

Projekt: id0853
Berichtszeitraum: 01.11.2021 - 31.12.2022
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 im Jahr 2022 tatsächlich verwendeten Ressourcen gelistet.

Simulation	Setup	# years	node-h / year	total node-h	/work [TByte /year]	/work [TByte]	/arch [TByte /year]	/arch [TByte]
RD2-base-01a,b,c (3 ensemble members)	T42L90MA 1950-2100 (SST/SIC prescribed)	453,0	53	24009	0,23	104,19	3,44	1558,32
RD2-base-02a	T42L90MA 2000-2015	16						
RD2-oce-01a,b,c (3 ensemble members)	T42L90MA/GR30L40 1950-2100	453,0	61	27633	0,27	122,31	3,49	1580,97
RD1SD-aero-01	T42L90MA 1979-2020	42,0	106	4452	2,26	94,92	4,34	182,28
C2-4xCO2rdO3	T42L90MA (ohne Chemie)	60,0	16,6	996	0,003	0,18	0,661	39,66

Tabelle 1: Übersicht über die EMAC Simulationen im Projekt ESCiMo im Jahr 2022. Die grün unterlegten Simulationen wurden wie geplant, bzw. zum Teil durchgeführt. Die grau unterlegten Zeilen zeigen die Simulationen aus dem Antrag, die nicht durchgeführt wurden. Die blau unterlegten Simulationen wurden stattdessen bzw. zusätzlich durchgeführt.

Beschreibungen und Begründungen:

- Die „**baseline projection**“, ein Ensemble aus 3 Simulationen (**RD2-base-01a,b,c**), welche bereits im Jahr 2021 begonnen wurde, wurde wie geplant zu Ende geführt. Die Simulationen wurden mit vorgeschriebenen „sea surface temperature“ (SST) und „sea ice concentration“ (SIC) aus den MPI-ESM CMIP6 Simulationen (r1i1p1f1, r2i1p1f1, r3i1p1f1) durchgeführt. Die Bereitstellung der Daten im CCMI Repository (bei BADS) wurde begonnen, konnte jedoch noch nicht abgeschlossen werden. Die Überführung der Daten in die CERA-Datenbank bzw. nach /doku steht noch aus.
- Die Simulation **RD2-base-02a** wurde zusätzlich durchgeführt, um den Übergang von mistral auf levante zu überprüfen. Zu diesem Zweck wurde von check-pointing („restart“) Files von **RD2-base-01a** verzweigt und die Jahre 2000 – 2015, die zuvor auf mistral bereits berechnet wurden, noch einmal auf levante berechnet. Der Vergleich ergab keine signifikanten Änderungen, d.h. in diesem Fall Änderungen die größer waren als die Unterschiede zwischen den 3 Ensemble Mitgliedern. Dies war die Voraussetzung dafür, dass die auf mistral begonnenen **RD2-base-01a,b,c** Simulationen nahtlos auf levante fortgesetzt werden konnten (siehe auch Tabelle 2 zur Verteilung der Simulationen auf mistral und levante).
- Die zugehörige „baseline projection“ mit gekoppeltem Ozeanmodell (**RD2-oce-01a,b,c**), ebenfalls ein Ensemble aus 3 Simulationen, wurde zurückgestellt. Der Hauptgrund dafür ist, dass zur Zeit noch Arbeiten laufen, EMAC mit einem neuen Strahlungsschema auszustatten, welches eine realistischere Strahlungswirkung von Spurengasen und Aerosolen berechnet. Es ist

daher aus wissenschaftlicher Sicht wünschenswert und sinnvoll, die geplanten Simulationen mit dem neuen Strahlungsschema durchzuführen und keine Ressourcen mehr für die „alte“ Version aufzuwenden. Die technischen Arbeiten zur Implementierung des neuen Strahlungsschemas sind bereits erfolgt, aber die Parameteroptimierung („tuning“) des Modells bei Verwendung des neuen Strahlungsschemas ist noch nicht abgeschlossen. Es ist daher geplant für den kommenden Antragszeitraum noch einmal Ressourcen zu beantragen.

