkampagnen, werden Simulationen durchgeführt, welche die unterschiedlichen Regime der Ozonchemie und die Luftqualität in Europa und Asien direkt miteinander vergleichen. Im Jahr 2020 wurden zahlreiche Testsimulationen im Projekt 617 für die geplante Referenzsimulation (Zeitraum: 01.12.2016 - 01.01.2019) durchgeführt. Hierbei wurden anfangs zu Testzwecken nur EMAC-Simulationen, nachfolgend dann mehrere kurze Zeiträume (jeweils Dezember 2016) mit MECO(4), also mit zusätzlich 4 Instanzen des COSMO/MESSy Modells gerechnet (je zwei Instanzen mit 50 bzw. 12 km für Europa und Asien).

Im Juli diesen Jahres wurde die geplante Referenzsimulation gestartet. Aufgrund unplausibler Ergebnisse musste diese Simulation jedoch Ende August des Simulationsjahres 2017 abgebrochen werden. Die Analyse ergab, dass die Ergebnisse aufgrund eines fehlerhaften Emissionskatasters falsch waren. Dieser Fehler im Kataster wurde mittlerweile behoben.

Aktuell werden Testsimulationen mit dem globalen Modell gerechnet, um die Verbesserungen zu kontrollieren. Sobald dies erfolgreich abgeschlossen ist, wird die 2-jährige Referenzsimulation wie oben beschrieben erneut gestartet. Das Ergebnis eines ersten Tests ist in Abbildung 1 gezeigt.

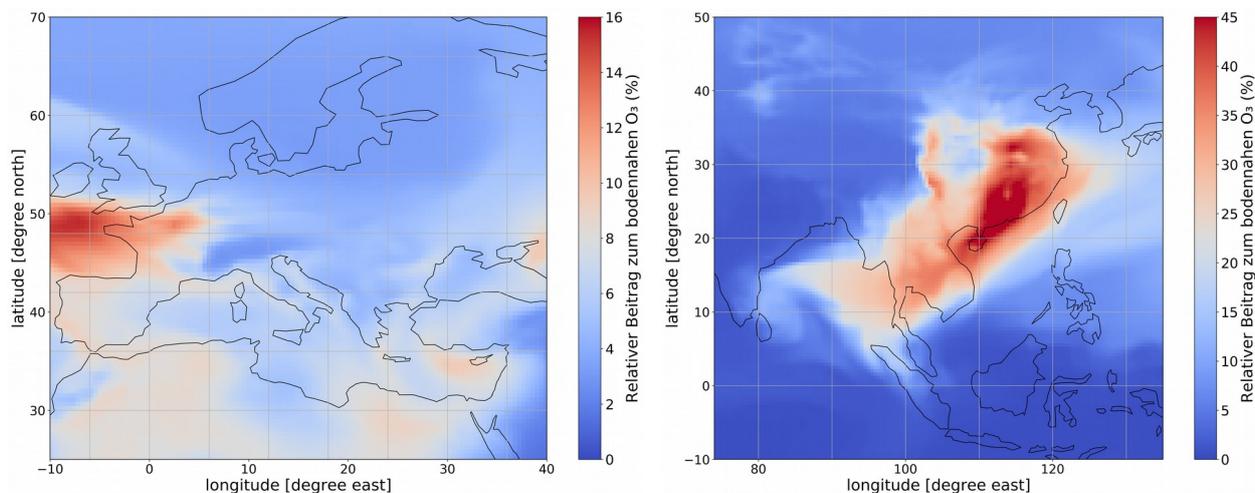


Abb. 1: Relativer Beitrag der anthropogenen EU Emissionen (ohne Verkehr) zum bodennahen Ozon in der EU (links) und der relative Beitrag der anthropogenen Emissionen aus Südostasien (ohne Verkehr, rechts) zu bodennahem Ozon (%) in Südostasien am 1. Dezember 2016 simuliert mit COSMO/MESSy (0.44°).

