

Projekt: id0853
Berichtszeitraum: 01.11.2022 - 31.12.2023
Projekttitel: Earth System Chemistry Integrated Modelling (ESCiMo)
Federführender Wissenschaftler: Dr. Patrick Jöckel

Im o.a. Bewilligungszeitraum konnte keine der geplanten Simulationen durchgeführt werden, da die Kürzungen durch den WLA (insbesondere die Kürzung in /work) eine Durchführung und Auswertung der Daten unmöglich gemacht hat, obwohl ein Teil (50 TByte) des (beantragten, jedoch gekürzten) „Altbestandes“ (Daten aus vorangegangenen Bewilligungszeiträumen) in der zweiten Hälfte des Bewilligungszeitraums von /work entfernt werden konnte:

Simulation	/work [TByte]
RC2-oce-01	12,00
RC1SD-base-10	38,00
Summe	50

Aus den im ursprünglichen Antrag dargelegten Gründen, konnte in 2023 jedoch nicht entfernt werden (Begründungen siehe unten):

Simulation	Begründung	/work [TByte]
RD1-base-01	CERA / /doku	16,00
RD1SD-base-01	CERA / /doku	92,00
RD2-base-01,a,b,c	CERA / /doku	102,00
RD1SD-made3-01	Analysen / Referenz	15,00
SC2-oce-01,02,03	Analysen / Referenz	30,00
RD1SD-base-02a, b ^(*)	Analysen	42,00
	Zwischenergebnisse	25,00
		322

Der bewilligte Platz auf /work (376 TByte) wurde demnach von 372 TByte (erste Hälfte des Bewilligungszeitraumes) bzw. 322 TByte (zweite Hälfte des Bewilligungszeitraumes) durch „Altbestand“ belegt, und die verbleibenden 4 TByte (bzw. 54 TByte) reichten für die ursprünglich geplanten Simulationen nicht aus. Dabei sei hier angemerkt, dass der Platz für die in der Tabelle mit ^(*) gekennzeichneten Simulationsdaten nicht beantragt war. Diese beiden Simulationen wurden gegen Ende 2022 durchgeführt und dienten der Überprüfung einer wichtigen Modellaktualisierung: der chemische Mechanismus, der die Gasphasenchemie beschreibt, wurde aktualisiert. Die Auswirkungen dieser Aktualisierung auf die Ergebnisse der Simulationen (a=alt, b=neu) mussten analysiert werden und diese Analyse nahm weitaus mehr Zeit in Anspruch, als ursprünglich geplant.

Unter den beschriebenen Umständen war es nicht möglich die Simulationen durchzuführen, da mit 15 Tbyte in /scratch (Quota) und den andauernden Problemen mit slk ein unmittelbares Archivieren und ständiges oder späteres Dearchivieren keine Alternative darstellte.

Die abgerufene Rechenzeit (563 node-h auf levante) wurde für kürzere Testsimulationen, weiteres post-processing (Analyse der Daten), und eine kurze (3 x 7 Monate umfassende) Sensitivitätsstudie zur Auswirkung der Vulkaneruption des Raikoke (Juni 2019) auf das SO₂ Budget verwendet (letzteres im Rahmen einer Doktorarbeit).

Die Aufbereitung und der "upload" der geforderten Daten für CCMI-2020 wurde in 2023 weitergeführt, konnte jedoch **noch immer** nicht abgeschlossen werden. Gründe dafür waren

- massive Probleme beim „upload“ zum British Atmospheric Data Centre (BADC), welches die CCMI-Modelldaten (den Teil davon, der im CCMI-Datenrequest formuliert ist) archiviert und für die Auswertung bereitstellt,
- gestiegene Anforderungen für die Überführung der (nicht durch den CCMI Request abgedeckten) restlichen Daten in die CERA-Datenbank,
- massive Problem mit slk,
- personelle Probleme bzw. Engpässe beim Antragsteller (DLR).

Eine weitere **Publikation**, die auf den Daten des ESCiMo-Projektes (CCMI-2020) beruht, ist erschienen, weitere sind in Vorbereitung:

Friedel, M., Chiodo, G., Sukhodolov, T., Keeble, J., Peter, T., Seeber, S., Stenke, A., Akiyoshi, H., Rozanov, E., Plummer, D., Jöckel, P., Zeng, G., Morgenstern, O., and Josse, B.: Weakening of springtime Arctic ozone depletion with climate change, *Atmos. Chem. Phys.*, 23, 10235–10254, <https://doi.org/10.5194/acp-23-10235-2023>, 2023.