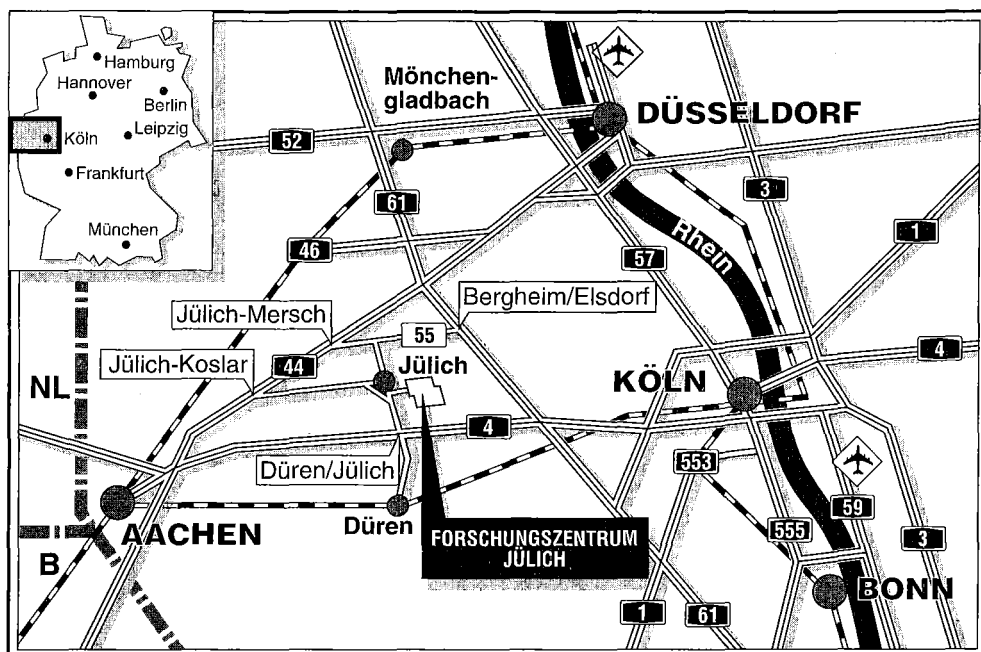


*Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre 1:
Stratosphärische Chemie*

**Ein Box-Trajektorien-Modell zur Analyse
atmosphärischer Reaktionssysteme**

R. Ruhnke E.-P. Röth



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3131

ISSN 0944-2952

Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre 1:
Stratosphärische Chemie Jül-3131

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Ein Box-Trajektorien-Modell zur Analyse atmosphärischer Reaktionssysteme

R. Ruhnke E.-P. Röth

INHALTSVERZEICHNIS

1. EINLEITUNG.....	1
2. DAS HAUPTPROGRAMM	6
3. DAS UNTERPROGRAMM INRE.....	13
4. DAS UNTERPROGRAMM INCO	19
5. DAS UNTERPROGRAMM STEADY.....	24
6. DAS UNTERPROGRAMM TIMDEP	26
6.1. DER VORLAUF.....	26
6.2. BERECHNUNG DES AKTUELLEN GEOGRAPHISCHEN ORTES DES LUFTPAKETES	27
6.3. BESTIMMUNG DES ZENITWINKELS	27
6.4. BESTIMMUNG DER AKTUELLEN HÖHE DER MISCHUNGSSCHICHT.....	28
6.5. BESTIMMUNG DER TEMPERATUR UND DES DRUCKES IN DER BOX.....	29
6.6. BERECHNUNG DES ZEITSCHRITTES.....	30
6.6.1. <i>Automatische Zeitschrittsteuerung.....</i>	<i>31</i>
6.6.1.1. Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung	31
6.6.1.2. Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung	32
6.6.2. <i>Vorgegebene funktionelle Zeitschrittsteuerung</i>	<i>33</i>
6.7. BERECHNUNG DER FLÜSSIGPHASENPARAMETER	35
6.8. BERECHNUNG DER AKTUELLEN EMISSIONSRATEN, GESCHWINDIGKEITS- UND GLEICHGEWICHTSKONSTANTEN	36
7. DAS UNTERPROGRAMM AUSTAUSCH.....	38
7.1. SKALIERUNG DER AKTUELLEN KONZENTRATIONEN AUF DEN NEUEN DRUCK	38
7.2. BESTIMMUNG DER TRANSPORTPARAMETER.....	38
7.2.1. <i>Austausch zwischen der Reservoirschicht und der Mischungsschicht</i>	<i>38</i>
7.2.2. <i>Austausch zwischen der Reservoirschicht und der Mischungsschicht</i>	<i>39</i>
7.2.3. <i>Betrachtung der Emissionen und Depositionen.....</i>	<i>40</i>
8. DAS UNTERPROGRAMM CHEMIE	41

9. DAS UNTERPROGRAMM EULER	42
9.1. BERECHNUNG DER KONZENTRATIONEN BEI HOMOGENEN GASPHASENREAKTIONEN	42
9.2. BERECHNUNG DER KONZENTRATIONEN BEI HETEROGENEN GLEICHGEWICHTEN.....	44
10. DAS UNTERPROGRAMM OUTPUT.....	47
11. DAS UNTERPROGRAMM DIAGN.....	48
11.1. OPTIMIEREN DES REAKTIONSSYSTEMS	48
11.2. EINTEILUNG DER SPEZIES DURCH ANALYSE DER LEBENSZEITEN.....	49
12. SENSITIVITÄTSBERECHNUNG.....	52
12.1. DAS UNTERPROGRAMM SENSIND.....	53
12.2. DAS UNTERPROGRAMM SENSIDIR.....	56
13. WEITERE UNTERPROGRAMME UND FUNKTIONEN	60
13.1. DAS UNTERPROGRAMM DELBLK	60
13.2. DAS BLOCK-DATA UNTERPROGRAMM CHARAC.....	60
13.3. DIE FUNKTION ZVONP	60
13.4. DIE FUNKTION PVONZ	61
13.5. DIE FUNKTION TVONZ	61
14. LITERATUR:	62
15. ANHANG.....	64

1. Einleitung

Bei der Beantwortung umweltrelevanter Fragen stellen Modelle der Atmosphäre wesentliche Hilfsmittel dar. Die in der atmosphärischen Forschung verwendeten Modelle bilden das reale Verhalten der Luft in den primitiven Gleichungen ab. Eine dieser grundlegenden Gleichungen ist die Massenkontinuitätsgleichung oder Ausbreitungsgleichung:

$$\frac{dc}{dt} = \bar{V}(\bar{u} \cdot c) + (P - D \cdot c) \quad (1.1)$$

Gemäß dieser Gleichung setzt sich die zeitliche Änderung der Konzentration c einer Luftkomponente aus einem Transport-Term $\bar{V}(\bar{u} \cdot c)$ und einem Term $(P - D \cdot c)$ zusammen, der die Quellen und Senken und die chemischen Umwandlungen des Stoffes in der Atmosphäre enthält. Aufgrund der additiven Verknüpfung der beiden Terme sind diese in der modellmäßigen Beschreibung leicht zu trennen, und somit können die Parameter der beiden Terme $\bar{V}(\bar{u} \cdot c)$ und $(P - D \cdot c)$ getrennt berechnet werden. Die Kopplung von Transport und chemischen Reaktionen geschieht in den atmosphärischen Modellen erst im letzten Schritt, der Lösung der Ausbreitungsgleichung (1.1).

Eine Unterscheidung der Modelle erfolgt zumeist durch das zugrundgelegte räumliche Gitter und damit durch die Behandlung des Transport-Terms $\bar{V}(\bar{u} \cdot c)$ (siehe auch GRAEDEL UND CRUTZEN (1994)). Es ist grundsätzlich denkbar, ein einziges Modell zu konstruieren, das es erlaubt, alle Fragestellungen sowohl in räumlicher als auch in zeitlicher Hinsicht zu beantworten. Dieses Modell wäre aber zum einen sehr rechenzeit- und somit auch kostenintensiv und zum anderen würde es eine Fülle von Informationen liefern, die für die Beantwortung der interessierenden Fragestellung keine Bedeutung besitzen. Daher wurden verschiedene Modelle entwickelt, die zwar alle die Massenkontinuitätsgleichung lösen, deren räumliche und zeitliche Maßstäbe aber den zu beantwortenden Fragestellungen angepaßt sind (siehe auch RÖTH (1985)).

Der erste Schritt bei der Simulation von gemessenen Konzentrationsverläufen und somit der Untersuchung der interessierenden Fragestellung mit Hilfe eines Modells besteht daher darin, das für den speziellen Zweck geeignete Modell auszuwählen. Diese Auswahl muß sich zum einen an dem Zeitraum orientieren, der simuliert werden soll (z.B. Stunden oder Jahre), und zum anderen an dem zu simulierenden Raum (z.B. ortsfester Meßpunkt in Bodennähe oder ballon- bzw. flugzeuggetragener Meßpunkt).

Um einem breiten Anwendungsspektrum gerecht zu werden, wurde das im folgenden beschriebene Multiboxmodell entwickelt, welches modular aufgebaut ist und je nach Fragestellung als reines Box-Trajektorienmodell oder als 3-Box-Modell betrieben werden kann.

Dem Box-Trajektorien-Modell liegt die Annahme zugrunde, daß sich ein abgeschlossenes Luftpaket ohne Austausch mit der Umgebung entlang einer Trajektorie bewegt. In den Luftschichten der freien Troposphäre und der Stratosphäre ist dies näherungsweise der Fall, denn dort sind die Austauschprozesse zwischen den einzelnen Luftmassen gering (BRASSEUR UND SOLOMON (1984)), so daß das Luftpaket für eine gewisse Zeit als isoliert zu betrachten ist. Daher ist für diese Anwendungen das reine Box-Trajektorien-Modell das probate Werkzeug zur Simulation von Messungen. Die Trajektorie wird dabei für die Modellierung aus meteorologischen Beobachtungen gewonnen oder aber aus Vorhersagedaten berechnet. Besonders für die Simulation von stratosphärischen Messungen ist das Box-Trajektorienmodell geeignet, da die chemische Identität der stratosphärischen Luft für etwa eine Woche erhalten bleibt (siehe z.B. EHHALT (1987), MÜLLER (1994)). Für diesen Zeitraum können auch die Trajektorien mit einer tolerablen Unsicherheit des Ortes berechnet werden. Durch die konzeptbedingte Vernachlässigung des Transportes können die chemischen Umwandlungen sehr ausführlich behandelt werden, so daß Box-Trajektorien-Modelle vorwiegend zur Abschätzung des Einflusses chemischer Umwandlungen auf die Spurenstoffkonzentrationen herangezogen werden.

Ist es dagegen das Ziel, Messungen in Erdbodennähe zu simulieren, wobei unterschiedliche biogene und anthropogene Quellen berücksichtigt werden sollen, so muß ein Modell herangezogen werden, welches Quellen und Senken der Substanzen am Rande der betrachteten Box angemessen berücksichtigen kann.

Da in dieser Schicht der Atmosphäre die Luftmasse im Energie-, Impuls- und Stoffaustausch mit dem Erdboden steht, muß die Dynamik dieser Luftschicht berücksichtigt werden (GARRAT (1992), STULL (1988)). Durch die sonnenbedingte Erwärmung des Erdbodens kommt es zu einer Aufheizung der bodennahen Schicht, deren Dichte dadurch gegenüber den darüberlagernden Luftschichten geringer ist. Dieser Dichteunterschied führt zu einem vertikalen Auftrieb der erwärmten Luftschicht, der sogenannten Konvektion. Da die Konvektion durch absinkende Luftmassen kompensiert wird, kommt es zu einer guten Durchmischung der untersten Luftschichten in der planetaren Grenzschicht, so daß sich in Bodennähe emittierte Substanzen rasch in der Mischungsschicht verteilen. Die Höhe dieser Mischungsschicht nimmt mit steigender Erwärmung

des Erdbodens im Laufe des hellen Tages zu, bricht aber nach Sonnenuntergang durch die fehlende Energiezufuhr zusammen. In der Nacht entwickelt sich eine stabile Schichtung in der planetaren Grenzschicht. Dies hat zur Folge, daß die Luftmassen, die sich nicht unmittelbar am Erdboden befanden, nun in der sogenannten Reservoirschicht verbleiben, deren Luftzusammensetzung sich, unbeeinflußt von Transportvorgängen, nur durch die chemischen Reaktionen der Nacht ändert. Unterhalb dieser Reservoirschicht baut sich in der Nacht langsam die sogenannte Bodeninversionsschicht auf. Da durch die stabile Schichtung der Austausch zwischen Bodeninversionsschicht und Reservoirschicht unterbunden ist, reichern sich Substanzen, die am Erdboden emittiert werden, in der Bodeninversionsschicht an. Erst nach Sonnenaufgang bildet sich langsam die Mischungsschicht wieder aus und die vertikale Verteilung der emittierten Substanzen beginnt.

Der oben beschriebene Tagesgang innerhalb der planetaren Grenzschicht wurde in parametrisierter Form beim 3-Box-Modell berücksichtigt. Eine skizzenhafte Darstellung dieser Parametrisierung befindet sich in Abbildung 3-1. Über der ersten Box, die die unterste Schicht der planetaren Grenzschicht darstellt und die den Meßpunkt enthalten soll, ist eine zweite Box angekoppelt. Darüber befindet sich eine dritte Box, die die freie Troposphäre simuliert. Die unterste Box besteht am Tage aus der konvektiven Mischungsschicht und in der Nacht aus der Bodeninversionsschicht. Die daran angekoppelte zweite Box repräsentiert die Reservoirschicht, deren Mächtigkeit im Laufe des hellen Tages immer mehr abnimmt, da die Höhe der Mischungsschicht immer mehr zunimmt, die Höhe der planetaren Grenzschicht aber als konstant angenommen wird. Im Laufe des Tages verschmelzen also die Boxen 1 und 2 miteinander, so daß die gesamte planetare Grenzschicht durch die Mischungsschicht ausgefüllt wird (siehe DERWENT (1990)). Da über den beiden Boxen noch eine dritte Box berücksichtigt wird, können auch die Einträge aus der freien Troposphäre in die planetare Grenzschicht berechnet werden. Dabei wird der Eintrag aus der freien Troposphäre in die planetare Grenzschicht durch eine Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung beschrieben, die aus meteorologischen Modellen abgeleitet werden kann (siehe SILLMAN ET AL. (1990)).

Die Benutzung dieses 3-Box-Modells kann nun für zwei Arten der Simulation von Meßwerten am Erdboden herangezogen werden. Ist der Meßpunkt Mittelpunkt eines räumlich homogenen Geländes, so besitzt aufgrund homogener Verteilung der Quellen die Angabe des Ursprungsortes des Luftpaketes, abgesehen von der Initialisierung, keine Bedeutung. Daher kann der Ort des Luftpaketes den Meßpunkt darstellen und die Simulation Konzentrationstagesgänge der Luftbestandteile berechnen. Macht dage-

gen eine inhomogene Verteilung der Quellen eine solche Behandlung unmöglich, so müssen sich die beiden unteren Boxen, die die planetare Grenzschicht darstellen, simultan entlang einer Trajektorie zum Meßpunkt bewegen. Dabei muß auch die zeitliche Varianz der Mischungsschichthöhe berücksichtigt werden. Tagesgänge am Meßpunkt können dann nicht durch einen einzigen Modellauf berechnet werden, sondern es muß jedes einzelne zu einem bestimmten Zeitpunkt am Meßpunkt ankommende Luftpaket berechnet werden.

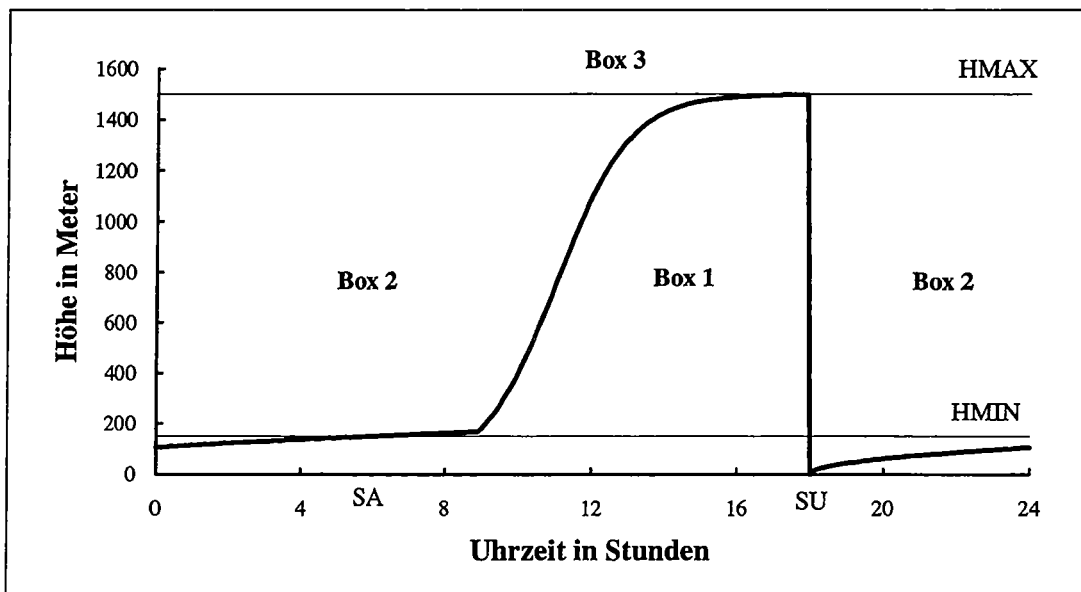


Abbildung 1-1: Skizzierte Darstellung der im 3-Box-Modell enthaltenen Parametrisierung des Tagesganges der Mischungsschicht in der planetaren Grenzschicht. Box 1 repräsentiert in der Nacht die Bodeninversionsschicht und am Tage die konvektive Mischungsschicht, Box 2 die Reservoirschicht und Box 3 die freie Troposphäre. HMAX gibt dabei die maximale Höhe der Mischungsschicht, die am Sonnenuntergang (SU) erreicht wird, und HMIN die Höhe, die die Mischungsschicht in der Nacht am Sonnenaufgang (SA) erreicht, an.

Die Anwendungsbreite des erstellten Multiboxmodells und die in dieses Modell eingebauten Analysemethoden wurden von RUHNKE (1995) anhand von vier Beispielen aus unterschiedlichen Bereichen der Atmosphäre demonstriert. Diese Beispiele sollen im folgenden kurz beschrieben werden.

- 1.) Im Bereich der stratosphärischen Chemie behalten die Luftmassen über einen Zeitraum von mehreren Tagen ihre chemische Identität. Stratosphärische Messungen eines NO_2 -Profils in mittleren Breiten zeigen eine Versetzung an, die durch die Geschichte des Luftpaketes bedingt zu sein scheint (HELTEN ET AL. (1994)). Die Simulation des Profils mit Hilfe des Box-Trajektorienmodells bestätigt diese Annahme. Die durchgeführten Analysen des Unsicherheitsbereiches der Modellaussagen legen

für weitere stratosphärische Meßkampagnen nahe, im Vorfeld Modellrechnungen durchzuführen, um die wichtigsten Parameter zu identifizieren und so das Luftpaket genauer zu charakterisieren.

- 2.) Messungen der Ozonkonzentrationen in Bodennähe weisen im Sommer Spitzen auf, die zu einer Gesundheitsbeeinträchtigung führen können. Die chemische Bildung des Ozons erfolgt durch ein Zusammenspiel der Belastung an Stickoxiden und Kohlenwasserstoffen. Dabei ist das Potential eines Kohlenwasserstoffs, Ozon zu bilden, von mehreren Faktoren abhängig. Unter Berücksichtigung dieser Abhängigkeiten wurden mit den Analysemethoden, die im Box-Trajektorien-Modell enthalten sind, die Ozonbildungspotentiale von unterschiedlichen Kohlenwasserstoffen bestimmt und eine Abschätzung der Beteiligungen der verschiedenen Stoffklassen an der chemisch gebildeten Ozonmenge durchgeführt.
- 3.) Die von Kraftfahrzeugen emittierten Substanzen erreichen in Straßenschluchten hohe Konzentrationswerte. Die Grenzwerte dieser Stoffe sind zumeist als statistische Kenngrößen definiert. Der Schadstoff Stickstoffdioxid wird nur zu einem geringen Anteil direkt emittiert und hauptsächlich aus der Oxidation der Primäremission von NO durch Ozon gebildet. Die durchgeführten Simulationen zeigen, daß die Abhängigkeiten der statistischen Kenngrößen durch die Analyse von Einzelfallrechnungen chemisch interpretiert werden können (ROMBERG ET AL. (1995)). Die analytische Identifizierung der wesentlichen chemischen Prozesse führt zu einer genauen Parametrisierung der Prozesse, die leicht in komplexe Modelle eingebaut werden kann.
- 4.) Laboruntersuchungen atmosphärisch-chemischer Prozesse leisten durch eine mögliche Isolierung bestimmter Details wertvolle Dienste für die gesamte atmosphärische Forschung. Experimente in einer Smogkammer liefern für den unimolekularen Zerfall des NO_3 und für die homogene Gasphasenreaktion des N_2O_5 mit Wasser eine genauere Bestimmung der Geschwindigkeitskonstanten dieser Reaktionen (BLEILEBENS (1994)). Die Simulation der experimentellen Untersuchung zeigt mittels der Analysemethoden die Abhängigkeit der Unsicherheit der erhaltenen Ergebnisse von den Eingangsgrößen auf. Dadurch liefern die Analysemethoden Vorschläge, wie weitere Experimente durchzuführen sind, um eine maximale Empfindlichkeit des untersuchten Systems bezüglich der beiden Reaktionen zu gewährleisten.

Im folgenden erfolgt eine Beschreibung der erstellten Programmodule des entwickelten Modells. Sie soll dazu dienen, die in den einzelnen Unterprogrammen verwendeten Algorithmen zu erläutern und so den Benutzern die Arbeit mit dem Modell zu erleichtern.

2. Das Hauptprogramm

Das Hauptprogramm dient dazu, die Berechnung der tageszeitabhängigen Konzentrationen der im Reaktionssystem enthaltenen Spezies zu steuern. Das Ablaufdiagramm ist in Abbildung 2-1 dargestellt.

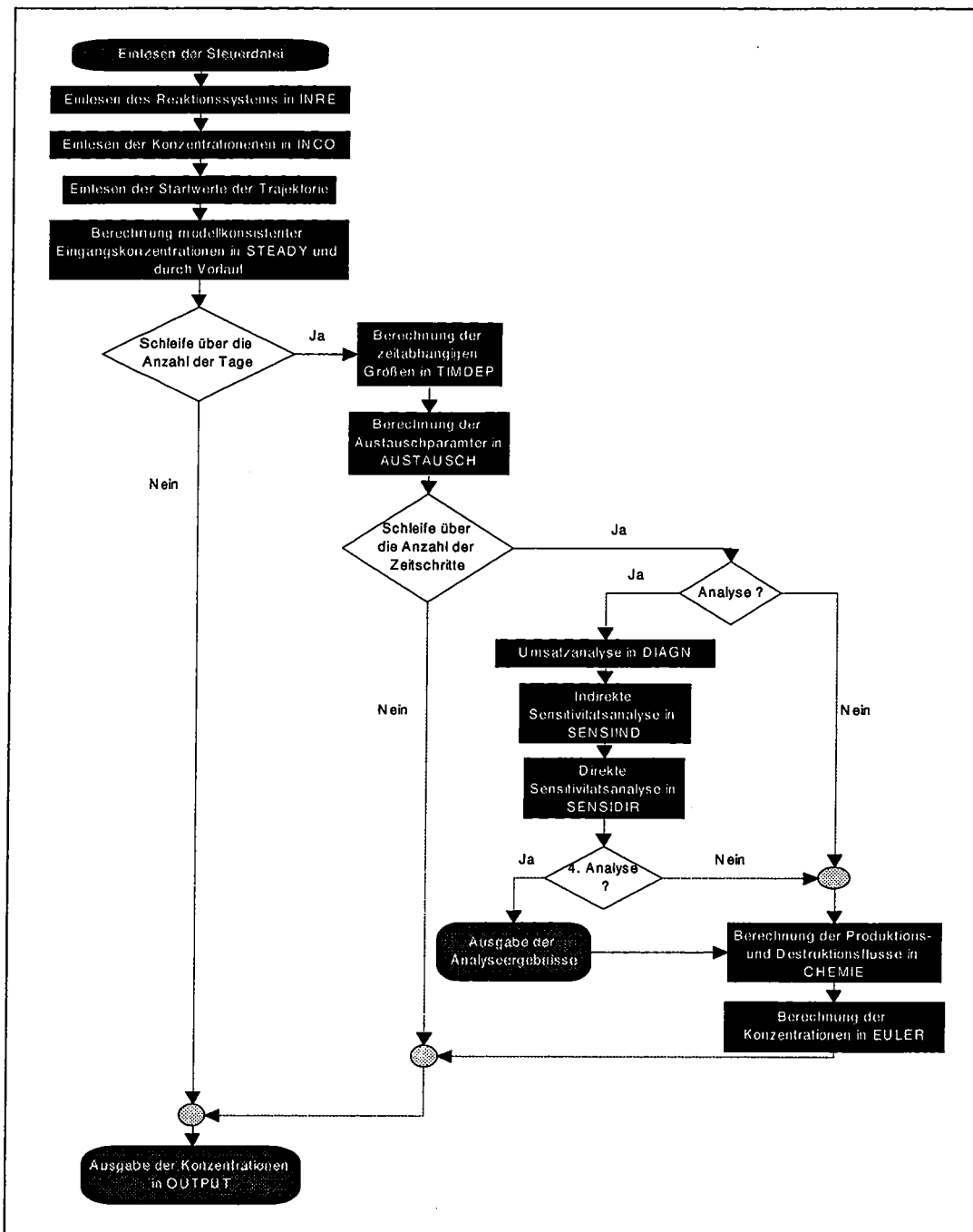


Abbildung 2-1: Ablaufdiagramm des Box-Modells

Durch den modularen Aufbau bedingt, wird zu Beginn die Steuerdatei *steuer.dat* (siehe Tabelle 2-1) aufgerufen, in der die für den Ablauf wichtigen Informationen zusammengefaßt sind. Die Parameter dieser Datei bestimmen also den jeweiligen Ablauf des Rechenprogramms.

Tabelle 2-1: Beispiel für die Steuerdatei *steuer.dat*

```
C Name der Datei, die das Reaktionssystem enthält
tropo.rea
C Name der Datei, die die Startkonzentrationen enthält
tropo.kon
C Name der Datei, die die Trajektorie enthält
tropo2.tra
C Name der Ausgabedatei
tropo.aus
C Abfrage, ob freies Trajektorien-Modell (1) oder 2-Box-Modell (2)
2
C Abfrage, ob Wolke im System (1), oberhalb (2) oder keine (0)
0
C Abfrage, ob Ausgabe alle 10 Minuten (1) oder jeden Stützpunkt (2)
1
C Abfrage nach Art der Zeitschrittsteuerung (1:Funktion/2:Umsatz/3:Fehler)
3
C Abfrage, ob eine Analyse gewünscht wird
Analyse(Ja=1):1, 1.Analyse:12. , Intervall [h]: 3. , TKRIT [s]: 300.
```

Zunächst werden die Eingabedateien geöffnet und eingelesen. Zum einen ist dies die Datei, die das Reaktionssystem mit den entsprechenden temperatur- und druckabhängigen Geschwindigkeitskonstanten der Reaktionen und den Unsicherheiten der Reaktionskonstanten enthält, und zum anderen die Eingabedatei der Konzentrationen, in der die Startkonzentrationen, die Quellstärken, die Depositionsraten der im Reaktionssystem enthaltenen Substanzen, sowie die Zusammensetzung möglicher Substanzfamilien bestimmt sind. Anschließend werden der Name der Eingabedatei der Trajektorie, die neben der Stromlinie des Luftpaketes noch weitere zeitabhängige Größen enthält, sowie der Name der Ausgabedatei eingelesen und letztere geöffnet.

Der nächste Steuerparameter, der abgefragt wird, ist die Wahl des gewünschten Modelltyps. Dies kann entweder ein Trajektorien-Modell sein, welches die chemische Identität des Luftpaketes sowie die Bewegung des Luftpaketes auf einer Equipotentialfläche voraussetzt und so für Simulationen von Luftpaketen in der freien Troposphäre

und Stratosphäre geeignet ist. Oder man wählt die Option des 3-Box-Modells, welches dazu geeignet ist, die Ergebnisse von Messungen in Erdbodennähe zu simulieren, da es die tageszeitliche Variation der Mischungsschichthöhe zusammen mit der damit verbundenen Einmischung von Luftmassen aus höheren Luftschichten in die planetare Grenzschicht berücksichtigt.

Desweiteren kann die Option einer zusätzlichen flüssigen Phase ausgewählt werden, die sich, wenn sie simuliert werden soll, entweder in oder oberhalb der Box(en) befindet, zum anderen muß noch angegeben werden, zu welchem Zeitpunkt die Ausgabe erfolgen soll. Dies kann entweder alle 10 Minuten oder an den Stützstellen, die in der Trajektorieneingabedatei definiert werden, geschehen.

Ein weiterer Steuerparameter ist die Art der Zeitschrittsteuerung, wobei man zwischen drei Arten wählen kann:

- a) Der Zeitschritt wird durch eine maximal mögliche Konzentrationsänderung berechnet ("Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung").
- b) Der Zeitschritt wird durch den maximalen Fehler, der bei Konzentrationsberechnung erlaubt ist, berechnet ("Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung").
- c) Der Zeitschritt wird durch eine aus Erfahrungswerten gebildete Funktion gesteuert.

Der abschließende Steuerparameter bezieht sich auf eine mögliche Diagnose mit den folgenden zusätzlichen Informationen: der Zeit der ersten Diagnose, Anzahl der zu durchlaufenden Diagnosen und der zeitliche Abstand dieser, sowie die Größe des kritischen Zeitschrittes in Sekunden.

Danach sind alle Steuerparameter definiert, und die Steuerdatei wird geschlossen.

Anschließend werden aus der Eingabedatei der Trajektorie (siehe Tabelle 2-2) heraus die für das zu simulierende System wichtigen Randbedingungen eingelesen. Diese Randbedingungen bestehen aus der potentiellen Temperatur, der Anzahl der zu simulierenden Tage, der Temperatur und dem Druck der Box. (Letztere dienen lediglich dazu, die zu den Startbedingungen gültigen Geschwindigkeitskonstanten für die Auflistung in der Ausgabedatei zu berechnen.) Die potentielle Temperatur der Box wird dagegen dazu benötigt, im Falle der gewählten Option des Trajektorienmodells, die Equipotentialfläche und somit zusammen mit der in der Trajektorieneingabedatei angegebenen zeitabhängigen Temperatur den Druck des Luftpaktes zu definieren. Über diesen wird dann die Höhe der Box berechnet. Für das 3-Box-Modell wird der Druck in der Box aus den mittleren Höhen der einzelnen Boxen (siehe Kapitel 6 und Kapitel 13.4) errechnet.

Die nächsten anzugebenden Randwerte sind die der flüssigen Phase, die allerdings nur dann eine Bedeutung bei der Simulation besitzen, wenn die entsprechende Option in der Steuerdatei gewählt wurde. Zu diesen Randwerten gehört der Flüssigwassergehalt, der in [g pro Kubikzentimeter] angegeben werden soll, der pH-Wert des Wolkenwassers, die Regenrate in [mm pro Stunde], die programmintern in [cm/s] umgerechnet wird, den Zeitpunkten des Beginns und des Endes eines Regens, sowie der Tag an dem der Regen fallen soll. Wird dabei als Tag eine negative Zahl eingegeben, so regnet es zwischen den definierten Zeitpunkten an jedem zu simulierenden Tag.

Tabelle 2-2: Beispiel für eine Eingabedatei einer Trajektorie

```

File :
tropo.tra      Enddatum : 22 08 1992      pot.Temp.: 298. [K]
  2      Tage
298.      Kelvin
1013.      mbar
  0.15 CLW 4.0 pH 0.25 mm/h 12.00 ReBe 13.00 ReEn -1 TagRe
  2x 150. HMIN 1500. HMAX 11.00 THAL -8.50 TFAL 1.00E-05 ka [s-1]
FORMAT (2X,I2,I2,1X,I2,1X,I2,1X,I2,A1,F7.2,F7.2,F6.1,F7.2,F7.2,F7.2)
Datum      Zeit      * Breite  Länge Temp.      ANT      BIO      SON
      [h][m][s]      [°N]      [°E]      [K]
920821 10  0  0      50.93      6.36 296.0      0.00      0.00      0.00
920821 12  0  0      50.93      6.36 298.0      0.         0.         .
920821 14  0  0      50.93      6.36 296.0      0.         0.         0.00
920821 16  0  0      50.93      6.36 294.0      0.         0.         .
920821 18  0  0      50.93      6.36 292.0      0.         0.         .
920821 20  0  0      50.93      6.36 290.0      0.         0.         .
920821 22  0  0      50.93      6.36 288.0      0.         0.         .
920822 24  0  0      50.93      6.36 286.0      0.         0.         .
920822  4  0  0      50.93      6.36 288.0      0.         0.         .
920822  8  0  0      50.93      6.36 290.0      0.         0.         .
920822 12  0  0      50.93      6.36 292.0      0.         0.         .
920822 16  0  0      50.93      6.36 294.0      0.         0.         .
920822 20  0  0      50.93      6.36 296.0      0.         0.         .
920822 24  0  0      50.93      6.36 298.0      0.         0.         .

```

Als weitere Parameter werden die Randbedingungen für die Variabilität der Mischungsschichthöhe für die Anzahl der definierten Tage eingelesen, die aber nur dann eine Bedeutung in der Simulation besitzen, falls das 3-Box-Modell in der Steuerdatei gewählt wurde.

Diese Mischungsschichtparameter bestehen aus einem Faktor, der angibt, an wievielen aufeinander folgenden Tagen die tageszeitliche Variation der Mischungsschicht identisch ist, der Mischungsschichthöhe *HMIN*, die in der Nacht erreicht wird, der maximalen Höhe *HMAX*, dem Zeitpunkt *THAL*, an dem beim Anstieg der Mischungsschicht die halbe maximale Höhe erreicht wird, und dem Zeitpunkt *TFAL*, der angibt, wann die Mischungsschicht zusammenbricht. Ist *TFAL* ein negativer Wert, so bricht die Mischungsschicht am entsprechenden Tag beim Sonnenuntergang zusammen. Neben diesen Werten wird in der Zeile noch die Austauschfrequenz k_a in $[s^{-1}]$ zwischen freier Troposphäre und planetarer Grenzschicht, die für alle Substanzen identisch ist, angegeben.

Sind diese Werte bestimmt, so werden die Unterprogramme INRE bzw. INCO (siehe die Kapitel 3 und 4) aufgerufen, die aus den beiden entsprechenden Dateien heraus das Reaktionssystem mit den zugehörigen Konstanten und den Unsicherheiten dieser bzw. die Anfangskonzentrationen in den Boxen sowie die Quellstärken, Depositionsgeschwindigkeiten und Unsicherheiten in den Startkonzentrationen einlesen.

Anschließend werden noch die ersten beiden Stützstellen der Trajektorie eingelesen, die aus dem Datum, der Zeit (als Universal Time) und dem geographischen Ort der Box, der definiert ist durch seine geographische Breite und Länge, bestehen. Weitere eingelesene Werte sind die aktuelle Temperatur der Box, sowie die relativen Quellstärken $q(t)$ anthropogener (ANT), biogener (BIO) oder sonstiger (SON) Quellen. Diese unterschiedlichen Quellstärken können natürlich auch dazu benutzt werden, unterschiedliche Quellen (z.B. auch alle rein biogen) zu definieren.

Desweiteren kann zwischen der Angabe der Zeit und der geographischen Breite ein * angegeben werden, der dem Programm signalisiert, daß sich zu diesem Zeitpunkt die Simulationsbedingungen so ändern, daß aus der Eingabedatei der Konzentrationen heraus neue, ab dann gültige Substanzfamilien eingelesen werden müssen. Dieser Wechsel der Simulationsbedingungen, der mit einer Änderung der Familienzusammensetzung einhergehen kann, kann während einer Simulation dann nötig werden, wenn zum Beispiel eine sehr starke Emission auftritt, die das Reaktionssystem erheblich stört und aus dem Gleichgewicht bringt.

Ist so das Reaktionssystem bestimmt worden, wird das Unterprogramm TIMDEP (siehe Kapitel 6) aufgerufen, welches die zeitabhängigen Größen berechnet und zunächst auf ihre Anfangswerte initialisiert. Anschließend werden im Unterprogramm STEADY (siehe Kapitel 5) die eingelesenen Konzentrationen der Radikale auf ihre Modellkonsistenz innerhalb der in INCO eingelesenen Substanzfamilien geprüft und

entsprechend geändert. Dies muß geschehen, da bei unzureichender Modellkonsistenz das Reaktionssystem aufgrund großer Umsetzungsraten mancher Reaktionen zu Beginn des Modellaufs divergieren kann.

Nach dieser Prozedur ist das Reaktionssystem mit den dazugehörigen Anfangsbedingungen eindeutig festgelegt, und die zeitabhängige Rechnung beginnt.

Bei dieser läuft eine Schleife über die zu berechnenden Tage, bei der zunächst Parameter für den Zeitpunkt der Ausgabe festgelegt werden. Nachfolgend werden im Unterprogramm TIMDEP (siehe Kapitel 6) die zeitabhängigen Größen wie lokale Zeit und geographischer Ort des Luftpaketes, Temperatur, falls das 3-Box-Modell gewählt wurde, die Höhe der Mischungsschicht, Größe und Anzahl der Zeitschritte, Temperatur, aktuelle Geschwindigkeitskonstante und Photolysefrequenz u.s.w. errechnet. Anschließend wird das Unterprogramm AUSTAUSCH (siehe Kapitel 7) aufgerufen, welches die Austauschraten aller Substanzen zwischen Box und Boden, zwischen den Boxen, sowie zwischen den Boxen und der freien Troposphäre errechnet.

Mit Hilfe der in TIMDEP berechneten Anzahl der Zeitschritte läuft eine Schleife über diese, worin die Unterprogramme CHEMIE (siehe Kapitel 8) zur Berechnung der Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen und EULER (siehe Kapitel 9) zur Berechnung der neuen Konzentrationen iterativ aufgerufen werden und anschließend die Größe des Zeitschrittes zur aktuellen Zeit addiert wird. Überschreitet die aktuelle Zeit den zuletzt eingelesen Zeitwert des Luftpaketes, so werden die neuen Koordinaten der Trajektorie eingelesen. Falls dabei die neue Stützstelle der Trajektorie einen Tag überschreitet, ohne daß die Stützstelle 24.00 Uhr definiert war, so wird diese Stützstelle aus technischen Gründen programmintern eingeführt und die zugehörigen zeitabhängigen Werte durch lineare Interpolation zwischen der letzten vorhandenen und der neuen, noch nicht zur Berechnung herangezogenen Stützstelle ermittelt. Es empfiehlt sich jedoch, den Stützpunkt um 24 Uhr bereits in die Trajektoriendatei aufzunehmen.

Ebenfalls wird, falls der Zeitpunkt den oben definierten Ausgabeparameter überschreitet, das Unterprogramm OUTPUT (siehe Kapitel 10) aktiviert, welches die Konzentrationen zu diesem Zeitpunkt speichert.

Wurde in der Steuerdatei die Durchführung der Diagnose des Reaktionssystems gewünscht, so werden die Unterprogramme DIAGN (siehe Kapitel 11), SENSIIND und SENSIDIR (siehe Kapitel 12) zu den angegebenen Zeitpunkten gestartet. Ersteres bestimmt dabei die Umsatzraten der einzelnen Reaktionen bei den gegebenen Bedingungen und ermöglicht so eine Gewichtung der Bedeutung einer einzelnen Reaktionen zum Gesamtumsatz jeder Substanz, sowie die Berechnung der Lebensdauern der ein-

zeln Substanzen. Diese Werte werden dann in der Diagnoseausgabedatei *diag.dat* gespeichert. Die beiden anderen Unterprogramme dienen dazu, die Abhängigkeiten der Substanzen untereinander sowie zu den Reaktionen im System zu analysieren und mit Hilfe der so errechneten Sensitivitätskoeffizienten zusammen mit den Unsicherheiten der verwendeten Reaktionskonstanten die Unsicherheit der Modellaussage abzuschätzen. Die Ausgabe erfolgt in die Dateien *sensiind.kon* bzw. *sensiind.rk* für die mit SENSIIND berechneten Sensitivitäten bezüglich der Konzentration bzw. der Geschwindigkeitskonstanten und in die Dateien *sensidir.kon* bzw. *sensidir.rk* für die mit SENSIDIR berechneten Sensitivitäten.

Ist der letzte Punkt der Trajektorie erreicht und abgearbeitet oder der letzte zu berechnende Tag vergangen, so werden die Simulationsergebnisse gespeichert, alle geöffneten Dateien geschlossen und der Modellauf beendet.

Tabelle 3-2: Temperatur- und Druckabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten und zugehöriges Reaktionskennzeichen. Die Konstanten sind mit K_1 bis K_6 und die Temperatur mit T bezeichnet.

