

Project: **1063**

Project title: **Multiskalensimulationen von Verkehrseffekten auf Klima und Luftqualität**

Principal investigator: **Mariano Mertens**

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

### **1.1 Simulationen zum Einfluss der Verkehrsemissionen auf die Luftqualität in Europa und Asien**

Im Rahmen des **DLR Projektes TraK** wurden Simulationen zu den Beiträgen der Landverkehrsemissionen auf die Luftqualität in Europa durchgeführt. Hierfür wurden zwei Simulationen mit einem MECO(1) Set-Up mit einer Verfeinerung über Europa mit 50 km Auflösung inkl. der Quellzuordnungsmethode *TAGGING* auf **Mistral** durchgeführt, die wie folgt definiert waren:

- *Referenzsimulation mit regionalen TraK Emissionen für 2015*
- *Projektion für 2050 mit regionalen TraK Emissionen für 2050*

Die Emissionskataster wurden durch das Helmholtz-Zentrum Hereon zur Verfügung gestellt. Vergleichbare Simulationen mit den gleichen Emissionskatastern wurden ebenfalls von Hereon mit dem Chemie-Transport-Modell CMAQ durchgeführt. Die Ergebnisse von MECO(n) und CMAQ wurden im Rahmen des Projekts verglichen. Eine Publikation hierzu ist in Vorbereitung. Da die Emissionen später als geplant zur Verfügung gestellt wurden und in 2022 keine ausreichenden personellen Ressourcen zur Verfügung standen konnten die weiteren geplanten Simulationen für Europa nicht durchgeführt werden. Ebenso konnten die geplanten Simulationen über Asien im Projekt nicht durchgeführt werden, da entsprechende Emissionskataster bis Projektende nicht vorlagen.

### **1.2 Ozonchemie Europa/Asien**

Im Rahmen der **Helmholtz Klima-Initiative REKLIM**, des **DLR Projekts TraK** und zur Begleitung der **HALO EMeRGe-Europa und -Asien Messkampagnen** waren für das Jahr 2022 Simulationen geplant, welche es ermöglichen die unterschiedlichen Regime der Ozonchemie und die Luftqualität in Europa und Asien direkt miteinander zu vergleichen. Geplant waren für 2022 hierfür folgende Simulationen:

1. *Sensitivitätssimulation mit einer verbesserten Darstellung von Stickoxidemissionen aus Böden (Parametrisierung nach Hudman et al., 2012)*
2. *Sensitivitätssimulation mit einer verbesserten Darstellung der biogenen VOC Emissionen mittels MEGAN*
3. *Neue Referenzsimulation für Levante*

Die Simulationen 1. und 2. sollten ursprünglich noch auf Mistral durchgeführt werden. Die notwendigen Entwicklungen und Evaluierungen dazu waren jedoch etwas verzögert. Es war daher absehbar, dass die Simulationen auf Mistral nicht mehr abgeschlossen werden können. Aus diesem Grunde wurden die Arbeiten ausgesetzt und Arbeiten für eine Publikation priorisiert (siehe 1.3).

Sobald Levante verfügbar war, wurden die Vorarbeiten für eine neue Referenzsimulation gestartet. Hierbei mussten zunächst ein Vielzahl an Problemen (u.a. Decomposition- und Restartabhängigkeit) gelöst werden, welche durch die neuen Compiler verursacht wurden. Zudem treten, trotz mit „compute2“ auf Mistral vergleichbarer Menge an Speicher pro Kern, auf Levante vermehrt Abstürze durch den *OOM-Killer* (out-of-memory Killer). In engem Austausch mit dem DKRZ-Support konnten die Probleme mit Anpassungen der Ressourcenanforderungen an das Scheduling System deutlich reduziert werden. Zudem haben wir einen Workaround in der Modellkonfiguration implementiert. Dies hat viele Testsimulationen notwendig gemacht und der Start der neuen Referenzsimulation verzögerte sich entsprechend. Diese läuft nun jedoch seit Anfang September problemlos. Zudem arbeiten wir zur Zeit mit dem DKRZ Support daran mittels

ARM MAP, welches erst seit knapp 2 Wochen verfügbar ist, den Speicherverbrauch während der Modelllaufzeit zu analysieren und ggf. weiter zu optimieren.

