

Project: **617**

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

Principal investigator: **Patrick Jöckel**

Report period: **2021-11-01 to 2022-10-31**

1.1 METHANE-TO-GO-AFRICA

Die METHANE-TO-AFRICA Kampagne mit dem Forschungsflugzeug **DLR Falcon**, finanziert von der **Climate and Clean Air Coalition (CCAC) unter dem Vorsitz des Umweltprogramms der Vereinten Nationen**, fand aufgrund von Terminkonflikten und den Auswirkungen der CORONA-Pandemie erst im September 2022 statt. Da die Kampagne somit teilweise zeitgleich mit der CoMET 2.0 Kampagne stattfand, wurden keine Vorhersagen durchgeführt da hierfür die Personalressourcen nicht ausreichend waren. Zur Zeit wird das Set-Up für die geplanten Analysesimulationen vorbereitet. Wir erwarten jedoch, dass die Analysesimulationen für die Kampagne selbst erst 2023 durchgeführt werden.

1.2 METHANE-TO-GO-EUROPE

Die Arbeiten wurden zunächst auf der globalen Skala weiter durchgeführt und hier das globale Schwefelbudget auf Basis der Simulationsergebnisse im Projekt 853 (ESCiMo) analysiert. Zudem wurden die bereits durchgeführten Simulationen für den Flug am 7.11.2022 über dem Kohlekraftwerk Nikola Tesla in Serbien weiter analysiert und die Modelldaten mit Flugzeug gestützten in-situ Messungen sowie Beobachtungsdaten von Sentinel-5P verglichen. Da die Analysen des Schwefelbudgets auf der globalen Skala andauern, wurden keine weiteren Simulationen für die regionale Skala durchgeführt.

1.3 CIRRUS-HL

Für die Unterstützung der Analyse und Interpretation der im Rahmen der HALO CIRRUS-HL Kampagne erzielten flugzeuggetragenen atmosphärischen Messungen, wurden mit einem MECO(1) Set-Up basierend auf EMAC in T42L90MA und einer Verfeinerung über Nordeuropa mit 0,44° horizontaler Auflösung die geplanten Analysesimulationen (mit und ohne Emissionen aus dem Flugverkehr) vorbereitet. Hierfür wurde für den Kampagnenzeitraum sowie eine Einschwingzeit (April bis August 2021) zunächst eine Simulation mit voller Chemie mit dem globalen Modell EMAC durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulation liefern die Initialbedingungen und eine „Klimatologie“ strahlungsaktiver Spurengase für den „quasi chemistry transport model“ (QCTM) Modus der MECO(1)-Analysesimulationen für den Zeitraum (Juni bis August 2021) mit einer regionalen COSMO-Modellinstanz über Europa. Erste Ergebnisse der Simulation werden zur Zeit mit den in-situ Messungen auf HALO (high altitude and long range aircraft) verglichen. Abhängig von den Evaluationsergebnisse werden im vierten Quartal entweder eine angepasste Referenzsimulation oder weitere Analysesimulationen durchgeführt.

1.4 MAGIC

Die 14-tägige **MAGIC** Kampagne (Monitoring of Atmospheric composition and Greenhouse gases through multi-Instruments Campaigns) fand im August 2021 in Lappland statt. Bei mehreren Forschungsflügen von Kiruna (in Schweden) aus standen insbesondere Emissionen von natürlichen Methanquellen (Feuchtgebiete und Seen) im Fokus. Um die Genauigkeit der globalen Methanverteilung zu erhöhen, die auch Grundlage zur Berechnung der chemischen Reaktionen ist, wurden in die EMAC Instanz mit einer erhöhten spektralen Auflösung von T106L90MA zwei COSMO Instanzen mit 50 km und 7 km genestet (MECO(2)).