--->: Temperaturabhängigkeit nach Arrhenius:

$$k = K_1 e^{-\frac{K_2}{T}}$$

-T->: Temperatur- und Druckabhängigkeit nach Troe:

$$k = \frac{K_1 \left(\frac{T}{300} \right)^{-K_2} [M]}{(1+y)} \cdot K_5^{\left(\frac{1}{1+(\log_{10} y)^2} \right)}$$

$$\text{mit } y = \frac{K_1 \left(\frac{T}{300} \right)^{-K_2} [M]}{K_3 \left(\frac{T}{300} \right)^{-K_4}}$$

-A->: Temperaturabhängigkeit nach:

$$k = K_1 \left(\frac{T}{300} \right)^{-K_2}$$

-B->: Temperaturabhängigkeit nach:

$$k = K_1 e^{-\frac{K_2}{T}} T^{K_3}$$

-C->: Temperaturabhängigkeit nach:

$$k = x + \frac{z[M]}{1 + \frac{z[M]}{y}}$$

$$\text{mit } x = K_1 e^{-\frac{K_2}{T}}, \quad y = K_3 e^{-\frac{K_4}{T}}, \quad z = K_5 e^{-\frac{K_6}{T}}$$

-E->: Temperatur- und Druckabhängigkeit nach:

$$k = \frac{K_1 e^{-\frac{K_2}{T}} [M]}{(1+y)} \cdot K_5^{\left(\frac{1}{1+(\log_{10} y)^2} \right)}$$

$$\text{mit } y = \frac{K_1 e^{-\frac{K_2}{T}} [M]}{K_3 e^{-\frac{K_4}{T}}}$$

Die Berechnung der Photolysefrequenz erfolgt für jede Photodissoziation mit Hilfe folgender Näherungsformel (RÖTH (1995)), die die exakten Photodissoziationsgeschwindigkeiten mit ausreichender Genauigkeit wiedergibt, in Abhängigkeit vom Zenitwinkel χ :

$$j = j_0 e^{b \left(1 - \frac{1}{\cos(c \cdot \chi)} \right)} \quad (3.1)$$

Die in dieser Näherungsformel enthaltenen Konstanten j_0 , b und c , die für jede Photolyse spezifisch sind, werden dem Programm FLUX (RÖTH (1995)) entnommen. Dabei ist zu beachten, daß diese Konstanten höhenabhängig sind, so daß sie für die spezielle Höhe des Luftpaketes angegeben werden müssen. Als weitere, den Photonenfluß bestimmende Größe geht die Ozon-Konzentration in die Rechnung ein, und damit werden die Konstanten j_0 , b und c orts- und jahreszeitabhängig. Dies ist bei der Erstellung des Reaktionssystems zu beachten.

Tabelle 3-3: Auszug aus einem Reaktionssystem

----- Photolyse			
O3	-->	O(1D) + O2	
3.34E-05	4.57799	0.77710	
O3	-->	O + O2	
5.42E-04	0.38042	0.91252	
H2O2	-->	OH + OH	
7.80E-06	1.95780	0.79676	
NO2	-->	O + NO	
1.06E-02	1.09685	0.82538	
NO3	-->	NO + O2	
2.78E-02	0.29808	0.92780	
NO3	-->	NO2 + O	
2.76E-01	0.33841	0.91965	
N2O5	-->	NO2 + NO2 + O	
3.79E-05	1.76366	0.79865	
...			

Für Oxidationsreaktionen in der flüssigen Phase sind zwei Kennzeichnungen für unterschiedliche pH-Wertabhängigkeiten der Geschwindigkeitskonstanten vorgesehen (Tabelle 3-4). Dabei werden die Konstanten für die mittlere Tagestemperatur während der Simulation angegeben. Eine explizite Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit dieser Geschwindigkeitskonstanten ist nicht notwendig, da die Unsicherheiten in

den Reaktionskonstanten bezüglich der pH-Wertabhängigkeit größer sind als die Fehler, die durch das Einsetzen lediglich der mittleren Tagestemperatur entstehen.

Tabelle 3-4: pH-Wertabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten der Flüssigphasenoxi-
dationsreaktionen.

$$\begin{aligned} \text{-O-}>: \text{ pH-Wertabhängigkeit: } k &= \frac{K_1}{(K_2 + 10^{-\text{pH}})} \\ \text{-R-}>: \text{ pH-Wertabhängigkeit: } k &= K_1 + \frac{K_2}{10^{-\text{pH}}} \end{aligned}$$

Sind alle Reaktionen in der Gasphase aufgelistet und sollen Gleichgewichte zwischen der Gas- und Flüssigphase berücksichtigt werden, so dient als Trennungszeichen zwischen den Gasphasenreaktionen und den Gleichgewichten die Zeile "*****". Auch bei den heterogenen Gleichgewichten wird jedes Gleichgewicht durch zwei Zeilen repräsentiert.

Tabelle 3-5: Auszug aus einem Reaktionssystem

```
***** GLEICHGEWICHTE
SO2 -G-> SO2aq + HSO3aq + SO3aq
1.98E+00  2.29E-02  8.44E-08
O3 -H-> O3aq
2.34E-02
*****
```

Die Gleichgewichte werden dabei durch die Henry-Konstante beschrieben. Diese wird für jede lösliche Substanz durch das *Henry'sche Gesetz* definiert, wobei H als Proportionalitätskonstante auftritt.:

$$p_i = H_i x_i(aq) \quad (3.2)$$

Hierbei entspricht p_i dem Partialdruck der Substanz i in der Gasphase, H_i der Henry-konstante und $x_i(aq)$ dem Molenbruch des gelösten Stoffes i in der Flüssigphase.

Als Kennzeichen dienen für die heterogenen Gleichgewichte die Zeichen -H-> und -G->, wobei das flüssige Wasser nicht als Reaktionspartner in der Reaktionszeile anzugeben ist, da dies schon implizit durch die Angabe der Reaktionskennzeichen geschieht. Aus programmtechnischen Gründen wird auch bei Gleichgewichten ein Pfeil -x-> als Trennung zwischen Edukten und Produkten eingesetzt.

Das Kennzeichen -H-> gilt für die Gleichgewichte, bei denen die entstehende aquatisierte Substanz keinerlei Dissoziation unterliegt und die Aufnahme des Stoffes in die Flüssigphase direkt durch das *Henry'sche Gesetz* beschrieben wird. Als Gleichgewichtskonstante ist dabei in der nächsten Zeile die Henry-Konstante für die mittlere Tagestemperatur anzugeben.

Tabelle 3-6: pH-Wertabhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten H^* der Flüssigphasengleichgewichte.

$$\text{-H->: } H^* = K_1$$

$$\text{-G->: pH-Wertabhängigkeit nach: } H^* = K_1 \left(1 + \frac{K_2}{\text{pH}} + \frac{K_2 K_3}{\text{pH}^2} \right)$$

Unterliegen die gelösten Substanzen einer Dissoziation, so muß das Reaktionskennzeichen -G-> verwendet werden, wobei in der Reaktionszeile als Edukt die Substanz in der Gasphase und als Produkte die durch Dissoziation entstehenden gelösten Spezies eingetragen werden müssen. Bei dieser Angabe sind dann in der nächsten Zeile die Henry-Konstante sowie die entsprechenden Dissoziationskonstanten anzugeben.

Diese Art der Eingabe ist nötig, da die Löslichkeit der Substanz in diesem Fall vom pH-Wert abhängig ist, so daß die Henry-Konstante durch eine effektive Henry-Konstante H^* ersetzt werden muß.

Sind die Druck-, Temperatur- und pH-Wertabhängigkeiten der Geschwindigkeitskonstanten und der Gleichgewichtskonstanten mit den entsprechenden Konstanten bestimmt, wird die Zeile, in der die Reaktion aufgeführt ist, in das Unterprogramm DECODE eingelesen. Dort werden die Anzahl und die Namen der Edukte und der Produkte in der Reaktion ermittelt, wobei Plus-Zeichen zwischen den Reaktionsteilnehmern als Trennungszeichen gedeutet und Leerzeichen überlesen werden. Als Trennungszeichen zwischen den Edukten und den Produkten dient der Reaktionspfeil.

Die maximale Anzahl an Edukten ist dabei auf drei Substanzen, die der Produkte auf vier Substanzen festgesetzt, wobei stöchiometrische Faktoren nicht vorgesehen sind,

so daß im Falle von zwei entstehenden Molekülen der Spezies X diese einzeln aufgeführt werden müssen. Dies ist keine Einschränkung, da für Gasphasenreaktionen nur Systeme mit Elementarreaktionen sinnvoll sind.

Fehlt bei der Angabe einer trimolekularen Reaktion der dritte Stoßpartner, so bricht das Programm ab und der dritte Stoßpartner wird eingefordert.

Sollen zur besseren Lesbarkeit Kommentare eingefügt werden, so kann dies nach der Angabe von "-----" geschehen.

Ist die Reaktion im Unterprogramm DECODE aufgenommen, so wird anschließend das Unterprogramm COMP aufgerufen. Dort werden die Namen der im Reaktionssystem enthaltenen Spezies in der Reihenfolge ihres Auftretens im System abgespeichert. Entsprechend dieser Reihenfolge erhalten die Reaktionsteilnehmer ihre für das spezielle Reaktionssystem gültige Substanznummer. Die Nummern werden anschließend wieder der Reaktion zugeordnet, so daß jetzt jede Reaktion erstens durch eine laufende Nummer und zweitens durch die als Zahlenfolge codierte Reaktionsgleichung in einer Symboltabelle abgespeichert werden kann. Diese Symboltabelle steuert dann die weiteren Berechnungen.

Zur Zeit bestehen folgende Begrenzungen für das Reaktionssystem:

Die maximale Zahl an Reaktionen und Gleichgewichten darf insgesamt 280 nicht überschreiten, wobei höchstens 140 Substanzen, einschließlich der Familien und Kontrollsummen (siehe das Unterprogramm INCO), zulässig sind. Diese Zahlen können bei Bedarf geändert werden.

Sind alle Reaktionen und Gleichgewichte eingelesen, so wird das komplette Reaktionssystem mit den zugehörigen Reaktionskennzeichen und Geschwindigkeitskonstanten in der im Hauptprogramm definierten Ausgabedatei ausgegeben.

4. Das Unterprogramm INCO

Das Unterprogramm INCO dient dazu, die Anfangskonzentrationen aller im Reaktionssystem enthaltenen Substanzen in den zu simulierenden Boxen (einer im Falle des Trajektorienmodells und dreier im Falle des 3-Box-Modells) und etwaige Quellstärken, Depositionsgeschwindigkeiten und Unsicherheitsfaktoren einzulesen. Außerdem werden dort Substanzgruppen (Familien) definiert, innerhalb derer ein temporärer stationärer Zustand angenommen wird. Desweiteren werden die Angaben über Kontrollsummen eingelesen, die zur Überprüfung des Systems dienen. Sollen dabei zur besseren Lesbarkeit Kommentare eingefügt werden, so kann dies in der Zeile nach der Angabe von "-----" geschehen.

Ein Beispiel für eine Konzentrationseingabedatei befindet sich in Tabelle 4-1. Die Konzentrationen müssen dabei so angegeben werden, daß zunächst der Name der Substanz und dann ein Doppelpunkt als Trennungszeichen aufgeführt wird. Anschließend wird die Konzentration in der ersten Box in [Moleküle pro Kubikzentimeter] eingelesen. (Diese entspricht im Falle des 3-Box-Modells der unteren Box.) Soll die Konzentration einer Substanz während der Rechnungen konstant bleiben, so wird dem Konzentrationswert ein "c" angehängt. Für alle in der Flüssigphase enthaltenen Substanzen muß dagegen ein "g" angehängt werden. Für die Substanzen, die zur Sensitivitätsanalyse herangezogen werden sollen, dient ein "s" zur Kennzeichnung.

Nach dieser für jede Substanz, egal ob das Trajektorien- oder das 3-Box-Modell gewählt wurde, obligatorischen Konzentrationsangabe folgt ein Semikolon als Trennungszeichen. Die nachfolgenden Spalten 2 bis 5 besitzen dann nur noch eine Bedeutung, falls das 3-Box-Modell gewählt wurde.

Die zweite Spalte und somit der erste optionale Wert entspricht der Konzentration in der dritten, obersten Box, die die freie Troposphäre oberhalb der Mischungsschicht repräsentieren soll. Da für diese dritte Box die Substanzkonzentrationen während der Simulation als konstant angenommen werden, sollten nur die langlebigen Substanzen mit einer Konzentration in der dritten Box versehen werden. Die Konzentrationen in der zweiten Box werden zu Beginn der Simulation den Konzentrationen in der untersten Box gleichgesetzt. Die dritte Spalte dient der Angabe einer Quellstärke der Substanzen in $[\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$, wobei zur Zeit angenommen wird, daß die Emission nur in die unterste Luftmasse hinein erfolgt. Die Quellstärke $\bar{q}_i$ soll dabei einem Tagesmittel-

Tabelle 4-1: Beispiel für eine Konzentrationseingabedatei

Substanz:	C(Box1)	C(Box2)	Quellstärke	Dep. Geschw.	r. Uns.
N2	: 1.82E+19c;				
O2	: 5.30E+18c;				
H2O	: 4.45E+17c;				
CH4	: 4.61E+13 ;	4.55E+13;	3.00E+12a;		
C2H6	: 5.20E+10 ;		3.75E+10a;		
C2H4	: 1.00E+09 ;		6.50E+10a;		
C2H2	: 1.00E+09 ;		1.50E+10a;		
C3H8	: 1.20E+10 ;		7.75E+10a;		
CO	: 6.91E+12 ;	3.54E+12;	3.00E+12a;		
CO2	: 8.80E+15c;				
O(1D)	: 7.10E-03 ;				
O	: 1.90E+03 ;				
O3	: 7.15E+11 ;	1.01E+12;		0.50E+00;	1.2
OH	: 3.60E+06 ;				
HO2	: 2.20E+08 ;				
H2O2	: 2.56E+09 ;			1.00E+00;	
NO	: 7.00E+11 ;		5.00E+11a;		
NO2	: 1.30E+12 ;	5.06E+09;	2.00E+10a;	0.50E+00;	1.2
NO3	: 6.78E+09 ;				
N2O5	: 1.92E+11 ;			1.00E+00;	
HNO2	: 1.28E+11 ;				
HNO3	: 7.68E+11 ;			2.50E+00;	
HNO4	: 1.04E+08 ;			2.50E+00;	
CH2O	: 2.00E+10 ;			0.50E+00;	
CH3OOH	: 1.00E+08 ;				
...					

Oodd = O(1D) + O + O3					
Hodd = OH + HO2					
Nodd = NO + NO2 + NO3 + N2O5 + N2O5					

VOC = C2H6+C2H4+C2H2+C3H8+CH2O+CH3CHO+C2H5CHO+PAN+CH3OOH+CH3COCH3+CH3O2					
NOZ = Nodd + HNO2 + HNO3 + HNO4 + PAN					

wert entsprechen, für die Zeitabhängigkeit sorgen die in der Trajektorieneingabedatei anzugebenden Faktoren ANT, BIO und SON. Falls eine Quellstärke angegeben wird, muß diese entsprechend der Herkunft der Emission mit einem Kennzeichen versehen werden, um die relative Zeitabhängigkeit der Quellstärke $q(t)$, die in der

Trajektorieneingabedatei eingelesen wird, zu berücksichtigen. So muß, falls die Emission anthropogener Natur ist, der Quellstärke ein "a", falls sie biogener Natur ist, ein "b" und für alle anderen Fälle (kurzzeitiger Schadstoffausstoß etc.) ein "c" angehängt werden.

Die Senke einer Substanzkonzentration am Boden, die trockene Deposition, bildet die vierte Spalte, wobei dort die Depositionsgeschwindigkeit v_{Dep} in $[cm \cdot s^{-1}]$ angegeben wird. Die fünfte Spalte wird zur Zeit überlesen und ist somit ohne Bedeutung.

Die letzte und sechste Spalte bleibt der Angabe der relativen Unsicherheiten der Startkonzentrationen vorbehalten, wobei diese Werte zur Angabe des Unsicherheitsbereiches der Modellaussage herangezogen werden (siehe Kapitel 12).

Als Trennung zwischen den Angaben dient jeweils wieder ein Semikolon.

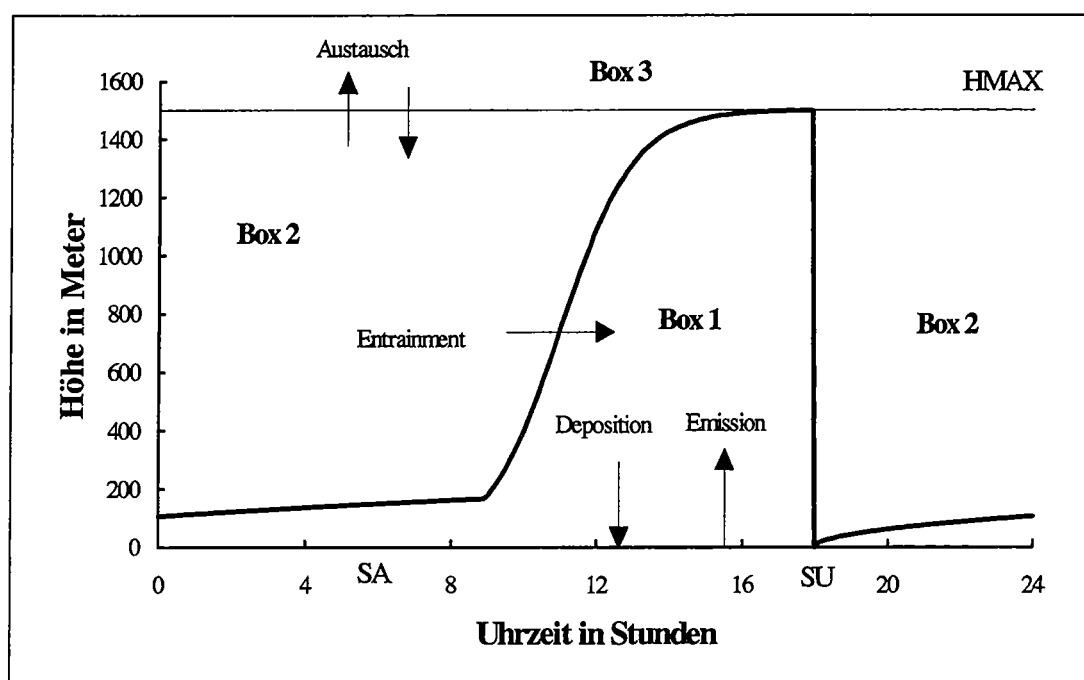


Abbildung 4-1: Skizzierung der Austauschmöglichkeiten innerhalb des 3-Box-Modells.

Der eingelesene Konzentrationsname wird mit den durch die Angabe des Reaktionssystems bekannten Spezies verglichen, und bei einer Übereinstimmung wird unter der entsprechenden Substanznummer die Konzentration sowie die Option "konstant" oder "gelöst" gespeichert. Wurde eine Konzentration für einen Stoff angegeben, der nicht Bestandteil des Reaktionssystems ist, so wird dies in der Ausgabedatei vermerkt. Werden keine Daten für die Konzentrationen in der dritten Box, der Quellstärke oder der Depositionsgeschwindigkeit für einzelne Substanzen angegeben, so bleibt der Initialisierungswert von 0, der im Block-Data-Unterprogramm CHARAC (siehe Kapitel 13.2) definiert wird, bestehen.

In fast jedem Reaktionssystem existieren reaktive Spezies, für die innerhalb eines Zeitschrittes ein stationärer Zustand angenommen werden kann. Diese können dann in Substanzfamilien zusammengefaßt werden, wobei die Umsatzraten der Austauschreaktionen der Mitglieder untereinander groß sind, die der gesamten Familie jedoch gering. Um nun solche Familien zu definieren, kann hinter der Eingabematrix nach der notwendigen Trennung durch die Zeile "*****" die Angabe der Familienzusammensetzung und nach einer weiteren Trennung durch "*****" die Angabe von Kontrollsummen, die der Überprüfung des Reaktionssystems dienen, erfolgen.

Die Angabe der Familienzusammensetzung muß dabei so erfolgen, daß zunächst der Name der Familie aufgeführt wird. Ein Gleichheitszeichen dient dann als Trennungszeichen für die darauf folgenden Namen der Familienmitglieder, die durch ein "+" getrennt werden. Ist es notwendig, daß eine Substanz mehrfach zu einer Familie gezählt werden soll, so muß diese entsprechend häufig explizit aufgeführt werden.

Ist der Name der Familie eine bereits im Reaktionssystem enthaltene Substanz, so wird eine Meldung ausgegeben, und das Programm bricht den Durchlauf ab. Ist dies nicht der Fall, so wird die Familie programmintern als weitere Substanz in das Reaktionssystem aufgenommen und unter einer zusätzlichen Substanznummer abgespeichert. Unter dieser Substanznummer wird schließlich auch die Gesamtkonzentration der Familie, die sich aus der Aufsummierung der Konzentrationen der Familienmitglieder ergibt, abgespeichert.

Nach der Trennung durch "*****" wird die Eingabe durch die Erfassung der Kontrollsummen zunächst beendet. Diese sind wie die Familien aufgebaut. Einziger Unterschied zur Behandlung der Familien ist die Möglichkeit, Summenmitglieder entsprechend der Häufigkeit des betreffenden Atoms in dem Molekül mit Faktoren zu versehen, so daß die Konzentration dieser Substanz bei der Bestimmung der Gesamtkonzentration mit diesem Faktor gewichtet wird.

Abschließend werden alle Substanzen mit ihren Konzentrationen zusammen mit den Zusatzangaben, ob sie während der Rechnungen konstant bleiben oder aber gelöst vorliegen, ihren Quellstärken und der Natur ihrer Emissionen, sowie den Depositionsgeschwindigkeiten und den relativen Unsicherheiten in die Ausgabedatei geschrieben.

Wurde eine im Reaktionssystem enthaltene Substanz nicht in ihrer Anfangskonzentration festgelegt, so wird dies in der Ausgabedatei vermerkt, und das Programm bricht ab, da in diesem Fall notwendige Angaben fehlen.

Ändern sich die Bedingungen während der Simulation, was in der Trajektorieneingabedatei durch den Schalter * erzeugt wird, so wird aus der Konzentrationseingabedatei erneut ein Block mit den ab dann gültigen Substanzfamilien und Kontrollsummen eingelesen. Die Zusammensetzung der Kontrollsummen wird dabei ebenfalls erneut eingelesen, da auch Substanzfamilien, die unter Umständen ab dieser Zeit nicht mehr existieren, Bestandteil der Kontrollsummen sein konnten, so daß die alte Zusammensetzung der Kontrollsumme nicht mehr gültig ist. Ist dieser Block nicht vorhanden, so bricht das Programm die Simulation ab.

5. Das Unterprogramm STEADY

Da in fast jedem Reaktionssystem reaktive Spezies, für die innerhalb eines Zeitschrittes ein stationärer Zustand angenommen werden kann, existieren, werden häufig Substanzfamilien gebildet. Da die Umsatzraten der Austauschreaktionen der Familienmitglieder untereinander groß sind, kann es zu Beginn der Simulation bei nicht modellkonsistenten Eingangskonzentrationen der Familienmitglieder zu numerischen Instabilitäten kommen. Denn, obwohl der für die zeitliche Entwicklung verwendete Algorithmus eine Massenerhaltung erzwingt, kann es doch durch die numerischen Fehler geringe Abweichungen geben. Diese Abweichungen bleiben normalerweise im Bereich der numerischen Unsicherheit, so daß sie ohne Bedeutung sind. Bei nicht-modellkonsistenten Eingaben von Substanzen, die zu Familien zusammengefaßt werden, können sich die Fehler über die hohen Umsatzraten innerhalb der Familien aufschaukeln, und damit konvergiert das System nicht mehr unbedingt zu den Bedingungen des stationären Zustandes.

Um zu gewährleisten, daß das Reaktionssystem aufgrund der großen Umsetzungsraten der Familienmitglieder zu Beginn des Modellaufs nicht divergiert, wird der Schleife über die Zeitschritte das Unterprogramm STEADY vorgeschaltet. Dieses Unterprogramm berechnet die Konzentrationen der Familienmitglieder im stationären Zustand, während die Gesamtkonzentrationen der Familien festgehalten werden. Dadurch wird das Verhältnis der Familienmitglieder untereinander modellgerecht, und eine Divergenz des Reaktionssystems wird vermieden.

Bevor der stationäre Zustand der Familienmitglieder untereinander berechnet wird, wird für alle Substanzen abgefragt, in wievielen und in welchen Familien sie involviert sind. Dies muß erfolgen, da bei einer Mehrfachbeteiligung einer Substanz in mehreren Familien berücksichtigt werden muß, daß sich der stationäre Zustand innerhalb der durch die Substanz gekoppelten Familien simultan einstellt.

Nach dieser Erfassung werden mit Hilfe des Unterprogramms CHEMIE die Austauschraten innerhalb der Familien in fünf Iterationen bestimmt. Die Berücksichtigung der Konzentration des vorangegangenen Iterationsschrittes geschieht mit Hilfe eines Wichtungsterms, der, um die Kopplung von einer Iteration zur nächsten zu reduzieren, mit jeder Iteration vom arithmetischen Mittel hin zu Null abnimmt.

$$c_{i,\text{neu}} = \frac{\frac{P_i}{D_i} + c_{i,\text{alt}} \cdot \text{Wichtungsterm}}{1 + \text{Wichtungsterm}} \quad (5.1)$$

Bei jeder Iteration bleiben die Gesamtfamilienkonzentrationen $c_{Fam.}$ konstant, und die errechneten Konzentrationen der Familienmitglieder $c_{i,neu}$ werden dieser Gesamtkonzentration mittels des Anpassungsfaktors $Fak_{i,neu}$ angepaßt.

$$c_i = c_{Fam.} \cdot Fak_{i,neu} \quad (5.2)$$

Bei der Anpassung der Steady-State-Konzentration jeder Substanz an die Gesamtkonzentration der Familie muß dann eine eventuelle Mehrfachangehörigkeit der betrachteten Substanz und somit eine Kopplung zwischen den Familien berücksichtigt werden. Dies geschieht dadurch, daß die für die Familien berechneten Anpassungsfaktoren $Fak_{Fam.}$, die sich aus folgender Formel ergeben,

$$Fak_{Fam.} = \frac{\sum c_{i,neu}}{c_{Fam.}} \quad (5.3)$$

für die betrachtete Substanz an die Gesamtkonzentrationen der Familien $c_{Fam.}$ unter Berücksichtigung dieser mit Hilfe der folgender Formel gewichtet werden:

$$Fak_{i,neu} = \frac{\sum \frac{Fak_{Fam.}}{c_{Fam.}}}{\sum \frac{1}{c_{Fam.}}} \quad (5.4)$$

6. Das Unterprogramm TIMDEP

Das Unterprogramm TIMDEP dient dazu, alle orts- und zeitabhängigen Größen, die für die Bestimmung der Konzentrationen der Luftkomponenten benötigt werden, zu Beginn eines jeden Zeitintervalls zu berechnen. Dabei ist der Rahmen, in denen sich die Simulation bewegt, durch die in der Eingabedatei der Trajektorie angegebenen Randbedingungen festgelegt. Die Randbedingungen, die an jeder Stützstelle festgelegt werden, sind die Zeit und der Ort des betrachteten Luftpakets, die Temperatur in der Box, sowie die zeitliche Verteilung der verschiedenen Emissionen. Da diese Werte an den Stützstellen fest vorgegeben sind, ist es Aufgabe des Unterprogramms TIMDEP die Werte dieser Größen zu den Zeitpunkten zwischen den Stützstellen zu interpolieren. Durch die Bestimmung dieser Werte zu den jeweiligen Zeitpunkten ist es dann möglich, weitere Größen, die ebenfalls zeit- und ortsabhängig sind, wie der Zenitwinkel und die Geschwindigkeitskonstanten, zu berechnen.

Wie die aktuellen Werte all dieser zeit- und ortsabhängigen Größen im einzelnen berechnet werden, soll im folgenden gezeigt werden. Da jedoch in dem Unterprogramm TIMDEP bei der Berechnung der aktuellen Größen zwischen Vorlauftag und Simulation unterschieden wird, soll vorher kurz die Notwendigkeit des Vorlaufes erläutert werden.

6.1. Der Vorlauf

Um modellkonsistente Eingangskonzentrationen zu erhalten und somit die Möglichkeit eines Aufschaukelns der Konzentrationswerte kurzlebiger Substanzen zu umgehen, ist dem eigentlichen Simulationslauf zunächst das Unterprogramm STEADY zum Erreichen modellkonsistenter Eingangskonzentrationen der Familienmitglieder vorgeschaltet. Der nachfolgende Vorlauf dient ausschließlich dazu, die Konzentrationen der längerlebigen Substanzen unter den vorgegebenen Rahmenbedingungen in ein ausgewogenes Verhältnis zueinander zu bringen. Bei diesem Vorlauf bleibt das Luftpaket für 20 Stunden zur lokalen Zeit von 10 Uhr am Startort der Trajektorie. Da die lokale Zeit des Luftpaketes in den 20 Stunden festgehalten wird, ergibt sich für diesen Vorlauftag kein Tagesgang. Die Uhrzeit von 10 Uhr wurde aufgrund der Diskussion in RUHNKE (1992) ausgewählt. Um ein "Einschwingen" des Luftpaketes auf den Tagesgang zu ermöglichen, wird der Startzeitpunkt der realen Trajektorie vom Programm um einen Tag auf 10 Uhr als Startzeit zurückverlängert, wobei das Luftpaket am Startort verbleibt. Denn wird dann die eigentliche Startzeit der Trajektorie erreicht, besitzen nun-

mehr zu Beginn der Simulation alle Substanzen modellkonsistente Eingangskonzentrationen.

6.2. Berechnung des aktuellen geographischen Ortes des Luftpaketes

Am Vorlauftag entsprechen die geographischen Koordinaten denen des Startortes des Luftpaketes. Während der eigentlichen Simulation werden die aktuelle geographische Breite und Länge durch lineare Interpolation zwischen den in der Tajektorieneingabedatei festgelegten Orten an den Stützstellen bestimmt. Die Parameter der Stützstellen werden aus separaten meteorologischen Modellen gewonnen, wodurch die Chemie eines Luftpaketes weitgehend von der Dynamik abgekoppelt werden kann.

Bei der Interpolation der geographischen Länge muß beachtet werden, daß die Angabe der geographischen Länge lediglich in Grad Ost erfolgt, so daß 0°E zugleich auch 360°E entspricht. Diese Nicht-Stetigkeit bedingt, daß die Richtung des Luftpaketes beim Überschreiten dieses Längengrades bei einer linearen Interpolation zwischen den aktuellen Stützstellen umgekehrt würde. Um die Richtung eindeutig zu definieren, werden daher die letzten drei eingelesenen Längengrade gespeichert und anschließend erfolgt eine Fallunterscheidung mit zeitabhängiger linearer Interpolation.

Mit Hilfe der berechneten, aktuellen geographischen Länge und der aktuellen Zeit (Universal Time, *UT*) wird dann die lokale Zeit (*LCT*) des Luftpaketes bestimmt, die für die Berechnung des aktuellen Zenitwinkels von Bedeutung ist.

$$LCT = UT + \text{geographische Länge in Grad} \cdot \frac{24 \text{ h}}{360^\circ} \quad (6.1)$$

6.3. Bestimmung des Zenitwinkels

Die Bestimmung des Zenitwinkels erfolgt über folgende Gleichung:

$$\cos(\chi) = \sin(\text{decl}) \cdot \sin(\text{phi}) + \cos(\text{decl}) \cdot \cos(\text{phi}) \cdot \cos\left(\frac{LCT - 12.}{12.} \cdot \pi\right) \quad (6.2)$$

Dabei entsprechen *LCT* der lokalen Zeit und *phi* der aktuellen geographischen Breite des Luftpaketes.

Die Deklination der Sonne *decl* ergibt sich aus der Ekliptik der Erdbahn. Der maximale Wert von 23.44 wird dabei am 21. Dezember bzw. 21. Juni erreicht. Am 21. März bzw. 21. September schneidet die Ekliptik den Himmelsäquator, und die Deklination wird Null.

$$\text{decl} = -23.44 \cdot \cos\left(\frac{\text{Tag seit dem 21.12.}}{365} \cdot 2\pi\right) \quad (6.3)$$

Der Zeitpunkt des Sonnenaufganges wird ebenfalls über Gleichung (6.2) ermittelt, wobei berücksichtigt wird, daß der Zenitwinkel bei Sonnenauf- und -untergang am Erdboden zwar 90 Grad beträgt, mit zunehmender Höhe des Luftpaketes dieser Winkel (um die sogenannte Kimmtiefe) aber größer wird, da die Sonne in größeren Höhen früher auf- bzw. später untergeht als am Erdboden.

Die Kimmtiefe κ errechnet sich durch:

$$\kappa = \arccos\left(\frac{\text{Erdradius}}{\text{Erdradius} + \text{Höhe}}\right) \quad (6.4)$$

6.4. Bestimmung der aktuellen Höhe der Mischungsschicht

Die Berechnung der aktuellen Höhe der Mischungsschicht $H_{\text{MISCH}}(t)$ wird nur dann durchgeführt, wenn in der Steuerdatei das 3-Box-Modell gewählt wurde.

Für die Beschreibung der grundlegenden physikalischen Gegebenheiten, die für die Zeitabhängigkeit der Höhe der Mischungsschicht verantwortlich sind, sei auf STULL (1988) verwiesen. Die hier verwendete Parametrisierung der Variation der Mischungsschichthöhe basiert auf den dort graphisch angegebenen generellen Verläufen der Mischungsschicht, wobei durch die Variation der Parameter die aktuelle Mischungsschicht der vorgegebenen Situation der Simulation angepaßt werden kann.

In der Nacht ändert sich die Höhe der Mischungsschicht (oder genauer: der nächtlichen bodennahen Grenzschicht) nur wenig, so daß in diesem Modell die Höhe am Ende der Nacht, dem Sonnenaufgang, dem in der Trajektorieneingabedatei angegebenen Wert *HMIN* entspricht. Der Anstieg in der Nacht folgt dabei folgender Formel:

$$H_{\text{Misch}}(t) = \sqrt{\frac{t - \text{TFAL}}{\text{SUNRIS} + 24. - \text{TFAL}}} \cdot H_{\text{MIN}} \quad (6.5a)$$

bzw. nach Mitternacht:

$$H_{\text{Misch}}(t) = \sqrt{\frac{LCT + 24. - TFAL}{SUNRIS + 24. - TFAL}} \cdot HMIN \quad (6.5b)$$

Am Vormittag vergrößert sich die Mischungsschicht durch die Erwärmung des Erdbodens und erreicht in diesem Modell zum Zeitpunkt *THAL* die halbe maximale Höhe *HMAX*. Der Anstieg der Mischungsschicht nach Sonnenaufgang wird dabei näherungsweise durch folgende Formel beschrieben:

$$H_{\text{Misch}}(t) = \frac{HMAX}{e^{-(t-THAL)} + 1} \quad (6.6)$$

Ist der mit Hilfe der Gleichung (6.5b) errechnete Wert der Höhe der Mischungsschicht größer als der mit Gleichung (6.6) bestimmte Wert, so wird ersterer in der Simulation herangezogen.

Zu dem Zeitpunkt *TFAL* bricht die Mischungsschicht vollständig in sich zusammen. Vom Erdboden aus wächst jedoch schon die nächtliche Grenzschicht heran, die in diesem Modell am Sonnenaufgang des nächsten Tages ihre nächtliche Höhe von *HMIN* erreicht. Die Berechnung erfolgt dabei nach Gleichung (6.5a).

6.5. Bestimmung der Temperatur und des Druckes in der Box

Die Berechnung der beiden Größen Temperatur und Druck unterscheidet sich je nach der Modellwahl.

Wurde in der Steuerdatei eine freie Box entlang einer Trajektorie auf einer Äquipotentialfläche als Modell gewählt, so wird die Temperatur *T* durch lineare Interpolation aus den in der Trajektorieneingabedatei enthaltenen Temperaturwerten ermittelt.

Der Druck *p* und somit die Konzentration des Mediums in dem Luftpaket werden dann aus der potentiellen Temperatur θ über folgende Gleichung ermittelt (siehe ROEDEL (1992)),

$$p = p_0 \left(\frac{T}{\theta} \right)^{\frac{1}{z}} \quad (6.7)$$

wobei p_0 dem Normaldruck von 1013 mbar entspricht und der Exponent *z* definiert ist durch:

$$z = 1 - \frac{c_p}{c_v} = 0.286 \quad (6.8)$$

c_p und c_v entsprechen dabei den spezifischen Wärmekapazitäten der Luft bei konstantem Druck bzw. konstantem Volumen.

Wurde dagegen das 3-Box-Modell gewählt, so werden zunächst die mittleren Höhen der unteren beiden Boxen errechnet und der Druck $p(H)$ in diesen beiden mittleren Höhen mit Hilfe der Funktion *PVONZ* (siehe Kapitel 13.4) bestimmt.

Die mittleren Temperaturen in den beiden Boxen $T(H)$ ergeben sich dann aus der in der Trajektoriendatei angegebenen Temperatur am Erdboden und der Funktion *TVONZ* (siehe Kapitel 13.5). Dabei wird durch die Funktion das Verhältnis der Temperaturen der beiden Boxen in Bezug auf die Bodentemperatur bestimmt. Diese wird in der Trajektorieneingabedatei vorgegeben. Die endgültigen Temperaturen ergeben sich dann durch die Skalierung auf die Bodentemperatur:

$$T_{\text{Box}} = \frac{\text{TVONZ}(h)}{\text{TVONZ}(0)} \cdot T_{\text{Boden}} \quad (6.9)$$

6.6. Berechnung des Zeitschrittes

Die Größe der Zeitschritte besitzt in einem photochemischen Modell eine entscheidende Bedeutung, da bei der Integration der Bilanzgleichung (siehe das Unterprogramm *EULER*) die Konstanz der Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen innerhalb eines Zeitschrittes Voraussetzung ist.

Da sich aber die äußeren Bedingungen, insbesondere der Sonnenstand, im Laufe eines Tages ändern, sind auch die Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen tageszeitabhängig. Um nun die Konstanz dieser Werte innerhalb des Zeitschrittes zu gewährleisten, muß zu den Zeiten, in denen die Veränderungen besonders groß sind, der Zeitschritt entsprechend klein werden.

Für die Berechnung der tageszeitabhängigen Größe des Zeitschrittes stehen in dem Programm drei Möglichkeiten zur Verfügung:

Zum einen besteht die Möglichkeit, den Zeitschritt durch die gerade aktuellen Größen der Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen automatisch zu berechnen. Zum anderen besteht die Möglichkeit, eine Funktion der Tageszeitabhängigkeit der Zeitschrittgrößen aufzurufen, die einen Großteil der möglichen Verläufe abbildet. Diese

soll dabei durch wenige Parameter beschrieben werden und benötigt so, im Gegensatz zu den beiden anderen Verfahren, ein Minimum an Rechenaufwand, um die Größe des Zeitschrittes zu berechnen.

Daß in diesem Modell die Zeitschrittsteuerung optional gestaltet ist und in der Steuerdatei gewählt werden kann, begründet sich in der Art der Fragestellungen, die mit diesem Modell bearbeitet werden können.

Soll z.B. eine Vielzahl von Produktionsläufen unter relativ konstanten Bedingungen durchgeführt werden, so empfiehlt es sich, die Zeitschrittsteuerung mittels der vorgegebenen Funktion zu wählen, da die zeitaufwendige Skalierung auf optimale Rechengenauigkeit (siehe Kapitel 6.6.4) nur einmal vollzogen werden muß, bei den Produktionsläufen aber Rechenzeit gespart werden kann.

Werden dagegen nur einzelne Läufe mit stark variierenden Randbedingungen durchgeführt, so sollte eine der automatischen Methoden zur Zeitsteuerung herangezogen werden. Denn obwohl diese für den einzelnen Lauf mehr Rechenzeit benötigen, ist der Gesamtaufwand geringer, da nicht vor jedem Lauf die Skalierung der Zeitschritte, wie es für die Zeitschrittsteuerung mittels der vorgegebenen Funktion erforderlich ist, erfolgen muß.

Für die automatische Zeitschrittsteuerung stehen in dem Modell zwei Arten zur Verfügung. Zum einen ist dies die Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung und zum anderen die Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung. Vergleiche dieser beiden Methoden haben ergeben (RUHNKE (1995)), daß die Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung eher, daß heißt bei noch größeren zugelassenen Toleranzen, in die Nähe des exakten Wertes gelangt als die Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung. Letztere jedoch ist bei niedrig eingestellten Toleranzen die Methode, die dem exakten Wert am nächsten kommt. Daher sollte die Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung dann eingesetzt werden, wenn sowohl die Rechenzeit als auch die Speicherkapazität (siehe Kapitel 6.6.1.1.) begrenzt ist. Spielen diese Restriktionen keine Rolle, so sollte die Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung herangezogen werden.

6.6.1. Automatische Zeitschrittsteuerung

6.6.1.1. Umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung

Diese Art der Zeitschrittsteuerung beruht auf der Bilanzgleichung

$$\frac{dc}{dt} = P - Dc \quad (6.10)$$

Denn erlaubt man für bestimmte Substanzen i eine maximale relative Konzentrationsänderung um ε_u (ein Wert von 5 Promille ist ein vernünftiger Kompromiß zwischen Rechendauer und zu erreichender Genauigkeit (RUHNKE (1995))) in dem zu berechnenden Zeitintervall Δt , so ergibt sich durch einfaches Umstellen der Gleichung folgender maximaler Zeitschritt (siehe auch HASS (1991)):

$$\Delta t = \text{Min} \left(\left| \frac{\varepsilon_u \cdot c_i}{P_i - D_i \cdot c_i} \right| \right) \quad (6.11)$$

Für diese Art der Zeitschrittberechnung werden demnach nur die aktuellen Produktionsraten, Destruktionsfrequenzen und Konzentrationen der Substanzen benötigt. Da diese Daten vorliegen, wird für die umsatzbegrenzte Zeitschrittsteuerung kein weiterer Speicherplatz benötigt.