## 1.2 Simulationen zur 3DO Messkampagne / 1.3 Multiskalensimulationen zu Aerosol

Aufgrund von Engpässen beim Personal und der zusätzlich benötigten Rechenzeit für die kurzfristig durchgeführte BlueSky Kampagne (siehe 1.6) wurden keine Simulationen durchgeführt.

## 1.4 Regionale Quellen und Senken von Methan

Im Rahmen des vom BMBF geförderten Projektes (Förderkennzeichen 01LK1701A) **AIRSPACE** (Aircraft remote sensing of greenhouse gases with combined passive and active instruments) wurde das Vorhersage- und Analysesystem MECO(n) getestet und evaluiert. Im Jahr 2020 wurde der Kampagnenzeitraum nochmals mit dem zusätzlichen Submodell CH<sub>4</sub> (*Winterstein and Jöckel, 2020, in review*) nachgerechnet, welches Methanisotopologie und die zugehörigen Fraktionierungsprozesse berücksichtigt. Dabei wurde die Anwendbarkeit des Submodells auf regionalen Skalen getestet. Zusätzlich zum Methanmischungsverhältnis wurden während der

Kampagne (CoMet 1.0) auch Kohlenstoff- und Wasserstoffisotope des Methans gemessen und für den Vergleich mit MECO(n) bereitgestellt. In einem ersten Schritt wurden drei verschiedene Isotopensignaturen für die Methanemissionen aus Punktquellen im Oberschlesischen Kohlebecken (Untersuchungsgebiet der Kampagne) angenommen. Dafür wurden drei Analysesimulationen von jeweils 2,5 Monaten (1 Monat Kampagne, 1,5 Monate Spin-Up) inklusive der Isotopologie simuliert. Die Isotopensignatur der Methanabgasfahnen änderte sich in allen Simulationen relativ zum Hintergrund. Der erste Vergleich mit den Beobachtungen („flask samples“) entlang der Flugwege zeigte jedoch, dass es noch Verbesserungspotenzial gibt. In einem zweiten Schritt wurde die Simulation mit skaliertem delta-<sup>13</sup>C-Hintergrund und danach mit detaillierten Informationen zu den Emissionsraten der einzelnen Punktquellen und den beobachteten Isotopensignaturen der Punktquellen nachgerechnet. Hierfür wurden zwei weitere Analysesimulationen von je 2,5 Monaten durchgeführt. Der Vergleich mit den Messungen zeigt, dass der simulierte delta-<sup>13</sup>C-Hintergrund gut zu den Beobachtungen passt. Derzeit werden die Isotopensignaturen einzelner Emitter analysiert.

### 1.5 CH4-TO-GO-Forecasts

Derzeit werden im Projekt 617 Vorhersagen für die **CH4-TO-GO-EUROPE** Messkampagne der **DLR Falcon** gerechnet. Hierfür wurde eine Modellkonfiguration erstellt, in welcher EMAC global mit T42L90MA Auflösung betrieben wird. Darin eingeschachtelt gibt es drei COSMO-CLM/MESSy-Verfeinerungen mit 0.44°, 0.0625° sowie 0.025°. Die am feinsten aufgelöste Instanz überdeckt dabei Italien sowie die Balkanregion. Es werden Vorhersagen für SO<sub>2</sub> (siehe Abbildung 2) und CH<sub>4</sub> Punktquellen durchgeführt, welche im Rahmen der Messkampagne beprobt werden sollen. Die Vorhersagen laufen bereits seit Mitte August im Testbetrieb und seit Anfang Oktober im operationellen Betrieb. Das Ende des Vorhersagebetriebs ist für November geplant.

