

DISS. ETH Nr. 17824

**Systematische Untersuchung der  
Abhängigkeiten eines  
Klima-Chemie-Modells von  
Randbedingungen und  
Parametrisierungen**

ABHANDLUNG  
zur Erlangung des Titels

DOKTOR DER NATURWISSENSCHAFTEN

der

ETH ZÜRICH

vorgelegt von  
MARTIN SCHRANER  
Dipl. Math. ETH  
geboren am 5. November 1975  
von Zürich und Sulz (AG)

Angenommen auf Antrag von:  
Prof. Dr. Thomas Peter, Referent  
Prof. Dr. Martin Dameris, Prof. Dr. Atsumu Ohmura, Korreferenten  
Dr. Eugene Rozanov, Dr. Christina Schnadt, Korreferenten

2008

# Zusammenfassung

Globale Klima-Chemie-Modelle (engl. chemistry climate models, CCMs) spielen eine zentrale Rolle bei Vorhersagen der Entwicklung der Stratosphäre im 21. Jahrhundert. Dabei sind insbesondere Prognosen der stratosphärischen Ozonentwicklung in einem sich ändernden Klima von grossem Interesse. Um die Zuverlässigkeit solcher Modellvorhersagen beurteilen zu können, müssen Modelle anhand von Beobachtungen in der Vergangenheit auf ihre Güte getestet werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden für das bereits bestehende CCM SOCOL (**S**OLAR Climate **O**zone **L**inks) erstmals transiente Simulationen gerechnet. Eine für die Zeitperiode 1979–2000 durchgeführte Modellevaluierung zeigte einige teils gravierende Modellschwächen. Anstatt einer annähernd konstanten Verteilung wies das gesamte organische und anorganische Chlor ( $\text{CCl}_y$ ) über dem Polarwirbel ein völlig unrealistisches Minimum und über den Tropen in der mittleren Stratosphäre ein künstliches Maximum auf; Brom wurde in der gesamten Stratosphäre massiv unterschätzt, während stratosphärischer Wasserdampf deutlich überschätzt wurde. Nach den Vulkaneruptionen von El Chichón (1982) und Mt. Pinatubo (1991) wurde zudem ein mehr als doppelt so starker Ozonabbau wie beobachtet simuliert.

Mit systematischen Modifikationen der im Modell verwendeten Randbedingungen und Parametrisierungen wurden die Ursachen der Modellschwächen identifiziert. Für jede der insgesamt zwanzig verschiedenen, schrittweise abgeänderten Modellversionen wurde eine transiente Simulation für die Zeitperiode 1975–2000 gerechnet und die Auswirkungen auf die Modellresultate analysiert.

Ursache der meisten Modellprobleme in der Grundversion von SOCOL ist eine Verletzung der Massenerhaltung beim Transport der chemischen Spezies. Zum einen werden die sehr kurzlebigen Spurengase aus Gründen des Rechenaufwands nicht transportiert, was für ClO,  $\text{Cl}_2\text{O}_2$ , HOCl, HBr und HOBr in verschiedenen Regionen künstliche Massensakkumulationen zur Folge hat. Zum anderen ist das in SOCOL für den Horizontaltransport verwendete Semi-Lagrange'sche-Transportschema trotz der Verwendung sogenannter Massendifferenzen regional nicht massenerhaltend.

Durch den Transport aller Spurenstoffe und die Anwendung einer familienbasierten Massendifferenzkorrektur für  $\text{Cl}_y$ ,  $\text{Br}_y$  und  $\text{NO}_y$  nach dem Semi-Lagrange'schen Transport werden die gravierenden Modellprobleme in den Chlor- und Bromverteilungen weitgehend eliminiert. Zudem wird in der mittleren Stratosphäre die modellierte Verteilung von  $\text{NO}_x$  deutlich verbessert. Schliesslich hat der Transport aller Spurenstoffe auch eine markante Verbesserung des simulierten Ozonsignals nach El Chichón und Mt. Pinatubo zur Folge, welches nun insbesondere über den Tropen sehr gut mit den Beobachtungen übereinstimmt.

Allerdings führt die aufgrund der Elimination des unrealistischen Chlorminimums im Polarwirbel stark erhöhte katalytische Ozonerstörung zu deutlich unterschätzten Ozon-

konzentrationen. Sensitivitäts-Simulationen zeigen, dass die zu tiefen Ozonwerte durch einen künstlichen Massentransport von den hohen Breiten in die Tropen verursacht werden. Diesem Problem wird entgegengetreten, indem der Massenflox für Ozon auf die Region 40°S–40°N beschränkt wird.

Das Problem der stark überschätzten stratosphärischen Wasserdampfkonzentrationen konnte weitgehend eliminiert werden, indem in der untersten tropischen Stratosphäre neu die Zirrenbildung berücksichtigt wird. Damit wird in der untersten Stratosphäre in jedem Zeitschritt der gesamte den Sättigungsdampfdruck übersteigende Wasserdampf vom Modellsystem entfernt.

Die Berücksichtigung der quasi-zweijährigen Oszillation (QBO) führt zu einer deutlich besseren Übereinstimmung von Modell und Beobachtungen im Zonalwind, der Temperatur und im Ozon in der unteren und mittleren tropischen und subtropischen Stratosphäre. Zudem beeinflusst das QBO-Nudging auch die klimatologisch gemittelte residuale Zirkulation, wodurch die Modellklimatologien der meisten Modellgrößen verändert werden.

Die Parametrisierung der heterogenen Chemie wurde überarbeitet und durch ein genaueres Schema ersetzt. Die wichtigsten Effekte sind wesentlich verbesserte NAT-Konzentrationen im Polarwirbel sowie eine ausgeprägte Denitrifizierung über der winterlichen Antarktis, welche in der Grundversion völlig fehlte.