6.6.1.2. Fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung

Die fehlerkontrollierte Zeitschrittsteuerung beruht auf der Forderung, daß der Fehler in der Konzentrationsberechnung für bestimmte Substanzen für den Zeitpunkt $t+\Delta t$ bezüglich der aktuellen Konzentration unter einem bestimmten Wert ε_f liegt. Dabei ist für ε_f ein Wert von $5 \cdot 10^{-4}$ ein vernünftiger Kompromiß zwischen Rechenzeit und zu erreichender Genauigkeit (RUHNKE (1995)).

$$\varepsilon_f = \frac{c_{t+\Delta t} - \tilde{c}_{t+\Delta t}}{c_t} \quad (6.12)$$

Die Konzentration $c_{t+\Delta t}$ ergibt sich dabei durch die Lösung der Bilanzgleichung (6.10) unter Berücksichtigung der aktuellen Produktionsraten, Destruktionsfrequenzen und der aktuellen Konzentration c_t .

$$c_{t+\Delta t} = \frac{P_t}{D_t} + \left(c_t - \frac{P_t}{D_t} \right) e^{-D_t \Delta t} \quad (6.13)$$

Für $\tilde{c}_{t+\Delta t}$ ergibt sich die Konzentration durch Berücksichtigung der aktuellen Konzentration und den Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen des vorherigen Zeitschrittes:

$$c_{t+\Delta t} = \frac{P_{t-\Delta t}}{D_{t-\Delta t}} + \left(c_t - \frac{P_{t-\Delta t}}{D_{t-\Delta t}} \right) e^{-D_{t-\Delta t} \Delta t} \quad (6.14)$$

Da ε_f klein ist, ändern sich auch die Produktionsrate und die Destruktionsfrequenz wenig, und es ergibt sich durch Einsetzen von (6.13) und (6.14) in (6.12) und durch Umformen folgender Zeitschritt:

$$\Delta t = -\frac{\ln\left(1 - \frac{\varepsilon_f c_t}{\alpha}\right)}{D_t} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{P_t}{D_t} - \frac{P_{t-\Delta t}}{D_{t-\Delta t}} \quad (6.15)$$

Ist D_t sehr klein, so ergibt sich der Zeitschritt zu:

$$\Delta t = \frac{\varepsilon_t c_t}{P_t - P_{t-\Delta t}} \quad (6.16)$$

Für diese Methode der Zeitschrittsteuerung wird also zusätzlicher Speicherplatz benötigt, da die Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen aus dem vorherigen Zeitschritt zur Bestimmung des nächsten herangezogen werden.

6.6.2. Vorgegebene funktionelle Zeitschrittsteuerung

Hierbei orientierte sich die Auswahl der Funktion zur Beschreibung der Größe des Zeitschrittes an einer Vielzahl der tageszeitabhängigen Verläufe der mit den beiden obig beschriebenen Verfahren berechneten Zeitschritten.

Zur Überprüfung der Rechengenauigkeit und somit zur Skalierung der Zeitschritte müssen die durch die Funktion vorgegebenen Zeitschritte in Vorversuchen solange halbiert werden, bis sich am Ende eines Laufes keine Änderungen der Konzentrationen größer als 1% ergibt. Erst dann kann angenommen werden, daß sich die Familienmitglieder innerhalb der Zeitschritte im photochemischen Gleichgewicht befinden. Da sich durch die letzte Zeitschritthalbierung die Genauigkeit nicht wesentlich erhöht, die Rechenzeit durch die Halbierung der Zeitschritte aber verdoppelt wird, werden die Zeitschritte vor der letzten Halbierung als endgültig angesehen. Es ist hierbei zu beachten, daß die Größe der Zeitschritte abhängig ist von dem behandelten Reaktionssystem. Sie muß also für jedes System neu ermittelt werden, während die Form des Tagesgangs unverändert bleibt.

Um nicht unnötig viel Rechenzeit für die Berechnung der Zeitschritte verwenden zu müssen, wird jeder Zeitschritt innerhalb eines vorgegebenen Intervalls wiederholt. Die mathematische Berechnung der Zeitschritte ist in Tabelle 6-1 aufgeführt. Die Dauer eines Zeitschrittintervalls wurde auf 5 Minuten gesetzt, was eine hinreichend genaue

Auflösung der Zeitschritte um den Sonnenaufgang und Sonnenuntergang darstellt. In Abbildung 6-1 ist der prinzipielle Tageslauf der Zeitschritte für diese vorgegebene Zeitschrittsteuerung aufgetragen. Die kleinsten Zeitschritte werden zu den kritischen Zeiten des Sonnenauf- und Sonnenuntergangs, in denen sich die Konzentrationen einiger Substanzen besonders stark ändern, erreicht. Für den Juni ergeben sich dort Werte von 0.01 Sekunden, die für die nächsten 5 Minuten gelten. In der Mittagszeit erreichen dagegen die Zeitschritte ein Maximum, um zum Sonnenuntergang hin wieder kleiner zu werden. Nach Sonnenuntergang nehmen die Zeitschritte dann wieder sehr stark zu. Der größte Zeitschritt, der mit dieser funktionellen Zeitschrittsteuerung berechnet wird, darf generell nicht größer sein als die Zeitauflösung der vorgegebenen Trajektorie. Ist die Zeitauflösung der Trajektorie inhomogen, z.B. durch die Berücksichtigung einer kurzzeitigen Emissionsaufnahme durch das Luftpaket, so muß sich dieser Wechsel des Zeitintervalls der Trajektorie in der Größe des Zeitschrittes wiederfinden. Sollte daher das Zeitintervall der Trajektorie kleiner sein als der mit der Funktion errechnete Zeitschritt, so wird mit Zeitschritten von einem Drittel des Trajektorienzeitintervalls gerechnet. Die Drittelung des Zeitintervalls wurde durch Simulationen von Luftpaketen, die eine kurzzeitige Aufnahme von Autoabgasen erfahren (RUHNKE (1995)), als eine ausreichende Größe des Zeitschrittes in dem von außen vorgegebenen Zeitintervall der Trajektorie ermittelt.

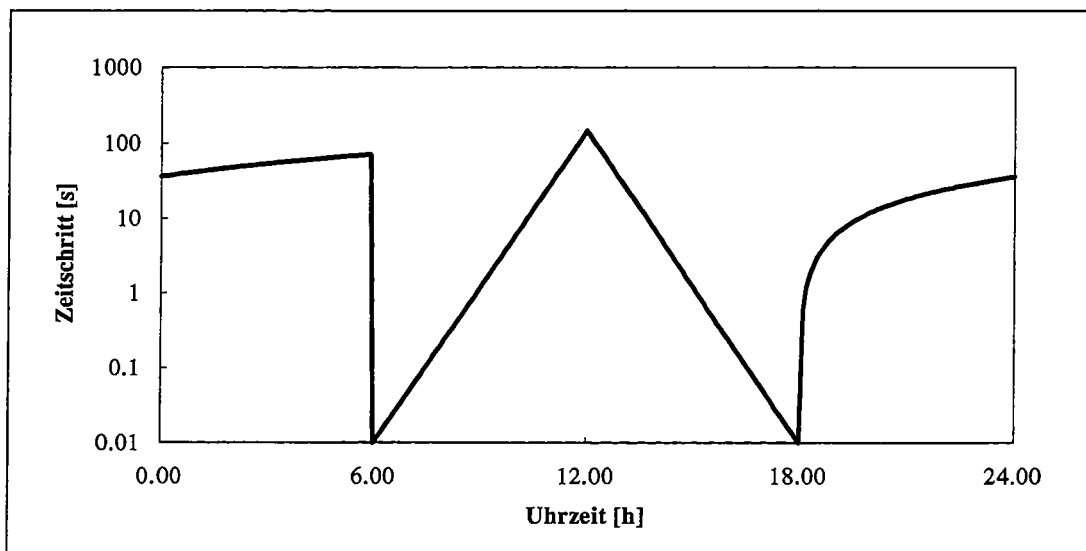


Abbildung 6-1: Dauer der Zeitschritte im Laufe des Tages

Tabelle 6-1: Berechnungsalgorithmus der Größe der Zeitschritte in der vorgegebenen funktionellen Zeitschrittsteuerung.

Ist die Zeit kleiner als die Zeit des Sonnenaufgangs, so gilt

$$DT = (LCT + SUNRIS) \cdot 6$$

Bis zum Mittag ist

$$DT = \frac{e^{(ABS(MONAT-6) \cdot 0.2 + 1.2) \cdot (LCT - SUNRIS)}}{1.E + 2}$$

danach bis zum Sonnenuntergang

$$DT = \frac{e^{(ABS(MONAT-6) \cdot 0.2 + 1.2) \cdot (SUNSET - LCT)}}{1.E + 2}$$

Bis um Mitternacht gilt

$$DT = (LCT - SUNSET) \cdot 6$$

Die Anzahl der Schritte ergibt sich zu

$$NSTP = \text{MAX} \left(\frac{300}{DT}, 1 \right)$$

6.7. Berechnung der Flüssigphasenparameter

Für die Berücksichtigung einer flüssigen Phase durch das Modell können zwei Optionen innerhalb der Steuerdatei angewählt werden. Zum einen ist dies die Option, daß sich die flüssige Phase mit den in der Trajektorieneingabedatei definierten Parametern innerhalb der Box(en) befindet. Zum anderen kann sich eine Wolke oberhalb der Box(en) befinden, so daß eine flüssige Phase innerhalb der Box(en) nur dann berücksichtigt wird, wenn diese Wolke ausregnet.

Soll sich nun eine Wolke innerhalb der Box(en) befinden, so entspricht der aktuelle Gehalt an flüssigem Wasser ohne Berücksichtigung des Regens, dem in der Trajektorieneingabedatei eingegebenen Flüssigwassergehalt:

$$\text{Wasser}(t) = \text{CLW} \quad (6.17)$$

Tritt Regen auf, so erniedrigt sich der bis dahin gültige Flüssigwassergehalt, der den Anteil von Wasser zu Gas in $[\text{g}/\text{cm}^3]$ angibt, um den Teil, der ausgerechnet wird. Diese Menge an Wasser ist proportional der Regenrate in $[\text{cm}/\text{s}]$ in dem aktuellen Zeitschritt Δt und antiproportional der Höhe der Box und somit der Mischungsschicht.

$$\text{Fak} = \frac{\frac{\text{Re genrate}}{\text{Boxhöhe}} \cdot \Delta t}{\text{Wasser}(t - \Delta t)} \quad (6.18)$$

$$\text{Wasser}(t) = \text{Wasser}(t - \Delta t) \cdot (1 - \text{Fak}) \quad (6.19)$$

Für die Konzentrationen der in der flüssigen Phase gelösten Stoffe i ergibt sich dementsprechend eine proportionale Erniedrigung um

$$c_{i,\text{aq}}(t) = c_{i,\text{aq}}(t - \Delta t) \cdot (1 - \text{Fak}) \quad (6.20)$$

Wurde dagegen die zweite Option gewählt, daß sich die Wolke oberhalb der Box(en) befindet, so tritt eine flüssige Phase in den Boxen nur dann auf, wenn es aus dieser Wolke regnet. Damit ist der Flüssigwassergehalt der Box(en) innerhalb des aktuellen Zeitschrittes proportional der Regenrate und antiproportional der Boxhöhe:

$$\text{Wasser}(t) = \frac{\text{Re genrate}}{\text{Boxhöhe}} \cdot \Delta t \quad (6.21)$$

Die Substanzen, die sich in dem Regen gelöst haben, werden durch diesen aus der Box irreversibel entfernt. Die Konzentrationen dieser Stoffe, die sich in der flüssigen Phase befinden, werden daher vom Modell auf Null gesetzt und somit bei jedem Aufruf des Unterprogramms TIMDEP aus dem System entfernt.

6.8. Berechnung der aktuellen Emissionsraten, Geschwindigkeits- und Gleichgewichtskonstanten

Die aktuellen Quellstärken werden für die verschiedenen Quellarten (*ANT*, *BIO*, *SON*) linear in der Zeit zwischen den in der Trajektorieneingabedatei angegebenen relativen Quellstärken an den Stützstellen interpoliert. Dies bedeutet, daß gegebenenfalls die Stützstellen so dicht gelegt werden müssen, daß eine lineare Interpolation zulässig wird.

Für die Geschwindigkeits- und Gleichgewichtskonstanten gilt, daß, falls nur mit einer Box gerechnet wird, diese Konstanten nur für diese eine Box berechnet werden. Werden dagegen zwei Boxen berechnet, so müssen die Konstanten für die obere und untere Box separat berechnet werden. Da die Konzentrationen in der freien Troposphäre konstant gehalten werden, werden dort keine chemischen Umsätze zugelassen und es müssen daher für diese Box auch keine Reaktionskonstanten berechnet werden.

Die Berechnung erfolgt dabei gemäß den in den Tabellen 3-2, 3-4 und 3-6 aufgeführten Formeln.

7. Das Unterprogramm AUSTAUSCH

Dieses Unterprogramm wird abgesehen von der Skalierung der aktuellen Konzentrationen auf den Druck nur für die Option des 3-Box-Modells benötigt. In ihm werden für jede Substanz und für die Substanzfamilien die Austauschparameter zwischen den Boxen und dem Boden bestimmt.

7.1. Skalierung der aktuellen Konzentrationen auf den neuen Druck

Während der Beobachtungszeit des Luftpaketes kann sich der Druck ändern, das Mischungsverhältnis der Substanzen bleibt jedoch gleich, da vorausgesetzt wird, daß sich die Zusammensetzung des betrachteten Luftpaketes nur durch chemische, Emissions- oder Depositionsvorgänge ändert. Daher werden die Konzentrationen jeweils auf den neuen, im Unterprogramm TIMDEP festgelegten Druck umgerechnet, wobei das Allgemeine Gasgesetz

$$c_i = \frac{n}{V} = \frac{p_i}{RT} \quad (7.1)$$

angewendet wird.

7.2. Bestimmung der Transportparameter

Da die Mischungsschicht im Laufe eines Tages in ihrer Höhe veränderlich ist und kein abgeschlossenes System darstellt, findet ein Austausch sowohl zwischen der Mischungsschicht (Box 1) und der Reservoirschicht (Box 2) als auch zwischen der Reservoirschicht und der freien Troposphäre (Box 3) statt. Desweiteren steht die Mischungsschicht mit dem Erdboden in Kontakt, so daß Emissionsvorgänge in die Mischungsschicht hinein und Depositionsvorgänge aus ihr heraus betrachtet werden müssen.

7.2.1. Austausch zwischen der Reservoirschicht und der Mischungsschicht

Die Einmischung von Luftmassen von der Reservoirschicht in die Mischungsschicht erfolgt dabei durch das sogenannte "Entrainment" (siehe auch STULL (1988)). Dieses "Entrainment" geschieht dabei aber nur, wenn die Mischungsschicht auf Kosten der Reservoirschicht im Laufe der Erwärmung des Bodens durch die Sonneneinstrahlung

wächst, bzw. wenn die Reservoirschicht beim Zusammenbrechen der Mischungsschicht z.B. nach Sonnenuntergang wieder wächst.

Für die Mischungsschicht stellt demnach das "Entrainment" am Vormittag beim Anwachsen der Mischungsschichthöhe eine Quelle (oder Senke) für alle Substanzen dar.

Für das "Entrainment" wird in diesem Modell angenommen, daß eine instantane und völlige Vermischung der Luftmassen aus der Reservoirschicht mit denen der Mischungsschicht in dem sich zur aktuellen Zeit mischenden Volumen erfolgt. Dabei wird mit der in TIMDEP berechneten aktuellen Mischungsschichthöhe zunächst die Konzentration jeder Substanz durch die Vermischung der Boxen 1 und 2 bestimmt. Dazu wird bei steigender Mischungsschicht der Anteil der Konzentration aus der oberen Box 2 der unteren Box 1 zugemischt, der sich in dem Höhenintervall zwischen neuer und alter Mischungsschichthöhe befand.

$$c_{i,1}(t) = \frac{c_{i,1}(t) \cdot H_{\text{Misch,alt}}(t) + c_{i,2}(t) \cdot (H_{\text{Misch,neu}}(t) - H_{\text{Misch,alt}}(t))}{H_{\text{Misch,neu}}(t)} \quad (7.2)$$

Abgesehen von diesem Entrainment von Luftmassen der Reservoirschicht in die Mischungsschicht werden alle anderen Transportterme als Reaktionen 1.Ordnung behandelt.

7.2.2. Austausch zwischen der Reservoirschicht und der freien Troposphäre

Anders als im Falle des Austauschs zwischen der Mischungsschicht (Box 1) und der Reservoirschicht (Box 2) sind für die Reservoirschicht als produktive bzw. destruktive Terme der Austausch mit der freien Troposphäre (Box 3) zu nennen, der netto bei einer höheren Konzentration einer Substanz i in Box 2 als in Box 3 einen Verlust, bei umgekehrtem Verhältnis einen Gewinn der Substanz i in Box 2 darstellt. Der Austauschparameter, der hier mit k_a angegeben und in der Trajektorieneingabedatei definiert wird, stellt dabei eine Geschwindigkeitskonstante 1. Ordnung dar.

$$TTP_{i,2} = k_a \cdot c_{i,3}(t) \quad (7.3)$$

$$TTD_{i,2} = k_a \cdot c_{i,2}(t) \quad (7.4)$$

Sollten die beiden unteren Boxen 1 und 2 bei maximaler Mischungsschichthöhe zu einer einzigen verschmolzen worden sein, so stellen die letzteren beiden Transportterme

auch für die nunmehr einzig vorhandene Box 1 einen Produktions- bzw. Destruktions- term dar.

7.2.3. Betrachtung der Emissionen und Depositionen

Am Erdboden befinden sich Quellen verschiedener Spurenstoffe. Die Berücksichtigung der Emission von Spurenstoffen stellt somit einen produktiven Transportprozeß $TTP_{i,1}$ für die emittierten Schadstoffe i in die untere Box 1 dar.

$$TTP_{i,1} = \frac{Q_i(t)}{H_{\text{Misch}}(t)} = \frac{\bar{q}_i q(t)}{H_{\text{Misch}}(t)} \quad (7.5)$$

Die aktuelle Quellstärke $Q_i(t)$ setzt sich dabei aus der in der Konzentrationseingabedatei einzugebenden mittleren Tagesquellstärke $\bar{q}_i$ und der in der Trajektorieneingabedatei anzugebenden relativen zeitlichen Quellstärke $q(t)$ zusammen.

Als gegenläufiger destruktiver Prozeß $TTD_{i,1}$ für die untere Box 1 ist die trockene Deposition von Spurenstoffen am Boden zu sehen:

$$TTD_{i,1} = \frac{V_{\text{Dep},i}(t) \cdot c_i(t)}{H_{\text{Misch}}(t)} \quad (7.6)$$

$V_{\text{Dep},i}(t)$ wurde dabei in der Eingabedatei der Konzentrationen angegeben und $c_i(t)$ entspricht der aktuellen Konzentration der Substanz i .

Sind die Austauschterme für die einzelnen Substanzen in Boxen 1 und 2 bestimmt, so werden die Transportterme der Familien in den Boxen aus der Summe der Terme der einzelnen Familienmitgliedern berechnet.

8. Das Unterprogramm CHEMIE

Das Unterprogramm CHEMIE berechnet bei jedem Aufruf die Produktionsraten und die Destruktionsfrequenzen für jede im Reaktionssystem enthaltene Substanz sowie für alle Familien.

Dabei läuft eine Schleife über alle im Reaktionssystem enthaltenen Reaktionen. Mit Hilfe der im Unterprogramm INRE codierten Reaktionsgleichungen werden die Edukte und Produkte erkannt und die Umsatzraten der Reaktionen nach folgender Gleichung berechnet, wobei $k_{j,IB}$ der im Unterprogramm TIMDEP errechneten aktuellen Geschwindigkeitskonstante der Reaktion j in der Box IB entspricht.

$$v_{j,IB} = k_{j,IB} \cdot c_{1,IB}(t) \cdot c_{2,IB}(t) \cdot (M_{IB}) \quad (8.1)$$

M_{IB} steht hier für die Konzentration des Mediums "Luft" in der Box IB . Bei bimolekularen Reaktionen wird nicht mit der Luftkonzentration M_{IB} multipliziert.

$v_{j,IB}$ ist für jede Box verschieden, da sowohl die Geschwindigkeitskonstanten aufgrund der unterschiedlichen Temperaturen als auch die Konzentrationen der Substanzen in den Boxen unterschiedlich sind.

Die Produktionsrate $P_{i,IB}$ und die Destruktionsfrequenz $D_{i,IB}$ des Stoffes i in der Box IB ergeben sich anschließend durch Aufsummierung der Umsätze $v_{j,IB}$ der einzelnen Reaktionen j , an denen die Substanz i beteiligt ist. Wird diese Substanz i in einer Reaktion mehrfach gebildet, so wird die Umsatzrate der Reaktion entsprechend oft berücksichtigt. Für die Destruktion gilt entsprechendes. Zusätzlich zu den Umsätzen aus den Reaktionen werden noch die Transportterme der Substanzen berücksichtigt, die im Unterprogramm AUSTAUSCH berechnet werden. Als Gesamtproduktion, bzw. -destruktionsterm ergibt sich somit:

$$P_{i,IB} = \sum_j v_{j,IB} + TTP_{i,IB} \quad \text{bzw.} \quad D_{i,IB} = \frac{\sum_j v_{j,IB} + TTD_{i,IB}}{c_{i,IB}} \quad (8.2)$$

Die Umsätze der Familien setzen sich aus den Umsätzen der einzelnen Familienmitgliedern zusammen. Sind bei einer Reaktion sowohl ein Edukt als auch ein Produkt Bestandteil derselben Familie, so geht der Umsatz dieser Reaktion nicht in die Berechnung der Produktionsrate und Destruktionsfrequenz der Familie ein.

9. Das Unterprogramm EULER

Die elementare Information, die das Modell liefert, besteht in der Angabe der zeitabhängigen Konzentrationen der im Reaktionssystem enthaltenen Substanzen an dem durch Temperatur, Druck und geographischem Lage definierten Ort des Luftpaketes. Der Formalismus der Konzentrationsberechnung wird im folgenden beschrieben und im Unterprogramm EULER angewendet.

9.1. Berechnung der Konzentrationen bei homogenen Gasphasenreaktionen

Die durch eine konstante Produktion und Destruktion eines Stoffes i während eines Zeitschrittes dt hervorgerufene Konzentrationsänderung wird im Unterprogramm EULER berechnet. EULER löst dabei die Massenkontinuitätsgleichung für Atmosphärenmodelle,

$$\frac{dc_i}{dt} = P_i - D_i c_i \quad (9.1)$$

die jetzt eine einfache Eulersche Differentialgleichung 1. Ordnung darstellt.

Die Produktionsgeschwindigkeit P_i und die Destruktionsfrequenz D_i können dabei neben dem chemischen Term auch Transportterme bzw. Quell- und Senkenterme enthalten.

Bei der Beschreibung mehrerer Substanzen kann das entstehende System gekoppelter Differentialgleichungen 1. Ordnung im allgemeinen nur numerisch gelöst werden, wobei der differentielle Zeitschritt dt durch einen endlichen Zeitschritt Δt ersetzt werden muß. Unter der Annahme, daß innerhalb des Zeitschrittes Δt alle Produktionsraten P_i und alle Destruktionsfrequenzen D_i konstant sind, ergibt sich die Lösung der Differentialgleichung zu:

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{P_i}{D_i} + \left(c_i(t) - \frac{P_i}{D_i} \right) e^{-D_i \Delta t} \quad (9.2)$$

Diese Lösung der Differentialgleichung ist für den Fall $D_i \rightarrow 0$, d.h. für Substanzen, die eine sehr lange Lebensdauer besitzen, deren Konzentration aber nicht als konstant angesehen werden kann, aus numerischen Gründen nicht verwendbar, so daß die Exponentialfunktion über die ersten beiden Glieder der Potenzreihe angenähert wird.

$$e^{-D_i \Delta t} = \frac{1}{e^{D_i \Delta t}} \cong \frac{1}{1 + D_i \Delta t} \quad (9.3)$$

Somit ergibt sich über

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{P_i}{D_i} + \frac{\left(c_i(t) - \frac{P_i}{D_i} \right)}{1 + D_i \Delta t} \quad (9.4)$$

folgende Lösung:

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{P_i \Delta t + c_i(t)}{1 + D_i \Delta t} \quad (9.5)$$

die für sehr kleine Destruktionsfrequenzen ($D_i < 10^{-10} \text{ s}^{-1}$) im Unterprogramm EULER verwendet wird. Diese implizite Form der Ersetzung der e-Funktion wird benutzt, da nur sie im Gegensatz zur expliziten Form eine Massenerhaltung gewährleistet, denn nur in diesem Fall kann keine der Konzentrationen negativ werden.

Für die in den Familien enthaltenen reaktiven Spezies, deren Austauschreaktionen schnellen Prozessen entsprechen, stellt sich der stationäre Zustand der beteiligten Stoffe im photochemischen Gleichgewicht innerhalb des Zeitschrittes Δt ein. Das heißt, dc_i/dt wird in der allgemeinen Bilanzgleichung gleich Null, und die Konzentration bestimmt sich direkt durch:

$$c_i(t) = \frac{P_i}{D_i} \quad (9.6)$$

Da auch für die Familien im Unterprogramm CHEMIE die Produktionsraten und Destruktionsfrequenzen bestimmt und im Unterprogramm EULER für die Familien die neuen Gesamtkonzentrationen errechnet wurden, müssen die Konzentrationen der Familienmitglieder diesen neuen Gesamtkonzentrationen der Familien angepaßt werden. Diese Anpassung ist nötig, da durch die hohen Umsätze der Bestandteile der Familien aufgrund der numerischen Ungenauigkeit die Summe der Konzentrationen der Mitglieder nicht mehr der direkt errechneten Gesamtfamilienkonzentration entspricht. Die Anpassung geschieht durch den Vergleich der Summe der Konzentrationen der Familienmitglieder mit der neuen, direkt errechneten Familienkonzentration und einem anschließenden Wichten der Mitgliederkonzentration auf die Gesamtkonzentration hin. Dieses Wichten geschieht in Analogie zu dem im Unterprogramm STEADY beschrie-

benen Verfahren. Dabei wird auch die Möglichkeit berücksichtigt, daß eine Substanz in mehreren Familien beheimatet ist.

9.2. Berechnung der Konzentrationen bei heterogenen Gleichgewichten

Da für die heterogenen Prozesse ein sich instantan einstellendes Gleichgewicht angenommen wird, können die Konzentrationen nicht über Reaktionsgleichungen berechnet werden. Daher mußte ein anderer Formalismus erstellt werden, um die Gleichgewichtskonzentrationen in der flüssigen Phase zu berechnen.

Hierbei wird nach der Bestimmung der Konzentration der Substanz X in der Gasphase $[X]_g$ die Konzentration $[X]_l$ des in der flüssigen Phase Gelösten dieser Substanz berechnet. $[X]_l$ berücksichtigt dabei neben der reinen Lösung auch die durch Dissoziation aus der solvatisierten Form der Substanz hervorgegangenen Spezies. Die Summe aus Gasphasenkonzentration und Flüssigphasenkonzentration der Substanz X wird als $[X]_{tot}$ bezeichnet. Die Massenbilanz lautet demnach:

$$[X]_{tot} = [X]_{g,alt} + [X]_{l,alt} \quad (9.7)$$

Die in der Gasphase verbleibende Menge errechnet sich nun aus dem für geschlossene Systeme geltenden Verhältnis:

$$\frac{[X]_{g,neu}}{[X]_{tot}} = \frac{1}{1 + H \cdot \text{Wasser}(t)} \quad (9.8)$$

mit H als Henrykonstante und $\text{Wasser}(t)$ als aktueller Flüssigwasserkonzentration.

Die aktuelle Konzentration der in der Flüssigphase gelösten Substanzen ist dann:

$$[X]_{l,neu} = [X]_{tot} - [X]_{g,neu} \quad (9.9)$$

Dissoziiert der in die Flüssigphase aufgenommene Stoff, so muß für die Konzentrationsberechnung der dadurch entstehenden Produkte letztere Gleichung noch mit einem vom Dissoziationsgrad abhängigen und somit für jedes Dissoziationsprodukt unterschiedlichen Wichtungsfaktor W multipliziert werden. Dieser berücksichtigt die pH-wertabhängige Existenz der Dissoziationsprodukte und entspricht für einen Dissoziationsgrad i , der für die rein aquatisierte Substanz gleich 0 ist, folgender Formel:

$$W = H \frac{\prod K_i}{pH^i H^*} \quad (9.10)$$

mit H als Henrykonstante, K_i als Dissoziationskonstante der i 'ten Dissoziationsstufe, pH^i als i 'ter Potenz des pH-Wertes und H^* als Pseudo-Henrykonstante, die sich nach folgender Formel errechnet:

$$H^* = K_1 \left(1 + \frac{K_2}{pH} + \frac{K_2 K_3}{pH^2} \right) \quad (9.11)$$

Dabei bezeichnen K_1 bis K_3 die Gleichgewichtskonstanten der dissoziierten Spezies für einen Dissoziationsgrad i von 2.

Durch die Berücksichtigung der aktuellen Flüssigwasserkonzentration bei der Berechnung von $[X]_{g,neu}$ werden die sich im instantan einstellenden Gleichgewicht zwischen der Gas- und Flüssigphase befindlichen Substanzen wieder vollständig in die Gasphase überführt, wenn die Wolke sich auflöst, da das Verhältnis der Konzentration einer Substanz in der Gasphase zu der Gesamtkonzentration, welches durch Gleichung (9.8) definiert ist, dann 1 wird. Werden dagegen Substanzen erst in der flüssigen Phase durch Oxidationsreaktionen gebildet und stehen somit nicht direkt mit einer Substanz in der Gasphase im Gleichgewicht, so verbleiben diese Substanzen beim Auflösen der Wolke als Aerosol in der Atmosphäre. Diese Aersole besitzen demnach immer noch die Charakterisierung "g" und verteilen sich gleichmäßig bei einer erneuten Kondensation auf die entstehenden Wolkentröpfchen.

Wie bereits bei der Beschreibung des Unterprogramms INRE erwähnt wurde, werden die Henry- und Gleichgewichtskonstanten, sowie die Geschwindigkeitskonstanten der Flüssigphasenoxidationen für die mittlere Tagestemperatur berechnet. Diese Vernachlässigung der Tageszeitabhängigkeit der Konstanten ist solange gerechtfertigt, bis allgemein akzeptierte Literaturwerte dieser Prozesse vorliegen. Zur Zeit würde die erreichte Genauigkeit durch eine Berücksichtigung der tageszeitabhängigen Temperatur durch die größere Unsicherheit bei der Wahl der Geschwindigkeitskonstanten zunichte gemacht.

Im letzten Schritt dieses Unterprogramms werden schließlich noch die Gesamtfamilienkonzentrationen den durch die Berücksichtigung der heterogenen Prozesse entstandenen neuen Konzentrationen angepaßt.

10. Das Unterprogramm OUTPUT

Das Unterprogramm OUTPUT dient dazu, die Mischungsverhältnisse der Substanzen, Familien und Summen der einzigen Box im Falle des freien Box-Trajektorien-Modells oder der unteren Box im Falle des 3-Box-Modells auszugeben. Dabei werden zunächst die Mischungsverhältnisse zu den Zeiten, die im Hauptprogramm festgelegt sind, intern gespeichert und erst am Ende des Modellauflaufs in einer Matrixform zusammenhängend in die Ausgabedatei geschrieben. Ein Beispiel für eine solche Ausgabe ist im Anhang dargestellt. Um sicherzustellen, daß bei einem ungewollten vorzeitigen Abbruch des Programms die bereits berechneten Daten nicht verloren gehen, werden die Werte auch in ein temporäres File *outconc.tmp* ausgegeben. Zusätzlich zu dieser temporären Ausgabedatei werden noch zwei weitere temporäre Dateien erzeugt, die zum einen die Produktionsraten (*outprod.tmp*) und zum anderen die Destruktionsraten (*outdest.tmp*) jeder Substanz zu den Ausgabezeitpunkten enthalten. Diese Dateien sind ASCII-formatiert und können bei Bedarf mit üblichen Mitteln gelesen werden.

Um eine Lesbarkeit der Ausgabedatei auf dem Bildschirm zu gewährleisten, beziehungsweise um die Ausgabedatei bei einer Zeichendichte von 20 Zeichen per Inch noch in eine Zeile DIN A4-Papier drucken zu können, werden pro Zeile immer nur die Mischungsverhältnisse von 10 Substanzen geschrieben. Für Reaktionssysteme, die mehr als 10 Komponenten beinhalten, bedeutet dies, daß mehrere Folgezeilen mit jeweils 10 Werten der ersten Zeile, die die Uhrzeit in Universal Time enthält, folgen. Unterhalb der Uhrzeit befinden sich in der zweiten Zeile die zu dem Zeitpunkt aktuelle Temperatur, in der dritten Zeile die aktuelle geographische Breite und Länge und in der vierten Zeile der Zenitwinkel des Luftpaketes.

Da die Anordnung der Substanzen mit ihren Konzentrationen nicht spaltenweise erfolgt, muß für eine Weiterverarbeitung in Tabellenkalkulations-Programmen, die diese Anordnung der Daten verlangen, die Ausgabe umgeschrieben werden. Ein Beispiel für ein Programm, das die Ausgabedatei liest, einige, frei auszuwählende Substanzen entweder auf dem Bildschirm oder auf Papier plottet und die Konzentrationen dieser Substanzen dann spaltenweise ausgibt, ist das Programm BOXPLOT, dessen Beschreibung dem Anhang beigelegt ist.

11. Das Unterprogramm DIAGN

11.1. Optimieren des Reaktionssystems

Das hier beschriebene Box-Modell enthält eine große Anzahl von Werkzeugen zur Analyse des eingegebenen Reaktionssystems. Hierzu dient, neben den in Kapitel 12 beschriebenen Unterprogrammen zur Sensitivitätsanalyse, das Unterprogramm DIAGN. Dieses berechnet für alle Reaktionen die Umsätze und setzt sie für die einzelnen Reaktionen mit den Umsätzen aller im System enthaltenen Substanzen und Familien in Beziehung. Dadurch wird deutlich, welche Reaktionen für den Auf- und Abbau der einzelnen Substanzen maßgeblich sind und welche Reaktionen keinerlei oder nur eine geringe Wirkung auf die Konzentrationen der Substanzen besitzen. Anhand der so möglichen Wichtung der Reaktionen kann anschließend das ursprüngliche Reaktionssystem reduziert werden. Zeigt die Wichtung, daß einzelne Substanzen auch ganz fortfallen können, so sollten die Analysen mit dem reduzierten Reaktionssystem erneut durchgeführt werden, um die Abhängigkeiten im reduzierten System zu überprüfen.

Die hier durchgeführte Wichtung erlaubt dabei nur das Aussortieren der Reaktionen und Substanzen, die für das gesamte Ausgangsreaktionssystem keine Bedeutung besitzen. Eine weitere Vereinfachung des Reaktionssystems hinsichtlich der zu untersuchenden Fragestellung ist dann mit den Unterprogrammen zur Sensitivitätsanalyse möglich. Diese erlauben es, die Querverbindungen der Substanzen auch mit Reaktionen, an denen diese Substanz nur indirekt beteiligt ist, zu analysieren.

Wird die Option der Diagnose gewählt, so erfolgt in dem Unterprogramm DIAGN eine Berechnung der Produktions- und Destruktionsflüsse aller im Reaktionssystem enthaltenen Substanzen und Familien zu vier gewünschten Zeiten am letzten Tag der Simulation. Diese Zeiten werden über die Steuerdatei vorgewählt.

Zur Berechnung der Flüsse werden für all diese Spezies in der einzelnen Box (für das freie Trajektorien-Modell) oder in der unteren Box (für das 3-Box-Modell) bei den gegebenen Anfangsbedingungen die Umsätze aller Reaktionen, an denen sie beteiligt sind, aufaddiert. Ist diese Spezies ein Produkt, so werden diese Umsätze zur Produktionsrate, ansonsten zur Destruktionsrate hinzuaddiert.

Sind an einer Reaktion Mitglieder einer Familie beteiligt, so wird der Umsatz dieser Reaktion für die Gesamtfamilie nur dann zur Berechnung herangezogen, wenn ein zahlenmäßiger Überschuß an Mitgliedern entweder produziert oder verbraucht wird.

Werden dagegen gleichviele Moleküle der Mitglieder durch diese eine Reaktion verbraucht wie produziert, so trägt die Reaktion nicht zur Änderung der Familienkonzentration bei und wird daher übergangen.

Die Ausgabe in die Diagnosedatei *diagn.dat* erfolgt in Form einer Matrix. Dabei wird für jede Spezies für die Diagnosezeitpunkte neben der Konzentration die verbrauchenden wie produzierenden Reaktionen mit ihren relativen Beiträgen zum Gesamtumsatz, sowie die absoluten Gesamtumsätze zu den gewählten Zeiten aufgeführt. Ein Auszug aus einer Diagnosedatei ist im Anhang aufgeführt.

Zur besseren Orientierung, welche Reaktion nun den Umsatz der entsprechenden Substanz bestimmt, wird jeder Reaktion noch ein Kennzeichen für ihre relative Beteiligung am Gesamtumsatz zu dem gegebenen Zeitpunkt beigelegt. Diesem Zweck dienen Sternchen, die eine optische Erleichterung schaffen, die für jede Substanz wichtigen Reaktionen zu erkennen. So erhalten all die Reaktionen, die zu dem gewählten Zeitpunkt mehr als 10 % zum Gesamtumsatz beitragen 3 Sternchen, die mit einer Beteiligung von 1 bis 10 % 2 Sternchen, sowie 1 Sternchen, wenn die Beteiligung der Reaktionen zwischen 1 Promille und 1 Prozent liegt.

Eine weitere Hilfestellung besteht durch den Hinweis in der Ausgabe, daß falls der Abbau einer Substanz zu mehr als 98 % zu allen Zeiten über eine einzige Reaktion erfolgt, die entsprechende Substanz vermutlich durch ihr Folgeprodukt ersetzt werden kann. Diese Angabe sollte aber durch eine Analyse der Bedeutung dieser Substanz für die Edukte und eine Begutachtung der Lebensdauer dieser Substanz vom Benutzer des Modells in jedem Fall überprüft werden (siehe RUHNKE (1995)).

11.2. Einteilung der Spezies durch Analyse der Lebenszeiten

Als weitere Analysemöglichkeit des Diagnose-Programms steht noch die Berechnung der Lebenszeiten für jede Substanz zur Verfügung.

Die Moleküllebensdauer einer Substanz ist dabei definiert durch:

$$\tau_{i,\text{Molekül}} = \frac{1}{D_i} \quad (11.1)$$

Die Ensemble-Lebensdauer einer Substanz ergibt sich nach:

$$\tau_{i,\text{Ensemble}} = \frac{c_i(t)}{D_i \cdot c_i(t) - P_i} \quad (11.2)$$

Durch die Angabe eines kritischen Zeitschrittes in der Steuerdatei ist das Diagnoseprogramm in der Lage anzugeben, nach welchem Formalismus die einzelnen Substanzkonzentrationen während der Simulation zu errechnen sind.

Die Hilfestellung, die durch die Angabe eines kritischen Zeitschrittes zur Einteilung der Substanzen in "Steady-State"-Substanzen, zeitabhängige Substanzen und Substanzen, deren Konzentration konstant ist, gegeben werden kann, beruht auf den Lebensdauern der einzelnen Substanzen. Denn für kurzlebige Radikale sind die Produktions- und Destruktionsterme nahezu gleich groß, so daß sich die Konzentration kaum ändert und die Ensemble-Lebensdauer groß wird, die Molekül-Lebensdauer aber sehr klein ist. Für "konstante" Substanzen ändert sich die Konzentration ebenfalls nicht. Da aber die Destruktion in diesem Fall sehr klein ist, ist auch die Molekül-Lebenszeit groß. Der kritische Zeitschritt, der zwischen diesen beiden Extremen der Molekül-Lebenszeit liegt, erlaubt die Einteilung nach folgenden Kriterien:

$$\tau_{\text{Molekül},i} \ll \Delta t_{\text{krit}} \Rightarrow c_i \text{ aus dem Ansatz des stationären Zustandes} \quad (11.3)$$

$$\tau_{\text{Molekül},i} \gg \Delta t_{\text{krit}} \Rightarrow c_i = \text{konstant} \quad (11.4)$$

Für die beiden Schranken wird in dem vorliegenden Programm folgendes angenommen:

Ist die Molekül-Lebensdauer einer Substanz kleiner als 5 % des kritischen Zeitschrittes und die Ensemble-Lebensdauer größer als der 50fache Wert des kritischen Zeitschrittes, so wird die Angabe ausgegeben, daß sich die Substanz im Steady-State befindet und daher einer Familie zugeordnet werden kann. Sind dagegen die Molekül- als auch die Ensemble-Lebensdauer beide größer als der 50fache Wert des kritischen Zeitschrittes, so wird die Angabe "konstant" angegeben. Liegt die Molekül-Lebensdauer zwischen diesen Extremen, so muß die Konzentration zeitabhängig durch die Lösung der Eulerschen Differentialgleichung gelöst werden.

Die Größe des kritischen Zeitschrittes, der in der Steuerdatei "von außen" vorgegeben wird, ist dabei zumeist durch die gestellte Aufgabe und die für sie typische Zeitskala vorgegeben:

- für Tagesgänge: $1 \text{ Minute} < \Delta t_{\text{krit}} < 10 \text{ Tage}$
- für Langzeitprognosen: $1 \text{ Tag} < \Delta t_{\text{krit}} < 100 \text{ Jahre}$
- für Kfz-Emissionen: $0.1 \text{ Sekunde} < \Delta t_{\text{krit}} < 30 \text{ Minuten}$

Alle oben angegebenen Schranken unterliegen einer gewissen Willkür. Die von uns hier eingesetzten Werte haben sich im Verlaufe einer großen Zahl von Tests als geeignet herausgestellt, die überwiegende Mehrzahl der Fälle richtig wiederzugeben. Es bleibt jedoch auch eine Reihe von Grenzfällen übrig, in denen alleine der Nutzen entscheiden muß, wie das Reaktionssystem zu handhaben ist. Das Unterprogramm DIAGN kann ebenso wie die im nächsten Kapitel beschriebenen Unterprogramme zur Sensitivitätsberechnung nur Hinweise geben und Hilfestellung bei der Diagnose eines Reaktionssystems leisten.

