Projekt: id0853
Berichtszeitraum: 01.01.2021 - 31.10.2021
Projekttitel: Earth System Chemistry Integrated Modelling (ESCiMo)
Federführender Wissenschaftler: Dr. Patrick Jöckel

Im o.a. Bewilligungszeitraum wurden weitere Simulationen mit EMAC für die "Chemistry Climate Model Initiative" Phase 2 (CCMI-2) durchgeführt. Diese sind in Tabelle 1 aus dem Antrag und in Tabelle 2 zusammen mit den tatsächlich verwendeten Ressourcen gelistet.

Simulation	Setup	# years	node-h / year	total node-h	/work [TByte /year]	/work [TByte]	/arch [TByte /year]	/arch [TByte]
RD1-base-01	T42L90MA 1960-2018 1950-2019	59,0 70,0	237,0	0	0,17	0,00	2,65	0,00
RD1SD-base-01	T42L90MA 1960-2018 1979-2019	59,0 41,0	280,0	0	2,26	0,00	4,34	0,00
RD1SD-base-01a	T42L90MA, 2010	1,0						
RD1SD-base-01b	T42L90MA, 2010	1,0						
RD1-base-02	T42L47MA 1960-2018	59,0	175,0	10325	0,08	4,72	1,43	84,37
RD2-base-01	T42L90MA 2000-2100	101,0	237,0	23937	0,17	17,17	2,65	267,65
RD2-base-02	T42L47MA 2000-2100	101,0	175,0	17675	0,08	8,08	1,43	144,43
RD2-oce-01	T42L47MA/GR30L40 2000-2100, base scenario	101,0	180,0	18180	0,11	11,11	1,45	146,45
RD2-oce-02	T42L47MA/GR30L40 2000-2100 scenario 1	101,0	180,0	18180	0,11	11,11	1,45	146,45
RD2-oce-03	T42L47MA/GR30L40 2000-2100 scenario 2	101,0	180,0	18180	0,11	11,11	1,45	146,45
RD2-oce-04	T42L47MA/GR30L40 2000-2100 scenario 3	101,0	180,0	18180	0,11	11,11	1,45	146,45
SD1SD-base-01	T42L90MA 2000-2020	21,0	280,0	5880	2,26	47,46	4,34	91,14
C2-4xCO2rdO3	T42L90MA (ohne Chemie)	60,0	25	1500	0,003	0,18	0,661	39,66
ERA-05 „nudging“ Daten	1950-1978, 2020/06-12	29,6			3,9	115,40	3,9	115,40
Datenbestand ERA-05 Daten	(siehe Text)					125,00		
Datenbestand	für die weitere Auswertung im Rahmen von CCMI bzw. zum Übertrag in die CERA Datenbank (siehe Text und nächste Tabelle)					230,08		

Tabelle 1: Übersicht über die EMAC Simulationen im Projekt ESCiMo im Jahr 2021. Die grün unterlegten Simulationen wurden wie geplant durchgeführt. Die grau unterlegten Zeilen zeigen die Simulationen aus dem Antrag, die nicht durchgeführt wurden. Die blau unterlegten Simulationen wurden stattdessen durchgeführt.

Beschreibungen und Begründungen:

- Bei den zusätzlichen Simulationen **RD1SD-base-01a** und **RD1SD-base-01b** handelt es sich um Sensitivitätssimulationen zur Bestimmung des atmosphärischen Schwefelbudgets. Hierzu wurde in **01a** eine zusätzliche Diagnostik zur Bestimmung des „wet-scavenging“ verwendet und in **01b** die Flüssigphasenchemie im Modell um die explizite Darstellung zusätzlicher Schwefelverbindungen erweitert. Es konnte damit gezeigt werden, dass das Schwefelbudget in EMAC geschlossen ist und die einzelnen Senkenbeiträge (nasse und trockene Deposition, Sedimentation) konnten bestimmt werden.
- Die Simulationen in **T42L47MA** Auflösung wurden nicht durchgeführt, da das ESCiMo Konsortium die Strategie geändert hat: In Zukunft sollen alle Simulationen konsistent in der T42L90MA Auflösung durchgeführt werden, auch die Simulationen mit gekoppeltem Ozean. Die erhöhten Ressourcenanforderungen (node-h und Speicherplatz) werden durch die bessere, direkte Vergleichbarkeit (SST/SIC „forced“ vs. gekoppeltes Ozeanmodell) gerechtfertigt, zudem wird die Dynamik der Atmosphäre (vor allem der Stratosphäre) durch die feinere vertikale Auflösung (L90MA) realistischer dargestellt. Außerdem wird die Zahl der Simulationen insgesamt reduziert, da vergleichende Simulationen T42L90MA (ohne Ozeanmodell) – T42L47MA (ohne Ozeanmodell) – T42L47MA (mit Ozeanmodell) entbehrlich werden.

