

Simulation flüchtiger organischer Substanzen mit ICON-ART



M. Weimer¹ (michael.weimer@kit.edu), J. Schröter², J. Eckstein²,
C. Stassen^{2,3}, K. Deetz², D. Rieger², H. Vogel², B. Vogel², O. Kirner¹, P. Braesicke², R. Ruhnke²

¹Steinbuch Centre for Computing, ²Institut für Meteorologie und Klimatologie, ³jetzt bei: Monash University, School of Earth, Atmosphere and Environment, Australien

Das ICON Modell und dessen ART-Erweiterung

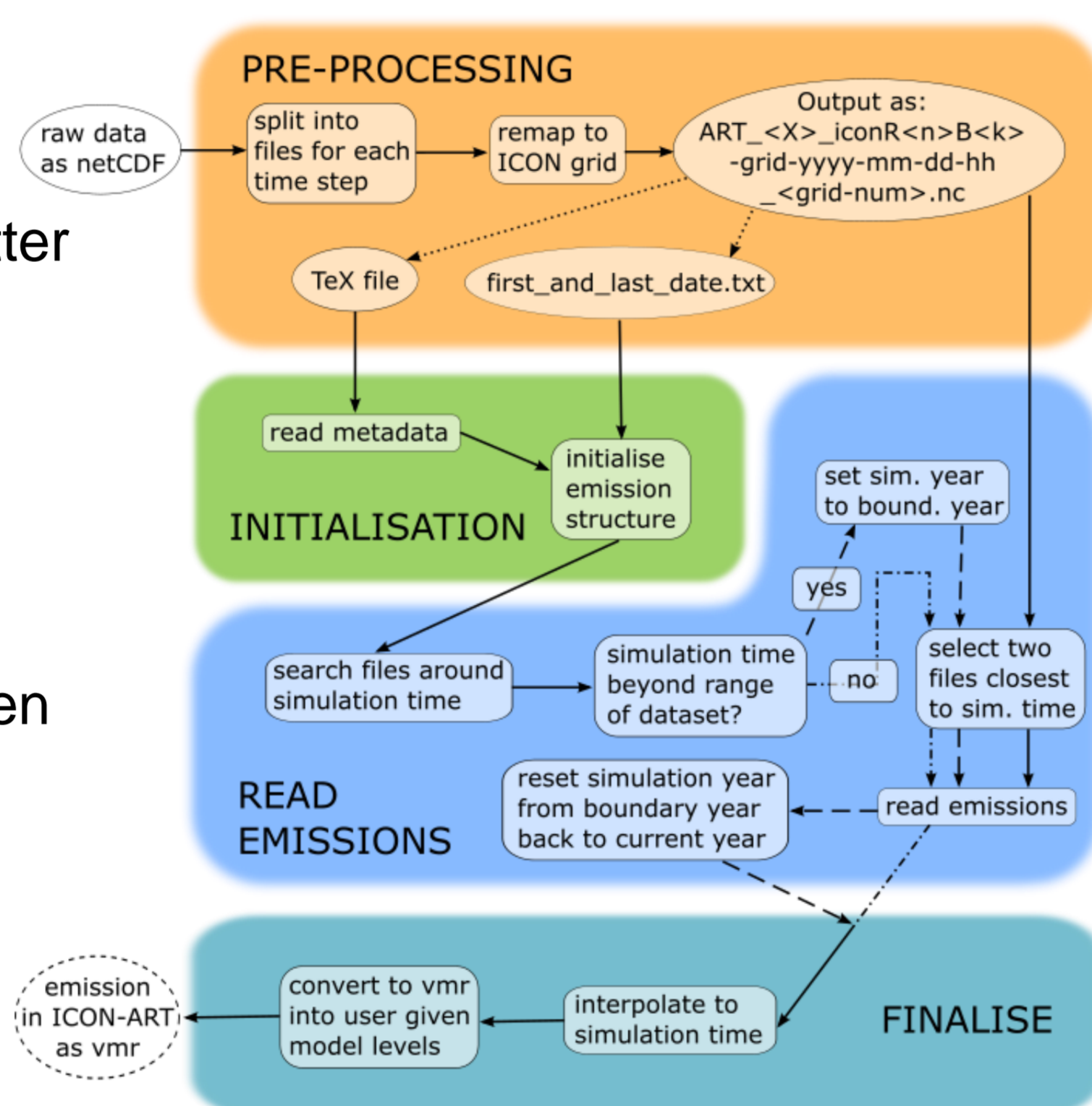
ICON (ICOsahedral Non-hydrostatic) ist ein globales Modell, das am Deutschen Wetterdienst und am Max-Planck-Institut für Meteorologie entwickelt wird. ICON gibt die Möglichkeit der lokalen Gitterverfeinerung mit 2-Wege-Interaktion zwischen den unterschiedlichen Gittern. Seit Januar 2015 wird ICON am DWD operationell zur Wettervorhersage eingesetzt und wird zukünftig am MPI-M für Klima-Projektionen genutzt werden [1]. Wir haben dem Modellsystem Module für Gasphasenchemie und Aerosole (ART, Aerosols and Reactive Trace gases) hinzugefügt [2].