- Die **RD1SD-aero-01** Simulation („specified dynamics“, d.h. „nudged“ mit ERA-5 Daten des ECMWF) wurde unter der geänderten Bezeichnung **RD1SD-made3-01** zum Teil durchgeführt. Es wurden die Jahre 1998 bis 2002 (Februar) berechnet, um nach einer 2-jährigen Einschwingphase die Ergebnisse der Jahre 2000-2001 analysieren und evaluieren zu können. Die Analyse dieser Daten ist zum Zeitpunkt der Berichterstellung noch nicht abgeschlossen, erste Ergebnisse lassen aber darauf schließen, dass zusätzliche Änderungen am Modell-Setup bzgl. der Aerosole vorgenommen werden sollten. Es ist daher geplant für den nächsten Antragszeitraum noch einmal Ressourcen für eine „SD“-Simulation zu beantragen, die auch Aerosole umfasst.
- Die ursprünglich geplante **C2-4xCO2rdO3** Simulation wurde nicht durchgeführt. Diese Simulation war ursprünglich geplant, um die bisherigen Simulationen zum 4xCO2 Experiment zu ergänzen. Im Laufe der Analyse stellte sich jedoch heraus, dass die wissenschaftlichen Fragestellungen mit den bereits durchgeführten Simulationen hinreichend beantwortet werden konnten. Im Vordergrund der Ergebnisse steht dabei, dass die Ozon-induzierten Zirkulationsveränderungen die generelle Beschleunigung der stratosphärischen Zirkulation dämpfen. Die Studie hierzu ist derzeit bei Journal of Climate unter Begutachtung.

simulation	resolution	simulated years - in 2021 - mistral - levante	Node-h „mistral“ Broadwell compute nodes (36c)	Node-h „levante“ (128c)	data size /arch* [TByte]	data size /work [TByte]
RD2-base-01a	T42L90MA	1950-2008/11 2008/12-2066 2067-2099	18296,8	1708,17		34
RD2-base-01b	T42L90MA	1950-2001/08 2002/09-2060 2061-2099	18608,0	1927,58		34
RD2-base-01c	T42L90MA	1950-2001/05 2001/06-2059 2060-2099	18446,0	1993,11		34
RD2-base-02a	T42L90MA	--- --- 2000-2016		809,34		3,5
RD1SD-made3-01	T42L90MA	--- --- 1998-2002/02		447,37		15
SUMME 2022			55350,8	5628,86		120,5

Tabelle 2: Übersicht über die verbrauchten Ressourcen im Jahr 2022 bis zum Stichtag 26.10.2022.

*Die Bestimmung des Datenvolumens für einzelne Unterverzeichnisse im Archiv (/arch) war zum Zeitpunkt der Berichterstellung auf Grund von Problemen mit silk leider nicht möglich.

Zusätzlich wurden bis zum Stichtag 726 (levante) und 700 (mistral) 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 2022 weitergeführt, konnte jedoch noch nicht abgeschlossen werden.

Ausblick

Im nächsten Bewilligungszeitraum (d.h. 2023) sollen im Rahmen dieses Projektes die Simulationen für den nationalen Beitrag zu CCMI-2 weitergeführt werden. Dies sind in einem nächsten Schritt insbesondere das 3er Ensemble zu Projektionen 1950-2100 (RD2-oce) mit dem neuen Strahlungsschema und einem gekoppeltem Ozeanmodell. Zudem soll eine weitere „specified dynamics“ Simulation unter Einbeziehung eines detaillierten troposphärischen Aerosol-Submodells durchgeführt werden. Darüber hinaus soll die Übertragung der Daten von /arch nach /doku bzw. in die CERA Datenbank für die Simulationen der Phase 2 von CCMI weitergeführt werden.

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

Eleftheratos, K., Kapsomenakis, J., Fountoulakis, I., Zerefos, C. S., Jöckel, P., Dameris, M., Bais, A. F., Bernhard, G., Kouklaki, D., Tourpali, K., Stierle, S., Liley, J. B., Brogniez, C., Auriol, F., Diémoz, H., Simic, S., Petropavlovskikh, I., Lakkala, K., & Douvis, K.: Ozone, DNA-active UV radiation, and cloud changes for the near-global mean and at high latitudes due to enhanced greenhouse gas concentrations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22, 12 827–12 855, doi: 10.5194/acp-22-12827-2022, URL <https://acp.copernicus.org/articles/22/12827/2022/> (2022)

Hufnagl, L.: The Influence of Ozone Changes on the Stratospheric Dynamics in 4xCO₂ Climate Simulations, Master's thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, URL <https://elib.dlr.de/185531/> (2022)