Das Diagnoseunterprogramm wird durch die Auflistung aller Reaktionen mit der Summe aller Sternchen für jede Reaktion beendet, wobei die Sternchen für eine Substanz, die als "konstant" angesehen wird, nicht mitzählen (siehe Tabelle im Anhang). Durch diese Prozedur werden sofort all die Reaktionen augenfällig, die zu den Diagnosezeitpunkten und -bedingungen keine Bedeutung für die Edukte und Produkte besitzen. Diese können dann für die eigentliche Zusammenstellung des Chemiesystems im Hinblick auf die Simulation aus dem Reaktionssystem zumeist entfernt werden.

Durch dieses Unterprogramm besteht also die Möglichkeit, das bestehende Reaktionssystem zu überprüfen und zu straffen. Durch diese Straffung wird das Reaktionssystem kompakter und der Modellauf schneller, ohne wesentlich an Genauigkeit einzubüßen.

12. Sensitivitätsberechnung

Numerische Modelle benötigen je nach ihrer Komplexität eine Vielzahl von Eingabeparametern zur Lösung der entsprechenden Bilanzgleichungen. Will man den Einfluß der Änderung einer dieser Eingangsgrößen auf eine zu bestimmende Ausgangsgröße berechnen, so werden unterschiedliche Typen der Sensitivitätsberechnungen für dieses Problem herangezogen. In dem vorliegenden Programm sind zwei verschiedene Berechnungsarten enthalten und können über Steuerparameter ausgewählt werden.

In chemischen Modellen ist besonders die differentielle Änderung der Konzentration einer Substanz i in Abhängigkeit von einem beliebigen Eingabeparameter λ von Interesse.

$$s_{ij} = \frac{\partial c_i(t, \lambda)}{\partial \lambda_j} \quad (12.1)$$

Die Größen s_{ij} sind die Sensitivitätskoeffizienten. Da der so definierte Sensitivitätskoeffizient dimensionsbehaftet ist und über einen großen Wertebereich variieren kann, werden zumeist zur Analyse eines Systems normalisierte Sensitivitätskoeffizienten benutzt, die dimensionslos sind:

$$\bar{s}_{ij} = \frac{\lambda_j}{c_i(t, \lambda)} \cdot \frac{\partial c_i(t, \lambda)}{\partial \lambda_j} = \frac{\partial \ln c_i(t, \lambda)}{\partial \ln \lambda_j} \quad (12.2)$$

Als Parameter λ_j der Sensitivitätsberechnung kommen dabei sowohl die Reaktionskonstanten aller im System befindlichen Reaktionen, als auch die Konzentrationen aller im System enthalten Substanzen in Frage. Prinzipiell ist es möglich, alle Eingabedaten als Parameter λ_j einzusetzen.

Die Beurteilung der Ergebnisse zielt dabei auf unterschiedliche Aufgabenstellungen hin: Die Sensitivität bezüglich der Reaktionskonstanten mündet in der Angabe eines Fehlers der Modellergebnisse bezüglich der Güte der Eingabeparameter und somit der Unsicherheit des Chemiemoduls. Denn die im Modell verwendeten Geschwindigkeitskonstanten besitzen, da alle Meßwerte fehlerbehaftet sind, einen Unsicherheitsbereich. Diese Unsicherheit wird jedoch bei Simulationsrechnungen häufig übergangen und die berechneten Simulationsergebnisse werden zumeist als korrekt, also ohne Unsicherheits- bzw. Fehlerbereich, angegeben. Die Sensitivitätsanalyse bezüglich der Reakti-

onskonstanten erlaubt es nun, die Unsicherheiten der Eingangsdaten zu berücksichtigen und so einen Fehler für jede erhaltene Konzentration einer Substanz anzugeben, der mittels einer Gauß'schen Fehlerfortpflanzung errechnet wird:

$$\Delta c_i = \sqrt{\sum_j s_{ij}^2 \cdot \Delta \lambda_j^2} \quad (12.3)$$

Es ist darauf hinzuweisen, daß die Sensitivitätsanalyse das Differentialsystem als linear annimmt, das heißt, die Ergebnisse gelten nur in der Umgebung des Standardfalls. Somit läßt sich aus der Tatsache, daß der Sensitivitätskoeffizient bezüglich einer Reaktionskonstante klein ist, nicht unbedingt davon ausgehen, daß die Reaktion auf die Konzentration der Substanz keinen Einfluß hat und somit weggelassen werden kann.

Die Sensitivität der Konzentration einer Substanz bezüglich der Änderung einer anderen Substanzkonzentration gibt einen Hinweis darauf, wie wichtig die entsprechende Substanz für die Problemstellung der Simulation ist. Das Ziel bei der Berechnung dieser Sensitivitätskoeffizienten liegt also weniger in der Angabe einer Unsicherheit der Ergebnisse, sondern hauptsächlich in der Bestimmung der Relevanz der Spezies für das Reaktionssystem. Ebenso können die Beziehungen der Substanzen untereinander aufgeklärt werden. Durch Aufklären der Verzahnung der Reaktionspfade und Substanzen untereinander ist es dann möglich, Reaktionspfade und Substanzen zu identifizieren, die für die Fragestellung keine Bedeutung besitzen und somit aussortiert werden können, ohne das Ergebnis der Simulation hinsichtlich der zu untersuchenden Substanz maßgeblich zu beeinflussen.

Selbstverständlich geht der Sensitivitätskoeffizient bezüglich einer Konzentration auch in den Fehler einer Simulation ein. Während die Sensitivitäten bezüglich der Reaktionskonstanten die "Unsicherheit aufgrund der Chemie" beschreiben, geben die Sensitivitäten bezüglich Konzentration "die Unsicherheit der Modellaussage bezüglich der Feldmessungen" an. Aus ihnen ist dann zum Beispiel auch abzuleiten, welche Substanzen während einer Kampagne besonders genau gemessen werden müssen.

12.1. Das Unterprogramm SENSIIND

Die einfachste Möglichkeit (siehe auch RABITZ ET AL. (1983)) zur Berechnung der normalisierten Sensitivitätskoeffizienten besteht darin, die differentiellen Änderungen durch kleine endliche Änderungen eines Parameters anzunähern. Diese Verfahrensweise wird indirekte Methode genannt, und es ergibt sich folgende Beziehung:

$$\bar{s}_{ij} = \frac{\lambda_j}{c_i(t, \lambda)} \cdot \frac{c_i(t, \lambda_j + \Delta\lambda_j) - c_i(t, \lambda_j - \Delta\lambda_j)}{2\Delta\lambda_j} \quad (12.4)$$

Um diese Gleichung lösen zu können, muß die Bilanzgleichung der chemischen Reaktionen für jede Substanz für jede Änderung des Eingangsparameters λ_j gelöst werden. Dabei sind die Transporteinflüsse indirekt enthalten, ein Fehler im Transport wird allerdings vernachlässigt. Die Bilanzgleichung ist eine Funktion der Konzentrationen aller Substanzen im System, der Zeit und der Eingangsparameter,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = f(\bar{c}, t, \lambda) = \bar{P} - \bar{D} \cdot \bar{c} \quad (12.5)$$

wobei $\bar{c}$, $\bar{P}$ und $\bar{D}$ den n-dimensionalen Vektoren der Konzentration, Produktionsraten bzw. Destruktionsfrequenzen entsprechen und λ den m-dimensionalen Vektor der Eingangsparameter darstellt.

Die Berechnung der normalisierten Sensitivitätskoeffizienten mittels dieser Methode erfolgt dabei zeitabhängig. Das heißt, es werden die Unterschiede bei Änderung des Parameters λ_j in der Konzentration der Substanzen nach einer gewissen Zeitspanne festgestellt. Die Zeitspanne, über die dabei die Rechnung erfolgt, entspricht hier dem kritischen Zeitschritt, der bereits in dem Unterprogramm DIAGN zur Einteilung des Reaktionssystems diente.

Als Parameter λ_j werden im Unterprogramm zunächst die Reaktionskonstanten aller im System befindlichen Reaktionen und anschließend die Konzentrationen aller Substanzen betrachtet. Als Variationsbreite $\Delta\lambda_j$ wird für beide Fälle im Programm eine relative Änderung der zu dem Zeitpunkt gültigen Parameter um 5 % nach oben und nach unten gesetzt, falls nicht in den Eingabedateien der Reaktionen und Konzentrationen die Unsicherheitsbereiche der Reaktionen bzw. Konzentrationen angegeben wurden.

Die Berechnung des aktuellen, da temperaturabhängigen Unsicherheitsfaktors f erfolgt in dem Unterprogramm UNSICHER entsprechend den verschiedenen Formeln für die unterschiedlichen Temperaturabhängigkeiten der Reaktionskonstanten (Tabelle 12.1). Für die nicht dort aufgeführten Reaktionskennzeichen wird der Unsicherheitsbereich als nicht temperaturabhängig betrachtet. Eine Fehlerabschätzung existiert bei diesen in der Literatur nicht, so daß bei der Angabe der Unsicherheitsbereiche in der Eingabedatei der Reaktionen lediglich die Unsicherheit bei 298 Kelvin angegeben wird.

Mit diesen Unsicherheitsfaktoren ergibt sich $\Delta\lambda_j$ zu:

$$\Delta\lambda_j = f \cdot \lambda_j \quad (12.6)$$

Da zunächst die normalisierten Sensitivitätskoeffizienten bezüglich einer Änderung in einer Reaktionskonstanten bei aktuellem Wert der restlichen Konstanten und Konzentrationen berechnet werden, läuft eine äußere Schleife über alle Reaktionen und eine innere Schleife über die beiden zu berechnenden Fälle $c_i(t, \lambda_j + \Delta\lambda_j)$, $c_i(t, \lambda_j - \Delta\lambda_j)$. Der "Normalfall" $c_i(t, \lambda_j)$ wird nur einmal berechnet.

Um die Konzentrationswerte zu bestimmen, werden die Unterprogramme PRODES und EUSEN aufgerufen. Diese berechnen zum einen die Produktionsraten $\bar{P}$ und die Destruktionsfrequenzen $\bar{D}$ für alle Substanzen mit den aktuellen Reaktionskonstanten und Konzentrationen inklusive der einen geänderten Konstante nach dem im Unterprogramm CHEMIE beschriebenen Formalismus. Zum anderen werden die Differentialgleichungen (12.5) nach dem im Unterprogramm EULER beschriebenen Verfahren durch das Unterprogramm EUSEN gelöst. Die Berechnung erfolgt dabei mit einem festen Zeitschritt von 1 Sekunde, der sich bei Voruntersuchungen als ausreichend klein für die zeitabhängige Sensitivitätsberechnung erwiesen hat.

Ist die innere Schleife über die Parametervariation vollendet, so können die normalisierten Sensitivitätskoeffizienten für alle Substanzen bei Änderung der einen Reaktionskonstante berechnet und abgespeichert werden. Danach springt die äußere Schleife auf die nächste Reaktion weiter, wobei die in der Schleife zuvor geänderte Reaktionskonstante auf ihren ursprünglichen Wert zurückgesetzt wird. Dann wird die Konstante der nächsten Reaktion den Änderungen unterworfen, und somit nacheinander alle normalisierten Sensitivitätskoeffizienten aller Substanzen bezüglich dieser Änderung berechnet.

Die Bestimmung der normalisierten Sensitivitätskoeffizienten bezüglich einer Änderung in den Konzentrationen erfolgt ebenfalls nach dem soeben beschriebenen Ablauf. Dabei läuft die äußere Schleife über alle mit "s" gekennzeichneten Substanzen, die dann in der inneren Schleife als Parameter die relative Änderung erfahren und somit zur Berechnung von $c_i(t, \lambda_j + \Delta\lambda_j)$, $c_i(t, \lambda_j - \Delta\lambda_j)$ und den "Normalfall" $c_i(t, \lambda_j)$ herangezogen werden. Die Berechnung der normalisierten Sensitivitätskoeffizienten erfolgt mit Hilfe der Unterprogramme PRODES und EUSEN analog dem oben beschriebenen Verfahren.

Nach der Berechnung der Sensitivitätskoeffizienten erfolgt jeweils die Berechnung der Unsicherheitsbereiche gemäß Gleichung (12.3), wobei dann nicht die normalisierten Sensitivitätskoeffizienten sondern die dimensionsbehafteten Sensitivitätskoeffizienten und der im Unterprogramm UNSICHER berechnete Unsicherheitsbereich bzw. der Standardwert von 5 % herangezogen werden.

Ist der letzte (vierte) Durchlauf der Sensitivitätsberechnung bezüglich der Änderung in den Reaktionskonstanten und den Konzentrationen zu dem in der Steuerdatei angegebenen Diagnosezeitpunkt beendet, so werden die errechneten normalisierten Sensitivitätskoeffizienten zusammen mit den errechneten Unsicherheitsbereichen in der Datei *sensiind.rk* für die Sensitivitäten bezüglich den Reaktionskonstanten bzw. *sensiind.kon* für die Sensitivitäten bezüglich den Konzentrationen ausgegeben. In letzterer werden zudem auch noch die absoluten Sensitivitäten gespeichert.

12.2. Das Unterprogramm SENSIDIR

Eine zweite Möglichkeit zur Berechnung der Sensitivitätskoeffizienten, die sogenannte direkte Methode, ergibt sich daraus, daß der n-dimensionale Vektor der Sensitivitätskoeffizienten $\bar{s}_j$, der die Sensitivitätskoeffizienten s_{ij} der n Substanzkonzentrationen bezüglich des Parameters λ_j enthält, folgende Gleichung erfüllt (siehe auch DUNKER (1984)):

$$\frac{\partial \bar{s}_j}{\partial t} = J(t) \cdot \bar{s}_j + \bar{f}_j \quad (12.7)$$

Dabei sind die Vektoren wie folgt definiert

$$\bar{s}_j = \frac{\partial \bar{c}}{\partial \lambda_j} \quad (12.8)$$

und

$$\bar{f}_j = \frac{\partial f(\bar{c}, t, \lambda)}{\partial \lambda_j} \quad (12.9)$$

Die Elemente der Jacobi-Matrix berechnen sich nach

$$J_{kl}(t) = \frac{\partial f_k(c_k, t, \lambda)}{\partial c_l} \quad (12.10)$$

Nimmt man einen stationären Zustand zu den Zeitpunkten der Berechnung an (WALLASCH (1993)), ist die zu lösende Gleichung zur Bestimmung der Sensitivitätskoeffizienten:

$$0 = J(t) \cdot \bar{s}_j + \bar{f}_j \quad (12.11)$$

Dieses lineare Gleichungssystem läßt sich zum Beispiel mit Hilfe der Gauß-Eliminierung lösen.

Bevor die Berechnung durchgeführt wird, müssen zunächst all die Substanzen ermittelt werden, die sich zu dem Analysezeitpunkt im Steady-State befinden, denn nur für diese ist Gleichung (12.11) gültig.

Sind diese Substanzen herausgefiltert, so wird zunächst die Jacobi-Matrix berechnet. Zu diesem Zwecke läuft eine äußere Schleife über die Substanz, die differentiell geändert wird. Es werden für alle Reaktionen die Differentiale nach der vorgegebenen Substanz bestimmt und das Unterprogramm PRODES aufgerufen. Dort werden die Steady-State-Konzentrationen der herausgefilterten Substanzen nach dem im Unterprogramm STEADY beschriebenen Verfahren errechnet. Anschließend wird die Spalte der Jacobi-Matrix bezüglich der geänderten Substanz berechnet und abgespeichert.

Die Berechnung der Matrix der expliziten Differentiale nach den Geschwindigkeitskonstanten bzw. Substanzkonzentrationen erfolgt nach dem Schema der Berechnung der Jacobi-Matrix. Zunächst werden die Differentiale der Umsatzraten nach dem Parameter berechnet, anschließend das Unterprogramm PRODES aufgerufen, abschließend die Werte für $\bar{f}_j$ berechnet und abgespeichert.

Sind so die beiden Terme des linearen Gleichungssystems (Jacobi-Matrix und die expliziten Differentiale) bestimmt, kann die Lösung dieser Gleichungen erfolgen. Dazu werden zunächst die Gleichungen umgestellt nach

$$J(t) \cdot \bar{s}_j = -\bar{f}_j \quad (12.12)$$

und anschließend das Unterprogramm GAUSS aufgerufen, welches die Lösung (die Sensitivitätskoeffizienten) des linearen Gleichungssystems berechnet. Nachdem das Unterprogramm GAUSS die Koeffizienten in das Hauptprogramm übertragen hat, werden sie normalisiert.

Nach der Berechnung der Lösung für die expliziten Differentiale nach den Geschwindigkeitskonstanten werden die Sensitivitätskoeffizienten für die Lösung der Gleichung

für die expliziten Differentiale nach den Substanzkonzentrationen im Unterprogramm GAUSS berechnet und anschließend normalisiert.

Die Sensitivitätsanalysen können bis zu viermal während eines Rechenlaufes durchgeführt werden. Ist der vierte Durchlauf, gemäß der in der Steuerdatei entsprechenden Diagnosezeit durchlaufen, so werden die normalisierten Sensitivitätskoeffizienten für eine Änderung in den Geschwindigkeitskonstanten in der Datei *sensidir.rk* und die normalisierten Sensitivitätskoeffizienten nach den Substanzkonzentrationen in der Datei *sensidir.kon* gespeichert.

Tabelle 12-1: Berechnungsarten des Unsicherheitsfaktors f der Geschwindigkeitskonstanten und zugehöriges Reaktionskennzeichen. Die Konstanten sind mit UK1 bis UK4 bezeichnet und entsprechen den Fehlern in den entsprechenden Konstanten der Temperatur und Druckabhängigkeit K1 bis K4 (siehe Tabelle 3-2).

--->: Temperaturabhängigkeit nach Arrhenius:

$$f = UK_1 \cdot e^{\text{Abs}\left(UK_2 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right)} - 1$$

-T->: Temperatur- und Druckabhängigkeit nach Troe:

$$f = \sqrt{\left(\frac{x_1 \text{fac} \cdot x_2}{x_1 + x_2}\right)^2 + \left(\frac{x_2 \text{fac} \cdot x_1}{x_1 + x_2}\right)^2}$$

mit $x_1 = K_1 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-K_2} \cdot [M]$, $x_2 = K_3 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-K_4} \cdot [M]$
 und $x_1 \text{fac} = UK_1 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-UK_2} - 1$, $x_2 \text{fac} = UK_3 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-UK_4} - 1$

-A->: Temperaturabhängigkeit nach:

$$f = UK_1 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-UK_2} - 1$$

-E->: Temperatur- und Druckabhängigkeit nach:

$$f = \sqrt{\left(\frac{x_1 \text{fac} \cdot x_2}{x_1 + x_2}\right)^2 + \left(\frac{x_2 \text{fac} \cdot x_1}{x_1 + x_2}\right)^2}$$

$x_1 = K_1 \cdot e^{-\frac{K_2}{T}} \cdot [M]$, $x_2 = K_3 \cdot e^{-\frac{K_4}{T}} \cdot [M]$
 und $x_1 \text{fac} = UK_1 \cdot e^{\text{Abs}\left(UK_2 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right)} - 1$,
 $x_2 \text{fac} = UK_3 \cdot e^{\text{Abs}\left(UK_4 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right)} - 1$

Für alle anderen Reaktionskonstanten gilt:

$$f = UK_1 - 1$$

13. Weitere Unterprogramme und Funktionen

13.1. Das Unterprogramm DELBLK

Dieses Unterprogramm wird in den Subroutines INRE und INCO aufgerufen und dient dazu, in der eingelesenen Zeile die Leerzeichen zu löschen. In den dazugehörigen Dateien dienen also nur Sonderzeichen als Trennung!

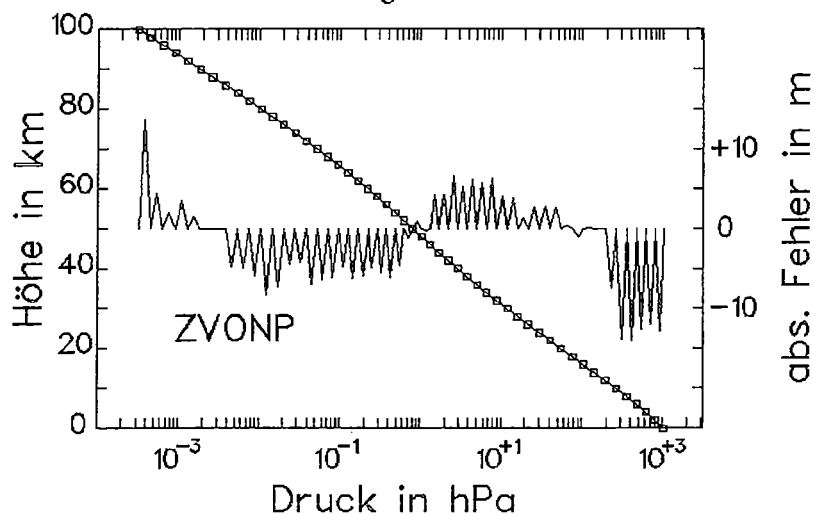
13.2. Das Block-Data Unterprogramm CHARAC

In diesem Unterprogramm werden zu Beginn eines Laufes alle Felder auf ihre Standardwerte initialisiert, bevor sie im Laufe des Programms durch die eingegebenen Werte der Eingabedateien überschrieben werden.

13.3. Die Funktion ZVONP

Diese Funktion dient dazu, aus dem im Unterprogramm TIMDEP berechneten Druck die Höhe des Luftpaketes in km zu errechnen. Die Funktion beruht auf der stückweise durch Exponentialfunktionen angenäherten US-STANDARD-ATMOSPHERE (1976). Die Größen h , die in der Funktion auftreten, sind die Skalenhöhen der Standard-Atmosphäre bei vorgegebenem Druck, jeweils für den entsprechenden Höhenbereich.

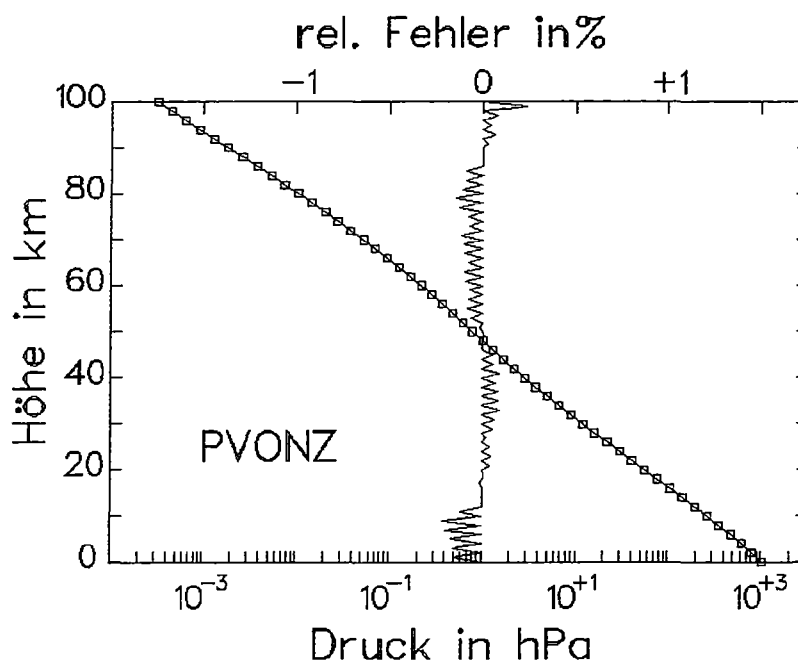
Abbildung 13-1: Darstellung der Höhe in Abhängigkeit des Druckes. Der angegebene absolute Fehler bezieht sich auf die Differenz der mittels der Näherung errechneten Höhe zu der in der US STANDARD-ATMOSPHERE aufgeführten Höhen.



13.4. Die Funktion PVONZ

Diese Funktion dient dazu, aus den im Unterprogramm TIMDEP berechneten mittleren Höhen der beiden unteren Boxen (im Falle des 3-Box-Modells), den Druck des Luftpaketes in diesen Höhen in mbar zu errechnen. Die Funktion PVONZ beruht ebenso wie die Funktion ZVONP auf der stückweise durch Exponentialfunktionen angenäherten US-STANDARD-ATMOSPHERE (1976).

Abbildung 13-2: Darstellung des Druckes in Abhängigkeit der Höhe. Der angegebene relative Fehler bezieht sich auf die Differenz des mittels der Näherung berechneten Druckes zu dem in der US STANDARD-ATMOSPHERE aufgeführten Druck.



13.5. Die Funktion TVONZ

Diese Funktion dient dazu, aus den im Unterprogramm TIMDEP berechneten mittleren Höhen der beiden unteren Boxen (im Falle des 3-Box-Modells), die Temperatur des Luftpaketes in diesen Höhen in K zu errechnen. Die Funktion TVONZ beruht auf der in der US-STANDARD-ATMOSPHERE (1976) angegebenen Temperaturabnahme von 6.5 K/km von einer Bodentemperatur von 288 K aus.

14. Literatur:

- BLEILEBENS, D., *Reaktionskinetische Untersuchungen zur Nachtchemie von Stickoxiden*, Diplomarbeit, 113 pp., Universität Bonn, Bonn, 1994.
- BRASSEUR, G., UND. S. SALOMON, *Aeronomy of the Middle Atmosphere*, 441 pp., D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Bosten, Lancaster, 1984.
- DERWENT, R.G., Evaluation of a Number of Chemical Mechanisms for their Application in Models Describing the Formation of Photochemical Ozone in Europe, *Atmos. Environ.*, 24A, 2615-2624, 1990.
- DUNKER, A.M., The decoupled direct method for calculating sensitivity coefficients in chemical kinetics, *J. Chem. Phys.*, 81, 2385-2393, 1984.
- EHHALT, D.H., Equivalent Displacement Height and Vertical Eddy Diffusion in the Stratosphere, *J. Geophys. Res.*, 92, 13240-13244, 1987.
- GARRAT, J.R., *The Atmospheric Boundary Layer*, 316 pp., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- HASS, H., *Description of the EURAD Chemistry-Transport-Model Version2 (CTM2)*, Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln, Heft 83, Köln, 100 Seiten, 1991
- HELTEN, M., H. FARK, G. HOLZEM UND O. VOELKER BECKER, *Messung freier Radikale in der unteren Stratosphäre mittels Matrix-Isolation-Elektron-Spin-Resonanz (MIESR)*, Abschlußbericht zum Vorhaben 01 VOZ 03/6 des BMFT, 1994.
- MÜLLER, R., *Die Chemie des Ozons in der polaren Stratosphäre*, Dissertation, Freie Universität Berlin, Berlin, 143 Seiten, 1994.
- RABITZ, H., M. KRAMER, AND D. DACOL, Sensitivity analysis in chemical kinetics, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 34, 419-461, 1983.
- ROEDEL, W., *Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre*, Springer, Berlin, 457 Seiten, 1992.
- ROMBERG, E., R. BÖSINGER, A. LOHMEYER, R. RUHNKE UND E.-P. RÖTH, NO-NO₂-Umwandlung für die Anwendung bei Immissionsprognosen für Kfz-Abgase, zur Veröffentlichung eingereicht in *Staub - Reinhaltung der Luft*, Juni 1995.
- RÖTH, E.P., *Description of a Photonflux-Model to Determine Photodissociation-coefficients*, Berichte des Forschungszentrums Jülich, in Vorbereitung
- RUHNKE, R., *Entwicklung eines Modells der troposphärischen Schwefelchemie*, Diplomarbeit, Universität Essen, Essen, 101 Seiten, 1992.

- RUHNKE, R., *Ein Verfahren zur Analyse von chemischen Reaktionssystemen und zur Erstellung von Chemiemodulen für atmosphärische Modelle*, Dissertation, Universität Essen, Essen, 154 Seiten, 1995.
- SILLMAN, S., J.A. LOGAN, AND S.C. WOFSY, The Sensitivity of Ozone to Nitrogen Oxides and Hydrocarbons in Regional Ozone Episodes, *J. Geophys. Res.*, 95, 1837-1851, 1990.
- STULL, R.B., *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*, Atmospheric Science Library, Kluwer Academics Publishers, Dordrecht, Boston, London, 666 Seiten, 1988.
- U.S. STANDARD ATMOSPHERE, 1976, NOAA-S/T 76-1562, National Oceanic and Atmospheric Administration, Washington, D.C., 227 Seiten, 1976.
- WALLASCH, M., Private Mitteilung, 1993.

15. Anhang

- A) Auszug aus einer Konzentrationsausgabedatei
- B) Auszug aus einer Analyse
 - a) Diagnose
 - b) Sensitivität bezüglich der Konzentrationen
 - c) Sensitivität bezüglich der Reaktionskonstanten
- C) Beschreibung des Programms BOXPLOT
- D) Quelltext des Programms BOXTRA

Anhang A

Auszug aus einer Konzentrationsausgabedatei

ANHANG A) AUSZUG AUS EINER KONZENTRATIONSAUSGABEDATEI

B O X T R A

=====

Version vom 17.08.1995

Datum:29. 8.1995

Es wurde das Trajektorienmodell gewählt.

Zahl der Tage : 2
Druck : 1013.2 mbar
Pot. Temperatur : 293. K
Temperatur : 293. K

Fluessigwassergehalt : .20 g/m3
pH-Wert : 4.0
Es tritt kein Regen auf.

Reaktionssystem:

Die Reaktionskonstanten gelten fuer 293.1 K und dem angegebenen Druck.
Die Photolyseraten entsprechen den 12 Uhr-Werten.

1	O(1D)	+O2	+	--->O	+O2	+	+	4.06E-11	[cm-3*s-1]
2	O(1D)	+N2	+	--->O	+N2	+	+	2.62E-11	[cm-3*s-1]
3	O(1D)	+H2O	+	--->OH	+OH	+	+	2.30E-10	[cm-3*s-1]
4	O3	+OH	+	--->HO2	+O2	+	+	6.48E-13	[cm-3*s-1]
5	O3	+HO2	+	--->OH	+O2	+O2	+	2.00E-15	[cm-3*s-1]
6	OH	+HO2	+	--->H2O	+O2	+	+	1.13E-10	[cm-3*s-1]
7	OH	+HO2	+M	--->H2O	+O2	+	+	1.60E-30	[cm-6*s-1]
8	OH	+H2O2	+	--->HO2	+H2O	+	+	1.68E-12	[cm-3*s-1]
9	HO2	+HO2	+	--->H2O2	+O2	+	+	1.78E-12	[cm-3*s-1]
10	HO2	+HO2	+M	--->H2O2	+O2	+	+	5.15E-32	[cm-6*s-1]
11	O3	+NO	+	--->NO2	+O2	+	+	1.69E-14	[cm-3*s-1]
12	O3	+NO2	+	--->NO3	+O2	+	+	2.81E-17	[cm-3*s-1]
13	OH	+HNO2	+	--->NO2	+H2O	+	+	6.77E-11	[cm-3*s-1]
14	OH	+HNO4	+	--->NO2	+H2O	+O2	+	4.75E-12	[cm-3*s-1]
15	HO2	+NO	+	--->OH	+NO2	+	+	8.39E-12	[cm-3*s-1]
16	HO2	+NO2	+	--->HNO2	+O2	+	+	1.20E-13	[cm-3*s-1]
17	HO2	+NO3	+	--->HNO3	+O2	+	+	4.10E-12	[cm-3*s-1]
18	H2O	+N2O5	+	--->HNO3	+HNO3	+	+	2.00E-21	[cm-3*s-1]
19	NO	+NO3	+	--->NO2	+NO2	+	+	2.84E-11	[cm-3*s-1]
20	N2O5	+M	+	--->NO2	+NO3	+	+	7.79E-22	[cm-3*s-1]
21	HNO4	+M	+	--->HO2	+NO2	+	+	1.95E-21	[cm-3*s-1]
22	OH	+CO	+	--->HO2	+CO2	+	+	2.40E-13	[cm-3*s-1]
23	OH	+CO	+M	--->HO2	+CO2	+	+	3.60E-33	[cm-6*s-1]
24	OH	+CH4	+	--->H2O	+CH3O2	+	+	6.96E-15	[cm-3*s-1]
25	OH	+CH2O	+	--->H2O	+HO2	+CO	+	1.00E-11	[cm-3*s-1]
26	OH	+CH3OOH	+	--->H2O	+CH3O2	+	+	7.52E-12	[cm-3*s-1]
27	HO2	+CH2O	+	--->H2O2	+HO2	+CO	+	5.19E-14	[cm-3*s-1]
28	HO2	+CH3O2	+	--->O2	+CH3OOH	+	+	5.06E-12	[cm-3*s-1]
29	NO	+CH3O2	+	--->NO2	+CH2O	+HO2	+	7.76E-12	[cm-3*s-1]
30	CS2	+O	+	--->COS	+SO2	+	+	3.48E-12	[cm-3*s-1]
31	CS2	+OH	+	--->COS	+HS	+	+	1.20E-12	[cm-3*s-1]
32	COS	+OH	+	--->HS	+CO2	+	+	1.83E-15	[cm-3*s-1]
33	COS	+O	+	--->SO2	+CO	+	+	1.15E-14	[cm-3*s-1]

34	H2S	+OH	+	--->HS	+H2O	+	+	4.65E-12 [cm-3*s-1]
35	HS	+O2	+	--->SO2	+OH	+	+	4.00E-19 [cm-3*s-1]
36	HS	+O3	+	--->SO2	+OH	+	+	3.46E-12 [cm-3*s-1]
37	HS	+NO2	+	--->SO2	+NO	+	+	2.92E-11 [cm-3*s-1]
38	HS	+HO2	+	--->H2S	+O2	+	+	3.00E-11 [cm-3*s-1]
39	HS	+H2O2	+	--->H2S	+HO2	+	+	5.00E-15 [cm-3*s-1]
40	DMS	+OH	+	--->SO2	+	+	+	4.85E-12 [cm-3*s-1]
41	SO2	+CH3O2	+	--->H2SO4	+CH2O	+HO2	+	5.00E-17 [cm-3*s-1]
42	O	+O2	+M	-A->O3	+	+	+	6.33E-34 [cm-6*s-1]
43	OH	+HNO3	+	-C->NO3	+H2O	+	+	1.56E-13 [cm-3*s-1]
44	O	+NO2	+M	-T->NO3	+	+	+	6.55E-32 [cm-6*s-1]
45	OH	+NO	+M	-T->HNO2	+	+	+	2.01E-31 [cm-6*s-1]
46	OH	+NO2	+M	-T->HNO3	+	+	+	4.78E-31 [cm-6*s-1]
47	HO2	+NO2	+M	-T->HNO4	+	+	+	5.82E-32 [cm-6*s-1]
48	NO3	+NO2	+M	-T->N2O5	+	+	+	5.13E-32 [cm-6*s-1]
49	SO2	+OH	+M	-T->H2SO4	+	+	+	3.63E-32 [cm-6*s-1]
50	O3	+	+	-*->O(1D)	+O2	+	+	2.40E-05 [s-1]
51	O3	+	+	-*->O	+O2	+	+	5.43E-04 [s-1]
52	H2O2	+	+	-*->OH	+OH	+	+	9.66E-06 [s-1]
53	NO2	+	+	-*->O	+NO	+	+	1.26E-02 [s-1]
54	NO3	+	+	-*->NO	+O2	+	+	2.73E-02 [s-1]
55	NO3	+	+	-*->NO2	+O	+	+	1.71E-01 [s-1]
56	N2O5	+	+	-*->NO2	+NO2	+O	+	4.00E-05 [s-1]
57	HNO2	+	+	-*->OH	+NO	+	+	2.39E-03 [s-1]
58	HNO3	+	+	-*->OH	+NO2	+	+	6.09E-07 [s-1]
59	HNO4	+	+	-*->HO2	+NO2	+	+	8.23E-06 [s-1]
60	CH2O	+	+	-*->CO	+HO2	+HO2	+	4.41E-05 [s-1]
61	CH2O	+	+	-*->CO	+H2	+	+	5.72E-05 [s-1]
62	CS2	+	+	-*->SO2	+COS	+	+	3.00E-04 [s-1]
63	CH3OOH	+	+	-*->CH2O	+HO2	+OH	+	9.71E-06 [s-1]
64	SO2AQ	+H2O2AQ	+	-O->SO4AQ	+	+	+	3.80E-09 [cm-3*s-1]
65	SO2AQ	+O3AQ	+	-R->SO4AQ	+	+	+	9.02E-09 [cm-3*s-1]
66	HSO3AQ	+O3AQ	+	-R->SO4AQ	+	+	+	9.02E-09 [cm-3*s-1]
67	SO3AQ	+O3AQ	+	-R->SO4AQ	+	+	+	9.02E-09 [cm-3*s-1]

Gleichgewichte:

Die Gleichgewichtskonstanten gelten fuer einen pH-Wert von 4.0

68	SO2	+	+	<=G=>SO2AQ	+HSO3AQ	+SO3AQ	+	4.56E+02
69	O3	+	+	<=H=>O3AQ	+	+	+	2.34E-02
70	H2O2	+	+	<=H=>H2O2AQ	+	+	+	2.10E+05
71	H2S	+	+	<=H=>H2SAQ	+	+	+	2.72E-01
72	CS2	+	+	<=H=>CS2AQ	+	+	+	1.01E-01
73	COS	+	+	<=H=>COSAQ	+	+	+	3.38E-02
74	DMS	+	+	<=H=>DMSAQ	+	+	+	7.50E+01
75	HNO3	+	+	<=H=>NO3AQ	+	+	+	7.05E+06
76	CH2O	+	+	<=H=>CH2O AQ	+	+	+	4.20E+03
77	CH3OOH	+	+	<=H=>MHPAQ	+	+	+	4.24E+02

Substanzfamilien:

HODD=OH+HO2

OODD=O+O3+O(1D)

NODD=NO+NO2+NO3+N2O5+N2O5+HNO2+HNO4

HXS=HS+H2S

AQUA=SO2AQ+SO3AQ+HSO3AQ+SO4AQ

Kontrollsummen:

NSUM=NODD+HNO3+NO3AQ

SSUM=AQUA+H2SAQ+HXS+SO2+H2SO4+DMS+CS2+COS

	Substanz	C(Box1)	Status	C(Box3)	F[cm2s-1]	Quellart	Vd[cms-1]	Unsicherh.
NR= 1	M	:2.50E+19	konstant	2.50E+19	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR= 2	O(1D)	:7.10E-03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 3	O2	:5.30E+18	konstant	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 4	O	:1.90E+03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 5	N2	:1.82E+19	konstant	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 6	H2O	:3.10E+17	konstant	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 7	OH	:3.60E+06	Analyse	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 8	O3	:1.02E+12	Analyse	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 9	HO2	:2.20E+08		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 10	H2O2	:2.56E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 11	NO	:2.56E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 12	NO2	:1.00E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 13	NO3	:6.78E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 14	HNO2	:1.28E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 15	HNO4	:1.04E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 16	HNO3	:7.68E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 17	N2O5	:1.92E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 18	CO	:6.91E+12		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 19	CO2	:8.80E+15	konstant	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 20	CH4	:4.89E+13		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 21	CH3O2	:5.20E+07		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 22	CH2O	:3.07E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 23	CH3OOH	:1.17E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 24	CS2	:6.00E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 25	COS	:1.30E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 26	SO2	:1.28E+11	Analyse	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 27	HS	:8.00E+03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 28	H2S	:8.20E+07		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 29	DMS	:1.30E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 30	H2SO4	:1.30E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 31	H2	:1.40E+10	konstant	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 32	SO2AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 33	H2O2AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 34	SO4AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 35	O3AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 36	HSO3AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 37	SO3AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 38	H2SAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 39	CS2AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 40	COSAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 41	DMSAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 42	NO3AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 43	CH2O AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 44	MHPAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 45	HODD	:2.24E+08	Analyse	1.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 46	OODD	:1.02E+12	Analyse	1.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 47	NODD	:5.55E+11		1.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 48	HXS	:8.20E+07		1.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 49	AQUA	:4.00E-25		1.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	1.00E+00
NR= 50	NSUM	:1.32E+12		2.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR= 51	SSUM	:1.61E+11		3.00E-99	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00

Mixing Ratios :