Das Modellset-up für die 2. Simulation ist ebenfalls fertig entwickelt, so dass die Simulation nach der erfolgreichen Durchführung der Referenzsimulation (3.) in Q4/2022 gestartet werden kann. Einzig und allein die Durchführung der Sensitivitätssimulation mit einer verbesserten Berechnung der Stickoxidemissionen aus Böden (1.) wird 2022 nicht mehr gestartet werden können.

### **1.3 Datenhaltung Ozonchemie Europa/Asien**

Die vorhandenen Daten wurden im Rahmen einer Doktorarbeit weiterhin ausgewertet. Zudem wurde eine umfangreiche Publikation vorbereitet, in welcher die Simulationsergebnisse mit den Messdaten der **HALO EMERGe-Europa** Kampagne verglichen sowie die Quellen für Ozon über Europa im Detail untersucht wurden. Es ist geplant die Publikation im Q4/2022 einzureichen.

### **1.4 Sensitivitätsstudien zu NO<sub>x</sub> Emissionen des europäischen Landverkehrs**

Die vorhandenen Daten wurden weiter ausgewertet und eine Publikation vorbereitet. Erste Ergebnisse wurden auf der **Airquality Konferenz 2022** in dem Plenums-Vortrag mit dem Titel „**Influence of land transport emissions on ozone in Europe – What can we learn from combining impact and contribution analyses?**“ vorgestellt.

### **1.5 Einfluss von Schiffsemissionen auf die Luftqualität**

Im Rahmen des **BMBF finanzierten Projekts MAREMIS** (Förderkennzeichen, 01DP21008B, Laufzeit 08/2021 - 07/2023) wurden Simulationen zum Einfluss der Schiffsemissionen auf die Luftqualität in Hamburg und Singapur durchgeführt. Rechenzeit für diese Simulationen wurden nicht beantragt, aufgrund der Veränderungen/Verschiebungen in 1.1 und 1.2 standen aber genug Ressourcen zur Verfügung um diese Arbeiten durchzuführen. Konkret wurden MECO(n) Modellset-ups mit 1 km Auflösung für Hamburg sowie 10 km Auflösung für Singapur entwickelt. Für Singapur wurde die Auflösung zunächst beschränkt, da hierfür die Bereitstellung von feiner aufgelösten Emissionskatastern aussteht. Durchgeführt wurden mit diesen Set-Ups erste Simulationen um den Einfluss möglicher alternativer Treibstoffe (Methanol, LNG) zu untersuchen. Hierbei wurde jeweils eine Woche im Winter (11.02 – 17.02) und eine Woche im Sommer (17.7 – 24.7) ausgewählt. Zwei von insgesamt 6 Szenarien wurden bereits berechnet, zwei weitere werden dieses Jahr voraussichtlich noch durchgeführt. Die Modelldaten werden in den kommenden Monaten gemeinsam mit Industriepartnern in einen Demonstrator integriert um Stakeholdern Minderungsmöglichkeiten darzustellen.

### **1.6 Einfluss von Schiffsemissionen auf troposphärisches Ozon**

Im Rahmen des internationalen Netzwerks **Taskforce HTAP (Hemispheric Transport of Air Pollution)** wurde eine Simulation mit EMAC inklusive Tagging für 2000 – 2020 mit einer horizontalen Auflösung von T42 (~300 km) und 90 vertikalen Leveln bis 0.1 Pa und den CAMS-GLOB Emissionsdaten durchgeführt. Hierbei wurden insgesamt 12 verschiedene Quellregionen für die Schiffsemissionen unterschieden. Weitere Institute haben ähnliche Simulationen durchgeführt, welche nun im Rahmen von HTAP gemeinsam ausgewertet werden. Ein erster Vortrag mit dem Titel „Global model calculations of the effects of international ship emissions in different world regions“ wurde dazu auf der **Airquality Konferenz 2022** vorgestellt. Auch für diese Arbeiten wurden ursprünglich keine Ressourcen beantragt und Teile der Ressourcen aus 1.1/1.2 genutzt.

#### **Hinweis zu den verbrauchten Ressourcen:**

Aufgrund der oben beschriebenen Probleme und Verschiebungen in 1.2 sowie insbesondere durch den Wegfall vieler Simulationen in 1.1 sind vor allem im Q1 und Q2/2022 viele Knotenstunden (~90 % im Q1, 58 % in Q2) auf Mistral bzw. Levante verfallen. Im Q3 sind auf Levante nochmal 10928 (~29 %) Knotenstunden verfallen. Für das Q4 erwarten wir, dass die beantragten Ressourcen abgerufen werden können.