

## Spurenstoffe in der Atmosphäre

Der atmosphärische Zweig von Spurenstoffkreisläufen bestimmt zu einem großen Teil die räumliche Verteilung des Eintrages von Schadstoffen in Boden und Wasser. Eutrophierung und Versauerung abseits der direkten Emissionsquellen sind daher die Folge komplexer chemischer Prozesse in der Atmosphäre, die ihrerseits mit ihrer hochvariablen Dynamik nur unzureichende Genauigkeiten bei der Quantifizierung der Flüsse von Nitraten und Sulfaten in Böden und Gewässer erlauben.

In der Untersuchung für die Region des Drei-Schluchten-Staudammes wird der Eintrag von Nitraten und Sulfaten in Böden und Gewässer mit größtmöglicher Genauigkeit ermittelt. Dabei sollen für ausgesuchte, besonders kritische Gebiete die Depositionen mit besonders hoher räumlicher Auflösung berechnet werden. Insgesamt umfasst die Aufgabe den Aufbau eines atmosphärenchemischen Modellsystems, welches auf verschiedenen räumlichen Skalen die Quantifizierung ermöglicht. Dabei sind für die Region des Drei-Schluchten-Staudamm-Projektes am Yangtze bei numerischen Simulationen die folgenden Bedingungen besonders zu berücksichtigen:



- Teilweise extrem hohe, unsichere, aber weiterhin wachsende Emissionsraten auf begrenzten bewohnten Gebieten,
- stark gegliederte Topographie mit kanalisierenden Tälern,
- starke saisonale Temperaturoegensätze und durch Monsun geprägte Variabilität der Zirkulation, bei gleichzeitiger jährlicher hoher Variabilität der Ausprägung,
- hohe Bedeutung konvektiver Niederschläge.

Eine quantitative Bestimmung der Einträge in Böden und Gewässer hat, neben der Deposition anderer atmosphärischer Spurenstoffe, insbesondere die trockene Deposition der Gasphasenbestandteile Schwefeldioxid, Salpetersäure und Ammoniak, die Sedimentation von Aerosolpartikeln mit Schwefelsäure, Salpetersäure und Ammonium, sowie die nasse Deposition der letztgenannten Stoffe (insbesondere  $\text{NO}_3$ ) durch Niederschlag zum Gegenstand. Damit ist also unter den oben genannten Bedingungen neben der Simulation der Gasphase sowohl Aerosolchemie als auch Nassphasenchemie zu modellieren. Die angestrebte Genauigkeit erfordert die Nutzung aller verfügbarer Beobachtungsdaten, also sowohl in situ-Messungen als auch Fernerkundungsdaten.

Hierzu sind mesoskalige Simulationen der Emissionen, chemischen Umwandlungen, Transporte, Diffusion und, als besonderer Schwerpunkt, die wesentlichen Depositionswege mit einem atmosphärischen Chemie-Transport-Modell (CTM) die methodischen Grundlagen der Untersuchungen. Die Simulationen sollen mit variabler Auflösung vorgenommen werden. Dabei wird zunächst die Chemie-Transportrechnung auf der Mesoskala, das äußere Gebiet des Drei-Schluchten-Reservoirs umfassend, mit etwa 50 km horizontaler Auflösung berechnet. Die hier gewonnenen Ergebnisse dienen als Randwerte für Simulationen ausgewählter und feiner aufgelöster Gebiete, um dann mit etwa 10 km Auflösung den Nitratintrag kritischer Regionen für höhere Genauigkeitsanforderungen zu modellieren. Hier kann in erster Linie an das Gebiet der Stadt

Chongqing gedacht werden, aber auch weitere Gebiete lassen sich gleichzeitig mit derselben Auflösung bearbeiten.



Die Verwendung von Messdaten soll die zweite wesentliche Komponente sein. Hierzu sollen in erster Linie in situ-Beobachtungen herangezogen werden, die im Routinebetrieb im Bereich des Drei-Schluchten-Staudammes betrieben werden. Sie liefern die Basis zur Verbesserung des Systemverständnisses der Atmosphäre. Allerdings können Beobachtungen in der Praxis nur einen kleinen Teilaspekt des chemischen Zustandes der Atmosphäre, ihrer Dynamik und des Budgets der Nitrate und Sulfate erfassen. Chemische Atmosphärenmodelle führen zwar zu einem vollständigen und ihrer Formulierung entsprechend konsistenten Abbild dieses Zustandes, das aber von zunächst unbekannter Güte und Belastbarkeit ist. Daher soll neben der multiskaligen Simulation als wesentliches Element die inverse Modellierung angewandt werden. Als weitere Datenquellen können Ergebnisse aus Satellitenmessungen herangezogen werden.

Die nahe liegende Bewertung und Verbesserung der Simulationsqualität führt auf den ersten hier zu behandelnden Problemkreis: Welche Parameter des Modells sind wie zu modifizieren, um eine möglichst geringe Abweichung von den Beobachtungen zu erzielen? Die erfolgreiche Datenassimilation liefert eine Analyse der optimierten Größen. Dabei steht die Optimierung der verschiedenen Depositionsprozesse, insbesondere die entsprechenden Kontrollparameter wie Depositionsgeschwindigkeit im Mittelpunkt, um quantitative Abschätzungen von kleinstmöglicher Unsicherheit zu gewinnen. Dies ist von besonderer Bedeutung, da die Quantifizierung der Nitrateinträge in Böden wesentlich ist, diese aber nicht direkt gemessen werden können. Ferner sollen für die Nassphasenchemie, im wesentlichen Sulfatchemie, ebenfalls adjungierter Modellcode entwickelt und verwandt werden.

Die Verknüpfungen zu anderen Projektbereichen ergeben sich beispielsweise bei dem Thema "Wasser", wo atmosphärische Nitrifizierungsbeiträge Berücksichtigung finden. Niederschlagsraten, die bei der Berechnung von nassen Depositionsmengen ermittelt werden, können Beiträge zur Bodenfeuchte bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten von Hangrutschungen liefern.