Anzahl Zeitpunkte:	229 Substanzen:									
	WASSER	M	O(1D)	O2	O	N2	H2O	OH	O3	HO2
	H2O2	NO	NO2	NO3	HNO2	HNO4	HNO3	N2O5	CO	CO2
	CH4	CH3O2	CH2O	CH3OOH	CS2	COS	SO2	HS	H2S	DMS
	H2SO4	H2	SO2AQ	H2O2AQ	SO4AQ	O3AQ	HSO3AQ	SO3AQ	H2SAQ	CS2AQ
	COSAQ	DMSAQ	NO3AQ	CH2O AQ	MHPAQ	HODD	OODD	NODD	HXS	AQUA
	NSUM	SSUM								
t=10: 0, 0 UT	2.00E-07	2.45E+19	1.13E-21	2.12E-01	2.53E-15	7.28E-01	1.24E-02	6.61E-13	4.08E-08	8.27E-12
T= 290.6 K	5.04E-11	4.12E-09	1.52E-08	1.57E-11	1.72E-10	1.34E-10	8.62E-10	1.26E-09	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	2.07E-12	1.20E-09	4.67E-11	2.40E-10	5.20E-10	5.11E-09	2.97E-15	3.28E-12	5.20E-11
32.6 °	5.20E-10	5.60E-10	4.97E-14	5.20E-11	9.06E-45	4.69E-15	1.14E-11	9.60E-15	4.38E-18	1.19E-16
	8.63E-17	1.91E-14	2.98E-08	2.48E-11	9.73E-14	8.93E-12	4.08E-08	2.22E-08	3.28E-12	1.14E-11
	5.29E-08	6.45E-09								
t=10:10, 0 UT	2.00E-07	2.45E+19	1.33E-21	2.12E-01	2.25E-15	7.28E-01	1.24E-02	8.83E-14	4.68E-08	2.27E-13
T= 290.7 K	1.24E-11	8.55E-09	1.31E-08	6.46E-14	7.98E-11	3.00E-12	8.75E-10	2.03E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.77E-14	1.14E-09	4.57E-11	2.01E-10	5.58E-10	5.08E-09	3.62E-17	3.24E-12	5.14E-11
31.6 °	5.30E-10	5.60E-10	4.94E-14	1.28E-11	5.76E-11	5.37E-15	1.13E-11	9.54E-15	4.33E-18	9.99E-17
	9.27E-17	1.89E-14	3.03E-08	2.35E-11	9.51E-14	3.15E-13	4.68E-08	2.17E-08	3.24E-12	6.90E-11
	5.29E-08	6.49E-09								
t=10:20, 0 UT	2.00E-07	2.45E+19	1.37E-21	2.12E-01	2.25E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.58E-14	4.68E-08	2.00E-13
T= 290.7 K	3.10E-12	8.51E-09	1.30E-08	6.39E-14	4.72E-11	2.58E-12	8.81E-10	1.73E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.52E-14	1.08E-09	4.50E-11	1.69E-10	5.91E-10	5.08E-09	2.65E-17	3.22E-12	5.11E-11
30.7 °	5.35E-10	5.60E-10	4.94E-14	3.20E-12	7.99E-11	5.38E-15	1.13E-11	9.55E-15	4.30E-18	8.38E-17
	9.80E-17	1.88E-14	3.05E-08	2.23E-11	9.37E-14	2.76E-13	4.68E-08	2.16E-08	3.22E-12	9.12E-11
	5.29E-08	6.52E-09								
t=10:30, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.41E-21	2.12E-01	2.25E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.24E-14	4.69E-08	1.91E-13
T= 290.8 K	8.03E-13	8.47E-09	1.29E-08	6.38E-14	3.73E-11	2.42E-12	8.86E-10	1.70E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.46E-14	1.02E-09	4.44E-11	1.42E-10	6.18E-10	5.09E-09	2.16E-17	3.21E-12	5.09E-11
29.9 °	5.40E-10	5.60E-10	4.95E-14	8.27E-13	9.24E-11	5.38E-15	1.13E-11	9.56E-15	4.28E-18	7.01E-17
	1.02E-16	1.87E-14	3.06E-08	2.11E-11	9.24E-14	2.64E-13	4.69E-08	2.14E-08	3.21E-12	1.04E-10
	5.29E-08	6.55E-09								
t=10:40, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.44E-21	2.12E-01	2.24E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.18E-14	4.70E-08	1.89E-13
T= 290.9 K	2.36E-13	8.42E-09	1.28E-08	6.38E-14	3.42E-11	2.35E-12	8.91E-10	1.67E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.46E-14	9.68E-10	4.38E-11	1.18E-10	6.41E-10	5.10E-09	1.83E-17	3.19E-12	5.06E-11
29.2 °	5.45E-10	5.60E-10	4.95E-14	2.43E-13	1.02E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.57E-15	4.26E-18	5.87E-17
	1.06E-16	1.86E-14	3.08E-08	1.99E-11	9.11E-14	2.60E-13	4.70E-08	2.12E-08	3.19E-12	1.13E-10
	5.29E-08	6.57E-09								
t=10:50, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.46E-21	2.12E-01	2.24E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.19E-14	4.70E-08	1.87E-13
T= 290.9 K	9.42E-14	8.37E-09	1.26E-08	6.39E-14	3.32E-11	2.29E-12	8.96E-10	1.64E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.47E-14	9.17E-10	4.32E-11	9.90E-11	6.61E-10	5.11E-09	1.57E-17	3.18E-12	5.03E-11
28.6 °	5.50E-10	5.60E-10	4.96E-14	9.69E-14	1.10E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.58E-15	4.23E-18	4.90E-17
	1.09E-16	1.85E-14	3.10E-08	1.89E-11	8.98E-14	2.59E-13	4.70E-08	2.11E-08	3.18E-12	1.22E-10
	5.29E-08	6.59E-09								
t=11: 0, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.48E-21	2.12E-01	2.23E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.21E-14	4.71E-08	1.87E-13
T= 291.0 K	5.75E-14	8.31E-09	1.25E-08	6.40E-14	3.27E-11	2.25E-12	9.01E-10	1.62E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.49E-14	8.69E-10	4.26E-11	8.27E-11	6.77E-10	5.11E-09	1.35E-17	3.16E-12	5.01E-11
28.2 °	5.55E-10	5.60E-10	4.96E-14	5.92E-14	1.19E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.58E-15	4.21E-18	4.09E-17
	1.12E-16	1.84E-14	3.11E-08	1.79E-11	8.85E-14	2.59E-13	4.71E-08	2.09E-08	3.16E-12	1.30E-10
	5.29E-08	6.61E-09								

t=11:10, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.49E-21	2.12E-01	2.22E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.22E-14	4.71E-08	1.86E-13
T= 291.1 K	4.67E-14	8.25E-09	1.24E-08	6.41E-14	3.24E-11	2.20E-12	9.06E-10	1.60E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.50E-14	8.24E-10	4.20E-11	6.91E-11	6.91E-10	5.11E-09	1.17E-17	3.15E-12	4.98E-11
27.8 °	5.60E-10	5.60E-10	4.95E-14	4.80E-14	1.27E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.57E-15	4.19E-18	3.41E-17
	1.14E-16	1.83E-14	3.13E-08	1.69E-11	8.72E-14	2.58E-13	4.71E-08	2.07E-08	3.15E-12	1.39E-10
	5.29E-08	6.62E-09								

t=11:20, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.50E-21	2.12E-01	2.21E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.22E-14	4.71E-08	1.85E-13
T= 291.1 K	4.22E-14	8.18E-09	1.24E-08	6.43E-14	3.21E-11	2.16E-12	9.11E-10	1.58E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.52E-14	7.82E-10	4.15E-11	5.76E-11	7.02E-10	5.11E-09	1.01E-17	3.13E-12	4.96E-11
27.6 °	5.65E-10	5.60E-10	4.95E-14	4.34E-14	1.35E-10	5.40E-15	1.13E-11	9.57E-15	4.16E-18	2.85E-17
	1.16E-16	1.82E-14	3.14E-08	1.61E-11	8.60E-14	2.57E-13	4.71E-08	2.06E-08	3.13E-12	1.47E-10
	5.29E-08	6.64E-09								

t=11:30, 0 UT	2.00E-07	2.46E+19	1.50E-21	2.12E-01	2.19E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.19E-14	4.72E-08	1.84E-13
T= 291.2 K	3.95E-14	8.11E-09	1.23E-08	6.46E-14	3.17E-11	2.11E-12	9.16E-10	1.56E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.53E-14	7.43E-10	4.09E-11	4.81E-11	7.12E-10	5.11E-09	8.72E-18	3.11E-12	4.93E-11
27.6 °	5.70E-10	5.60E-10	4.94E-14	4.05E-14	1.44E-10	5.40E-15	1.13E-11	9.55E-15	4.14E-18	2.37E-17
	1.18E-16	1.81E-14	3.16E-08	1.53E-11	8.47E-14	2.56E-13	4.72E-08	2.04E-08	3.11E-12	1.55E-10
	5.29E-08	6.64E-09								

t=11:40, 0 UT	2.00E-07	2.47E+19	1.50E-21	2.12E-01	2.18E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.15E-14	4.72E-08	1.82E-13
T= 291.3 K	3.72E-14	8.04E-09	1.22E-08	6.49E-14	3.13E-11	2.06E-12	9.21E-10	1.55E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.53E-14	7.07E-10	4.03E-11	4.01E-11	7.20E-10	5.10E-09	7.56E-18	3.10E-12	4.91E-11
27.6 °	5.75E-10	5.60E-10	4.94E-14	3.82E-14	1.52E-10	5.40E-15	1.13E-11	9.54E-15	4.12E-18	1.98E-17
	1.19E-16	1.80E-14	3.17E-08	1.45E-11	8.35E-14	2.54E-13	4.72E-08	2.03E-08	3.10E-12	1.63E-10
	5.29E-08	6.65E-09								

t=11:50, 0 UT	2.00E-07	2.47E+19	1.49E-21	2.12E-01	2.16E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.09E-14	4.72E-08	1.80E-13
T= 291.3 K	3.52E-14	7.96E-09	1.21E-08	6.52E-14	3.09E-11	2.02E-12	9.26E-10	1.53E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.54E-14	6.72E-10	3.98E-11	3.34E-11	7.26E-10	5.10E-09	6.57E-18	3.08E-12	4.88E-11
27.8 °	5.80E-10	5.60E-10	4.93E-14	3.61E-14	1.60E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.52E-15	4.10E-18	1.65E-17
	1.20E-16	1.79E-14	3.19E-08	1.38E-11	8.23E-14	2.51E-13	4.72E-08	2.01E-08	3.08E-12	1.72E-10
	5.29E-08	6.66E-09								

t=12: 0, 0 UT	2.00E-07	2.47E+19	1.48E-21	2.12E-01	2.14E-15	7.28E-01	1.24E-02	7.00E-14	4.72E-08	1.79E-13
T= 291.4 K	3.32E-14	7.88E-09	1.20E-08	6.57E-14	3.04E-11	1.97E-12	9.31E-10	1.52E-12	2.76E-07	3.52E-04
51.0N/ 7.5E	1.96E-06	1.54E-14	6.41E-10	3.92E-11	2.79E-11	7.32E-10	5.09E-09	5.73E-18	3.07E-12	4.86E-11
28.2 °	5.85E-10	5.60E-10	4.92E-14	3.41E-14	1.69E-10	5.39E-15	1.13E-11	9.50E-15	4.07E-18	1.38E-17
	1.21E-16	1.78E-14	3.20E-08	1.31E-11	8.12E-14	2.49E-13	4.72E-08	2.00E-08	3.07E-12	1.80E-10
	5.29E-08	6.66E-09								

...

Anhang B

Auszug aus einer Analyse

a) Diagnose

b) Sensitivität bezüglich der Konzentrationen

c) Sensitivität bezüglich der Reaktionskonstanten

ANHANG B) AUSZUG AUS EINER ANALYSE (DIAGNOSE)

								12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Diagnose für O3 mit Konz. =								1.17E+12	1.15E+12	1.07E+12	8.38E+11	[cm-3]
Produktionen:												
42	O	+O2	+M	-->O3	+	+	+	100.00***	100.00***	100.00***	100.00***	[%]
Gesamtproduktion =								4.38E+09	3.39E+09	1.36E+09	6.82E-17	[cm-3*s-1]
Destruktionen:												
4	O3	+OH	+	-->HO2	+O2	+	+	.03	.02	.00	.00	[%]
5	O3	+HO2	+	-->OH	+O2	+O2	+	.00	.00	.00	.00	[%]
11	O3	+NO	+	-->NO2	+O2	+	+	84.73***	84.00***	84.35***	.00	[%]
12	O3	+NO2	+	-->NO3	+O2	+	+	.21*	.28*	.79*	100.00***	[%]
36	HS	+O3	+	-->SO2	+OH	+	+	.00	.00	.00	.00	[%]
50	O3	+	+	-->O(1D)	+O2	+	+	.63*	.34*	.03	.00	[%]
51	O3	+	+	-->O	+O2	+	+	14.40***	15.36***	14.83***	.00	[%]
Gesamtdestruktion=								4.38E+09	3.39E+09	1.37E+09	8.09E+06	[cm-3*s-1]
Lebensdauer für ein Molekül O3 nach [C/D]								2.66E+02	3.40E+02	7.79E+02	1.04E+05	[s]
Lebensdauer für O3 nach [C/(P-D)]								-3.36E+06	2.79E+05	1.22E+05	1.04E+05	[s]
Die Substanz-Konz. für einen kritischen Zeitschritt von 5. Min ist:								zeitab.	zeitab.	zeitab.	konstant	
Kenngröße [P/D]								1.00E+00	9.99E-01	9.94E-01	8.43E-24	
Vermutlich kann bei der Analyse vernachlaessigt werden:											Produktion	

...

								12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Diagnose für SO2 mit Konz. =								1.26E+11	1.22E+11	1.19E+11	1.15E+11	[cm-3]
Produktionen:												
30	CS2	+O	+	-->COS	+SO2	+	+	.06	.04	.07	.00	[%]
33	COS	+O	+	-->SO2	+CO	+	+	.00	.07	.55*	.00	[%]
35	HS	+O2	+	-->SO2	+OH	+	+	.14*	.34*	.24*	.87*	[%]
36	HS	+O3	+	-->SO2	+OH	+	+	.26*	.63*	.43*	1.21**	[%]
37	HS	+NO2	+	-->SO2	+NO	+	+	.56*	1.39**	1.24**	4.46**	[%]
40	DMS	+OH	+	-->SO2	+	+	+	4.59**	31.39***	27.63***	93.46***	[%]
62	CS2	+	+	-->SO2	+COS	+	+	94.39***	66.13***	69.84***	.00	[%]
Gesamtproduktion =								2.18E+05	1.24E+04	6.35E+02	1.04E-04	[cm-3*s-1]
Destruktionen:												
41	SO2	+CH3O2	+	-->H2SO4	+CH2O	+HO2	+	.00	.00	.00	99.03***	[%]
49	SO2	+OH	+M	-->H2SO4	+	+	+	100.00***	100.00***	100.00***	.97*	[%]
Gesamtdestruktion=								1.97E+05	7.92E+04	3.51E+03	1.98E-01	[cm-3*s-1]
Lebensdauer für ein Molekül SO2 nach [C/D]								6.37E+05	1.55E+06	3.38E+07	5.80E+11	[s]
Lebensdauer für SO2 nach [C/(P-D)]								-6.12E+06	1.83E+06	4.12E+07	5.81E+11	[s]
Die Substanz-Konz. für einen kritischen Zeitschritt von 5. Min ist:								konstant	konstant	konstant	konstant	
Kenngröße [P/D]								1.10E+00	1.57E-01	1.81E-01	5.26E-04	
Vermutlich kann bei der Analyse vernachlaessigt werden:												

...

Reaktionssystem:								Summe der Sternchen				
1	O(1D)	+O2	+	-->O	+O2	+	+	16	7.77E+06	3.23E+06	1.08E+05	2.12E-17
2	O(1D)	+N2	+	-->O	+N2	+	+	17	1.72E+07	7.14E+06	2.40E+05	4.70E-17
3	O(1D)	+H2O	+	-->OH	+OH	+	+	26	2.57E+06	1.07E+06	3.59E+04	7.01E-18
4	O3	+OH	+	-->HO2	+O2	+	+	16	1.28E+06	5.29E+05	2.23E+04	9.72E-03
5	O3	+HO2	+	-->OH	+O2	+O2	+	8	1.02E+04	5.26E+03	6.17E+02	1.38E-01
6	OH	+HO2	+	-->H2O	+O2	+	+	0	8.62E+02	1.84E+02	1.07E+00	1.73E-10
7	OH	+HO2	+M	-->H2O	+O2	+	+	0	3.01E+02	6.51E+01	3.76E-01	6.02E-11

8	OH	+H2O2	+	-->HO2	+H2O	+	+	11	2.37E+00	2.83E-01	1.25E-03	9.76E-13
9	HO2	+HO2	+	-->H2O2	+O2	+	+	3	3.50E+01	9.37E+00	1.51E-01	1.26E-08
10	HO2	+HO2	+M	-->H2O2	+O2	+	+	3	2.52E+01	6.78E+00	1.09E-01	9.05E-09
11	O3	+NO	+	-->NO2	+O2	+	+	39	3.71E+09	2.85E+09	1.16E+09	2.79E-06
12	O3	+NO2	+	-->NO3	+O2	+	+	28	9.27E+06	9.58E+06	1.08E+07	8.09E+06
13	OH	+HNO2	+	-->NO2	+H2O	+	+	12	8.84E+04	1.73E+04	1.34E+02	4.87E-05
14	OH	+HNO4	+	-->NO2	+H2O	+O2	+	0	4.02E+02	7.43E+01	5.59E-01	1.12E-10
15	HO2	+NO	+	-->OH	+NO2	+	+	20	7.22E+06	2.84E+06	1.59E+05	1.44E-13
16	HO2	+NO2	+	-->HNO2	+O2	+	+	27	1.57E+05	8.23E+04	1.28E+04	3.65E+00
17	HO2	+NO3	+	-->HNO3	+O2	+	+	2	2.93E+01	2.06E+01	6.59E+00	1.37E-01
18	H2O	+N2O5	+	-->HNO3	+HNO3	+	+	26	2.30E+04	2.74E+04	8.83E+04	7.27E+06
19	NO	+NO3	+	-->NO2	+NO2	+	+	19	8.96E+06	9.21E+06	1.03E+07	2.32E-06
20	N2O5	+M	+	-->NO2	+NO3	+	+	26	5.96E+05	8.15E+05	2.50E+06	1.80E+08
21	HNO4	+M	+	-->HO2	+NO2	+	+	36	1.92E+06	1.00E+06	1.57E+05	4.78E+01
22	OH	+CO	+	-->HO2	+CO2	+	+	33	2.82E+06	1.17E+06	5.34E+04	2.97E-02
23	OH	+CO	+M	-->HO2	+CO2	+	+	28	1.04E+06	4.38E+05	1.99E+04	1.10E-02
24	OH	+CH4	+	-->H2O	+CH3O2	+	+	38	5.61E+05	2.39E+05	1.08E+04	5.88E-03
25	OH	+CH2O	+	-->H2O	+HO2	+CO	+	29	2.73E+05	5.82E+04	1.87E+03	9.97E-04
26	OH	+CH3OOH	+	-->H2O	+CH3O2	+	+	21	1.26E+04	4.31E+03	1.84E+02	1.02E-04
27	HO2	+CH2O	+	-->H2O2	+HO2	+CO	+	22	3.66E+03	9.74E+02	8.69E+01	2.39E-02
28	HO2	+CH3O2	+	-->O2	+CH3OOH	+	+	12	8.58E+00	2.47E+00	3.21E-02	1.47E-05
29	NO	+CH3O2	+	-->NO2	+CH2O	+HO2	+	30	5.74E+05	2.44E+05	1.10E+04	5.43E-11
30	CS2	+O	+	-->COS	+SO2	+	+	2	1.25E+02	5.25E+00	4.68E-01	2.02E-26
31	CS2	+OH	+	-->COS	+HS	+	+	32	1.43E+03	3.20E+01	3.23E-01	1.57E-07
32	COS	+OH	+	-->HS	+CO2	+	+	31	5.59E+01	2.45E+01	1.11E+00	6.09E-07
33	COS	+O	+	-->SO2	+CO	+	+	10	1.06E+01	8.72E+00	3.48E+00	1.69E-25
34	H2S	+OH	+	-->HS	+H2O	+	+	24	6.07E+02	2.37E+02	1.07E+01	5.93E-06
35	HS	+O2	+	-->SO2	+OH	+	+	28	2.96E+02	4.18E+01	1.54E+00	9.08E-07
36	HS	+O3	+	-->SO2	+OH	+	+	29	5.67E+02	7.89E+01	2.70E+00	1.25E-06
37	HS	+NO2	+	-->SO2	+NO	+	+	34	1.23E+03	1.73E+02	7.87E+00	4.64E-06
38	HS	+HO2	+	-->H2S	+O2	+	+	12	1.87E-02	1.36E-03	6.36E-06	1.09E-15
39	HS	+H2O2	+	-->H2S	+HO2	+	+	0	5.80E-07	2.34E-08	8.37E-11	6.92E-20
40	DMS	+OH	+	-->SO2	+	+	+	23	1.00E+04	3.91E+03	1.75E+02	9.73E-05
41	SO2	+CH3O2	+	-->H2SO4	+CH2O	+HO2	+	14	2.38E+00	1.30E+00	1.29E-01	1.96E-01
42	O	+O2	+M	-->O3	+	+	+	24	4.38E+09	3.39E+09	1.36E+09	6.82E-17
43	OH	+HNO3	+	-->NO3	+H2O	+	+	24	6.30E+03	2.77E+03	1.28E+02	7.50E-05
44	O	+NO2	+M	-->NO3	+	+	+	2	2.57E+04	1.98E+04	9.86E+03	4.93E-22
45	OH	+NO	+M	-->HNO2	+	+	+	24	1.69E+06	5.30E+05	1.07E+04	1.89E-17
46	OH	+NO2	+M	-->HNO3	+	+	+	41	6.18E+06	2.56E+06	1.44E+05	8.06E-02
47	HO2	+NO2	+M	-->HNO4	+	+	+	36	1.92E+06	1.00E+06	1.56E+05	4.47E+01
48	NO3	+NO2	+M	-->N2O5	+	+	+	26	6.20E+05	8.45E+05	2.62E+06	1.88E+08
49	SO2	+OH	+M	-->H2SO4	+	+	+	34	1.97E+05	7.92E+04	3.51E+03	1.91E-03
50	O3	+	+	-->O(1D)	+O2	+	+	11	2.76E+07	1.14E+07	3.83E+05	8.38E-39
51	O3	+	+	-->O	+O2	+	+	18	6.31E+08	5.21E+08	2.04E+08	8.38E-39
52	H2O2	+	+	-->OH	+OH	+	+	9	7.87E+00	1.55E+00	3.28E-02	3.18E-49
53	NO2	+	+	-->O	+NO	+	+	36	3.72E+09	2.85E+09	1.16E+09	3.65E-39
54	NO3	+	+	-->NO	+O2	+	+	3	4.41E+04	5.10E+04	5.89E+04	4.00E-42
55	NO3	+	+	-->NO2	+O	+	+	6	2.76E+05	3.16E+05	3.54E+05	4.00E-42
56	N2O5	+	+	-->NO2	+NO2	+O	+	2	1.49E+03	1.22E+03	9.09E+02	1.19E-40
57	HNO2	+	+	-->OH	+NO	+	+	26	1.79E+06	6.37E+05	3.31E+04	3.89E-43
58	HNO3	+	+	-->OH	+NO2	+	+	23	1.39E+04	8.75E+03	1.02E+03	2.57E-40
59	HNO4	+	+	-->HO2	+NO2	+	+	0	3.96E+02	1.12E+02	2.72E+00	1.27E-47
60	CH2O	+	+	-->CO	+HO2	+HO2	+	36	6.92E+05	2.39E+05	3.10E+04	5.44E-41
61	CH2O	+	+	-->CO	+H2	+	+	18	9.00E+05	3.42E+05	6.69E+04	5.44E-41
62	CS2	+	+	-->SO2	+COS	+	+	27	2.06E+05	8.23E+03	4.43E+02	7.14E-44
63	CH3OOH	+	+	-->CH2O	+HO2	+OH	+	22	9.34E+03	5.36E+03	1.15E+03	7.39E-42
64	SO2AQ	+H2O2AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	23	3.88E+03	1.07E+03	1.01E+02	1.38E-01
65	SO2AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	20	1.46E+03	1.38E+03	1.24E+03	9.64E+02
66	HSO3AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	36	3.34E+05	3.16E+05	2.85E+05	2.21E+05
67	SO3AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	12	2.82E+02	2.66E+02	2.40E+02	1.86E+02

ANHANG B) AUSZUG AUS EINER ANALYSE (SENSITIVITÄT BEZÜGLICH DER KONZENTRATION)

Sensitivitätskoeffizienten bezüglich KON

		absolute Werte				relative Werte				
		12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Analyse für	OH									
7	OH	-3.35E-04	-3.61E-04	-1.49E-03	-2.40E-04	-3.35E-04	-3.61E-04	-1.49E-03	-2.40E-04	[%]
8	O3	-2.43E-09	-6.09E-10	8.34E-11	-8.19E-19	-1.64E-03	-9.87E-04	2.74E-03	-3.74E-05	[%]
26	SO2	-3.58E-07	-1.49E-07	-5.68E-09	2.38E-15	-2.60E-02	-2.57E-02	-2.07E-02	1.49E-02	[%]
45	HODD	1.19E-03	8.27E-04	5.06E-04	2.89E-05	4.23E-03	3.48E-03	5.01E-03	1.32E-01	[%]
Gesamtunsicherheit durch die Meßfehler in den Konzentrationen beträgt:						1.90	2.18	1.18	.66	[%]

		absolute Werte				relative Werte				
		12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Analyse für	O3									
7	OH	-2.76E+01	-2.76E+01	-3.52E+01	-4.40E+00	-4.09E-05	-1.70E-05	-1.07E-06	-9.62E-14	[%]
8	O3	-2.20E-05	-1.34E-05	-2.96E-05	-9.53E-05	-2.20E-05	-1.34E-05	-2.96E-05	-9.53E-05	[%]
26	SO2	-1.24E-04	-5.41E-05	-1.88E-06	-3.88E-12	-1.33E-05	-5.74E-06	-2.09E-07	-5.32E-13	[%]
45	HODD	1.25E+01	1.14E+01	8.46E+00	-7.59E-02	6.56E-05	2.97E-05	2.56E-06	-7.57E-12	[%]
Gesamtunsicherheit durch die Meßfehler in den Konzentrationen beträgt:						4.51	4.58	4.73	.00	[%]

		absolute Werte				relative Werte				
		12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Analyse für	SO2									
7	OH	-2.73E-03	-1.03E-02	-6.40E-02	-9.24E-01	-3.76E-08	-6.00E-08	-1.76E-08	-1.48E-13	[%]
8	O3	7.09E-07	3.86E-07	1.49E-07	7.29E-09	6.58E-06	3.64E-06	1.34E-06	5.32E-08	[%]
26	SO2	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	9.97E-01	[%]
45	HODD	-4.32E-01	-3.67E-01	-2.02E-01	-6.12E-03	-2.11E-05	-9.00E-06	-5.50E-07	-4.45E-12	[%]
Gesamtunsicherheit durch die Meßfehler in den Konzentrationen beträgt:						4.98	4.98	4.99	4.99	[%]

		absolute Werte				relative Werte				
		12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Analyse für	HODD									
7	OH	-1.31E-03	-1.72E-03	-2.02E-02	-1.08E+00	-3.69E-04	-4.08E-04	-2.04E-03	-2.38E-04	[%]
8	O3	-7.05E-09	-1.76E-09	1.34E-09	-1.12E-14	-1.34E-03	-6.76E-04	4.42E-03	-1.12E-04	[%]
26	SO2	-1.10E-06	-5.51E-07	-3.73E-08	1.73E-11	-2.26E-02	-2.25E-02	-1.37E-02	2.38E-02	[%]
45	HODD	4.07E-03	3.42E-03	6.42E-03	1.31E-01	4.07E-03	3.42E-03	6.42E-03	1.31E-01	[%]
Gesamtunsicherheit durch die Meßfehler in den Konzentrationen beträgt:						4.10	4.75	4.47	.66	[%]

ANHANG B) AUSZUG AUS EINER ANALYSE (SENSITIVITÄT BEZÜGLICH DER REAKTIONSKONSTANTEN)

Normierte Sensitivitätskoeffizienten bezüglich RK

							12.00 Uhr	15.00 Uhr	18.00 Uhr	21.00 Uhr	
Analyse für O3											
1	O(1D)	+O2	+	-->O	+O2	+	.00683	.00274	.00015	.00000	[*]
2	O(1D)	+N2	+	-->O	+N2	+	.01514	.00606	.00032	.00000	[*]
3	O(1D)	+H2O	+	-->OH	+OH	+	-.02227	-.00887	-.00047	.00000	[*]
4	O3	+OH	+	-->HO2	+O2	+	-.00736	-.00352	-.00027	.00000	[*]
5	O3	+HO2	+	-->OH	+O2	+O2	-.00041	-.00021	-.00003	.00000	[*]
6	OH	+HO2	+	-->H2O	+O2	+	-.00003	-.00001	.00000	.00000	[*]
7	OH	+HO2	+M	-->H2O	+O2	+	-.00001	.00000	.00000	.00000	[*]
8	OH	+H2O2	+	-->HO2	+H2O	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
9	HO2	+HO2	+	-->H2O2	+O2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
10	HO2	+HO2	+M	-->H2O2	+O2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
11	O3	+NO	+	-->NO2	+O2	+	-9.76090**	-8.41958**	-5.27906**	.00000	[*]
12	O3	+NO2	+	-->NO3	+O2	+	-.04192	-.04733	-.08321	-.28563*	[*]
13	OH	+HNO2	+	-->NO2	+H2O	+	.00027	.00002	.00000	.00000	[*]
14	OH	+HNO4	+	-->NO2	+H2O	+O2	-.00001	.00000	.00000	.00000	[*]
15	HO2	+NO	+	-->OH	+NO2	+	.02249	.01056	.00121	.00000	[*]
16	HO2	+NO2	+	-->HNO2	+O2	+	-.00533	-.00270	-.00032	.00000	[*]
17	HO2	+NO3	+	-->HNO3	+O2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
18	H2O	+N2O5	+	-->HNO3	+HNO3	+	-.00058	-.00068	-.00168	.00026	[*]
19	NO	+NO3	+	-->NO2	+NO2	+	.01696	.01824	.03203	.00000	[*]
20	N2O5	+M	+	-->NO2	+NO3	+	.00580	.00675	.01842	-.00199	[*]
21	HNO4	+M	+	-->HO2	+NO2	+	.00791	.00367	.00053	.00000	[*]
22	OH	+CO	+	-->HO2	+CO2	+	.04894	.01990	.00076	.00000	[*]
23	OH	+CO	+M	-->HO2	+CO2	+	.01812	.00744	.00028	.00000	[*]
24	OH	+CH4	+	-->H2O	+CH3O2	+	.02034	.00861	.00037	.00000	[*]
25	OH	+CH2O	+	-->H2O	+HO2	+CO	.00462	.00097	.00003	.00000	[*]
26	OH	+CH3OOH	+	-->H2O	+CH3O2	+	.00046	.00015	.00001	.00000	[*]
27	HO2	+CH2O	+	-->H2O2	+HO2	+CO	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
28	HO2	+CH3O2	+	-->O2	+CH3OOH	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
29	NO	+CH3O2	+	-->NO2	+CH2O	+HO2	.00105	.00046	.00002	.00000	[*]
30	CS2	+O	+	-->COS	+SO2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
31	CS2	+OH	+	-->COS	+HS	+	-.00003	.00000	.00000	.00000	[*]
32	COS	+OH	+	-->HS	+CO2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
33	COS	+O	+	-->SO2	+CO	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
34	H2S	+OH	+	-->HS	+H2O	+	-.00001	-.00001	.00000	.00000	[*]
35	HS	+O2	+	-->SO2	+OH	+	.00001	.00000	.00000	.00000	[*]
36	HS	+O3	+	-->SO2	+OH	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
37	HS	+NO2	+	-->SO2	+NO	+	-.00001	.00000	.00000	.00000	[*]
38	HS	+HO2	+	-->H2S	+O2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
39	HS	+H2O2	+	-->H2S	+HO2	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
40	DMS	+OH	+	-->SO2	+	+	-.00007	-.00003	.00000	.00000	[*]
41	SO2	+CH3O2	+	-->H2SO4	+CH2O	+HO2	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
42	O	+O2	+M	-->O3	+	+	.00013	.00010	.00008	.00000	[*]
43	OH	+HNO3	+	-->NO3	+H2O	+	.00013	.00005	.00000	.00000	[*]
44	O	+NO2	+M	-->NO3	+	+	-.00012	-.00010	-.00008	.00000	[*]
45	OH	+NO	+M	-->HNO2	+	+	.00624	.00250	.00012	.00000	[*]
46	OH	+NO2	+M	-->HNO3	+	+	-.08704	-.03447	-.00128	.00000	[*]
47	HO2	+NO2	+M	-->HNO4	+	+	-.00784	-.00363	-.00050	.00000	[*]
48	NO3	+NO2	+M	-->N2O5	+	+	-.00600	-.00694	-.01874	.00209	[*]
49	SO2	+OH	+M	-->H2SO4	+	+	-.00132	-.00057	-.00002	.00000	[*]
50	O3	+	+	-->O(1D)	+O2	+	-.02420	-.00970	-.00052	.00000	[*]
51	O3	+	+	-->O	+O2	+	-.00002	-.00002	-.00001	.00000	[*]
52	H2O2	+	+	-->OH	+OH	+	.00000	.00000	.00000	.00000	[*]
53	NO2	+	+	-->O	+NO	+	9.79194**	8.44561**	5.31562**	.00000	[*]
54	NO3	+	+	-->NO	+O2	+	-.00172	-.00202	-.00244	.00000	[*]

55	NO3	+	+	-->NO2	+O	+	+	.00125	.00157	.00275	.00000	{%}
56	N2O5	+	+	-->NO2	+NO2	+O	+	.00002	.00002	.00001	.00000	{%}
57	HNO2	+	+	-->OH	+NO	+	+	-.00679	-.00306	-.00038	.00000	{%}
58	HNO3	+	+	-->OH	+NO2	+	+	.00021	.00013	.00001	.00000	{%}
59	HNO4	+	+	-->HO2	+NO2	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}
60	CH2O	+	+	-->CO	+HO2	+HO2	+	.03292	.01152	.00126	.00000	{%}
61	CH2O	+	+	-->CO	+H2	+	+	-.00024	-.00006	.00000	.00000	{%}
62	CS2	+	+	-->SO2	+COS	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}
63	CH3OOH	+	+	-->CH2O	+HO2	+OH	+	.00029	.00017	.00003	.00000	{%}
64	SO2AQ	+H2O2AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}
65	SO2AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}
66	HSO3AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}
67	SO3AQ	+O3AQ	+	-->SO4AQ	+	+	+	.00000	.00000	.00000	.00000	{%}

Gesamtunsicherheit durch die Fehler in den Reaktionskonstanten betrgt: .69 .60 .37 .01 {%}

Anhang C

Beschreibung des Programms BOXPLOT

BOXPLOT

Programm Name :

BOXPLOT.EXE

Programm Aufruf :

BOXPLOT

Programm Zweck :

Das Programm BOXPLOT dient zum Plotten der Ausgabe des Box-Trajektorien-Modells
BOXTRA.

Eingabe Dateien :

[drive:]filename.exe

Ausgabe Dateien :

BOXPLT.TMP

Um die Daten, die von dem Box-Trajektorien-Modell BOXTRA erzeugt werden, zu plotten, wurde das vorliegende Programm entwickelt. Das Programm erzeugt pro Lauf bis zu 8 Diagramme, für jeweils eine Substanz ein Diagramm. In jedem dieser Diagramme können die Zeitverläufe der Konzentrationen der Substanz aus bis zu 6 verschiedenen Dateien aufgezeichnet werden. Die Beschränkung auf 6 Dateien ergibt sich, da jeder Kurvenzug mit einer anderen Feder gezeichnet wird.

Für die Diagramme sind folgende Versionen möglich:

- 1) Es wird der volle Datensatz geplottet. Die Zeitachse ist immer Universal Time.
- 2) Es werden die letzten 24 Stunden der Rechnung geplottet.

Für jede dieser Versionen kann gewählt werden, ob die Konzentration logarithmisch oder linear aufgetragen werden soll.

Achtung ! Die Wahl der Achse gilt für alle Plots eines Laufes !

Im eingeschränkten Maße können die Daten auch noch bearbeitet werden. Vorgesehen sind zur Zeit folgende Möglichkeiten:

- 0) Die Daten werden nicht miteinander gekoppelt.
- 1) Die Kurven werden als Differenz zur Kurve des ersten Files aufgetragen.
- 2) Es wird jeweils das Verhältnis der aktuellen Kurve zur Kurve des ersten Files geplottet.

In den beiden Fällen, wo die Kurven verknüpft werden, wird die erste Kurve nicht geplottet. Auch hier gilt, daß die einmal getroffene Wahl für alle Substanzen gilt.

Nach der Wahl der Achse liest das Programm den Header der ersten Datei und zeigt an, welche Substanzen in dem File enthalten sind. Aus dieser Liste sind dann die bis zu 8 Substanzen, die aufgetragen werden sollen, durch Auflistung ihrer Kennzahlen anzugeben. Daraus ergibt sich, daß alle weiteren Files die Substanzen in der gleichen Reihenfolge enthalten müssen!

Nachdem ein File gelesen wurde, fragt das Programm nach dem Namen des nächsten einzulesenden Files. Sind 6 Files eingelesen, oder wird die Frage durch [Enter] quittiert, beginnt die Plotroutine.

Jedes Diagramm wird zuerst auf dem Bildschirm dargestellt. Eine Ausgabe auf dem Plotter erfolgt nur, wenn dies durch Bejaen der entsprechenden Frage gewünscht wird. Der Wechsel jeder Blattes ist durch Betätigung einer beliebigen Taste anzuzeigen.

Für jedes File wird in BOXPLOT.TMP eine Liste der ausgewählten Daten für etwaige weitere Verwendung erstellt.

Beispiel für ein Protokoll zum Programm BOXPLOT :

C:\TEMP>boxplot

```

BBBBBB   OOOO   XX   XX   PPPPP   LL   OOO   TTTTTT
BB   BB   OO   OO   XX XX   PP   PP   LL   OO   OO   TT
BBBBBB   OO   OO   XXX   PPPPP   LL   OO   OO   TT
BB   BB   OO   OO   XX XX   PP   LL   OO   OO   TT
BBBBBB   OOOO   XX   XX   PP   LLLLLL   OOO   TT

```

Programm zum Plotten der Ergebnisse von BOXTRAJ

Von welchem File soll gelesen werden ?

SCHWEFEL.AUS

Es gibt folgende Optionen für die Plots :

- 1 : Alle Daten werden geplottet.
- 2 : Es werden die letzten 24 Stunden gezeigt.

2

Die Kurven können auch miteinander kombiniert werden :

- 0 : keine Kombinationen (Default)
- 1 : relative Abweichungen zu Kurve 1
- 2 : Verhältnis zu Kurve 1

1

Erläuterungen zum Protokoll vom Programm BOXPLOT :

Eingabe des ersten Files

Auswahl der Zeitachse

Auswahl der Kombinationen

Beispiel für ein Protokoll zum Programm BOXPLOT :

Es können bis zu 8 Substanzen gewählt werden, die auf ein neues File ausgeschrieben werden.

Nr= 1:WASSER	Nr= 2:M	Nr= 3:O(1D)	Nr= 4:O2
Nr= 5:O	Nr= 6:N2	Nr= 7:H2O	Nr= 8:OH
Nr= 9:O3	Nr= 10:HO2	Nr= 11:H2O2	Nr= 12:NO
Nr= 13:NO2	Nr= 14:NO3	Nr= 15:HNO2	Nr= 16:HNO4
Nr= 17:HNO3	Nr= 18:N2O5	Nr= 19:CO	Nr= 20:CO2
Nr= 21:CH4	Nr= 22:CH3O2	Nr= 23:CH2O	Nr= 24:CH3OOH
Nr= 25:CS2	Nr= 26:COS	Nr= 27:SO2	Nr= 28:HS
Nr= 29:H2S	Nr= 30:DMS	Nr= 31:H2SO4	Nr= 32:H2
Nr= 33:SO2AQ	Nr= 34:H2O2AQ	Nr= 35:SO4AQ	Nr= 36:O3AQ
Nr= 37:HSO3AQ	Nr= 38:SO3AQ	Nr= 39:H2SAQ	Nr= 40:CS2AQ
Nr= 41:CO3AQ	Nr= 42:DMSAQ	Nr= 43:NO3AQ	Nr= 44:CH2O2AQ
Nr= 45:MHPAQ	Nr= 46:	Nr= 47:	Nr= 48:
Nr= 49:	Nr= 50:	Nr= 51:HO2D	Nr= 52:O2DD
Nr= 53:N2DD	Nr= 54:HXS	Nr= 55:AQUA	Nr= 56:NSUM

Welche Substanzen sollen separiert werden ?
(Geben Sie maximal 8 Nummern durch Komma getrennt ein !)
27, 33

Einlesen von SCHWEFEL.AUS beendet !

Von welchem File soll gelesen werden ?
B:SCHWEFEL.M2R
Einlesen von B:SCHWEFEL.M2R beendet !

Von welchem File soll gelesen werden ?

Bildschirmplot für die Substanz Nr. 27 (Zeit gegen Mischungsverhältnis)

Erläuterungen zum Protokoll vom Programm BOXPLOT :

Anzeige der im 1. File enthaltenen Substanzen.
Alle übrigen Files müssen die gleichen Substanzen in der gleichen Reihenfolge enthalten.