Eine neu eingeführte troposphärische HBr-Senke verhindert eine künstliche Akkumulation von Bromspezies in der Troposphäre, was in der Grundversion einen unrealistischen Ozonabbau über die katalytischen Bromzyklen zur Folge hatte.

Der Einfluss der übrigen Modellmodifikationen wie beispielsweise der Berücksichtigung der Sonnenvariabilität ist deutlich kleiner, für einzelne Modelländerungen sind die Effekte gar nur marginal.

In der Endversion sind viele der ursprünglichen Modellprobleme behoben oder beträchtlich reduziert. Die neue SOCOL-Version stimmt ähnlich gut mit Beobachtungen überein wie andere CCMs. Obwohl der Rechenaufwand gegenüber der Grundversion etwas erhöht ist, weist auch die Endversion nach wie vor eine sehr gute Modelleffizienz auf, was Modellsimulationen über mehrere Dekaden ermöglicht.

Trotz deutlich verbesserter Modellergebnisse weist auch die Endversion verschiedene noch nicht eliminierte Schwachpunkte auf. Viele dieser Probleme stehen mit grosser Wahrscheinlichkeit noch immer mit dem Semi-Lagrange'schen Transportschema in Zusammenhang.

# Abstract

Global chemistry climate models (CCMs) play an important role for the prediction of the evolution of the stratosphere in the 21st century, especially the prediction of the stratospheric ozone in a changing climate. To evaluate the confidence of such model predictions, these models must be tested for their performance using past observations.

In the framework of this work, transient simulations of the already existing CCM SOCOL (**S**olar **C**limate **O**zone **L**inks) have been performed for the first time. A model evaluation for the period 1979-2000 brought to light several severe model deficiencies. Instead of a nearly constant spatial distribution, total organic and inorganic chlorine ( $\text{CCl}_y$ ) showed a completely unrealistic minimum above the polar vortex and an artificial maximum in the middle stratosphere above the tropics; bromine was strongly underestimated within the entire stratosphere, whilst stratospheric water vapour was clearly overestimated. Besides this, simulated ozone depletion was doubled compared to observations after the eruptions of the volcanoes El Chichón (1982) and Mt. Pinatubo (1991).

The reasons for the deficiencies were investigated by systematic modifications of the boundary conditions and parametrisations used in the model. This resulted in twenty stepwise changed model versions. The time period 1975–2000 was simulated for each of these versions, and the effects onto the model results were analysed.

Most problems of the basic version of SOCOL are caused by the violation of the conservation of mass during the transport of the chemical species. On the one side, the very short-lived trace gases have not been transported to save computational costs. This caused an artificial accumulation of mass of  $\text{ClO}$ ,  $\text{Cl}_2\text{O}_2$ ,  $\text{HOCl}$ ,  $\text{HBr}$  and  $\text{HOBr}$  in different regions. On the other side, the Semi-Lagrangian transport scheme, which is used in SOCOL for the horizontal transport, does regionally not preserve the conservation of mass despite the use of so-called mass fixers.

By implementing the transport of all chemical species used in the model, and the application of a family-based correction of mass for  $\text{Cl}_y$ ,  $\text{Br}_y$  and  $\text{NO}_y$  after the Semi-Lagrangian transport, the model deficiencies concerning the distributions of chlorine and bromine are eliminated. Besides this, the simulated spatial distribution of  $\text{NO}_x$  in the middle stratosphere is considerably improved. Finally, the transport of all modelled species also results in a strong improvement of the simulated ozone signal after the eruptions of El Chichón and Mt. Pinatubo. The simulated signal is now in very good correspondence with the observations, especially in the tropics.

In the polar vortex however, the increased catalytic ozone depletion due to the eliminated unrealistic chlorine minimum leads to considerably underestimated ozone concentrations. Sensitivity runs of the model show that the unrealistic low ozone values are caused by an artificial mass transport from the high latitudes towards the tropics. This problem can be reduced by restricting the mass fixer for ozone onto the region of  $40^\circ\text{S}$ – $40^\circ\text{N}$ .

The problem of the strongly overestimated stratospheric water vapour concentrations

were largely eliminated by considering now the formation of cirrus clouds in the lowermost tropical stratosphere. This leads to the elimination of the entire water vapour exceeding the saturation vapour pressure in the lowermost stratosphere in any time step.

The consideration of the Quasi-Biennial Oscillation (QBO) leads to a clearly better correspondence of model results and observations of the zonal wind, the temperature, and ozone concentrations in the lower and middle tropical and subtropical stratosphere. Furthermore, the QBO nudging influences the climatologically averaged residual circulation, which has a significant effect on most of the model species.

The parametrisation of the heterogeneous chemistry was fully revised and replaced by a more sophisticated scheme. This results mainly in considerably improved NAT concentrations in the polar vortex as well as in a pronounced denitrification above the Antarctica in winter, which was completely absent in the basic version of the model.

A newly implemented tropospheric sink of HBr prohibits an artificial accumulation of bromine species in the troposphere, which provoked an unrealistic depletion of ozone by the catalytic bromine cycles in the basic version.

The influences of the remaining model modifications – as e.g. the consideration of the solar variability – are remarkably smaller or even marginal.

Many of the original model deficiencies were eliminated or strongly reduced in the final version. The model performance, i.e. the correspondence between simulation and observation, of the new SOCOL version is comparable to most other CCMs. Although the computational costs are slightly higher compared to the basic version, the model efficiency of the final version remains considerably high, thus allowing long-term transient ensemble simulations.

Despite clearly improved modelling results some deficiencies in the final version remain. Many of them are most likely still related to the Semi-Lagrangian transport scheme.