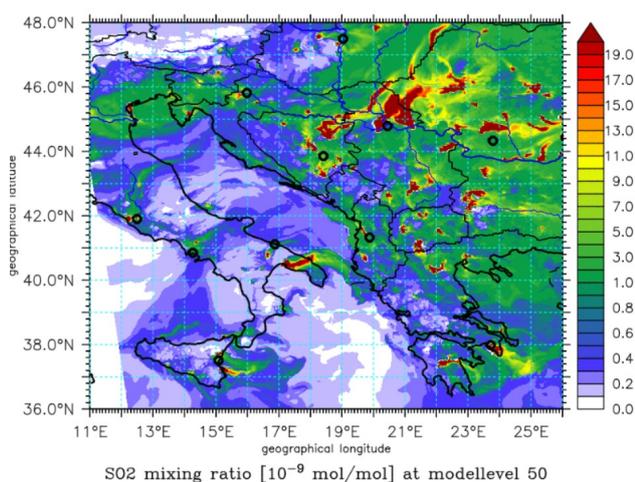


Abbildung 2: Schnappschuss der SO<sub>2</sub>-Vorhersagen CH4-TO-GO-EUROPA.

### 1.6 BLUESKY Forecasts

Im Mai/Juni diesen Jahres wurde sehr kurzfristig eine Messkampagne mit **HALO** und der **DLR Falcon** durchgeführt, um die Auswirkungen der COVID-19 Pandemie bedingten Emissions-Reduktionen auf die Atmosphäre zu untersuchen. Für diese Kampagne wurde ad-hoc unser MECO(n)-basiertes Vorhersagesystem eingerichtet. Die Modellkonfiguration umfasst EMAC in T42L90MA Auflösung sowie einer Verfeinerung über Nordamerika und Europa mit 0.44°. In beiden Instanzen wurde die Atmosphärenchemie simuliert und es kam die TAGGING Methode zur Untersuchung der einzelnen Beiträge (Quellen) zu Ozon zum Einsatz. Die Vorhersagen waren aktiv von Mai bis Juni, wobei jeweils eine Vorhersage pro Tag gerechnet wurde. Zusätzlich waren diverse Tests und eine Spin-Up Simulation nötig. Die hierfür benötigt Rechenzeit wurde für 2020 nicht beantragt, ein Teil jedoch im Rahmen der Nachbeantragung. Die tatsächlich benötigte Rechenzeit war jedoch höher als die Rechenzeit, welche genehmigt wurde.

## **Publikationen:**

Klausner, T., Mertens, M., Huntrieser, H., Galkowski, M., Kuhlmann, G., Baumann, R., Fiehn, A., Jöckel, P., Pühl, M., & Roiger, A.: Urban greenhouse gas emissions from the Berlin area: A case study using airborne CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> in situ observations in summer 2018, *Elem. Sci. Anth.*, 8(1), p.15, doi: 10.1525/elementa.411, URL <http://doi.org/10.1525/elementa.411> (2020)

Nickl, A.-L., Mertens, M., Roiger, A., Fix, A., Amediek, A., Fiehn, A., Gerbig, C., Galkowski, M., Kerkweg, A., Klausner, T., Eckl, M., & Jöckel, P.: Hindcasting and forecasting of regional methane from coal mine emissions in the Upper Silesian Coal Basin using the online nested global regional chemistry–climate model MECO(n) (MESSy v2.53), *Geoscientific Model Development*, 13, 1925–1943, doi: 10.5194/gmd-13-1925-2020, URL <https://www.geosci-model-dev.net/13/1925/2020/> (2020)

Winterstein, F. and Jöckel, P.: Methane chemistry in a nutshell – The new submodels CH<sub>4</sub> (v1.0) and TRSYNC (v1.0) in MESSy (v2.54.0), *Geosci. Model Dev. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/gmd-2020-137>, in review, 2020.

## **Sonstiges:**

*Die zur Zeit des Berichtes verbleibende Rechenzeit wird mit den geplanten Simulationen dieses Jahr voraussichtlich komplett aufgebraucht.*