Auswahl der bis zu 8 gewünschten Substanzen

Eingabe des nächsten einzulesenden Files

Beendigung des Einlesens durch [Enter]

Beispiel für ein Protokoll zum Programm BOXPLOT :

Plotterausgabe ? (J/N:Default)
Bildschirmplot für die Substanz Nr. 33 (Zeit gegen Mischungsverhältnis)
Plotterausgabe ? (J/N:Default) C:\TEMP>

Erläuterungen zum Protokoll vom Programm BOXPLOT :

Wenn J eingegeben wird, wird ein Papier-Bild erzeugt
Abfrage erfolgt für jedes Diagramm

Eingabedateien

SCHWEFEL.AUS

Es wurde das Trajektorienmodell gewählt.
 Flüssigwassergehalt in g/m3 : 1.50
 pH-Wert : 4.0
 Niederschlagsmenge in mm/h : .01
 Es tritt kein Regen auf.
 Endpunkt der Trajektorie schwefel.mam
 Druck = 1013.200 mbar
 Potentielle Temperatur = 288. K
 Gesamtzahl der Tage : 1

Reaktionssystem:

1	O(1D)	+O2	+	--->O	+O2	+	+
2	O(1D)	+N2	+	--->O	+N2	+	+
3	O(1D)	+H2O	+	--->OH	+OH	+	+
4	O3	+OH	+	--->HO2	+O2	+	+
5	O3	+HO2	+	--->OH	+O2	+O2	+
6	OH	+HO2	+	--->H2O	+O2	+	+
7	OH	+HO2	+M	--->H2O	+O2	+	+
8	OH	+H2O2	+	--->HO2	+H2O	+	+
9	HO2	+HO2	+	--->H2O2	+O2	+	+
10	HO2	+HO2	+M	--->H2O2	+O2	+	+
11	O3	+NO	+	--->NO2	+O2	+	+
12	O3	+NO2	+	--->NO3	+O2	+	+
13	OH	+HNO2	+	--->NO2	+H2O	+	+
14	OH	+HNO4	+	--->NO2	+H2O	+O2	+
15	HO2	+NO	+	--->OH	+NO2	+	+
16	HO2	+NO2	+	--->HNO2	+O2	+	+
17	HO2	+NO3	+	--->HNO3	+O2	+	+
18	H2O	+N2O5	+	--->HNO3	+HNO3	+	+
19	NO	+NO3	+	--->NO2	+NO2	+	+
20	N2O5	+M	+	--->NO2	+NO3	+	+
21	HNO4	+M	+	--->HO2	+NO2	+	+
22	OH	+CO	+	--->HO2	+CO2	+	+
23	OH	+CO	+M	--->HO2	+CO2	+	+
24	OH	+CH4	+	--->H2O	+CH3O2	+	+
25	OH	+CH2O	+	--->H2O	+HO2	+CO	+
26	OH	+CH3OOH	+	--->H2O	+CH3O2	+	+
27	HO2	+CH2O	+	--->H2O2	+HO2	+CO	+
28	HO2	+CH3O2	+	--->O2	+CH3OOH	+	+
29	NO	+CH3O2	+	--->NO2	+CH2O	+HO2	+
30	CS2	+O	+	--->COS	+SO2	+	+
31	CS2	+OH	+	--->COS	+HS	+	+
32	COS	+OH	+	--->HS	+CO2	+	+

Parameter

Konstante

3.20E-11	-.7000	0.00E+00	.0000	3.21E-11
1.80E-11	-1.1000	0.00E+00	.0000	1.81E-11
2.30E-10	.0000	0.00E+00	.0000	2.30E-10
1.60E-11	9.4000	0.00E+00	.0000	1.55E-11
1.10E-14	5.0000	0.00E+00	.0000	1.08E-14
4.80E-11	-2.5000	0.00E+00	.0000	4.84E-11
1.60E-30	.0000	0.00E+00	.0000	1.60E-30
2.90E-12	1.6000	0.00E+00	.0000	2.88E-12
2.30E-13	-6.0000	0.00E+00	.0000	2.35E-13
1.70E-33	-10.0000	0.00E+00	.0000	1.76E-33
2.00E-12	14.0000	0.00E+00	.0000	1.91E-12
1.20E-13	24.5000	0.00E+00	.0000	1.10E-13
1.79E-11	-3.9000	0.00E+00	.0000	1.81E-11
1.30E-12	-3.8000	0.00E+00	.0000	1.32E-12
3.70E-12	-2.4000	0.00E+00	.0000	3.73E-12
1.20E-13	.0000	0.00E+00	.0000	1.20E-13
4.10E-12	.0000	0.00E+00	.0000	4.10E-12
2.00E-21	.0000	0.00E+00	.0000	2.00E-21
1.70E-11	-1.5000	0.00E+00	.0000	1.71E-11
2.04E-07	9730.4490	0.00E+00	.0000	4.38E-22
6.51E-07	9802.2020	0.00E+00	.0000	1.09E-21
2.40E-13	.0000	0.00E+00	.0000	2.40E-13
3.60E-33	.0000	0.00E+00	.0000	3.60E-33
2.30E-12	17.0000	0.00E+00	.0000	2.17E-12
1.00E-11	.0000	0.00E+00	.0000	1.00E-11
3.80E-12	-2.0000	0.00E+00	.0000	3.83E-12
6.70E-15	-6.0000	0.00E+00	.0000	6.84E-15
3.30E-13	-8.0000	0.00E+00	.0000	3.39E-13
4.20E-12	-1.8000	0.00E+00	.0000	4.23E-12
3.20E-11	6.5000	0.00E+00	.0000	3.13E-11
1.20E-12	.0000	0.00E+00	.0000	1.20E-12
1.10E-13	12.0000	0.00E+00	.0000	1.06E-13

33	COS	+O	+	----	SO2	+CO	+	+	2.10E-11	22.0000	0.00E+00	.0000	1.95E-11
34	H2S	+OH	+	----	HS	+H2O	+	+	6.00E-12	.7500	0.00E+00	.0000	5.98E-12
35	HS	+O2	+	----	SO2	+OH	+	+	4.00E-19	.0000	0.00E+00	.0000	4.00E-19
36	HS	+O3	+	----	SO2	+OH	+	+	9.00E-12	2.8000	0.00E+00	.0000	8.91E-12
37	HS	+NO2	+	----	SO2	+NO	+	+	2.90E-11	-2.4000	0.00E+00	.0000	2.92E-11
38	HS	+HO2	+	----	H2S	+O2	+	+	3.00E-11	.0000	0.00E+00	.0000	3.00E-11
39	HS	+H2O2	+	----	H2S	+HO2	+	+	5.00E-15	.0000	0.00E+00	.0000	5.00E-15
40	DMS	+OH	+	----	SO2	+	+	+	1.10E-11	2.4000	0.00E+00	.0000	1.09E-11
41	SO2	+CH3O2	+	----	H2SO4	+CH2O	+HO2	+	5.00E-17	.0000	0.00E+00	.0000	5.00E-17
42	O	+O2	+M	-A-->	O3	+	+	+	6.00E-34	2.3000	0.00E+00	.0000	6.59E-34
43	OH	+HNO3	+	-C-->	NO3	+H2O	+	+	7.20E-15	785.0000	4.10E-16	1440.0000	1.65E-13
44	O	+NO2	+M	-T-->	NO3	+	+	+	9.00E-32	2.0000	2.20E-11	.0000	6.70E-32
45	OH	+NO	+M	-T-->	HNO2	+	+	+	7.00E-31	2.6000	1.50E-11	.5000	2.05E-31
46	OH	+NO2	+M	-T-->	HNO3	+	+	+	2.60E-30	3.2000	2.40E-11	1.3000	4.90E-31
47	HO2	+NO2	+M	-T-->	HNO4	+	+	+	1.80E-31	3.2000	4.70E-12	1.4000	6.00E-32
48	NO3	+NO2	+M	-T-->	N2O5	+	+	+	2.20E-30	4.3000	1.50E-12	.5000	5.12E-32
49	SO2	+OH	+M	-T-->	H2SO4	+	+	+	3.00E-31	3.3000	1.50E-12	.0000	3.64E-32
50	O3	+	+	-*->	O (1D)	+O2	+	+	3.38E-05	4.4488	7.89E-01	.0000	3.38E-05
51	O3	+	+	-*->	O	+O2	+	+	5.81E-04	.6871	8.84E-01	.0000	5.81E-04
52	H2O2	+	+	-*->	OH	+OH	+	+	1.12E-05	1.8162	8.11E-01	.0000	1.12E-05
53	NO2	+	+	-*->	O	+NO	+	+	1.40E-02	1.2738	8.18E-01	.0000	1.40E-02
54	NO3	+	+	-*->	NO	+O2	+	+	2.89E-02	.5684	8.99E-01	.0000	2.89E-02
55	NO3	+	+	-*->	NO2	+O	+	+	1.82E-01	.6313	8.88E-01	.0000	1.82E-01
56	N2O5	+	+	-*->	NO2	+NO2	+O	+	4.61E-05	1.7669	8.09E-01	.0000	4.61E-05
57	HNO2	+	+	-*->	OH	+NO	+	+	1.00E-03	1.2374	8.18E-01	.0000	1.00E-03
58	HNO2	+	+	-*->	HO2	+NO2	+	+	1.68E-03	1.3867	8.11E-01	.0000	1.68E-03
59	HNO3	+	+	-*->	OH	+NO2	+	+	7.50E-07	2.5543	8.12E-01	.0000	7.50E-07
60	HNO4	+	+	-*->	HO2	+NO2	+	+	9.87E-06	2.1821	8.19E-01	.0000	9.87E-06
61	CH2O	+	+	-*->	CO	+HO2	+HO2	+	5.14E-05	1.7818	8.34E-01	.0000	5.14E-05
62	CH2O	+	+	-*->	CO	+H2	+	+	6.43E-05	1.3502	8.34E-01	.0000	6.43E-05
63	CS2	+	+	-*->	SO2	+COS	+	+	3.36E-04	1.1830	8.75E-01	.0000	3.36E-04
64	CH3OOH	+	+	-*->	CH2O	+HO2	+OH	+	1.12E-05	1.7637	8.10E-01	.0000	1.12E-05
65	SO2AQ	+H2O2AQ	+	-O-->	SO4AQ	+	+	+	4.58E+04	.1000	0.00E+00	.0000	7.58E-09
66	SO2AQ	+O3AQ	+	-R-->	SO4AQ	+	+	+	2.23E+05	86.3400	0.00E+00	.0000	8.24E-09
67	HSO3AQ	+O3AQ	+	-R-->	SO4AQ	+	+	+	2.23E+05	86.3400	0.00E+00	.0000	8.24E-09
68	SO3AQ	+O3AQ	+	-R-->	SO4AQ	+	+	+	2.23E+05	86.3400	0.00E+00	.0000	8.24E-09

Gleichgewichte:

69	SO2	+	+	-G-->	SO2AQ	+HSO3AQ	+SO3AQ	+	1.98E+00	.0229	8.44E-08	.0000	1.45E+02
70	O3	+	+	-H-->	O3AQ	+	+	+	2.34E-02	.0000	0.00E+00	.0000	2.34E-02
71	H2O2	+	+	-H-->	H2O2AQ	+	+	+	2.10E+05	.0000	0.00E+00	.0000	2.10E+05
72	H2S	+	+	-H-->	H2SAQ	+	+	+	2.72E-01	.0000	0.00E+00	.0000	2.72E-01
73	CS2	+	+	-H-->	CS2AQ	+	+	+	1.01E-01	.0000	0.00E+00	.0000	1.01E-01
74	COS	+	+	-H-->	COSAQ	+	+	+	3.38E-02	.0000	0.00E+00	.0000	3.38E-02
75	DMS	+	+	-H-->	DMSAQ	+	+	+	7.50E+01	.0000	0.00E+00	.0000	7.50E+01
76	HNO3	+	+	-H-->	NO3AQ	+	+	+	7.05E+06	.0000	0.00E+00	.0000	7.05E+06
77	CH2O	+	+	-H-->	CH2O AQ	+	+	+	4.20E+03	.0000	0.00E+00	.0000	4.20E+03
78	CH3OOH	+	+	-H-->	MHPAQ	+	+	+	4.24E+02	.0000	0.00E+00	.0000	4.24E+02

Familien und Summen:

HODD=OH+HO2

OODD=O+O3+O(1D)

NODD=NO+NO2+NO3+N2O5+N2O5

HXS=HS+H2S

AQUA=SO2AQ+SO3AQ+HSO3AQ+SO4AQ

NSUM=NODD+HNO2+HNO4+HNO3

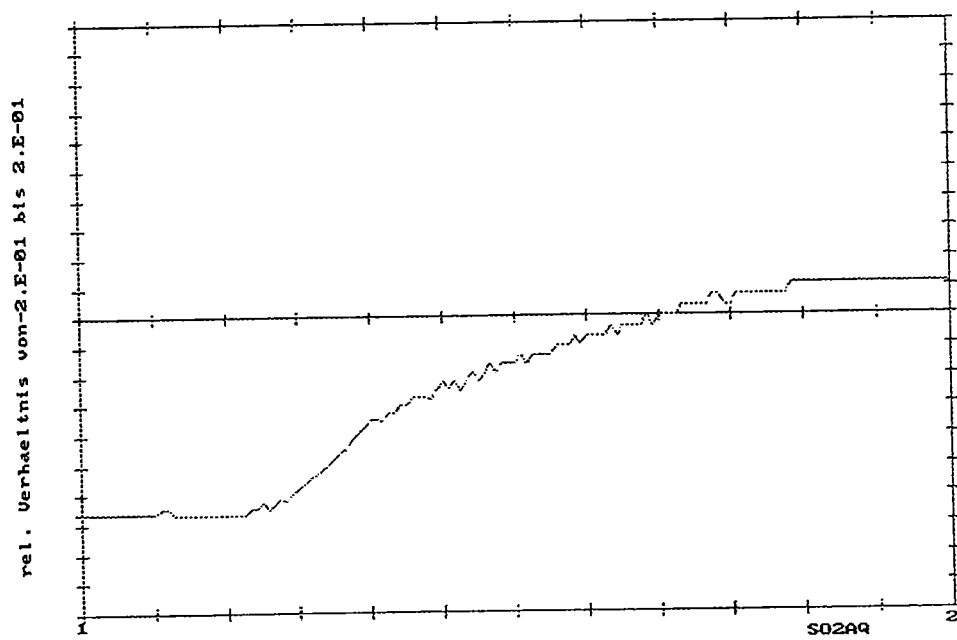
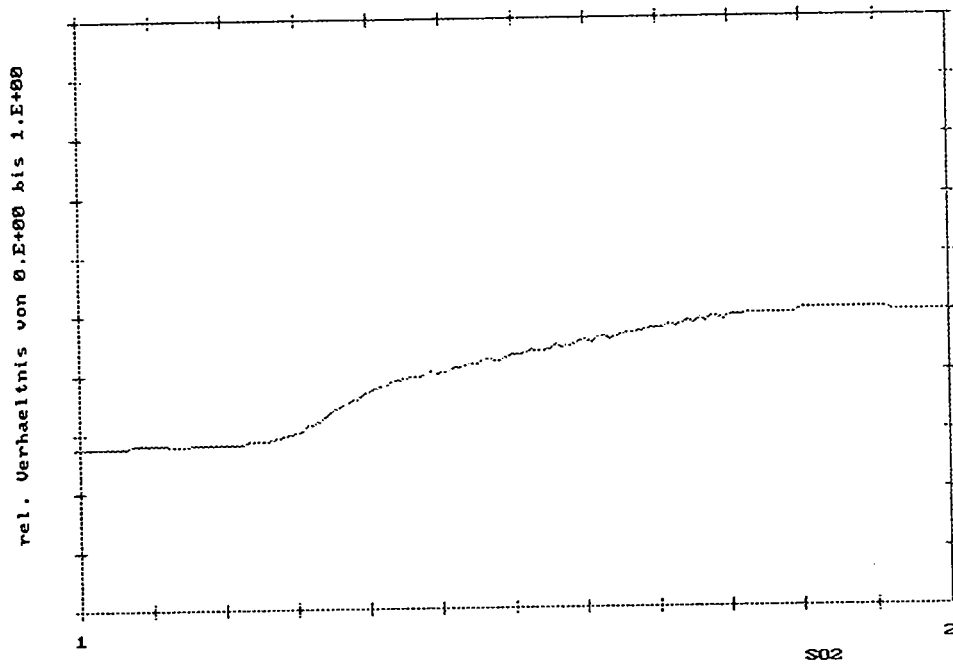
	Substanz	C(Box1)	Status	C(Box3)	E[cm2s-1]	Quellart	Vd[cms-1]	KZ[cm2s-1]
NR=	1 M	:2.54E+19	konstant	2.54E+19	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	2 O(1D)	:7.10E-03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	3 O2	:5.30E+18		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	4 O	:1.90E+03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	5 N2	:1.82E+19		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	6 H2O	:3.10E+17		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	7 OH	:3.60E+06		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	8 O3	:1.02E+12		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	9 HO2	:2.20E+08		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	10 H2O2	:2.56E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	11 NO	:2.56E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	12 NO2	:1.00E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	13 NO3	:6.78E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	14 HNO2	:1.28E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	15 HNO4	:1.04E+08		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	16 HNO3	:7.68E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	17 N2O5	:1.92E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	18 CO	:6.91E+12	gelöst	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	19 CO2	:8.80E+15		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	20 CH4	:4.89E+13		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	21 CH3O2	:5.20E+07		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	22 CH2O	:3.07E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	23 CH3OOH	:1.17E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	24 CS2	:6.00E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	25 COS	:1.30E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	26 SO2	:1.28E+11		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	27 HS	:8.00E+03		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	28 H2S	:8.20E+07		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	29 DMS	:1.30E+09		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	30 H2SO4	:1.30E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	31 H2	:1.40E+10		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	32 SO2AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	33 H2O2AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	34 SO4AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	35 O3AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	36 HSO3AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	37 SO3AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	38 H2SAQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	39 CS2AQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00
NR=	40 COSAQ	:1.00E-25		0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00

NR= 41	DMSAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 42	NO3AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 43	CH2O AQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 44	MHPAQ	:1.00E-25	gelöst	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 45	HODD	:2.24E+08		1.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 46	ODD	:1.02E+12		1.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 47	NODD	:4.26E+11		1.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 48	HXS	:8.20E+07		1.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 49	AQUA	:4.00E-25		1.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
NR= 50	NSUM	:1.32E+12		2.00E-99	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

Mixing Ratios :

Anzahl Zeitpunkte:	219 Substanzen:	45 Familien und Summen:	6							
	WASSER	M	O(1D)	O2	O	N2	H2O	OH	O3	HO2
	H2O2	NO	NO2	NO3	HNO2	HNO4	HNO3	N2O5	CO	CO2
	CH4	CH3O2	CH2O	CH3OOH	CS2	COS	SO2	HS	H2S	DMS
	H2SO4	H2	SO2AQ	H2O2AQ	SO4AQ	O3AQ	HSO3AQ	SO3AQ	H2SAQ	CS2AQ
	COSAQ	DMSAQ	NO3AQ	CH2O AQ	MHPAQ					
	HODD	ODD	NODD	HXS	AQUA	NSUM				
t=12: 0, 0	1.50E-06	2.54E+19	2.79E-22	2.08E-01	7.47E-17	7.15E-01	1.22E-02	1.41E-13	4.01E-08	8.65E-12
T=288.2	1.01E-10	1.01E-09	3.93E-10	2.66E-10	5.03E-09	4.09E-12	3.02E-08	7.55E-09	2.72E-07	3.46E-04
45.1N/ .0E	1.92E-06	2.04E-12	1.21E-09	4.60E-11	2.36E-10	5.11E-10	5.03E-09	3.14E-16	3.22E-12	5.11E-11
	5.11E-10	5.50E-10	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45
	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45	3.93E-45					
	8.79E-12	4.01E-08	1.68E-08	3.22E-12	1.57E-44	5.20E-08				
t=12: 0,12	1.50E-06	2.55E+19	1.97E-21	2.08E-01	8.59E-16	7.15E-01	1.22E-02	5.27E-15	2.25E-08	7.28E-12
T=288.2	1.19E-11	5.16E-12	8.58E-09	1.22E-10	4.88E-09	4.26E-12	1.21E-10	4.04E-09	2.72E-07	3.46E-04
45.1N/ .0E	1.92E-06	1.01E-10	1.05E-09	4.53E-11	2.35E-10	5.12E-10	4.95E-09	1.10E-16	3.19E-12	5.09E-11
	5.11E-10	5.51E-10	3.47E-13	8.87E-11	3.93E-45	1.86E-14	7.95E-11	6.71E-14	3.08E-17	8.41E-16
	6.13E-16	1.35E-13	3.02E-08	1.56E-10	6.80E-13					
	7.28E-12	2.25E-08	1.68E-08	3.19E-12	7.99E-11	2.18E-08				
t=12:10,12	1.50E-06	2.55E+19	2.61E-22	2.08E-01	1.30E-15	7.15E-01	1.22E-02	2.66E-14	5.38E-09	8.89E-11
T=288.2	3.57E-12	1.78E-10	4.95E-09	2.70E-10	1.43E-09	6.06E-10	1.45E-10	4.06E-09	2.72E-07	3.46E-04
45.1N/ .0E	1.92E-06	1.62E-10	2.51E-09	1.62E-10	1.94E-10	5.52E-10	4.90E-09	2.97E-17	3.17E-12	5.07E-11
	5.14E-10	6.12E-10	3.43E-13	2.66E-11	9.33E-11	4.46E-15	7.87E-11	6.64E-14	3.06E-17	6.96E-16
	6.61E-16	1.35E-13	3.63E-08	3.73E-10	2.43E-12					
	8.89E-11	5.38E-09	1.35E-08	3.17E-12	1.72E-10	1.57E-08				
...										
t=24: 0, 0	1.50E-06	2.55E+19	3.92E-45	2.08E-01	2.20E-41	7.15E-01	1.22E-02	2.33E-19	5.55E-10	1.64E-13
T=288.2	1.06E-15	8.74E-32	1.47E-20	1.11E-12	2.12E-13	3.34E-24	2.08E-10	4.56E-23	2.97E-07	3.46E-04
45.1N/ .0E	1.89E-06	4.21E-11	4.62E-10	2.71E-09	5.26E-17	7.44E-10	1.94E-09	2.56E-22	3.07E-12	4.73E-11
	5.69E-10	1.27E-08	1.36E-13	7.85E-15	3.25E-09	4.60E-16	3.11E-11	2.63E-14	2.96E-17	1.88E-22
	8.91E-16	1.26E-13	5.21E-08	6.87E-11	4.06E-11					
	1.64E-13	5.55E-10	1.11E-12	3.07E-12	3.28E-09	2.10E-10				

Ausgabedateien



BOXPLT.TMP

Zeit; SO2 ; SO2AQ ;
12.00; 5.03E-09; 4.20E-45;
12.00; 4.95E-09; 3.47E-13;
12.17; 4.90E-09; 3.43E-13;
12.34; 4.89E-09; 3.43E-13;
12.50; 4.88E-09; 3.43E-13;
12.67; 4.87E-09; 3.42E-13;
12.84; 4.86E-09; 3.41E-13;
13.00; 4.84E-09; 3.40E-13;
13.17; 4.82E-09; 3.38E-13;
13.33; 4.79E-09; 3.36E-13;
13.50; 4.76E-09; 3.34E-13;
13.67; 4.72E-09; 3.31E-13;
13.83; 4.68E-09; 3.29E-13;
14.00; 4.64E-09; 3.26E-13;
14.17; 4.60E-09; 3.23E-13;
14.33; 4.56E-09; 3.20E-13;
14.50; 4.52E-09; 3.17E-13;
14.67; 4.48E-09; 3.14E-13;
14.83; 4.44E-09; 3.11E-13;
15.00; 4.40E-09; 3.09E-13;
15.17; 4.36E-09; 3.06E-13;
15.33; 4.32E-09; 3.03E-13;
15.50; 4.28E-09; 3.00E-13;
5.67; 4.24E-09; 2.98E-13;
15.83; 4.20E-09; 2.95E-13;
16.00; 4.16E-09; 2.92E-13;
16.17; 4.12E-09; 2.89E-13;
16.33; 4.07E-09; 2.85E-13;
16.50; 4.02E-09; 2.82E-13;
16.67; 3.96E-09; 2.78E-13;
16.83; 3.90E-09; 2.74E-13;
17.00; 3.83E-09; 2.69E-13;
17.17; 3.76E-09; 2.64E-13;
17.33; 3.69E-09; 2.59E-13;
17.50; 3.62E-09; 2.54E-13;
17.67; 3.55E-09; 2.49E-13;
17.83; 3.49E-09; 2.45E-13;
18.00; 3.43E-09; 2.41E-13;
18.17; 3.38E-09; 2.37E-13;
18.33; 3.34E-09; 2.34E-13;
18.50; 3.30E-09; 2.31E-13;
18.67; 3.26E-09; 2.29E-13;
18.83; 3.23E-09; 2.27E-13;
19.00; 3.21E-09; 2.25E-13;
19.17; 3.19E-09; 2.24E-13;
19.33; 3.17E-09; 2.23E-13;
19.50; 3.16E-09; 2.22E-13;
19.67; 3.15E-09; 2.21E-13;
19.83; 3.14E-09; 2.20E-13;
20.00; 3.14E-09; 2.20E-13;
20.17; 3.14E-09; 2.20E-13;
20.33; 3.13E-09; 2.20E-13;
20.50; 3.13E-09; 2.20E-13;
20.67; 3.13E-09; 2.20E-13;
20.83; 3.13E-09; 2.20E-13;
21.00; 3.13E-09; 2.20E-13;
21.17; 3.13E-09; 2.20E-13;
21.33; 3.13E-09; 2.19E-13;
21.50; 3.13E-09; 2.19E-13;
21.67; 3.13E-09; 2.19E-13;
21.83; 3.13E-09; 2.19E-13;
22.00; 3.12E-09; 2.19E-13;
22.17; 3.12E-09; 2.19E-13;
22.33; 3.12E-09; 2.19E-13;
22.50; 3.12E-09; 2.19E-13;
22.67; 3.12E-09; 2.19E-13;
22.83; 3.12E-09; 2.19E-13;
23.00; 3.12E-09; 2.19E-13;
23.17; 3.12E-09; 2.19E-13;
23.33; 3.12E-09; 2.19E-13;
23.50; 3.12E-09; 2.19E-13;
23.67; 3.12E-09; 2.18E-13;

23.83; 3.11E-09; 2.18E-13;
24.00; 3.11E-09; 2.18E-13;
.01; 3.11E-09; 2.18E-13;
.17; 3.11E-09; 2.18E-13;
.34; 3.11E-09; 2.18E-13;
.51; 3.11E-09; 2.18E-13;
.68; 3.11E-09; 2.18E-13;
.84; 3.11E-09; 2.18E-13;
1.00; 3.11E-09; 2.18E-13;
1.17; 3.11E-09; 2.18E-13;
1.33; 3.11E-09; 2.18E-13;
1.50; 3.10E-09; 2.18E-13;
1.67; 3.10E-09; 2.18E-13;
1.83; 3.10E-09; 2.18E-13;
2.00; 3.10E-09; 2.18E-13;
2.17; 3.10E-09; 2.17E-13;
2.33; 3.10E-09; 2.17E-13;
2.50; 3.10E-09; 2.17E-13;
2.67; 3.10E-09; 2.17E-13;
2.83; 3.10E-09; 2.17E-13;
3.00; 3.10E-09; 2.17E-13;
3.17; 3.09E-09; 2.17E-13;
3.33; 3.09E-09; 2.17E-13;
3.50; 3.09E-09; 2.17E-13;
3.67; 3.09E-09; 2.17E-13;
3.83; 3.09E-09; 2.17E-13;
4.00; 3.09E-09; 2.17E-13;
4.17; 3.09E-09; 2.17E-13;
4.33; 3.09E-09; 2.17E-13;
4.50; 3.09E-09; 2.17E-13;
4.67; 3.08E-09; 2.16E-13;
4.83; 3.08E-09; 2.16E-13;
5.00; 3.07E-09; 2.15E-13;
5.17; 3.06E-09; 2.15E-13;
5.33; 3.04E-09; 2.13E-13;
5.50; 3.02E-09; 2.12E-13;
5.67; 3.00E-09; 2.10E-13;
5.83; 2.97E-09; 2.08E-13;
6.00; 2.94E-09; 2.06E-13;
6.17; 2.90E-09; 2.03E-13;
6.33; 2.85E-09; 2.00E-13;
6.50; 2.81E-09; 1.97E-13;
6.67; 2.76E-09; 1.93E-13;
6.83; 2.71E-09; 1.90E-13;
7.00; 2.66E-09; 1.87E-13;
7.17; 2.62E-09; 1.84E-13;
7.33; 2.58E-09; 1.81E-13;
7.50; 2.55E-09; 1.79E-13;
7.67; 2.52E-09; 1.77E-13;
7.83; 2.49E-09; 1.75E-13;
8.00; 2.47E-09; 1.73E-13;
8.17; 2.45E-09; 1.72E-13;
8.33; 2.43E-09; 1.71E-13;
8.50; 2.42E-09; 1.70E-13;
8.67; 2.40E-09; 1.69E-13;
8.83; 2.39E-09; 1.68E-13;
9.00; 2.38E-09; 1.67E-13;
9.17; 2.37E-09; 1.66E-13;
9.33; 2.36E-09; 1.65E-13;
9.50; 2.35E-09; 1.65E-13;
9.67; 2.33E-09; 1.64E-13;
9.83; 2.33E-09; 1.63E-13;
10.00; 2.32E-09; 1.62E-13;
10.17; 2.31E-09; 1.62E-13;
10.33; 2.30E-09; 1.61E-13;
10.50; 2.29E-09; 1.61E-13;
10.67; 2.28E-09; 1.60E-13;
10.83; 2.27E-09; 1.59E-13;
11.00; 2.26E-09; 1.59E-13;
11.17; 2.25E-09; 1.58E-13;
11.33; 2.24E-09; 1.57E-13;
11.50; 2.24E-09; 1.57E-13;
11.67; 2.23E-09; 1.56E-13;
11.83; 2.22E-09; 1.56E-13;
12.00; 2.21E-09; 1.55E-13;
12.17; 2.20E-09; 1.54E-13;
12.33; 2.19E-09; 1.54E-13;

12.50; 2.18E-09; 1.53E-13;
12.67; 2.18E-09; 1.53E-13;
12.83; 2.17E-09; 1.52E-13;
13.00; 2.16E-09; 1.52E-13;
13.17; 2.15E-09; 1.51E-13;
13.33; 2.15E-09; 1.50E-13;
13.50; 2.14E-09; 1.50E-13;
13.67; 2.13E-09; 1.49E-13;
13.83; 2.12E-09; 1.49E-13;
14.00; 2.11E-09; 1.48E-13;
14.17; 2.11E-09; 1.48E-13;
14.33; 2.10E-09; 1.47E-13;
14.50; 2.09E-09; 1.47E-13;
14.67; 2.09E-09; 1.46E-13;
14.83; 2.08E-09; 1.46E-13;
15.00; 2.07E-09; 1.45E-13;
15.17; 2.06E-09; 1.45E-13;
15.33; 2.06E-09; 1.44E-13;
15.50; 2.05E-09; 1.44E-13;
15.67; 2.04E-09; 1.43E-13;
15.83; 2.03E-09; 1.43E-13;
16.00; 2.03E-09; 1.42E-13;
16.17; 2.02E-09; 1.42E-13;
16.33; 2.01E-09; 1.41E-13;
16.50; 2.01E-09; 1.41E-13;
16.67; 2.00E-09; 1.40E-13;
16.83; 1.99E-09; 1.40E-13;
17.00; 1.99E-09; 1.39E-13;
17.17; 1.98E-09; 1.39E-13;
17.33; 1.98E-09; 1.39E-13;
17.50; 1.97E-09; 1.38E-13;
17.67; 1.97E-09; 1.38E-13;
17.83; 1.97E-09; 1.38E-13;
18.00; 1.96E-09; 1.38E-13;
18.17; 1.96E-09; 1.37E-13;
18.33; 1.96E-09; 1.37E-13;
18.50; 1.95E-09; 1.37E-13;
18.67; 1.95E-09; 1.37E-13;
18.83; 1.95E-09; 1.37E-13;
19.00; 1.95E-09; 1.37E-13;
19.17; 1.95E-09; 1.37E-13;
19.33; 1.95E-09; 1.37E-13;
19.50; 1.95E-09; 1.37E-13;
19.67; 1.95E-09; 1.36E-13;
19.83; 1.95E-09; 1.36E-13;
20.00; 1.94E-09; 1.36E-13;
20.17; 1.94E-09; 1.36E-13;
20.33; 1.94E-09; 1.36E-13;
20.50; 1.94E-09; 1.36E-13;
20.67; 1.94E-09; 1.36E-13;
20.83; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.00; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.17; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.33; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.50; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.67; 1.94E-09; 1.36E-13;
21.83; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.00; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.17; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.33; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.50; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.67; 1.94E-09; 1.36E-13;
22.83; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.00; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.17; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.33; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.50; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.67; 1.94E-09; 1.36E-13;
23.83; 1.94E-09; 1.36E-13;
24.00; 1.94E-09; 1.36E-13;

Zeit; SO2 ; SO2AQ ;
12.00; 5.03E-09; 4.20E-45;
2.00; 5.03E-09; 3.53E-13;
12.17; 5.04E-09; 3.15E-13;
12.34; 5.06E-09; 2.76E-13;
12.50; 5.07E-09; 2.41E-13;
12.67; 5.08E-09; 2.42E-13;
12.84; 5.09E-09; 2.42E-13;
13.00; 5.09E-09; 2.42E-13;
13.17; 5.09E-09; 2.42E-13;
13.33; 5.08E-09; 2.42E-13;
13.50; 5.08E-09; 2.41E-13;
13.67; 5.07E-09; 2.41E-13;
13.83; 5.06E-09; 2.41E-13;
14.00; 5.05E-09; 2.40E-13;
14.17; 5.04E-09; 2.40E-13;
14.33; 5.03E-09; 2.39E-13;
14.50; 5.02E-09; 2.39E-13;
14.67; 5.01E-09; 2.38E-13;
14.83; 4.99E-09; 2.37E-13;
15.00; 4.98E-09; 2.37E-13;
15.17; 4.96E-09; 2.36E-13;
15.33; 4.95E-09; 2.35E-13;
15.50; 4.93E-09; 2.34E-13;
15.67; 4.91E-09; 2.33E-13;
15.83; 4.89E-09; 2.32E-13;
16.00; 4.86E-09; 2.31E-13;
16.17; 4.84E-09; 2.30E-13;
16.33; 4.81E-09; 2.28E-13;
16.50; 4.77E-09; 2.27E-13;
16.67; 4.73E-09; 2.25E-13;
16.83; 4.68E-09; 2.22E-13;
17.00; 4.62E-09; 2.20E-13;
17.17; 4.56E-09; 2.17E-13;
17.33; 4.49E-09; 2.14E-13;
17.50; 4.42E-09; 2.10E-13;
17.67; 4.36E-09; 2.07E-13;
17.83; 4.30E-09; 2.04E-13;
18.00; 4.25E-09; 2.02E-13;
18.17; 4.20E-09; 2.00E-13;
18.33; 4.16E-09; 1.98E-13;
18.50; 4.12E-09; 1.96E-13;
18.67; 4.09E-09; 1.94E-13;
18.83; 4.06E-09; 1.93E-13;
19.00; 4.04E-09; 1.92E-13;
19.17; 4.02E-09; 1.91E-13;
19.33; 4.00E-09; 1.90E-13;
19.50; 3.99E-09; 1.90E-13;
19.67; 3.98E-09; 1.89E-13;
19.83; 3.98E-09; 1.89E-13;
20.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
20.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
20.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
20.50; 3.97E-09; 1.89E-13;
20.67; 3.97E-09; 1.89E-13;
20.83; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.50; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.67; 3.97E-09; 1.89E-13;
21.83; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.50; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.67; 3.97E-09; 1.89E-13;
22.83; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.50; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.67; 3.97E-09; 1.89E-13;
23.83; 3.97E-09; 1.89E-13;
24.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
.01; 3.97E-09; 1.89E-13;
.17; 3.97E-09; 1.89E-13;

.34; 3.97E-09; 1.89E-13;
.51; 3.97E-09; 1.89E-13;
.68; 3.97E-09; 1.89E-13;
.84; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.50; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.67; 3.97E-09; 1.89E-13;
1.83; 3.97E-09; 1.89E-13;
2.00; 3.97E-09; 1.89E-13;
2.17; 3.97E-09; 1.89E-13;
2.33; 3.97E-09; 1.89E-13;
2.50; 3.96E-09; 1.88E-13;
2.67; 3.96E-09; 1.88E-13;
2.83; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.00; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.17; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.33; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.50; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.67; 3.96E-09; 1.88E-13;
3.83; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.00; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.17; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.33; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.50; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.67; 3.96E-09; 1.88E-13;
4.83; 3.96E-09; 1.88E-13;
5.00; 3.95E-09; 1.88E-13;
5.17; 3.94E-09; 1.87E-13;
5.33; 3.92E-09; 1.86E-13;
5.50; 3.90E-09; 1.86E-13;
5.67; 3.88E-09; 1.84E-13;
5.83; 3.85E-09; 1.83E-13;
6.00; 3.82E-09; 1.82E-13;
6.17; 3.78E-09; 1.80E-13;
6.33; 3.74E-09; 1.78E-13;
6.50; 3.69E-09; 1.76E-13;
6.67; 3.65E-09; 1.73E-13;
6.83; 3.60E-09; 1.71E-13;
7.00; 3.56E-09; 1.69E-13;
7.17; 3.52E-09; 1.67E-13;
7.33; 3.48E-09; 1.65E-13;
7.50; 3.45E-09; 1.64E-13;
7.67; 3.42E-09; 1.63E-13;
7.83; 3.40E-09; 1.62E-13;
8.00; 3.38E-09; 1.61E-13;
8.17; 3.37E-09; 1.60E-13;
8.33; 3.35E-09; 1.59E-13;
8.50; 3.34E-09; 1.59E-13;
8.67; 3.33E-09; 1.58E-13;
8.83; 3.32E-09; 1.58E-13;
9.00; 3.31E-09; 1.57E-13;
9.17; 3.30E-09; 1.57E-13;
9.33; 3.29E-09; 1.56E-13;
9.50; 3.28E-09; 1.56E-13;
9.67; 3.27E-09; 1.55E-13;
9.83; 3.26E-09; 1.55E-13;
10.00; 3.25E-09; 1.55E-13;
10.17; 3.24E-09; 1.54E-13;
10.33; 3.24E-09; 1.54E-13;
10.50; 3.23E-09; 1.53E-13;
10.67; 3.22E-09; 1.53E-13;
10.83; 3.21E-09; 1.53E-13;
11.00; 3.20E-09; 1.52E-13;
11.17; 3.20E-09; 1.52E-13;
11.33; 3.19E-09; 1.52E-13;
11.50; 3.18E-09; 1.51E-13;
11.67; 3.17E-09; 1.51E-13;
11.83; 3.17E-09; 1.51E-13;
12.00; 3.16E-09; 1.50E-13;
12.17; 3.15E-09; 1.50E-13;
12.33; 3.14E-09; 1.49E-13;
12.50; 3.14E-09; 1.49E-13;
12.67; 3.13E-09; 1.49E-13;
12.83; 3.12E-09; 1.48E-13;
13.00; 3.11E-09; 1.48E-13;

13.17; 3.11E-09; 1.48E-13;
13.33; 3.10E-09; 1.47E-13;
13.50; 3.09E-09; 1.47E-13;
13.67; 3.08E-09; 1.47E-13;
13.83; 3.08E-09; 1.46E-13;
14.00; 3.07E-09; 1.46E-13;
14.17; 3.06E-09; 1.46E-13;
14.33; 3.06E-09; 1.45E-13;
14.50; 3.05E-09; 1.45E-13;
14.67; 3.04E-09; 1.45E-13;
14.83; 3.04E-09; 1.44E-13;
15.00; 3.03E-09; 1.44E-13;
15.17; 3.02E-09; 1.44E-13;
15.33; 3.02E-09; 1.43E-13;
15.50; 3.01E-09; 1.43E-13;
15.67; 3.00E-09; 1.43E-13;
15.83; 2.99E-09; 1.42E-13;
16.00; 2.99E-09; 1.42E-13;
16.17; 2.98E-09; 1.42E-13;
16.33; 2.98E-09; 1.41E-13;
16.50; 2.97E-09; 1.41E-13;
16.67; 2.96E-09; 1.41E-13;
16.83; 2.96E-09; 1.41E-13;
17.00; 2.95E-09; 1.40E-13;
17.17; 2.95E-09; 1.40E-13;
17.33; 2.94E-09; 1.40E-13;
17.50; 2.94E-09; 1.40E-13;
17.67; 2.94E-09; 1.40E-13;
17.83; 2.93E-09; 1.39E-13;
18.00; 2.93E-09; 1.39E-13;
18.17; 2.93E-09; 1.39E-13;
18.33; 2.93E-09; 1.39E-13;
18.50; 2.92E-09; 1.39E-13;
18.67; 2.92E-09; 1.39E-13;
18.83; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.00; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.17; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.33; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.50; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.67; 2.92E-09; 1.39E-13;
19.83; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.00; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.17; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.33; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.50; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.67; 2.92E-09; 1.39E-13;
20.83; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.00; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.17; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.33; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.50; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.67; 2.92E-09; 1.39E-13;
21.83; 2.92E-09; 1.39E-13;
22.00; 2.92E-09; 1.39E-13;
22.17; 2.92E-09; 1.39E-13;
22.33; 2.92E-09; 1.39E-13;
22.50; 2.91E-09; 1.39E-13;
22.67; 2.91E-09; 1.39E-13;
22.83; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.00; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.17; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.33; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.50; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.67; 2.91E-09; 1.39E-13;
23.83; 2.91E-09; 1.39E-13;
24.00; 2.91E-09; 1.39E-13;

Listing des Quellcodes

Ruhnke, 08.11.93

BOX PLOT . F O R

Liest bis zu 6 Ausgabedateien des Box-Trajektorien-Modells
Es können bis zu 8 Stoffen ausgewählt werden.
Von den Konzentrationen werden Plots auf dem Bildschirm und
wahlweise auf Papier erstellt.

geändert : 15.12.93 (S. Huber-Thives)
 22.12.93 (E-P.Röth)
 25.02.94 (S. Huber-Thives)
 15.09.94 (E-P.Röth)
 12.10.94 (S. Huber-Thives)