Das erweiterte Modellsystem ICON-ART befindet sich derzeit in der Entwicklung und hat zum Ziel, die Rückkopplungen zwischen Aerosolen, Spurengasen und dem Zustand der Atmosphäre zu simulieren. Stand heute kann mit ICON-ART unter anderem Vulkanasche, Ausbreitung von radioaktiven Luftbeimengungen, Seesalz und Mineralstaub simuliert werden. Zusätzlich wurden einige Spurengase eingeführt. Transport und Diffusion werden mit der ICON Tracer-Struktur berechnet. Zeitliche Integration folgt einem Ansatz, bei dem jeder physikalische Prozess einzeln und unabhängig aufgerufen wird. Derzeit werden trockene und feuchte Deposition, Sedimentation und chemische Reaktionen erster Ordnung eingefügt.

Hier wird ein neues Interface in ICON-ART zum Einlesen von Emissionen aus externen Datenquellen vorgestellt, sowie erste Ergebnisse der flüchtigen organischen Substanz Aceton, die eine wichtige Rolle für den Ozonabbau in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre spielt [3].

Das neue Emissions-Interface in ICON-ART

- Vorbereitung vor Modellstart:**
Interpolation der Emissionsdaten auf Iksaeder-basiertes ICON-Gitter
- Initialisierung** mit TeX-Tabelle
- Einlesen der Emissionen:**
Suchen und Einlesen der Emissionsdaten, die am nächsten zur Simulationszeit liegen
- Beenden des Interface:**
zeitliche Interpolation auf die Simulationszeit und Umwandlung in Volumenmischungsverhältnis



Aceton-Abbau mit vereinfachter OH-Chemie u. Photolyse

OH-Konzentration:

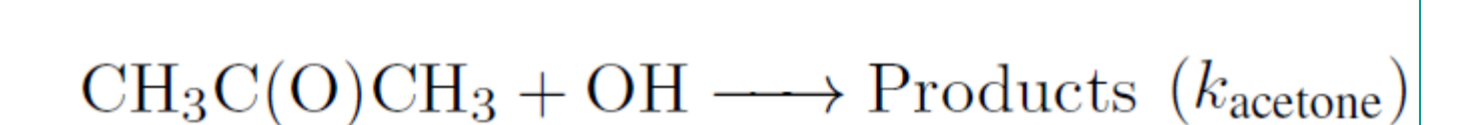
$$[\text{OH}] = \frac{2 [\text{O}^{(1D)}] k_{\text{H}_2\text{O}} [\text{H}_2\text{O}]}{k_{\text{CH}_4} [\text{CH}_4] + (k_{\text{CO},1} + k_{\text{CO},2}) [\text{CO}]}$$

- OH-Konzentration:
Gleichgewicht zwischen Aufbau durch Reakt. von $\text{O}^{(1D)}$ mit H_2O und Abbau durch CH_4 und CO

