

Project: **1305**

Project title: **TPChange C07 – The composition of the global UTLS nowadays and at the end of the 21st century**

Principal investigator: **Moritz Witt**

Report period: **2022-05-01 to 2023-04-30**

Während der Antragsperiode wurde für den DFG Sonderforschungsbereich TPChange eine globale EMAC Referenzsimulation durchgeführt und dadurch den ProjektpartnerInnen eine Modelldatengrundlage zum Vergleich ihrer individuellen und regionalen Ergebnisse geboten. Zusätzlich wurden eine Reihe von diagnostischen Tracern hinzugefügt, um beispielsweise Transportprozesse zu untersuchen. Die Simulation wurde mit interaktiver Atmosphärenchemie und einem troposphärischen Aerosolmodell durchgeführt. Für eine bessere Vergleichbarkeit mit Messdaten, wurde die Simulation mittels Newtonscher Relaxation gegen ECMWF ERA-5 Daten relaxiert.

Im Anschluss an die Simulation wurde eine Reihe von Plausibilitätsüberprüfungen durchgeführt, bevor die Daten Anfang des Jahres 2023 den ProjektpartnerInnen zur Verfügung gestellt wurden.

Im Rahmen des Jahrestreffens des Sonderforschungsbereich wurden beispielhafte Analysen anhand der Modelldaten präsentiert und die gute Übereinstimmung mit dem SWOOSH Datensatz im Falle von Ozon veranschaulicht.

Im ersten Quartal 2023 wurde mit dem Aufsetzen von Zeitscheiben Simulationen begonnen, mit deren Hilfe Aussagen über den heutigen und zukünftigen Einfluss von Konvektionsschemata und der horizontalen und vertikalen Auflösung auf die Verteilung und Stoffmenge von chemischen Substanzen sowie der Dynamik getroffen werden sollen. Diese freilaufenden Simulationen müssen so feineingestellt werden, dass sie mit den verwendeten Parametrisierungen für Konvektion und Wolken den heutigen Klimazustand beschreiben. Im besonderen Fokus steht hierbei die Strahlungsbilanz.

Durch Verzögerungen in der Überprüfung und der Erstellung der Setups konnten noch nicht alle Simulationen wie geplant durchgeführt werden, welche in der kommenden Antragsperiode durchgeführt werden. Ein Teil der Ressourcen wurden für die gestiegene Anzahl an nötigen Testsimulationen verwendet, dennoch wurden bis zum Stichtag 26.04.23 die bewilligten Ressourcen nicht vollständig aufgebraucht:

Ressource	Bewilligt	Verwendet	Verbleibend
Levante CPU-Nodes (Node hour)	10831	10126	705
Levante work Speicher (TiB)	115	70	45
StrongLink Projekt Archiv (TiB)	521	193	328

Ein Teil der Ressourcen werden noch für die momentan in der finalen Testphase befindlichen Referenz Zeitscheibensimulationen verwendet. Durch eine Präzisierung der zu beantwortenden Fragen mithilfe der Zeitscheibensimulationen, war es uns möglich die Frequenz, mit der Daten rausgeschrieben werden, deutlich zu verringern, was den Speicherbedarf im Archiv erheblich verringern wird. Die geplanten Zeitscheibensimulationen können die Erkenntnisse aus den Testsimulationen nutzen, wodurch wir zuversichtlich sind, die Verzögerung aus der ersten Antragsperiode teilweise kompensieren zu können.

Anmerkungen der Reviewer auf den Antrag:

Resources are requested for process-interaction studies of atmospheric chemistry, aerosol, and radiation at the upper troposphere / lower stratosphere. The simulations will be performed with ECHAM/MESSy Atmospheric Chemistry, results could be used for parametrizations in ICON/MESSy. The CPU estimates are based on test studies on Levante. Is it really planned to archive everything that is stored on work and if so is that necessary? The simulations were well described and a cut is only applied to account for necessary resources adjustments.

Stellungnahme:

Die originalen Simulationsdaten werden direkt im StrongLink archiviert und können dort im bei Bedarf abgerufen werden. Um eine effiziente Auswertung und Post-Prozessierung zu ermöglichen, wird eine Auswahl an Daten, die im derzeitigen Fokus des gesamten Projektes stehen, auf *work* vorgehalten. Diese werden von mehreren Nutzern verwendet, was einen wiederholten Abruf aus StrongLink sowie eine mehrfache Speicherung verhindert. Die durchgeführte Referenzsimulation wird zudem für einen Vergleich von Modell und Messdaten verwendet. Dies benötigt die größtmögliche zeitliche Auflösung der Daten, weshalb in diesem Fall Monatsmittel nicht ausreichen. Allerdings werden die zukünftigen Simulationen nahezu ausschließlich aus Monatsmitteln bestehen, wodurch die Datenmenge auf *work* pro Simulation erheblich verringert wird.