Es wurde eine Analysesimulation mit MECO(2) durchgeführt, in welcher, zusätzlich die Ausbreitung von Methan für zwei alternative Methanemissionskataster für Feuchtgebiete simuliert wurde. So kann sowohl der Einfluss von Methanemissionen aus Feuchtgebieten auf lokale Konzentrationsmaxima relativ zum Gesamtmethan qualitativ bestimmt werden, sowie der Einfluss der Unsicherheit verschiedener Emissionskataster auf die simulierten Methanmischungsverhältnisse abgeschätzt werden.

Vergleiche der Modellergebnisse mit in situ Beobachtungen können abhängig von den Bedingungen z.B. eine Evaluation der Emissionskataster oder eine Unterscheidung von lokalen

Emissionen und Methantransport ermöglichen. Korrekte Emissionskataster sind essentiell um den Einfluss des klimarelevanten Treibhausgases Methan in Klima-Chemiesimulationen untersuchen zu können. Die Auswertung der Ergebnisse dauert an. Eine Erweiterung der Analyse um ein Emissionskataster von Seeemissionen ist geplant.

1.5 CoMet 2.0 Arctic

Vom 6. August bis zum 15. September 2022 fand die Flugmesskampagne **CoMet 2.0 Arctic** mit Schwerpunkt auf Beprobung von CO₂ und CH₄ Emissionen aus natürlichen und anthropogenen Quellen statt. Während der Kampagne operierte **HALO** ausgestattet mit Fernerkundungs- und in situ Instrumentierung von der Basis Edmonton, Kanada aus. Details zur Kampagne sind unter <https://comet2arctic.de/> abrufbar.

Zur Flugplanung wurden zwei tägliche Vorhersagesimulationen mit dem MECO(1) Modellsystem berechnet. Die Modellkonfiguration bestand aus einer globalen EMAC Instanz in T106 Spektralaufösung mit 90 vertikalen Schichten und einer eingeschachtelten COSMO Instanz über Kanada, mit einer horizontalen Maschenweite von ca. 50 km. Die Vorhersagen wurden jeweils von den Daten einer analog aufgebauten Analysesimulation, die gegen IFS Analysen relaxiert wurde, initialisiert. Die Analysesimulation wurde vor Beginn der Messkampagne über einen Simulationszeitraum von 2 Monaten ab 1. Juni gestartet („Spin-Up“) und dann täglich mit den neusten IFS Analysen fortgesetzt. Die Analysesimulation lief parallel auf zwei Rechnern (u.a. Levante; ca. 6 Knotenstunden täglich), zusätzlich wurde eine der täglichen Vorhersagen auf Levante durchgeführt (täglich ca. 24 Knotenstunden plus ca. 1 Knotenstunde Prozessierung der Simulationsergebnisse).

Simulationsergebnisse der Vorhersagen wurden automatisiert visualisiert und über einen Webserver dem Vorhersage- und Kampagnenteam bereitgestellt.

Eine Neuerung bei der Kampagnenbegleitung während CoMet 2.0 Arctic war die Einbeziehung täglicher Analysen des GFAS (Global Fire Assimilation System; <https://www.ecmwf.int/en/forecasts/dataset/global-fire-assimilation-system>) in die Vorhersagesimulation zur besseren Einschätzung des Einflusses von Vegetationsfeuern auf die geplanten Messflüge.

Für Q4/2022 ist nun eine erste Analysesimulation geplant. Weitere sollen in 2023 folgen.

1.6 Optimierung des Vorhersagesystems

Aufgrund von Problemen bei der Vergabe der geplanten Masterarbeit wurden keine Arbeiten durchgeführt. Ressourcen für die Arbeiten wurden nicht erneut beantragt.

1.7 Auswertungen EMeRGe Messkampagne

Die Daten wurden weiter ausgewertet. Eine Übersichtspublikation zu der Kampagne und den durchgeführten Modesimulationen wurde veröffentlicht (Andrés Hernández et al., 2022). Zudem sind die Ergebnisse in die Publikation eingeflossen welche im Rahmen des Projekts 1063 durchgeführt wurde.