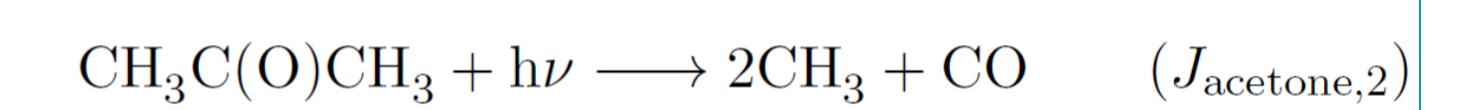
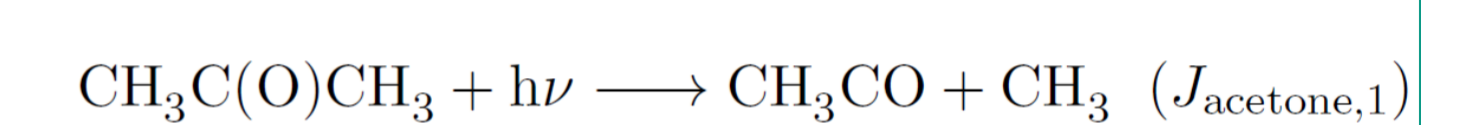
$$[\text{O}^{(1D)}] = \frac{J_{\text{O}_3} [\text{O}_3]}{k_{\text{O}_2} [\text{O}_2] + k_{\text{N}_2} [\text{N}_2] + k_{\text{H}_2\text{O}} [\text{H}_2\text{O}]}$$

- $\text{O}^{(1D)}$: Gleichgewicht zw. Aufbau durch O_3 -Photolyse und Abbau durch Stöße mit N_2 und O_2 , sowie Reakt. mit H_2O

Reaktion von Aceton mit OH:



Photolyse von Aceton:



- Berechnung durch das online-Photolyse-Modul in ICON-ART, basierend auf Cloud-J [4]

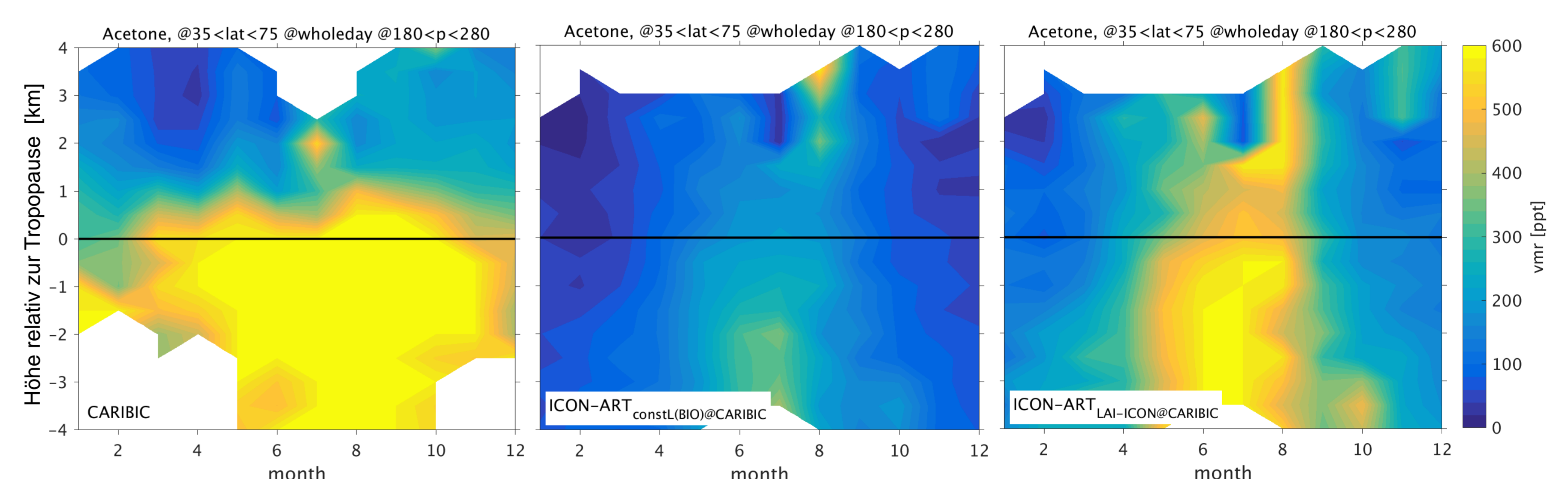
Lebensdauer von Aceton:

$$\tau_{\text{acetone}} = \frac{1}{k_{\text{acetone}} [\text{OH}] + J_{\text{acetone},1} + J_{\text{acetone},2}}$$

Vergleich von Aceton in der Tropopausenregion zwischen CARIBIC (links), MEGAN-MACC (Mitte) und MEGAN2.1 (rechts)

- Konstante Lebensdauer von Aceton: 20 Tage
- Klimatologien: Modellausgaben interpoliert auf CARIBIC [3] Flüge (2005-2015), dargestellt relativ zur Tropopausenhöhe
- MEGAN-MACC [5]: externer Datensatz für biogene Emissionen, monatliche Auflösung
- MEGAN2.1 [6]: Modul zur direkten Bestimmung von biogenen Emissionen in ICON-ART