Dieser Strategiewechsel erfordert zunächst jedoch eine Parameteroptimierung („tuning“) des gekoppelten Modellsystems in T42L90MA/GR30L40 Auflösung. Diese Arbeiten sind aber ohnehin nötig, weil wir gerade dabei sind EMAC mit einem alternativen Strahlungsschema auszurüsten (mehr dazu im Antrag für den nächsten Antragszeitraum).

- Die Simulation **RD2-base-01** konnte bisher nicht durchgeführt werden, weil die genaue Definition der Ref-D2 Simulation sowie einige der notwendigen Randbedingungen von CCMi2 nicht rechtzeitig zur Verfügung gestellt werden konnten. Inzwischen liegt die Definition vor und die Randbedingungen werden für EMAC z.Zt. aufbereitet. Die Ressourcen für diese Simulationen werden somit für den nächsten Antragszeitraum neu beantragt.
- Die Simulation **SD1SD-base-01** wurde nicht durchgeführt, da bereits die RD1SD-base-01 Simulation mit der neuesten Modellversion (v2.55.0) durchgeführt werden konnte und ein Vergleich somit nicht mehr nötig war.
- Die Simulation **C2-4xCO2rdO3** wurde noch nicht durchgeführt. Derzeit werden die 4 hierfür im Jahr 2020 durchgeführten Simulationen im Rahmen einer Masterarbeit ausgewertet. Die Ergebnisse erfordern momentan die zusätzliche Simulation nicht und die Vorbereitung für die Simulation (Erzeugung des Ozonfeldes) konnte aus damit verbundenen Zeitgründen noch nicht durchgeführt werden. Es ist jedoch anzunehmen, dass die Simulation im weiteren Verlauf der Analyse noch herangezogen werden muss. Im Antrag für 2022 werden die Ressourcen für die Simulation daher erneut beantragt.
- Die Bereitstellung der **ERA5** basierten „nudging“-Daten für EMAC wurde fast wie geplant weitergeführt. Allerdings wurden vom ECMWF für die Jahre 2000 – 2006 neue, korrigierte Daten (ERA5.1) zur Verfügung gestellt. Die Prozessierung dieser Daten wurde, in Vorbereitung für die Simulation **RD1SD-base-01**, vorgezogen. Ebenso die Aktualisierung der Zeitreihe bis 2021/02. Die Vorprozessierung (Schritt 1, auflösungsunabhängig) des ursprünglich geplanten Zeitraumes 1950 – 1978 konnte nicht gleichzeitig durchgeführt werden, da der notwendige Speicher unter /work im letzten Antrag nicht genehmigt wurde. Die notwendigen Ressourcen werden somit für den nächsten Antragszeitraum erneut beantragt.

simulation	resolution	number of simulated years	node-h / year	data size /arch [TByte/year]	Node-h (Broadwell, 36c)	data size /arch [TByte]
RD1-base-01	T42L90MA	70	237,9	3,42	16651	239,35
RD1SD-base-01	T42L90MA	41	270,7	5,73	11097	234,78
RD1SD-base-01a	T42L90MA	1	269,3	5,47	269	5,47
RD1SD-base-01b	T42L90MA	1	330,7	6,37	331	6,37
„nudging“ Daten						
ERA5.1 (2000 – 2006)	RAW	7		1,15		8,05
	PRE	7		1,82		12,7148
	T42L90MA	7				0,11813
	T42L41DLR	7				0,05603
	T63L31ECMWF	7				0,0955336
	T63L90MA	7				0,259921
	T106L90MA	7				0,722027
ERA5 (2000 – 2020)	RAW	1				1,15138
	PRE	1				1,81995
	T42L90MA	1				0,0169087
	T42L41DLR	21				0,160112
	T63L31ECMWF	21				0,272964
	T63L90MA	13				0,48274
	T106L90MA	8				0,825376
SUMME 2021					28348	512,72

Tabelle 2: Übersicht über die verbrauchten Ressourcen im Jahr 2021 bis zum Stichtag 15.07.2021.

Zusätzlich wurden bis zum Stichtag 593 node-h für Vor- und Nachprozessierung, Testsimulationen, "debugging" und die Vorbereitung weiterführender Modellsetups verwendet.

Die Aufbereitung und der "upload" der geforderten Daten für CCMI-2 wurde in 2021 begonnen. Zudem wurde die Übertragung der CCMI-1 Daten von /arch nach /doku bzw. in die CERA Datenbank vorläufig abgeschlossen und es konnte ein weiterer DOI vergeben werden:

- <https://doi.org/10.26050/WDCC/RC1> (bereits 2020)
- <https://doi.org/10.26050/WDCC/RC2> (bereits 2020)
- <https://doi.org/10.26050/WDCC/RC1SD> (2021)

Ausblick

Im nächsten Bewilligungszeitraum (d.h. 2022) sollen im Rahmen dieses Projektes die Simulationen für den nationalen Beitrag zu CCMI-2 weitergeführt werden. Dies sind in einem nächsten Schritt insbesondere je ein 3er Ensemble aus Projektionen 1950-2100 (RD2-base), einmal mit vorgeschriebenen SST/SIC und einmal mit gekoppeltem Ozeanmodell. Zudem soll eine weitere „specified dynamics“ Simulation unter Einbeziehung eines detaillierten troposphärischen Aerosol-Submodells durchgeführt werden. Dazu ist es auch notwendig, die Vorprozessierung der ERA-5 Daten weiterzuführen. Darüber hinaus soll die Übertragung der Daten von /arch nach /doku bzw. in die CERA Datenbank für die Simulationen der Phase 2 von CCMI begonnen werden.