1.8 ROMEO Auswertung/Datenhaltung

Gemeinsam mit der Universität Utrecht wurden die Ergebnisse der Modellsimulationen weiter ausgewertet, wobei der Vergleich der gemessenen und simulierten meteorologischen Parameter im Vordergrund stand. Die MECO(n) Ergebnisse werden in diesem Rahmen auch mit Ergebnissen von COSMO-GHG und WRF verglichen.

Hinweis zu den verbrauchten Ressourcen:

Durch den Wegfall einiger geplanter Arbeiten (1.2 und 1.6) und der Verschiebung der Kampagne METHANE-TO-GO-AFRIKA (1.1) sind im ersten Quartal (Mistral) etwa 70 % und im zweiten Quartal (Levante) etwa 30 % der beantragten Rechenzeit verfallen. Im dritten Quartal wurde mehr Rechenzeit als beantragt verbraucht (Vorhersagen CoMeT 2.0) und wir erwarten, dass auch im vierten Quartal alle beantragte Rechenzeit abgerufen werden wird.

Im Rahmen von 617 wurden 2022 folgende Publikationen veröffentlicht:

Voigt, C., Lelieveld, J., Schlager, H., Schneider, J., Curtius, J., Meerkötter, R., Sauer, D., Bugliaro,

L., Bohn, B., Crowley, J. N., Erbertseder, T., Gro, S., Hahn, V., Li, Q., Mertens, M., Pöhlker, M. L., Pozzer, A., Schumann, U., Tomsche, L., Williams, J., Zahn, A., Andreae, M., Borrmann, S., Bräuer, T., Dörich, R., Dörnbrack, A., Edtbauer, A., Ernle, L., Fischer, H., Giez, A., Granzin, M., Grewe, V., Harder, H., Heinritzi, M., Holanda, B. A., Jöckel, P., Kaiser, K., Krüger, O. O., Lucke, J., Marsing, A., Martin, A., Matthes, S., Pöhlker, C., Pöschl, U., Reifenberg, S., Ringsdorf, A., Scheibe, M., Tadic, I., Zauner-Wieczorek, M., Henke, R., & Rapp, M.: Cleaner skies during the COVID-19 lockdown, *Bulletin of the American Meteorological Society*, doi: 10.1175/BAMS-D-21-0012.1, URL <https://journals.ametsoc.org/view/journals/bams/aop/BAMS-D-21-0012.1/BAMS-D-21-0012.1.xml>

Andrés Hernández, M. D., Hilboll, A., Ziereis, H., Förster, E., Krüger, O. O., Kaiser, K., Schneider, J., Barnaba, F., Vrekoussis, M., Schmidt, J., Huntrieser, H., Blechschmidt, A.-M., George, M., Nenakhov, V., Harlass, T., Holanda, B. A., Wolf, J., Eirenschmalz, L., Krebsbach, M., Pöhlker, M. L., Kalisz Hedegaard, A. B., Mei, L., Pfeilsticker, K., Liu, Y., Koppmann, R., Schlager, H., Bohn, B., Schumann, U., Richter, A., Schreiner, B., Sauer, D., Baumann, R., Mertens, M., Jöckel, P., Kilian, M., Stratmann, G., Pöhlker, C., Campanelli, M., Pandolfi, M., Sicard, M., Gómez-Amo, J. L., Pujadas, M., Bigge, K., Kluge, F., Schwarz, A., Daskalakis, N., Walter, D., Zahn, A., Pöschl, U., Bönisch, H., Borrmann, S., Platt, U., & Burrows, J. P.: Overview: On the transport and transformation of pollutants in the outflow of major population centres – observational data from the EMeRGe European intensive operational period in summer 2017, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22, 5877–5924, doi: 10.5194/acp-22-5877-2022, URL <https://acp.copernicus.org/articles/22/5877/2022/> (2022)