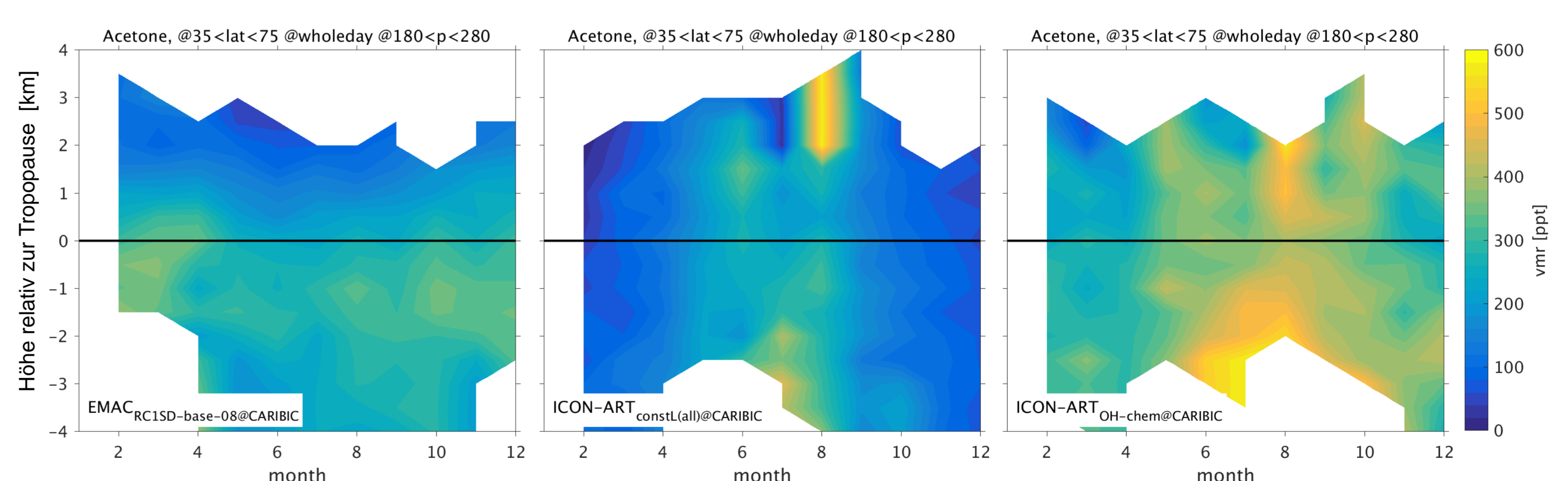
→ Im Vergleich zu Emissionen des Inventars MEGAN-MACC: Verbesserung des Jahresgangs von Aceton durch die Verwendung des online MEGAN2.1-Moduls



Vergleich zwischen voller Chemie EMAC (links), konst. Lebensdauer ICON-ART (Mitte) und OH-Chemie ICON-ART (rechts)

- Klimatologien: auf CARIBIC-Flüge (2005-2008) interpoliert
- EMAC [7]: gekoppeltes Chemie-Atmosphären-Modell: verschobener Jahresgang von Aceton
- Konstante Lebensdauer von Aceton in ICON-ART: Maximum im Sommer, zu geringes Mischungsverhältnis (vgl. CARIBIC)
- OH-Chemie zur Bestimmung der Aceton-Lebensdauer: Vergrößerung des Aceton-Mischungsverhältnisses

→ Im Vergleich zu konstanter Lebensdauer von Aceton: Verbesserung des Jahresganges von Aceton durch Verwendung der OH-Chemie



Literaturverzeichnis

[1] Zängl et al. (2015), Q.J.R. Meteorol. Soc., 141: 563–579.

[2] Rieger et al. (2015), Geosci. Model Dev., 8, 1659–1676.

[3] Neumaier et al. (2014), Geophys. Res. Lett., 41 (9), 3289–3297.

[4] Prather (2015), Geosci. Model Dev., 8 (8), 2587–2595

[5] Sindelarova et al. (2014), Atmos. Chem. Phys., 14 (17), 9317–9341.

[6] Guenther et al. (2012), Geosci. Model Dev., 5 (6), 1471–1492.

[7] Jöckel et al. (2006), Atmos. Chem. Phys., 6 (12), 5067–5104.