PROGRAM boxplot

IMPLICIT NONE

INTEGER*2 nfm, ! max. Anzahl der einzulesenden Dateien
 izmax, ! max. Anzahl der Datenpunkte
 ismax, ! max. Anzahl der ausgewählten Substanzen
 isubmax ! max. Anzahl der Substanzen
PARAMETER (nfm=6, izmax=1500, ismax=8, isubmax=200)

globale Variablen

REAL*4 wert(nfm,izmax,ismax), zeit(izmax), day(izmax),
 temp(izmax), lat(izmax), lng(izmax)
REAL*4 xmin, xmax, xf, ymin, ymax, yf, ytic
COMMON /konzen/ wert, zeit
COMMON /pltpar/ xmin, xmax, xf, ymin, ymax, yf, ytic

REAL*4 k(isubmax)
REAL*4 wmax, wmin
INTEGER*4 m1, m2, m3, key
INTEGER*2 isub(ismax), plty, isaf, iart,
 iz, iza, izn, isa, is, isn, nf, nfe, iex, i, iende, ii
INTEGER*2 nfa, ikomb
CHARACTER filein*15,
 ktext(isubmax)*12,
 subst(ismax)*12,
 text*6
LOGICAL*1 liny, plot

OPEN (UNIT=9,FILE='boxplot.tmp')
CALL cls
WRITE (6,6000)

Einlesen
=====

nfe=nfm
DO nf=1,nfm
 WRITE (6,6001)
 READ (5,5001) filein
 IF (filein.EQ.' ') THEN
 nfe=nf-1
 EXIT
 END IF
 OPEN (Unit=8,File=filein,Status='old')

Steuerzahlen und Substanzen

text=' '
DO WHILE (text.NE.'Mixing')
 READ (8,8001) text
END DO
IF (nf.EQ.1) THEN
 WRITE (6,6101)
 READ (5,*) plty ! Länge t-Achse
 WRITE (6,6103)
 READ (5,'(I5)') ikomb ! Kombinationsart
 IF (ikomb.EQ.0) THEN
 WRITE (6,6102)
 READ (5,'(I5)') iart ! Typ y-Achse

```

ELSE
    iart=0
ENDIF
IF (iart.EQ.1) THEN
    liny=.FALSE.
ELSE
    liny=.TRUE.
END IF
READ (8,8002) izn,isa,isaf ! Zahl Datenpkte,Substanz,Familien
isa=((isa-1)/10)+1)*10+isaf
READ (8,8003) (ktext(i),i=1,isa) ! Text der Substanzen
READ (8,*)

C
IF (isa.GT.isubmax .OR. izn.GT.izmax) THEN
    CALL cls
    IF (isa.GT.isubmax) WRITE (6,6201) isa, isubmax
    IF (izn.GT.izmax) WRITE (6,6202) izn, izmax
    STOP
END IF

C
C
C
Auswahl der Substanzen
-----
CALL cls
IF (isa.LE.80) THEN
    WRITE (6,6002) (i,ktext(i),i=1,isa)
ELSE
    WRITE (6,6008) (i,ktext(i),i=1,80)
    DO ii=81,((isa-1)/80)*80+80
        CALL inkey (key)
        CALL cls
        WRITE (6,6009) (i,ktext(i),i=ii,ii+79)
    END DO
    CALL inkey (key)
    CALL cls
    WRITE (6,6010) (i,ktext(i),i=((isa-1)/80)*80+1,isa)
END IF
WRITE (6,6003)
READ (5,5002) (isub(i),i=1,ismax) ! Substanznummern
CALL cls
isn=0
DO is=1,ismax
    IF (isub(is).GT.0 .AND. isub(is).LE.isa) THEN
        isn=is
    ELSE
        EXIT
    END IF
END DO
DO is=1,isn
    subst(is)=ktext(isub(is))
END DO
WRITE (9,7001) (subst(is),is=1,isn)

C
C
C
Einlesen der Datenpunkte
-----
DO iz=1,izn
    READ (8,8004) m1, m2, m3, (k(i),i=1,10) ! Zeit,Konz.
    READ (8,8006) temp(iz) , (k(i),i=11,20) ! Temp.,Konz.
    READ (8,8007) lat(iz),lng(iz),(k(i),i=21,30) ! Ort,Konz.
    IF (isa.GT.30) READ (8,8005) (k(i),i=31,isa) ! Konzentration
    zeit(iz)=m1+m2/60.+m3/3600.
    IF (zeit(iz).GE.1440.) zeit(iz)=zeit(iz)-1440.
    DO is=1,isn
        wert(1,iz,is)=k(isub(is))
    END DO
    WRITE (9,7002) zeit(iz), (wert(1,iz,is),is=1,isn)
    IF (iz.LT.izn) THEN
        DO i=1,2
            READ (8,*)
        END DO
    END IF
END DO
ELSE
C
C
C
Einlesen von Folgefiles
-----
    iende=2+((isa-1)/10)+1
    DO i=1,iende

```

```

      READ (8,*)
    END DO
    WRITE (9,7001) (subst(is),is=1,isn)
    DO iz=1,izn
      READ (8,8005) (k(i),i=1,10)          ! Konzentration
      READ (8,8005) (k(i),i=11,20)         ! Konzentration
      READ (8,8005) (k(i),i=21,30)         ! Konzentration
      IF (isa.GT.30) READ (8,8005) (k(i),i=31,isa) ! Konzentration
      DO is=1,isn
        wert(nf,iz,is)=k(isub(is))
      END DO
      WRITE (9,7002) zeit(iz), (wert(nf,iz,is),is=1,isn)
      IF (iz.LT.izn) THEN
        DO i=1,2
          READ (8,*)
        END DO
      END IF
    END DO
  END IF
END DO
CLOSE (UNIT=8)
WRITE (6,6004) filein
END DO
CLOSE (UNIT=9)

C
IF (nfe.EQ.1 .AND. ikomb.GT.0) THEN
  WRITE (6,6902)
  GOTO 999
END IF

C
Bildschirm- und Plotterausgabe
C
für die einzelnen Substanzen (max.8)
C
=====
plot=.FALSE.
DO is=1,isn                                ! Schleife über Substanzen

C
  Kombinieren der Kurven
C
  -----
C
  nfa=1
  IF (ikomb.GT.0) THEN
    nfa=2
    DO iz=1,izn
      DO nf=nfa,nfe
        IF (ikomb.EQ.1) Wert(nf,iz,is)=
          (Wert(nf,iz,is)-Wert(1,iz,is))/Wert(1,iz,is)
        IF (ikomb.EQ.2) Wert(nf,iz,is)=
          Wert(nf,iz,is)/Wert(1,iz,is)
      END DO
    END DO
  END IF

C
  Bestimmen der Plotparameter
C
  -----
C
  day(1)=0.
  DO iz=2,izn
    IF (zeit(iz).LT.zeit(iz-1)) THEN
      day(iz)=day(iz-1)+1.
    ELSE
      day(iz)=day(iz-1)
    END IF
  END DO
  DO iz=1,izn
    zeit(iz)=day(iz)*24.+zeit(iz)
  END DO
  iz=1
  IF (pltyp.EQ.1) GOTO 20
  IF (pltyp.EQ.2) THEN
    DO iz=izn,2,-1
      IF (zeit(iz).LT.zeit(izn)-24.) GOTO 20
    END DO
  END IF
20 CONTINUE
  iza=iz

C
  Bestimmen der Extrema
C
  -----
C
  wmax=wert(nfa,iza,is)
  wmin=wmax

```

```

DO nf=nfa,nfe
DO iz=iza,izn
  wmax=MAX(wmax,wert(nf,iz,is))
  wmin=MIN(wmin,wert(nf,iz,is))
END DO
END DO
wmax=MAX(ABS(wmin),ABS(wmax))
wmin=MIN(wmin,wmax*.1)

C
IF (wmax.NE.0.) THEN
  xmin=INT(zeit(iza+1)/24.)*24.
  xmax=(INT((zeit(izn)-.001)/24.)+1)*24.
  xfac=(xmax-xmin)/24.
  IF (liny) THEN
    ymin=0.
    iex=LOG10(wmax)-1.
    ymax=wmax/(10.**iex)
    IF (ymax.GT.5.) THEN
      ymax=10.
    ELSE IF (ymax.GT.2.) THEN
      ymax=5.
    ELSE
      ymax=2.
    END IF
    ymax=ymax*10.**iex
    ytic=ymax/10.
  ELSE
    ymax=INT(LOG10(wmax))
    ymin=INT(MAX(LOG10(wmin)-1.,ymax-20.))
    ytic=(ymax-ymin)/10.
  END IF
  IF (ikomb.EQ.1 .AND. wmin.LT.0.) ymin=-ymax
  yfac=(ymax-ymin)/15.

```

```

C
C
C
Bildschirm/Plotter-Ausgabe

```

```

CALL screen (nfe, iza, izn, is, subst(is), liny, ikomb)
WRITE (6,6005)
CALL inkey (key)
IF (key.EQ.74 .OR. key.EQ.106) THEN
  IF (plot) THEN
    WRITE (6,6006)
    CALL inkey (key)
  END IF
  WRITE (6,6007)
  CALL plotter (nfe, iza, izn, is, subst(is), liny, ikomb)
  plot=.TRUE.
END IF
ELSE
  WRITE (6,6900) subst(is)
END IF
END DO

```

```

C
5001 FORMAT (A)
5002 FORMAT (8I10)
5000 FORMAT (//
. 8X,'BBBBBB      OOOO  XX  XX  PPPPP  LL      OOO  TTTTTT'/
. 8X,'BB  BB  OO  OO  XX XX  PP  PP  LL      OO  OO  TT  '/
. 8X,'BBBBBB  OO  OO  XXX  PPPPP  LL      OO  OO  TT  '/
. 8X,'BB  BB  OO  OO  XX XX  PP  LL      OO  OO  TT  '/
. 8X,'BBBBBB      OOOO  XX  XX  PP      LLLLLL  OOO  TT  '/
. //23X,'Programm zum Plotten der Ergebnisse von BOXTRAJ'/)
6001 FORMAT (' Von welchem File soll gelesen werden ?')
6002 FORMAT (' Es können bis zu 8 Substanzen gewählt werden, die auf',
. ' auf ein neues File/' ' ausgeschrieben werden.'/
. 4(' Nr=',I3,',',A12))
6003 FORMAT (' Welche Substanzen sollen separiert werden ?/'
. ' (Geben Sie maximal 8 Nummern durch Komma getrennt',
. ' ein !))
6004 FORMAT (' Einlesen von ',A,' beendet !')
6005 FORMAT (' Plotterausgabe ? (J/N:Default)')
6006 FORMAT (' Blatt wechseln ! ',
. ' ... beliebige Taste zum Weitermachen')
6007 FORMAT (' ... plotten')
6008 FORMAT (' Es können bis zu 8 Substanzen gewählt werden, die auf',
. ' auf ein neues File/' ' ausgeschrieben werden.'/
. 20(4(' Nr=',I3,',',A12)/))' ...'//

```

```

        ' ... beliebige Taste zum Weitermachen')
6009 FORMAT (20(4(' Nr=',I3,',',A12)/))' ...'//
        ' ... beliebige Taste zum Weitermachen')
0010 FORMAT (4(' Nr=',I3,',',A12))
6101 FORMAT (/ ' Es gibt folgende Optionen für die Plots : '
        / '      1 : Alle Daten werden geplottet.'
        / '      2 : Es werden die letzten 24 Stunden gezeigt.')
6102 FORMAT (/ ' Soll die y-Achse'
        / '      0 : linear (DEFAULT)'
        / '      1 : logarithmisch skaliert werden ?')
6103 Format (/ ' Die Kurven können auch miteinander kombiniert werden : '
        / '      0 : keine Kombinationen (Default)'
        / '      1 : relative Abweichungen zu Kurve 1'
        / '      2 : Verhältnis zu Kurve 1')
6201 FORMAT ( ' Die Anzahl der Substanzen ist ',I3,'.'/
        ' Die maximale Anzahl der vom Programm zulässigen',
        ' Substanzen'/
        ' ist derzeit auf ',I2,' festgelegt.'/
        ' Das Programm wird an dieser Stelle abgebrochen !')
6202 FORMAT ( ' Die Anzahl der Zeitschritte ist ',I4,'.'/
        ' Die maximale Anzahl der vom Programm zulässigen',
        ' Zeitschritte'/
        ' ist derzeit auf ',I4,' festgelegt.'/
        ' Das Programm wird an dieser Stelle abgebrochen !')
6900 FORMAT ( ' Die Werte der Substanz ',A8,' sind identisch.'/
        ' Es gibt keine Bildschirmausgabe !')
6902 FORMAT ( ' Es fehlt die zweite Datei, um ein Verhältnis',
        ' zu bilden !')
'001 FORMAT (1X,' Zeit;',8(1X,A8,';'))
/002 FORMAT (1X,F5.2,';',1P,8(E9.2,';'))
8001 FORMAT (1X,A6)
8002 FORMAT (/28X,I4,21X,I3,21X,I3)
8003 FORMAT (18X,10A12)
8004 FORMAT (3X,I2,1X,I2,1X,I2,3X,10E12.2)
8005 FORMAT (14X,10E12.2)
8006 FORMAT (3X,F5.2,6X,10E12.2)
8007 FORMAT (F5.1,2X,F5.1,2X,10E12.2)

```

C

```

999 CONTINUE
END

```

*

```

C-----
C                                     Röth, 22.11.93
C
C      SUBROUTINE plotter (nfe, iza, izn, is, subst, liny, ikomb)
C
C      Plottet die Konzentrationen von einer Substanz aus maximal
C      6 Dateien auf Papier.
C
C      geändert : 25.02.94 (S. Huber-Thives)
C                 26.06.94 (E-P.Röth)
C
C-----

```

IMPLICIT NONE

```

C
C      INTEGER*2  nfm, izm, ism
C      PARAMETER (nfm=6, izm=1500, ism=8)
C
C      Parameter
C      -----
C      INTEGER*2  nfe, iza, izn, is, ikomb
C      LOGICAL*1  liny
C      CHARACTER  subst(*)
C
C      globale Variablen
C      -----
C      REAL*4     ywert(nfm,izm,ism), zeit(izm), w
C      REAL*4     xmin, xmax, xfac, ymin, ymax, yfac, ytic, xtic
C      COMMON /konzen/ ywert, zeit
C      COMMON /pltpar/ xmin, xmax, xfac, ymin, ymax, yfac, ytic
C
C      INTEGER*2  iz, nf, ilen, id, ide, ida, idd, nfa
C      REAL*4     x
C      CHARACTER  yaxstext*38
C
C

```

```

C  Achsbeschriftung
C  -----
IF (ikomb.EQ.0) THEN
  yaxstext='Misch.Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'
ELSE IF (ikomb.EQ.1) THEN
  yaxstext=' rel. Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'
ELSE
  yaxstext='      Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'
END IF
IF (liny) THEN
  WRITE (yaxstext(22:28),'(1PE7.0)') ymin
  WRITE (yaxstext(34:39),'(1PE6.0)') ymax
ELSE
  WRITE (yaxstext(23:28),'(1PE6.0)') 10.**ymin
  WRITE (yaxstext(34:39),'(1PE6.0)') 10.**ymax
END IF

```

```

C  Achsen
C  -----
CALL scale (30., 25., xmin, ymin, xfac, yfac, 4)
CALL newpen (2)
CALL speed (20.)
w=xmax-xmin
xtic=24.
IF (w.LT.11.*24.) xtic=12.
IF (w.LT.6.*24.) xtic=6.
IF (w.LT.2.*24.) xtic=2.
CALL xaxis (ymin, xmin, xmax, xtic, +1.)
CALL xaxis ( 0., xmin, xmax, xtic, 0.)
CALL xaxis (ymax, xmin, xmax, xtic, -1.)
xtic=24.
CALL xaxis (ymin, xmin, xmax, xtic, +3.)
CALL xaxis (ymax, xmin, xmax, xtic, -3.)
IF (liny) THEN
  CALL yaxis (xmax, ymin, ymax, ytic, -3.)
  CALL yaxis (xmin, ymin, ymax, ytic, +3.)
ELSE
  CALL lyaxis (xmax, ymin, ymax, 2, -3.)
  CALL lyaxis (xmin, ymin, ymax, 2, +3.)
END IF
CALL speed (100.)

```

```

C  Plotten der Werte
C  -----
nfa=1
IF (ikomb.gt.0) nfa=2
DO nf=nfa,nfe
  CALL newpen (nf)
  IF (liny) THEN
    CALL move (zeit(iza), ywert(nf,iza,is))
  ELSE
    CALL move (zeit(iza), LOG10(ywert(nf,iza,is)))
  END IF
  DO iz=iza+1,izn
    x=zeit(iz)
    IF (liny) THEN
      CALL draw (x, ywert(nf,iz,is))
    ELSE
      CALL draw (x, LOG10(ywert(nf,iz,is)))
    END IF
  END DO
END DO

```

```

C  Achsbeschriftung
C  -----
CALL newpen (2)
CALL settxt (4., 0., 1, 'p')
ida=xmin/24.
ide=xmax/24.
idd=ide-ida
IF (idd.GT.3) THEN
  DO id=ida,9
    x=id*24.-xfac/5.
    w=id
    CALL number (w, 'I' ,1, 0, x, -0.6*ytic+ymin)
    IF (id.EQ.ide) GOTO 20
  END DO

```

```

DO id=10,ide
  x=id*24.-xfac/4.
  w=id
  CALL number (w, 'I' ,2,0, x, -0.6*ytic+ymin)
END DO
20 CONTINUE
ELSE
DO id=ida,ide
  x=id*24.-xfac/5.
  w=id
  CALL number (w, 'I' ,1, 0, x, -0.6*ytic+ymin)
  IF (id.LT.ide) THEN
    x=id*24.-xfac/5. +6.
    w=6
    CALL number (w, 'I' ,1, 0, x, -0.8*ytic+ymin)
    x=id*24.-xfac/5. +12.
    w=12
    CALL number (w, 'I' ,2, 0, x, -0.8*ytic+ymin)
    x=id*24.-xfac/5. +18.
    w=18
    CALL number (w, 'I' ,2, 0, x, -0.8*ytic+ymin)
  END IF
END DO
END IF
ilen=LEN(subst)
CALL letter (ilen, subst, xmax-4.*xfac, ymax+ytic/4.)
CALL settxt (4., 90., 1, 'p')
CALL letter (39, yaxstext, xmin-1.7*xfac, ytic+ymin)
CALL newpen (0)
CALL pltnow
C
RETURN
END
*
C-----
C                                     Huber-Thives, 14.12.93
C
C SUBROUTINE screen (nfe, iza, izn, is, subst, liny, ikomb)
C
C Zeigt die Konzentrationen von einer Substanz aus maximal
C 6 Dateien auf dem Bildschirm an.
C
C geändert : 25.02.94 (S. Huber-Thives)
C           26.06.94 (E-P.Röth)
C-----
C
C IMPLICIT NONE
C
C INTEGER*2  nfm, izm, ism
C PARAMETER (nfm=6, izm=1500, ism=8)
C
C Parameter
C -----
C INTEGER*2  nfe, iza, izn, is, ikomb
C LOGICAL*1  liny
C CHARACTER  subst*(*)
C
C globale Variablen
C -----
C REAL*4     ywert(nfm,izm,ism), zeit(izm), w
C REAL*4     xmin, xmax, xfac, ymin, ymax, yfac, ytic, xtic
C COMMON /konzen/ ywert, zeit
C COMMON /pltpar/ xmin, xmax, xfac, ymin, ymax, yfac, ytic
C
C INTEGER*2  iz, nf, ilen, id, ide, nfa
C REAL*4     x
C CHARACTER  yaxstext*39
C
C Achsbeschriftung
C -----
C IF (ikomb.EQ.0) THEN
  yaxstext='Misch.Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'
ELSE IF (ikomb.EQ.1) THEN
  yaxstext=' rel. Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'
ELSE
  yaxstext=' Verhaeltnis von 1.E-56 bis 1.E-56'

```

```

END IF
IF (liny) THEN
  WRITE (yaxstext(22:28),'(1PE7.0)') ymin
  WRITE (yaxstext(34:39),'(1PE6.0)') ymax
ELSE
  WRITE (yaxstext(23:28),'(1PE6.0)') 10.**ymin
  WRITE (yaxstext(34:39),'(1PE6.0)') 10.**ymax
END IF

```

```

C
C  Achsen plotten
C  -----
CALL sscale (30., 25., xmin, ymin, xfac, yfac, 4)
CALL snewpen (7)
w=xmax-xmin
xtic=24.
IF (w.LT.11.*24.) xtic=12.
IF (w.LT.6.*24.) xtic=6.
IF (w.LT.2.*24.) xtic=2.
CALL sxaxis (ymin, xmin, xmax, xtic, +2.)
CALL sxaxis ( 0., xmin, xmax, xtic, 0.)
CALL sxaxis (ymax, xmin, xmax, xtic, -2.)
IF (liny) THEN
  CALL syaxis (xmax, ymin, ymax, ytic, -3.)
  CALL syaxis (xmin, ymin, ymax, ytic, +3.)
ELSE
  CALL slyaxis (xmax, ymin, ymax, 2, -3.)
  CALL slyaxis (xmin, ymin, ymax, 2, +3.)
END IF

```

```

C
C  Plotten der Werte
C  -----
nfa=1
IF (ikomb.gt.0) nfa=2
DO nf=nfa,nfe
  CALL snewpen (nf+1)
  IF (liny) THEN
    CALL smove (zeit(iza), ywert(nf,iza,is))
  ELSE
    CALL smove (zeit(iza), LOG10(ywert(nf,iza,is)))
  END IF
  DO iz=iza+1,izn
    x=zeit(iz)
    IF (liny) THEN
      CALL sdraw (x, ywert(nf,iz,is))
    ELSE
      CALL sdraw (x, LOG10(ywert(nf,iz,is)))
    END IF
  END DO
END DO

```

```

C
C  Achsbeschriftung
C  -----
CALL snewpen (15)
CALL ssettxt (4., 0., 1, 'p')
ide=xmax/24.
DO id=0,9
  x=id*24.-xfac/5.
  w=id
  CALL snumber (w, 'I', 1,0, x, -0.6*ytic+ymin)
END DO
DO id=10,ide
  x=id*24.-xfac/4.
  w=id
  CALL snumber (w, 'I', 2,0, x, -0.6*ytic+ymin)
END DO
ilen=LEN(subst)
CALL sletter (ilen, subst, xmax-4.*xfac, -ytic+ymin)
CALL ssettxt (4., 90., 1, 'p')
CALL sletter (39, yaxstext, xmin-1.7*xfac, ytic+ymin)
CALL snewpen (0)
CALL sendplt

```

```

C
RETURN
END

```

Anhang D

Quelltext des Programms BOXTRA

B O X T R A . FOR

STAND: 17.08.1995

HAUPTPROGRAMM ZUR BERECHNUNG EINES REAKTIONSSYSTEMS

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NTAG=10,NBOX=3)

DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION LNG0,LNG1,ANT0,ANT1,BIO0,BIO1,SON0,SON1,LNGX
DOUBLE PRECISION HMIN(NTAG),HMAX(NTAG),THAL(NTAG),TFAL(NTAG)
DOUBLE PRECISION G GK(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
DOUBLE PRECISION LCT,lng2,CHI
INTEGER TT0,TT1,TT2,HREND,TEND
INTEGER MONTH(12)
INTEGER*2 iyr,imon,iday
CHARACTER*8 CTEXT(0:NCONC)
CHARACTER*1 DUMFAM
CHARACTER*15 FILEIN

COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
COMMON /REACT/ RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
COMMON /TERME/ C,P,D,CZEI,TTP,TTD
COMMON /TRAJ/ POTTMP,ZT0,ZT1,BRT0,BRT1,LNG0,LNG1,TMP0,TMP1,
TT0,TT1,MM,LNGX,ANT0,ANT1,BIO0,BIO1,SON0,SON1,
HMIN,HMAX,THAL,TFAL
COMMON /WOLKEN/ HREND,G GK,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR
COMMON /ZEICHN/ CTEXT

DATA IDD /0/
DATA MONTH /0,31,59,90,120,151,181,212,243,273,304,334/

1 FORMAT (A,I2.2,'.',I2.2,'.',A,F6.2,F9.2,A,F7.2,A,F6.2)

Einlesen der Steuerdatei und Bestimmen der Eingabe- und Ausgabed.

OPEN (11,FILE='steuer.dat')
READ (11,*)
READ (11,'(A15)') filein
OPEN (12,FILE=filein) ! Reaktionssystem
READ (11,*)
READ (11,'(A15)') filein
OPEN (13,FILE=filein) ! Konzentrationen
READ (11,*)
READ (11,'(1A15)') filein
OPEN (14,FILE=filein) ! Trajektorie
READ (11,*)
READ (11,'(1A15)') filein
OPEN (16,FILE=filein) ! Ausgabefile
READ (11,*)
READ (11,*) IMOD ! Box-Anzahl
READ (11,*) IWOL ! Wolkenort
READ (11,*) IAUS ! Ausgabe
READ (11,*) IZEIT ! Art der Zeitschrittberechnung
READ (11,*)
READ (11,'(14X,I1,12X,F5.2,16X,F5.2,12X,F6.1)')
IDIA, DIATIME, DIADT, TKRIT ! Diagnose
DIATIME=DIATIME*3600.
DIADT=DIADT*3600.
CLOSE (UNIT=11)

Ausgabe einer Kopfzeile mit Modellname, Version und Datum

WRITE (16,*)
WRITE (16,*) 'B O X T R A'
WRITE (16,*) '=====
WRITE (16,*)
WRITE (16,*) 'Version vom 17.08.1995'
WRITE (16,*)
CALL GETDAT (iyr,imon,iday)
WRITE (16,'(A,I2,A,I2,A,I4)') ' Datum:',idly,'.',imon,'.',iyr
Write (16,*)

```

C
C Lesen der Kopfzeilen des Trajektorien-Files
C -----
C
READ (14,*)
READ (14,'(70X,F5.0)') POTTMP
READ (14,'(3X,I3)') ITAG
READ (14,'(3X,F5.1)') TEMP(1)
READ (14,'(2X,F6.1)') X
READ (14,'(3X,F4.2,4X,F4.1,3X,F5.2,6X,F5.2,6X,F5.2,7X,I2)')
      WASSER, pH, Rain, TRB, TRE, ITAGR
      I=1
4 CONTINUE
READ (14,'(I2,1X,F6.1,6X,F6.1,6X,F5.2,6X,F5.2,6X,F8.2)')
      IWH,HMIN(i),HMAX(i),THAL(i),TFAL(i),KA
IF (IWH.GT. 1) THEN
  DO J=I+1,I+(IWH-1)
    HMIN(J)=HMIN(I)
    HMAX(J)=HMAX(I)
    THAL(J)=THAL(I)
    TFAL(J)=TFAL(I)
  ENDDO
ENDIF
I=I+IWH
IF (I.LT. ITAG) GOTO 4
READ (14,*)
READ (14,*)
READ (14,*)

C
C Ausgabe aller wichtigen Randbedingungen
C -----
C
IF (IMOD.EQ. 1) THEN
  WRITE (16,*)
  WRITE (16,*) 'Es wurde das Trajektorienmodell gew„hlt.'
  WRITE (16,*) '-----'
  WRITE (16,*)
ELSEIF (IMOD.EQ. 2) THEN
  WRITE (16,*)
  WRITE (16,*) 'Es wurde das 3-Box-Modell gew„hlt.'
  Write (16,*) '-----'
  WRITE (16,*)
  DO I=1,ITAG
    WRITE (16,'(A,I3,A)')
    ' Mischungsschichtparameter am ',I,'ten Tag:'
    WRITE (16,'(A,F6.1,A,F6.1)')
    ' Minimale Hoehe in m :',HMIN(I),
    ' Maximale Hoehe in m :',HMAX(I)
    WRITE (16,'(A,F5.2)')
    ' Zeitpunkt Halbe maximale Hoehe :',THAL(I)
    IF (TFAL(I).LT. 0) THEN
      WRITE (16,'(A,A)') ' Die Mischungsschicht bricht ',
      ' bei Sonnenuntergang zusammen.'
    ELSE
      WRITE (16,'(A,F5.2,A)')
      ' Zeitpunkt des Zusammenbruchs :',TFAL(I),' Uhr'
    ENDIF
    WRITE (16,'(A,1P,E8.2,A)')
    ' Der Austauschfrequenz ist : ',Ka,' s-1'
    WRITE (16,*)
  ENDDO
  WRITE (16,*)
ENDIF

C
RGAS=1013.25/(2.46E19*298.)
MISCH=HMAX(1)
IF (X.GT. 2000.) THEN
  MEDIUM(1)=X
  PRESS=MEDIUM(1)*RGAS*TEMP(1)
ELSE
  PRESS=X
  MEDIUM(1)=PRESS/(RGAS*TEMP(1))
ENDIF
IS1=1
IS2=2
CTEXT(1)='M
C(0,1)=1.
C(0,2)=1.
C(1,1)=MEDIUM(1)
MEDIUM(2)=MEDIUM(1)
C(1,2)=MEDIUM(2)
MEDIUM(3)=MEDIUM(2)
C(1,3)=MEDIUM(3)

```

```

CZEI(1)=0.
C
WRITE (16,*)
WRITE (16,'(A,I3)')      ' Zahl der Tage          : ',ITAG
WRITE (16,'(A,F6.1,A)')  ' Druck              : ',PRESS,' mbar'
WRITE (16,'(A,F5.0,A)')  ' Pot. Temperatur       : ',POTTMP,' K'
WRITE (16,'(A,F5.0,A)')  ' Temperatur            : ',TEMP(1),' K'
WRITE (16,*)
IF (IWOL.NE. 0) THEN
WRITE (16,'(A,F6.2,A)')  ' Fluessigwassergehalt : ',WASSER,' g/m3'
WRITE (16,'(A,F5.1)')    ' pH-Wert              : ',pH
C
IF (ITAGR.LT. 0) THEN
WRITE (16,'(A,F6.2,A)')  ' Niederschlagsmenge   : ',Rain,' mm/h'
WRITE (16,'(A,F5.2,A,F5.2,A)')
.
' Der Regen tritt jeden Tag zwischen ',TRB,' und ',TRE,
' Uhr auf.'
ELSEIF (ITAGR.GT. 0) THEN
WRITE (16,'(A,F6.2,A)')  ' Niederschlagsmenge   : ',Rain,' mm/h'
WRITE (16,'(A,I2,A,F5.2,A,F5.2,A)')
.
' Tag des Regens ',ITAGR,' Dauer zwischen ',TRB,' und ',TRE,
' Uhr.'
ELSE
WRITE (16,*) 'Es tritt kein Regen auf.'
ENDIF
ELSE
WASSER=0.
WRITE (16,*)
ENDIF
C
C Umrechnung der Fluessigphasenparameter
C -----
WASSER=WASSER*1.0D-06
pH=10.**(-ph)
Rain=Rain/36000.D0
C
C Warnung, falls mehr ausgerechnet wird als vorhanden ist
C -----
IF ((IMOD.EQ. 1).AND. IWOL.NE. 0) THEN
IF ((TRE-TRB)*3600.*Rain/(200.) .GT. WASSER) THEN
WRITE (6,*) 'Warnung, die Regenmenge ist im Vergleich',
.
' zur vorhandenen Menge zu groß.'
ENDIF
ENDIF
C
C Lesen der Startwerte der Trajektorie
C -----
C
IZSCHALT=0
READ (14,'(2X,I2,I2,1X,I2,1X,I2,1X,I2,A1,F7.2,F7.2,F6.1,
.
F7.2,F7.2,F7.2)')
.
MM,TT0,IH,MI,IS,DUMFAM,BRT0,LNG0,TMP0,ANT0,BIO0,SON0
ZT0=IH*3600.+MI*60.+IS
ZT0=ZT0/3600.
READ (14,'(2X,I2,I2,1X,I2,1X,I2,1X,I2,A1,F7.2,F7.2,F6.1,
.
F7.2,F7.2,F7.2)')
.
MM,TT1,IH,MI,IS,DUMFAM,BRT1,LNG1,TMP1,ANT1,BIO1,SON1
ZT1=IH*3600.+MI*60.+IS
ZT1=ZT1/3600.
TIME=ZT0*3600.
TEND=0.
IF (ZT1.LE. ZT0.AND. ZT1.NE. 24.) THEN
IZSCHALT=1
TT2=TT1
ZT2=ZT1
BRT2=BRT1
LNG2=LNG1
TMP2=TMP1
ANT2=ANT1
BIO2=BIO1
SON2=SON1
ZT1=24.
BRT1=BRT0+(BRT2-BRT0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
TMP1=TMP0+(TMP2-TMP0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
ANT1=ANT0+(ANT2-ANT0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
BIO1=BIO0+(BIO2-BIO0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
SON1=SON0+(SON2-SON0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
ELSE
IZSCHALT=0
ENDIF
C
C
3
C Bestimmung der Anfangsrichtung des Luftpaketes

```

```

C -----
  IF (LNG1 .LT. LNG0) THEN
    IF ((LNG1-LNG0) .LT. (360.-LNG1-LNG0)) THEN
      LNGX=0.9*LNG0
    ELSE
      LNGX=1.1*LNG0
    ENDIF
  ELSEIF (LNG1 .GT. LNG0) THEN
    IF ((LNG1-LNG0) .LT. (360.-LNG1+LNG0)) THEN
      LNGX=0.9*LNG0
    ELSE
      LNGX=1.1*LNG0
    ENDIF
  ENDIF
C
C -----
C Einlesen des Reaktionssystems und der Start-Konzentrationen
C -----
C
C Bestimmung des Zenitwinkels
C -----
C
  PI=3.1415927
  PHIR=BRT0*PI/180.
  TAG=MONTH(MM)+(TT1-1)+10.
  DECL=-23.44*COS(TAG/365.*2.*PI)*PI/180.
  CHI=SIN(DECL)*SIN(PHIR)+COS(DECL)*COS(PHIR)*COS((12.-12.)/12.*PI)
  CHI=ACOS(CHI)
C
  CALL INRE (chi)
  CLOSE (UNIT=12)
  CALL INCO (IS1)
C
C -----
C Errechnung modellkonsistenter Anfangskonzentrationen
C -----
C
C Vorgehensweise 1. STEADY-Subroutine
C                2. Ein 'VORLAUFTAG' von 20 h bei konstant 10 Uhr
C                3. Ab 10 Uhr einschwingen bis zum Startzeitpunkt
C
  DTALT=1.0E-03
  DT=1.E-03
  NSTP=0 ! Schalter fuer 1. Aufruf Zeitschritt
  CALL TIMDEP (1,IZEIT,TIME,DT,NSTP,PHI,TET,CHI) ! RK f*r STEADY
  write (*,*) 'Steady'
  CALL STEADY
  ISchalt=0
  GOTO 11
C
  write (*,*) 'Vorlauf'
10 CONTINUE
  NSTP=-1 ! Schalter fuer Vorlauftage
  CALL TIMDEP (1,IZEIT,TIME,DT,NSTP,PHI,TET,CHI)
ccc CALL AUSTAUSCH
  DO I=1,NSTP
    CALL CHEMIE
    CALL EULER (DT)
  ENDDO
  TIME=TIME+DT*NSTP
  IF (TIME .GE. 24.*3600.) THEN
    TIME=0.
    ISchalt=1
  ENDIF
  IF (TIME+4. .GE. ZT0*3600. .AND. ISchalt .EQ. 1) THEN
    GOTO 11
  ELSE
    GOTO 10
  ENDIF
C
C -----
C Berechnung der neuen Konzentrationen
C -----
C
11 CONTINUE
  DO 9 IT=1,ITAG
    write (*,*) it
    IF (IT .NE. 1) TIME=0.
    TSTP=600.
    IF (IT .NE. 1) THEN
      TIMV=600.
    ELSE
      TIMV=ZT0*3600.
    ENDIF
19 CONTINUE
    CALL TIMDEP (IT,IZEIT,TIME,DT,NSTP,PHI,TET,CHI)

```

```

      CALL AUSTAUSCH
      DO 29 I=1,NSTP

C
C
C
C
      Analyse des Systems
      -----

      IF (IDIA .EQ. 1 .AND. (IT .EQ. ITAG .OR. IT .EQ. ITAG-1) .AND.
        TIME .GE. DIATIME .AND. IDD .LT. 4) THEN
        IDD=IDD+1
        CALL DIAGN (IDD,TKRIT,DIATIME)
ccc      CALL SENSIDIR (IDD,DIATIME,TKRIT,DT)
        CALL SENSIIND (IDD,DIATIME,TKRIT,IZEIT)
        DIATIME=DIATIME+DIADT
ccc      IF (IDD .EQ. 4) GOTO 49
      ENDIF
      IF (DIATIME .GT. 24*3600.) THEN
        DIATIME=DIATIME-24.*3600.
      ENDIF

C
      CALL CHEMIE
      CALL EULER (DT)
      IF (IAUS .EQ. 1) THEN
        TAUS=TIMV
      ELSEIF (IAUS .EQ. 2) THEN
        TAUS=ZT1*3600.
      ENDIF
      TIME=TIME+DT
      IF (TIME .GT. ZT1*3600.) THEN
        ZT0=ZT1
        TT0=TT1
        IF (ZT0 .GT. 23.9999) ZT0=0.
        BRT0=BRT1
        LNGX=LNG0
        LNG0=LNG1
        TMP0=TMP1
        ANT0=ANT1
        BIO0=BIO1
        SON0=SON1
        IF (IZSCHALT .EQ. 1) THEN
          ZT1=ZT2
          TT1=TT2
          BRT1=BRT2
          LNG1=LNG2
          TMP1=TMP2
          ANT1=ANT2
          BIO1=BIO2
          SON1=SON2
          IZSCHALT=0
          GOTO 30
        ENDIF
        IF (TEND .EQ. 0)
          READ (14, '(2X,I2,I2,1X,I2,1X,I2,1X,I2,A1,
            F7.2,F7.2,F6.1,F7.2,F7.2,F7.2)',END=45)
            MM,TT1,IH,MI,IS,DUMFAM,BRT1,LNG1,TMP1,
            ANT1,BIO1,SON1
          ZT1=(IH*3600.+MI*60.+IS)/3600.
          IF ((ZT1 .LE. ZT0 .AND. ZT1 .NE. 24.) .OR.
            (TT1 .GT. TT0 .AND. ZT1 .LE. 23.9999)) THEN
            IZSCHALT=1
            TT2=TT1
            ZT2=ZT1
            BRT2=BRT1
            LNG2=LNG1
            TMP2=TMP1
            ANT2=ANT1
            BIO2=BIO1
            SON2=SON1
            ZT1=24.
            BRT1=BRT0+(BRT2-BRT0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
            IF (LNG2 .LT. LNG0) THEN
              IF ((LNG2-LNG0) .LT. (360.-LNG2-LNG0)) THEN
                LNG1=LNG0+((360.-LNG0)+LNG2)*
                  (ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=0.9*LNG0
              ELSE
                LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=1.1*LNG0
              ENDIF
            ELSEIF (LNG2 .GT. LNG0) THEN
              IF ((LNG2-LNG0) .LT. (360.-LNG2+LNG0)) THEN
                LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=0.9*LNG0
              ELSE
                LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=1.1*LNG0
              ENDIF
            ELSEIF (LNG2 .GT. LNG0) THEN
              IF ((LNG2-LNG0) .LT. (360.-LNG2+LNG0)) THEN
                LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=0.9*LNG0
              ELSE
                LNG1=LNG0+(LNG2-LNG0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
                LNGX=1.1*LNG0
              ENDIF
            ELSE
              LNG1=LNG0
              LNGX=0.9*LNG0
            ENDIF
          ENDIF
        ENDIF
      ENDIF

```

```

        LNG1=LNG0-((360.-LNG2)+LNG0)*
            (ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
        LNGX=1.1*LNG0
    ENDIF
ENDIF
IF (LNG1 .GE. 360.) LNG1=LNG1-360.
TMP1=TMP0+(TMP2-TMP0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
ANT1=ANT0+(ANT2-ANT0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
BIO1=BIO0+(BIO2-BIO0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
SON1=SON0+(SON2-SON0)*(ZT1-ZT0)/((ZT2+24.)-ZT0)
ELSE
    IZSCHALT=0
    IF (LNG1 .LT. LNG0) THEN
        IF ((LNG1-LNG0) .LT. (360.-LNG1-LNG0)) THEN
            LNGX=0.9*LNG0
        ELSE
            LNGX=1.1*LNG0
        ENDIF
    ELSEIF (LNG1 .GT. LNG0) THEN
        IF ((LNG1-LNG0) .LT. (360.-LNG1+LNG0)) THEN
            LNGX=0.9*LNG0
        ELSE
            LNGX=1.1*LNG0
        ENDIF
    ENDIF
ENDIF
IF (DUMFAM .EQ. '*') THEN
    WRITE (16,*)
    WRITE (16, '(A,I2,5X,I2,A,I2,A,I2,A)')
        ' Tag:',IT,IH,':',MI,':',IS,' Uhr'
    CALL INCO (IS2)
ENDIF
GOTO 30
45 CONTINUE
TEND=1
END IF
30 CONTINUE
IF (TIME .GT. TAUS) THEN
CCC IF (IT .GE. 1) THEN
    CALL OUTPUT (TIME,TEMP,PHI,TET,CHI,IS1)
    TX=TIME/3600.
    LCT=TX+LNG0/15.
    IF (LCT .GT. 24.) LCT=LCT-24.
    TX=INT(TX)+(TX-INT(TX))*60./100.
    LCT=INT(LCT) + (LCT-INT(LCT))*60./100.
    WRITE (6,1) ' DATUM ',TT0,MM,' UT',TX,BRT0,'ØN ',
        LNG0,'ØE LCT',LCT
CCC ENDIF
    TIMV=TIMV+TSTP
ENDIF
IF (TEND.EQ.1 .AND. TIME.GT.ZT1*3600.) GOTO 49
IF (TIME .GT. 23.999999*3600.) GOTO 39
29 CONTINUE
GOTO 19
39 CONTINUE
IF (ZT0 .NE. 0.) ZT1=0.
9 CONTINUE
C
C Ende
C ----
C
49 CONTINUE
IF (ITAG .NE. 0) CALL OUTPUT (TIME,TEMP,PHI,TET,CHI,IS2)
C
CLOSE (UNIT=13)
CLOSE (UNIT=14)
CLOSE (UNIT=16)
C
END
*
C
C FORTRAN PROGRAMM I N R E
C
C UNTERPROGRAMM ZUM EINLESEN DER REAKTIONEN
C
C SUBROUTINE INRE (chi)
C
C IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
DOUBLE PRECISION KON(NREAK,7)
DOUBLE PRECISION UNKON(NREAK,7),UNCONC(NCONC)