Weitere **Publikationen**, die auf den Daten des ESCiMo-Projektes beruhen, sind erschienen:

Beirle, S., Borger, C., Dörner, S., Eskes, H., Kumar, V., de Laat, A., & Wagner, T.: Catalog of NO_x emissions from point sources as derived from the divergence of the NO₂ flux for TROPOMI, *Earth System Science Data*, 13, 2995–3012, doi: 10.5194/essd-13-2995-2021, URL <https://essd.copernicus.org/articles/13/2995/2021/> (2021)

Pisoft, P., Sacha, P., Polvani, L. M., Ael, J. A., de la Torre, L., Eichinger, R., Foelsche, U., Huszar, P., Jacobi, C., Karlicky, J., Kuchar, A., Miksovsky, J., Zak, M., & Rieder, H. E.: Stratospheric contraction caused by increasing greenhouse gases, *Environmental Research Letters*, URL <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1748-9326/abfe2b> (2021)

Dietmüller, S., Garny, H., Eichinger, R., & Ball, W. T.: Analysis of recent lower-stratospheric ozone trends in chemistry climate models, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21, 6811–6837, doi: 10.5194/acp-21-6811-2021, URL <https://acp.copernicus.org/articles/21/6811/2021/> (2021)

Garfinkel, C. I., Harari, O., Ziskin Ziv, S., Rao, J., Morgenstern, O., Zeng, G., Tilmes, S., Kinnison, D., O'Connor, F. M., Butchart, N., Deushi, M., Jöckel, P., Pozzer, A., & Davis, S.: Influence of the El Niño–Southern Oscillation on entry stratospheric water vapor in coupled chemistry–ocean CCM1 and CMIP6 models, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21, 3725–3740, doi: 10.5194/acp-21-3725-2021, URL <https://acp.copernicus.org/articles/21/3725/2021/> (2021)

Sheese, P. E., Walker, K. A., Boone, C. D., Degenstein, D. A., Kolonjari, F., Plummer, D., Kinnison, D. E., Jöckel, P., & von Clarmann, T.: Model estimations of geophysical variability between satellite measurements of ozone profiles, *Atmospheric Measurement Techniques*, 14, 1425–1438, doi: 10.5194/amt-14-1425-2021, URL <https://amt.copernicus.org/articles/14/1425/2021/> (2021)

Karagodin-Doyennel, A., Rozanov, E., Kuchar, A., Ball, W., Arsenovic, P., Remsberg, E., Jöckel, P., Kunze, M., Plummer, D. A., Stenke, A., Marsh, D., Kinnison, D., & Peter, T.: The response of mesospheric H₂O and CO to solar irradiance variability in models and observations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21, 201–216, doi: 10.5194/acp-21-201-2021, URL <https://acp.copernicus.org/articles/21/201/2021/> (2021)

Archibald, A., Neu, J., Elshorbany, Y., Cooper, O., Young, P., Akiyoshi, H., Cox, R., Coyle, M., Derwent, R., Deushi, M., Finco, A., Frost, G., Galbally, I., Gerosa, G., Granier, C., Griffiths, P., Hossaini, R., Hu, L., Jöckel, P., Josse, B., Lin, M., Mertens, M., Morgenstern, O., Naja, M., Naik, V., Oltmans, S., Plummer, D., Revell, L., Saiz, Saxena, P., Shin, Y., Shahid, I., Shallcross, D., Tilmes, S., Trickl, T., Wallington, T., Wang, T., Worden, H., & Zeng, G.: Tropospheric Ozone Assessment Report: A critical review of changes in the tropospheric ozone burden and budget from 1850 to 2100, *Elementa: Science of the Anthropocene*, 8, doi: 10.1525/elementa.2020.034, URL <https://doi.org/10.1525/elementa.2020.034> (2020) Zhao, Y., Saunio, M., Bousquet, P., Lin, X., Berchet, A., Hegglin, M. I., Canadell, J. G., Jackson, R. B., Deushi, M., Jöckel, P., Kinnison, D., Kirner, O., Strode, S., Tilmes, S., Dlugokencky, E. J., & Zheng, B.: On the role of trend and variability in the hydroxyl radical (OH) in the global methane budget, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20, 13 011–13 022, doi: 10.5194/acp-20-13011-2020, URL <https://acp.copernicus.org/articles/20/13011/2020/> (2020)

Weitere Publikationen sind z.Zt. bereits in der Begutachtung bzw. in Vorbereitung.