```

```

DOUBLE PRECISION  GKG(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
DOUBLE PRECISION  CHI
INTEGER  HREND
INTEGER  ERRNUM(20), HR
CHARACTER*1  ZE1
CHARACTER*8  CTXT(NSUB)
CHARACTER*11  DIM
CHARACTER*80  LINE

C
COMMON /ANZAHL/  ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
COMMON /REAKT /  RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
COMMON /RKONST/  KON
COMMON /UNSICH/  UNKON,UNCONC
COMMON /WOLKEN/  HREND,GKG,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR

C
1 FORMAT (1X,I3,1X,2(A8,'+'),A8,'<=',A1,'=>',3(A8,'+'),A8,1PE15.2)
2 FORMAT (1X,I3,1X,2(A8,'+'),A8,'-',A1,'->',3(A8,'+'),A8,1PE15.2,A)
3 FORMAT ('/' Die Reaktionsgleichungen mit den nachfolgenden ',
.         'Nummern enthalten weniger als 3 Edukte: '/,20I4)
4 FORMAT ('/' Gleichgewichte: '/, '-----' '/')
5 FORMAT ('/' Symboltabelle: '/3X,
+         ' IR:  SYM1 SYM2 SYM3  SYM4 SYM5 SYM6 SYM7')
6 FORMAT (I5,4X,3I5,2X,4I5)

C
WRITE (16,*)
WRITE (16,*) 'Reaktionssystem:'
WRITE (16,*) '-----'
WRITE (16,*)
WRITE (16,*(A,F5.1,A)) ' Die Reaktionskonstanten gelten fuer ',
.         temp(1),' K und dem angegeben Druck.'
WRITE (16,*) 'Die Photolyseraten entsprechen den 12 Uhr-Werten.'
WRITE (16,*)

C
C  SCHLEIFE UEBER DIE REAKTIONEN :
C
IR=0
IERR=0
DO 9 I=1,1000
  READ (12, '(A80)') LINE
  IF (LINE(1:4) .EQ. '----') GOTO 9
  CALL DELBLK (LINE)
  IPO=0

C
19  CONTINUE
  IF (LINE(1:8) .EQ. '*****') GOTO 100

C
C  ANZAHL DER REAKTIONSPARTNER VOR DEM PFEIL UEBERPRUEFEN
C
  IPFL=INDEX(LINE,'>')
  DO 29 J=1,3
    IPP=INDEX(LINE,'+')
    IF (IPP .NE. 0) LINE(IPP:IPP)='&'
29  CONTINUE
  IF (IPP .LT. IPFL .AND. IPP .NE. 0) THEN
    WRITE (6,*) ' Achtung zuviele Reaktionspartner vor dem Rea',
.         'ktionspfeil!!!'
    WRITE (6,*) LINE
    WRITE (6,*) ' Reaktionsgleichung wird ignoriert !!!'
    READ (12,*)
    GOTO 9
  ELSE
    IR=IR+1
    DO 39 J=1,3
      IPS=INDEX(LINE,'&')
      IF (IPS .NE. 0) LINE(IPS:IPS)='+'
39  CONTINUE
  ENDIF

C
C  ERMITTELN DER ART DER REAKTIONSGLEICHUNG
C
  IPOS=INDEX(LINE,'-')
  ZE1=LINE(IPOS+1:IPOS+1)
  DO 49 J=1,7
    KON(IR,J)=0.
    UNKON(IR,J)=0.
49  CONTINUE

C
  IF (ZE1 .EQ. '*') THEN

C
    READ (12, '(E10.2,F9.4,F9.4,F6.2)')
.         (KON(IR,J),J=1,3),UNKON(IR,1)
    RK(IR,1)=KON(IR,1)*DEXP(KON(IR,2)*(1.-1./COS(KON(IR,3)*CHI)))
    KON(IR,7)=1.

C
    ELSEIF (ZE1 .EQ. '-') THEN

```

```

C      READ (12, '(E10.2,F8.2,F6.2,2(F8.2))')
        (KON(IR,J),J=1,2), (UNKON(IR,J),J=1,3)
      RK(IR,1)=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(1))
      KON(IR,7)=2.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'A') THEN
C
      READ (12, '(E10.2,F6.2,3(F6.2))')
        (KON(IR,J),J=1,2), (UNKON(IR,J),J=1,3)
      RK(IR,1)=KON(IR,1)*(TEMP(1)/300.)**(-KON(IR,2))
      KON(IR,7)=3.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'B') THEN
C
      READ (12, '(E10.2,2(F6.2),F6.2)')
        (KON(IR,J),J=1,3), UNKON(IR,1)
      RK(IR,1)=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(1))*(TEMP(1)/300.)
        **(-KON(IR,3))
      KON(IR,7)=4.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'T') THEN
C
      IP1=INDEX(LINE, '+')
      LINE(IP1:IP1)='*'
      IP2=INDEX(LINE, '+')
      IF (IP2 .GT. IPOS+3 .OR. IP2 .EQ. 0) THEN
        IERR=IERR+1
        ERRNUM(IERR)=IR
      END IF
      LINE(IP1:IP1)='+'
      READ (12, '(2(E10.2,F6.2),F6.2,6(F6.2))')
        (KON(IR,J),J=1,5), (UNKON(IR,J),J=1,6)
      X=KON(IR,1)*(TEMP(1)/300.)**(-KON(IR,2))*MEDIUM(1)
      Y=X/(KON(IR,3)*(TEMP(1)/300.)**(-KON(IR,4)))
      RK(IR,1)=X/(1.+Y)*KON(IR,5)**(1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(1)
      KON(IR,7)=5.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'E') THEN
C
      READ (12, '(2(E10.2,F8.2),F8.2,2(F6.2,F8.2))')
        (KON(IR,J),J=1,5), (UNKON(IR,J),J=1,4)
      X=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(1))*MEDIUM(1)
      Y=X/(KON(IR,3)*DEXP(-KON(IR,4)/TEMP(1)))
      RK(IR,1)=X/(1.+Y)*KON(IR,5)**(1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(1)
      KON(IR,7)=6.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'N') THEN
C
C>> Speziell f•r N2O5 Atkinson eingef•hrt
      READ (12, '(2(E10.2,F8.2,F8.2),F6.2,F6.2)')
        (KON(IR,J),J=1,6), (UNKON(IR,J),J=1,1)
      X=KON(IR,1)*((TEMP(1)/300.)**(-KON(IR,2)))*
        DEXP(-KON(IR,3)/TEMP(1))*MEDIUM(1)
      Y=X/(KON(IR,4)*((TEMP(1)/300.)**(-KON(IR,5))))*
        DEXP(-KON(IR,6)/TEMP(1))
      RK(IR,1)=X/(1.+Y)*0.33**1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(1)
      KON(IR,7)=12.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'D') THEN
C
      READ (12, '(2(E10.2,F6.2),F6.2)')
        (KON(IR,J),J=1,4), UNKON(IR,1)
      X=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(1))
      Y=KON(IR,3)*DEXP(-KON(IR,4)/TEMP(1))
      RK(IR,1)=X+(Y*MEDIUM(1))
      KON(IR,7)=13.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'C') THEN
C
      READ (12, '(3(E10.2,F6.2),F6.2)')
        (KON(IR,J),J=1,6), UNKON(IR,1)
      X=KON(IR,1)*DEXP(KON(IR,2)/TEMP(1))
      Y=KON(IR,3)*DEXP(KON(IR,4)/TEMP(1))
      Z=KON(IR,5)*DEXP(KON(IR,6)/TEMP(1))
      RK(IR,1)=X+(Z*MEDIUM(1)/(1+(Z*MEDIUM(1)/Y)))
      KON(IR,7)=7.

C
C      ELSEIF (ZEI .EQ. 'O') THEN
C
      READ (12, '(E10.2,F8.2,F6.2)') (KON(IR,J),J=1,2), UNKON(IR,1)
      RK(IR,1)=(KON(IR,1)/(KON(IR,2)+pH)) 8
      IF (IWOL .NE. 0.) RK(IR,1)=RK(IR,1)*1000./(6.022E+23*WASSER)

```

```

      KON(IR,7)=8.
C
      ELSEIF (ZEI .EQ. 'R') THEN
C
      READ (12,'(E10.2,F8.2,F6.2)') (KON(IR,J),J=1,2),UNKON(IR,1)
      RK(IR,1)=KON(IR,1)+KON(IR,2)/pH
      IF (IWOL .NE. 0.) RK(IR,1)=RK(IR,1)*1000./(6.022E+23*WASSER)
      KON(IR,7)=9.
C
      ELSE
C
      READ (12,*)
      WRITE (6,*) LINE
      WRITE (6,*) ' Fehlerhafte Reaktions-Kennzeichnung'
      ENDIF
C
      IF (KON(IR,1) .EQ. 0.) GOTO 9
      CALL DECODE (LINE,CTXT,IVOR)
      IF (IVOR .EQ. 1) THEN
        DIM=' [s-1]'
      ELSEIF (IVOR .EQ. 2) THEN
        DIM=' [cm-3*s-1]'
      ELSE
        DIM=' [cm-6*s-1]'
      ENDIF
      IRX=IR
      CALL COMP (CTXT,IRX)
      WRITE (16,2) IR,(CTXT(J),J=1,3),ZEI,(CTXT(J),J=4,7),
        RK(IR,1),DIM
      9 CONTINUE
C
      100 IREND=IR
      IF (IERR .NE. 0) WRITE (16,3) (ERRNUM(I),I=1,IERR)
C
      SCHLEIFE UEBER DIE HETEROGENEN GLEICHGEWICHTSREAKTIONEN :
C
      HR=IREND
      IERR=0
      WRITE (16,4)
      WRITE (16,'(A,F4.1)') ' Die Gleichgewichtskonstanten gelten fuer e
      inen pH-Wert von ', -log10(pH)
      WRITE (16,*)
      DO 109 I=1,1000
        READ (12,'(A80)') LINE
        IF (LINE(1:4) .EQ. '----') GOTO 109
        CALL DELBLK (LINE)
        IP0=0
C
      119 CONTINUE
      IF (LINE(1:8) .EQ. '*****') GOTO 200
C
      ANZAHL DER REAKTIONSPARTNER VOR DEM PFEIL UEBERPRUEFEN
      IPFL=INDEX(LINE,'>')
      DO 129 J=1,3
        IPP=INDEX(LINE,'+')
        IF (IPP .NE. 0) LINE(IPP:IPP)='&'
      129 CONTINUE
      IF (IPP .LT. IPFL .AND. IPP .NE. 0) THEN
        WRITE (6,*) ' Achtung zuviele Reaktionspartner vor dem Rea',
          'ktionspfeil!!!'
        WRITE (6,*) LINE
        WRITE (6,*) ' Reaktionsgleichung wird ignoriert !!!'
        READ (12,*)
        GOTO 109
      ELSE
        HR=HR+1
        DO 139 J=1,3
          IPS=INDEX(LINE,'&')
          IF (IPS .NE. 0) LINE(IPS:IPS)='+'
      139 CONTINUE
      ENDIF
C
      ERMITTELN DER ART DER REAKTIONSGLEICHUNG
C
      IPOS=INDEX(LINE,'-')
      ZEI=LINE(IPOS+1:IPOS+1)
      DO 149 J=1,7
        KON(HR,J)=0.
        UNKON(HR,J)=0.
      149 CONTINUE
C
      IF (ZEI .EQ. 'H') THEN

```

```

      READ (12, '(E10.2,F6.2)') KON(HR,1),UNKON(HR,1)
      GGK(HR)=KON(HR,1)
      KON(HR,7)=10.
C
      ELSEIF (ZEI .EQ. 'G') THEN
C
      READ (12, '(3(E10.2),F6.2)') (KON(HR,J),J=1,3),UNKON(HR,1)
      X1=KON(HR,2)/pH
      X2=(KON(HR,2)*KON(HR,3))/(pH*pH)
      GGK(HR)=KON(HR,1)*(1.+X1+X2)
      KON(HR,7)=11.
C
      ELSE
C
      READ (12,*)
      WRITE (6,*) LINE
      WRITE (6,*) ' Fehlerhafte Reaktions-Kennzeichnung'
      ENDIF
C
      IF (KON(HR,1) .EQ. 0.) GOTO 109
      CALL DECODE (LINE,CTXT,IVOR)
      IRX=HR
      CALL COMP (CTXT,IRX)
      WRITE (16,1) HR,(CTXT(J),J=1,3),ZEI,(CTXT(J),J=4,7),GGK(HR)
109 CONTINUE
C
      WRITE (16,*)
200 HREND=HR
      IF (IERR .NE. 0) WRITE (16,3) (ERRNUM(I),I=1,IERR)
C
      RETURN
      END
*
C
      SUBROUTINE DECODE (LINE,CTXT,IVOR)
C
      PROGRAMM ZUM UMSPEICHERN DER REAKTIONSTEILNEHMER
C
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NSUB=7)
C
      INTEGER      RPOS(0:NSUB)
      CHARACTER*8  CTXT(NSUB)
      CHARACTER*80 LINE
C
      IPOSM=INDEX(LINE,'-')
      IPOSB=INDEX(LINE,' ')
      IPPFL=INDEX(LINE,'>')
      RPOS(0)=0
      NACH=1
      IVOR=1
C
      ANZAHL DER REAKTIONSTEILNEHMER VOR UND NACH DEM PFEIL BESTIMMEN
C
      9 CONTINUE
      DO 19 IL=1,NSUB+1
      IPOSP=INDEX(LINE,'+')
      IF (IPOSP .NE. 0) LINE(IPOSP:IPOSP)=' '
      IF (IPOSP .LT. IPOSM .AND. IPOSP .NE. 0) THEN
      IVOR=IVOR+1
      ELSE IF (IPOSP .GT. IPOSM) THEN
      NACH=NACH+1
      ELSE IF (IPOSP .EQ. 0) THEN
      GOTO 29
      END IF
      RPOS(IL)=IPOSP
19 CONTINUE
C
      REAKTIONSTEILNEHMER VOR DEM PFEIL ZUWEISEN
C
      29 CONTINUE
      RPOS(IL)=INDEX(LINE,' ')
      DO 39 I=1,IVOR
      IF (I .EQ. IVOR) IZL=IPOSM-RPOS(I-1)-1
      IF (I .NE. IVOR) IZL=RPOS(I)-RPOS(I-1)-1
      IRP=RPOS(I-1)
      DO 49 J=1,IZL
      CTXT(I)(J:J)=LINE(IRP+J:IRP+J)
49 CONTINUE
      DO 59 J=IZL+1,8
      CTXT(I)(J:J)=' '
59 CONTINUE
39 CONTINUE

```

```

DO 69 I=IVOR+1,3
  CTXT(I)=' '
69 CONTINUE
C
C   REAKTIONSTEILNEHMER NACH DEM PFEIL ZUWEISEN
C
  IF (NACH .EQ. 1) THEN
    IZL=(IPOSB-1)-IPPFL
    DO 79 I=1,IZL
      CTXT(4)(I:I)=LINE(IPPFL+I:IPPFL+I)
79    CONTINUE
    DO 89 I=IZL+1,8
      CTXT(4)(I:I)=' '
89    CONTINUE
  ELSE
    RPOS(IVOR-1)=IPPFL
    DO 99 I=IVOR+1,IVOR+NACH
      IL=I
      IF (IVOR .LT. 3) IL=3+I-IVOR
      IZL=RPOS(I-1)-RPOS(I-2)-1
      IRP=RPOS(I-2)
      DO 109 J=1,IZL
        CTXT(IL)(J:J)=LINE(IRP+J:IRP+J)
109      CONTINUE
      DO 119 J=IZL+1,8
        CTXT(IL)(J:J)=' '
119      CONTINUE
99    CONTINUE
  END IF
C
  DO 129 I=NACH+4,NSUB
    CTXT(I)=' '
129 CONTINUE
C
  RETURN
END
*
C
C   FORTRAN PROGRAMM C O M P
C
C   UNTERPROGRAMM ZUM COMPILIEREN DES REAKTIONSSYSTEMS
C
  SUBROUTINE COMP (CTXT,IR)
C
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
  PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7)
C
  INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
  CHARACTER*8 CTEXT(0:NCONC)
  CHARACTER*8 CTXT(NSUB)
C
  COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
  COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
  COMMON /ZEICHN/ CTEXT
C
  C   SCHLEIFE UEBER DIE REAKTIONSPARTNER :
  DO 9 J=1,NSUB
    IF (CTXT(J) .NE. ' ') THEN
      DO 19 I=1,ICEND
        IF (CTXT(J) .NE. CTEXT(I)) GOTO 19
        SYM(IR,J)=I
        GOTO 9
19      CONTINUE
      ICEND=ICEND+1
      CTEXT(ICEND)=CTXT(J)
      SYM(IR,J)=ICEND
    END IF
  9 CONTINUE
C
C   BESTIMMUNG DER STOECHIOMETRISCHEN KOEFFIZIENTEN FUER JEDE SUBSTANZ
C   IN JEDER REAKTION
C
  J1=SYM(IR,1)
  J2=SYM(IR,2)
  J3=SYM(IR,3)
  NU(J1,IR)=1.
  NU(J2,IR)=1.
  NU(J3,IR)=1.
  IF ((J1.EQ.J2) .OR. (J1.EQ.J3)) THEN
    NU(J1,IR)=NU(J1,IR)+1.
  ELSEIF (J2.EQ.J3) THEN
    NU(J2,IR)=NU(J2,IR)+1.
  11

```



```

        CZEI(I)=CZW
        QU(I)=QQ
        QZEI(I)=QZW
        TRDE(I)=DEP
        if (un .eq. 0) un=1.D0
        UNCONC(I)=UN
        GOTO 9
19      CONTINUE
        IF (CTXT .NE. '      ') THEN
            WRITE(16,2) CTXT
        END IF
20      CONTINUE
        READ (13,*)
9      CONTINUE
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE FAMILIENZUSAMMENSETZUNG
C
100     CONTINUE
        IF (ISW .EQ. 1) THEN
            WRITE (16,*)
            WRITE (16,*) 'Substanzfamilien:'
            WRITE (16,*)
        ELSEIF (ISW .EQ. 2) THEN
            WRITE (16,*)
            WRITE (16,*) 'Es wurden neue Substanzfamilien eingelesen:'
            WRITE (16,*)
        ENDIF
        DO 109 IJ=1,100
            READ (13,1) LINE
            LINALT=LINE
            CALL DELBLK (LINE)
C
C      ENDE DER EINGABEN FUER DIE FAMILIENBILDUNG ERREICHT ?
        IF (LINE(1:5) .EQ. '*****') THEN
            NFAM=IJ-1
            GOTO 190
        ENDIF
C
        WRITE (16,*) LINE
C      GUELTIGE EINGABE-ZEILE ?
        IGL=INDEX(LINE, '=')
        IF (IGL .EQ. 0) GOTO 150
        CTEXT(ICEND+IJ)=LINE(1:IGL-1)
C
C      PLUS-ZEICHEN SUCHEN UND IN STERNE UMWANDELN
        DO 119 NF=1,80
            IPL(NF)=INDEX(LINE, '+')
            IF (IPL(NF) .EQ. 0) GOTO 129
            LINE(IPL(NF):IPL(NF))='*'
119     CONTINUE
C
129     CONTINUE
        FAM(IJ, -1)=NF
        IPL(NF)=INDEX(LINE, ' ')
C
C      EINZELNE SUBSTANZEN NACH TXT UMSPEICHERN
        ICLEN=IPL(1)-IGL-1
        TXT(1)=' '
        TXT(1)(1:ICLEN)=LINE(IGL+1:IPL(1)-1)
        DO 139 IV=2,NF
            TXT(IV)=' '
            ICLEN=IPL(IV)-IPL(IV-1)-1
            TXT(IV)(1:ICLEN)=LINE(IPL(IV-1)+1:IPL(IV)-1)
139     CONTINUE
C
C      BESTIMMUNG DER FAMILIENKONZENTRATION, QUELLSTAERKE, DEPOSITIONS-
C      GESCHWINDIGKEIT UND AUSTAUSCHRATE
C
        FAM(IJ,0)=ICEND+IJ
        C(ICEND+IJ,1)=1.D-99
        C(ICEND+IJ,2)=1.D-99
        C(ICEND+IJ,3)=1.D-99
        UNCONC(ICEND+IJ)=1.D+00
        DO 149 IK=1,NF
            DO 159 IL=1,ICEND
                IF (CTEXT(IL).EQ.TXT(IK)) GOTO 169
159     CONTINUE
                WRITE (6, '(A,A8,A/1X,A80)') ' Fehlerhafte Familienangabe : ',
                    .      TXT(IK), ' in Zeile', LINALT
                STOP
169     CONTINUE
        FAM(IJ,IK)=IL
        C(ICEND+IJ,1)=C(ICEND+IJ,1)+C(IL,1)

```

```

      C(ICEND+IJ,2)=C(ICEND+IJ,2)+C(IL,2)
      C(ICEND+IJ,3)=C(ICEND+IJ,3)+C(IL,3)
      UNCONC(ICEND+IJ)=DMAX1(UNCONC(ICEND+IJ),UNCONC(IL))
C     FAMILIEN WERDEN ALS VARIABLEN, ZEITSCHRITTRELEVANT, FALLS EIN
C     MITGLIED DIES IST, UND DIE QUELLSTAERKEART ALS DIE DES LETZTEN
C     MITGLIEDES ANGENOMMEN
C     IST EIN MITGLIED DER FAMILIE ALS KONSTANT GEKENNZEICHNET, SO
C     WIRD DIE FAMILIE ALS KOSTANT ANGESEHEN, DIE SUBSTANZ ABER DARIN
C     ALS VARIABLEN
      IF (CZEI(IL) .LT. 0.05) THEN
        CZEI(ICEND+IJ)=0.
        CZEI(IL)=1.
      ELSEIF (CZEI(IL) .GT. 2.05) THEN
        CZEI(ICEND+IJ)=3.
      ELSE
        IF (CZEI(ICEND+IJ) .NE. 0.) THEN
          IF (CZEI(ICEND+IJ) .NE. 3.) THEN
            CZEI(ICEND+IJ)=1.
          ENDIF
        ENDIF
      ENDIF
      QZEI(ICEND+IJ)=QZEI(IL)
C     FAMILIENQUELLSTAERKE IST SUMME DER QUELLSTAERKE DER MITGLIEDER
      QU(ICEND+IJ)=QU(ICEND+IJ)+QU(IL)
C     FAMILIENQUELLDEPOSITIONSRATE IST SUMME DER RATEN DER MITGL.
      TRDE(ICEND+IJ)=TRDE(ICEND+IJ)+TRDE(IL)
149  CONTINUE
109  CONTINUE
C
150  WRITE (6,*) ' Fehlerhafte Familienangabe: '
      WRITE (6,*) LINALT
      STOP
C
190  CONTINUE
C
      BESTIMMUNG, WELCHE SUBSTANZ IN WELCHER UND WIEVIELEN FAMILIEN
      BETEILIGT IST
C
      IF (NFAM .EQ. 0) GOTO 200
C
      DO I=1,ICEND
        IZA(I)=0
      ENDDO
C
      DO J=1,NFAM
        NF=FAM(J,-1)
        DO K=1,NF
          IFA=FAM(J,K)
          IZA(IFA)=IZA(IFA)+1
          IZF(IFA,IZA(IFA))=J
        ENDDO
      ENDDO
C
      SUMMENUEBERPRUEFUNG DER ELEMENTE
C
200  CONTINUE
      IF (ISW .EQ. 1) THEN
        WRITE (16,*)
        WRITE (16,*) 'Kontrollsummen:'
        WRITE (16,*)
      ELSEIF (ISW .EQ. 2) THEN
        WRITE (16,*)
        WRITE (16,*) 'Es wurden neue Kontrollsummen eingelesen:'
        WRITE (16,*)
      ENDIF
C
      DO 209 IJ=1,100
        DO 219 I=-1,10
          TX(I)=' '
219  CONTINUE
        READ (13,1) LINE
        LINALT=LINE
        CALL DELBLK (LINE)
C
      ENDE DER SUMMENUEBERPRUEFUNG ERREICHT ?
      IF (LINE(1:5) .EQ. '*****') THEN
        NSUM=IJ-1
        GOTO 300
      ENDIF
C
      WRITE (16,*) LINE
C     GUELFIGE EINGABE ZEILE ?
      IGL=INDEX(LINE,' ')

```

```

IF (IGL .EQ. 0) GOTO 250
C
ICL=IGL-1
TX(-1)(1:ICL)=LINE(1:ICL)
LINE(1:80-IGL)=LINE(IGL+1:80)
ICNT=1
DO 229 NP=1,80
  IP=INDEX(LINE,'+')
  IF (IP .EQ. 0) THEN
    IP=INDEX(LINE,' ')
    TX(ICNT)(1:IP-1)=LINE(1:IP-1)
    GOTO 239
  ENDIF
  ICL=IP-1
  TX(ICNT)(1:ICL)=LINE(1:ICL)
  ICNT=ICNT+1
  LINE(1:80-IP)=LINE(IP+1:80)
229 CONTINUE
239 CONTINUE
NSM=NP
IJSUM=ICEND+NFAM+IJ
SUMSYM(IJ,0,2)=NSM
SUMSYM(IJ,0,1)=IJSUM
CTEXT(IJSUM)=TX(-1)(1:8)
C(IJSUM,1)=1.D-99
C(IJSUM,2)=1.D-99
C(IJSUM,3)=1.D-99
DO 249 NP=1,NSM
  IM=INDEX(TX(NP),'*')
  IF (IM .EQ. 0) THEN
    IFAK=1
  ELSEIF (IM .EQ. 2) THEN
    READ (TX(NP)(1:1),'(I1)') IFAK
    TXX=TX(NP)(3:13)//' '
    TX(NP)=TXX
  ELSEIF (IM .EQ. 3) THEN
    READ (TX(NP)(1:2),'(I2)') IFAK
    TXX=TX(NP)(4:13)//' '
    TX(NP)=TXX
  ELSE
    GOTO 250
  ENDIF
  DO 259 IL=1,ICEND+NFAM
    IF (CTEXT(IL) .EQ. TX(NP)) GOTO 269
259 CONTINUE
    WRITE (6,'(A,1A13,I7,A/1X,A80)')
      ' Fehlerhafte Kontrollsummenangabe : ',TX(NP),NP
      ' in Zeile',LINALT
    IL=0
269 CONTINUE
    SUMSYM(IJ,NP,1)=IL
    SUMSYM(IJ,NP,2)=IFAK
    C(IJSUM,1)=C(IJSUM,1)+C(IL,1)*IFAK
    C(IJSUM,2)=C(IJSUM,2)+C(IL,2)*IFAK
    C(IJSUM,3)=C(IJSUM,3)+C(IL,3)*IFAK
249 CONTINUE
209 CONTINUE
C
250 WRITE (6,*) ' Fehlerhafte Kontrollsummenangabe:'
  WRITE (6,*) LINALT
C
C  AUSGABE :
C
300 CONTINUE
IF (ISW .EQ. 2) GOTO 400
C
WRITE (16,3)
IX=0
DO 309 I=1,ICEND+NFAM+NSUM
  IF (CZEI(I).LT.0.1) THEN
    CONSTANT='konstant'
  ELSEIF (CZEI(I) .GT. 1.05 .AND. CZEI(I) .LT. 2.05) THEN
    CONSTANT='gel"st '
  ELSEIF (CZEI(I) .GT. 2.05) THEN
    CONSTANT='Analyse '
  ELSE
    CONSTANT=' '
  ENDIF
  IF (QZEI(I).LT.0.1) THEN
    CONST='anthrop.'
  ELSEIF (QZEI(I) .GT. 1.05) THEN
    CONST='biogen '
  ELSE

```

```

        CONST='
    ENDIF
    WRITE (16,4) I,CTEXT(I),C(I,1),CONSTANT,C(I,3),QU(I),CONST,
        TRDE(I),UNCONC(I)
    IF (C(I,1) .LT. 0.D0) THEN
        WRITE (16,5) CTEXT(I)
        IX=1
    END IF
309 CONTINUE
    WRITE (16,'(/)')
    IF (IX .EQ. 1) STOP
C
400 CONTINUE
    RETURN
    END
*
C
C   FORTRAN PROGRAMM S T E A D Y
C
C   UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG MODELLKONSISTENTER
C   ANFANGSKONZENTRATIONEN INNERHALB DER FAMILIEN
C
C   SUBROUTINE STEADY
C
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C   PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NBOX=3)
C
C   DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C   DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C   DOUBLE PRECISION FAK(10),CALT(NCONC,NBOX),FAK1,FAK2
C   INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C   INTEGER IZA1(NCONC)
C
C   COMMON /ANZAHL/ ICEND,IREND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C   COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C   COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C
C   DO 9 JJ=1,5
C       DO 12 J=1,NFAM
C           NF=FAM(J,-1)
C           DO 14 I=1,NF
C               IFA=FAM(J,I)
C               IZA1(IFA)=1
C               CALT(IFA,1)=C(IFA,1)
14      CONTINUE
12      CONTINUE
C       CALL CHEMIE
C
C       RAT=1.-(JJ-1.)/4.
C
C       DO 19 J=1,NFAM
C           NF=FAM(J,-1)
C           FAK(J)=0.
C           SUM=0.
C           DO 29 I=1,NF
C               IFA=FAM(J,I)
C               C(IFA,1)=(P(IFA,1)/(D(IFA,1)+1.D-25)+CALT(IFA,1)*RAT)
C                   /(1.+RAT)
C               SUM=SUM+C(IFA,1)
29      CONTINUE
C           IFA=FAM(J,0)
C           FAK(J)=C(IFA,1)/SUM
19      CONTINUE
C       DO 39 J=1,NFAM
C           NF=FAM(J,-1)
C           DO 49 I=1,NF
C               IFA=FAM(J,I)
C               IF (IZA(IFA) .EQ. 1) THEN
C                   C(IFA,1)=C(IFA,1)*FAK(J)
C               ELSEIF (IZA(IFA) .GT. 1 .AND. IZA1(IFA) .NE. 0) THEN
C                   FAK1=0.
C                   FAK2=0.
C                   DO 59 IJ=1,IZA(IFA)
C                       FAK1=FAK1+FAK(IZF(IFA,IJ))/C(FAM(J,0),1)
C                       FAK2=FAK2+(1./C(FAM(J,0),1))
59      CONTINUE
C                   C(IFA,1)=C(IFA,1)*FAK1/FAK2
C                   IZA1(IFA)=0
C               ENDIF
C               C(IFA,1)=DMAX1(1.0D-25,C(IFA,1))
C               C(IFA,2)=C(IFA,1)
49      CONTINUE

```

```

39  CONTINUE
C
C 9 CONTINUE
C
C   RETURN
C   END
C
C *
C
C   FORTRAN PROGRAMM T I M D E P
C
C   UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DES ZEITSCHRITTES, DER ANZAHL
C   DER ITERATIONSSCHRITTE UND ALLER ZEITABHAENGIGEN GROESSEN
C
C   SUBROUTINE TIMDEP (IT,IZEIT,TIME,DT,NSTP,PHI,TET,CHI)
C
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C   PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NTAG=10,NBOX=3)
C
C   DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
C   DOUBLE PRECISION KON(NREAK,7)
C   DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C   DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C   DOUBLE PRECISION LNG0,LNG1,ANT0,ANT1,BIO0,BIO1,SON0,SON1,LNGX
C   DOUBLE PRECISION HMIN(NTAG),HMAX(NTAG),THAL(NTAG),TFAL(NTAG)
C   DOUBLE PRECISION GGK(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
C   DOUBLE PRECISION LCT,X,Y,HWOLKE,PP(0:NCONC),DD(0:NCONC)
C   INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C   INTEGER TT0,TT1
C   INTEGER HREND
C   INTEGER MONTH(12)
C
C   COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C   COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C   COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
C   COMMON /RKONST/ KON
C   COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C   COMMON /TRAJ / POTTMP,ZT0,ZT1,BRT0,BRT1,LNG0,LNG1,TMP0,TMP1,
C   . TT0,TT1,MM,LNGX,ANT0,ANT1,BIO0,BIO1,SON0,SON1,
C   . HMIN,HMAX,THAL,TFAL
C   COMMON /WOLKEN/ HREND,GGK,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR
C
C   DATA MONTH /0,31,59,90,120,151,181,212,243,273,304,334/
C
C   SAVE
C
C   THALB=(1./2.)**(0)
C   IBOX=IMOD
C
C   PI=3.1415927
C   RERD=6366.
C   RGAS=1013.25/(2.46E+19*298.)
C   T=TIME/3600.
C
C   Bestimmung von Ort und lokaler Zeit
C   -----
C
C   Vorlaufftag bei konstanter Startzeit der Trajektorie
C   (empfohlen wird 10 Uhr)
C
C   IF (NSTP .LT. 0) THEN
C     PHI=BRT0
C     TET=LNG0
C     IF (ZT0 .NE. 10.) THEN
C       WRITE (*,*) 'Der Startwert der Trajektorie ist nicht 10 Uhr.
C       . Das Programm bricht an dieser Stelle ab. Bitte setzen sie in die
C       . Trajektorien-Eingabedatei den Startwert auf 10 Uhr zur*ck.'
C       STOP
C     ENDIF
C     LCT=10.
C     GOTO 10
C   ENDIF
C
C   Simulationstage
C
C   PHI=BRT0+(BRT1-BRT0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0)
C   IF ((LNG1 .LT. LNG0) .AND. (LNG1 .LT. LNGX) .AND.
C   . (LNG0 .GT. LNGX)) THEN
C     SCHRITT=((360.-LNG0)+LNG1)/(ZT1-ZT0)
C     ZEIT=(360.-LNG0)/SCHRITT
C     IF ((T-ZT0) .LT. ZEIT) THEN
C       TET=LNG0+(360.-LNG0)/(ZEIT)*(T-ZT0)
C     ELSE
C       TET=0.+(LNG1-0.)/(ZT1-(ZEIT+ZT0))*(T-(ZEIT+ZT0))

```

```

ENDIF
ELSEIF ((LNG1 .GT. LNG0) .AND. (LNG1 .GT. LNGX) .AND.
        (LNG0 .LT. LNGX)) THEN
    SCHRITT=((360.-LNG1)+LNG0)/(ZT1-ZT0)
    ZEIT=(LNG0-0.)/SCHRITT
    IF ((T-ZT0) .LT. ZEIT) THEN
        TET=LNG0+(0.-LNG0)/(ZEIT)*(T-ZT0)
    ELSE
        TET=360+(LNG1-360.)/(ZT1-(ZEIT+ZT0))*(T-(ZEIT+ZT0))
    ENDIF
ELSE
    TET=LNG0+(LNG1-LNG0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0)
ENDIF
IF (TET.GT.360.) TET=TET-360.
LCT=T+TET/15.
IF (LCT.GT.23.99999) LCT=LCT-24.
10 CONTINUE

Bestimmung der Mischungsschichtparameter
-----

HT      = ALTE MISCHUNGSSCHICHTHOEHE
MISCH = AKTUELLE MISCHUNGSSCHICHTHOEHE IN METER
HMAX(IT)= MAXIMALE MISCHUNGSSCHICHTHOEHE
HMIN(IT)= MINIMALE MISCHUNGSSCHICHTHOEHE
THAL(IT)= ZEIT, AN DER MISCH HALBES MAXIMUM ERREICHT
TFAL(IT)= ZEIT, AN DER MISCH WIEDER ABFAELLT
IBA=1 SCHALTER, FALLS BOX1 MIT BOX2 VERSCHMILZT
IBA=2 SCHALTER, FALLS BOX1 UND BOX2 GETRENNT

IF (IMOD .EQ. 1) THEN
    MISCH=1.
    HT=0.
    GOTO 20
ENDIF
HT=MISCH
IF (TFAL(IT) .LE. 0) TFAL(IT)=SUNSET
IF (LCT .LT. SUNRIS) THEN
    MISCH=HMIN(IT)*SQRT((LCT+24.-TFAL(IT))/(SUNRIS+24.-TFAL(IT)))
    MISCH=DMAX1(HT,MISCH)
ELSEIF (LCT .GT. SUNRIS .AND. LCT .LT. TFAL(IT)) THEN
    xmischl=HMAX(IT)/(DEXP(-(LCT-THAL(IT)))+1.)
    xmisch2=HMIN(IT)*SQRT((LCT+24.-TFAL(IT))/(SUNRIS+24.-TFAL(IT)))
    MISCH=DMAX1(xmischl,xmisch2)
    IF (MISCH .GT. 0.99999*HMAX(IT)) THEN
        IBA=1
    ELSE
        IBA=2
    ENDIF
ELSEIF (LCT .GE. TFAL(IT)) then
    MISCH=HMIN(IT)*SQRT((LCT-TFAL(IT))/(SUNRIS+24.-TFAL(IT)))
    IBA=2
ENDIF
20 CONTINUE

Berechnung der Temperatur und des Druckes der Box(en)
-----

IF (IMOD .EQ. 1) THEN
    IF (NSTP .LT. 0) THEN
        TEMP(1)=TMP0
    ELSE
        TEMP(1)=TMP0+(TMP1-TMP0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0)
    ENDIF
    PRES=1013.25*(TEMP(1)/POTTMP)**(1./286)
    MEDIUM(1)=PRES/(RGAS*TEMP(1))
    ALT=ZVONP(PRES)
    ALT=DMAX1(ALT,0.D0)
ELSEIF (IMOD .EQ. 2) THEN
    ALT=((MISCH/2.)/1000.)
    PRES1=PVONZ(ALT)
    TEMP(1)=TVONZ(ALT)/288.15*(TMP0+(TMP1-TMP0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0))
    MEDIUM(1)=PRES1/(RGAS*TEMP(1))
    ALT2=((HMAX(IT)/2.)/1000.)
    IF (ALT2 .LE. 0.) THEN
        PRES2=PRES1
    ELSE
        PRES2=PVONZ(ALT2)
    ENDIF
    TEMP(2)=TVONZ(ALT2)/288.15*(TMP0+(TMP1-TMP0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0))
    MEDIUM(2)=PRES2/(RGAS*TEMP(2))
    MEDIUM(3)=MEDIUM(2)
ENDIF

```

```

C      Bestimmung des Sonnenauf- und -unterganges
C      -----
C      PHIR=PHI*PI/180.
C      TAG=MONTH(MM)+(TT1-1)+10.
C      DECL=-23.44*COS(TAG/365.*2.*PI) *PI/180.
C      ALPHA=SIN(PHIR)*SIN(DECL)
C      BETA=COS(PHIR)*COS(DECL)
C
C      Chi0=ACOS(Alpha-Beta)
C      ChiRis=ACOS(RERD/(RERD+ALT))+PI/2.
C      Chi12=ACOS(Alpha+Beta)
C      If (ChiRis.LE.Chi0) then
C          If (ChiRis.GT.Chi12) then
C              SunRis=ACOS((COS(ChiRis)-Alpha)/Beta)*12./Pi+12.
C              If (SunRis.gt.12) SunRis=24.-SunRis
C          Else
C              SunRis=12.
C          Endif
C      Else
C          SunRis=0.
C      Endif
C      SunSet=24.-SunRis
C
C      Bestimmung des Zenitwinkels
C      -----
C      CHI=SIN(DECL)*SIN(PHIR)+COS(DECL)*COS(PHIR)*COS((LCT-12.)/12.*PI)
C      CHI=ACOS(CHI)
C      if (chi .lt. 0.) write (*,*) chi,'acos'
C
C      Bestimmung der Zeitschritte
C      -----
C
C      IF (IZEIT .EQ. 1) THEN
C
C      Vorlauftag bei konstant 10 Uhr
C
C          IF (NSTP .LT. 0) THEN
C              IF (T .GE. 10.) THEN
C                  NSTP=5*(25-T)
C                  DT=60./NSTP
C              ELSEIF (T .LT. 10.) THEN
C                  NSTP=5
C                  DT=12.
C              ENDIF
C              GOTO 30
C          ENDIF
C
C      Simulationstage
C
C          IF (LCT .LT. SUNRIS) THEN
C              DT=(LCT+SUNRIS)*6.
C          ELSE IF (LCT .GE. SUNRIS .AND. LCT .LE. 12.) THEN
C              DT=(DEXP((ABS(MM-6)*0.2+1.2)*(LCT-SUNRIS)))/1.E+2
C          ELSE IF (LCT .LE. SUNSET .AND. LCT .GT. 12.) THEN
C              DT=(DEXP((ABS(MM-6)*0.2+1.2)*(SUNSET-LCT)))/1.E+2
C          ELSEIF (LCT .GT. SUNSET) THEN
C              DT=(LCT-SUNSET)*6.
C          END IF
C          DT=DMIN1(DT,300.D+0)*THALB
C          NSTP=DMAX1(300.D+0/DT,1.D+0)
C          if (nstp .gt. 500) nstp=500
C          IF (TIME+DT .GT. ZT1*3600.) THEN
C              DT=(ZT1*3600.-TIME+1.0E-3)/3.
C              NSTP=3
C          ENDIF
C
C      ELSEIF (IZEIT .GT. 1) THEN
C
C          Simulationstage+Vorlaufstage
C
C          NSTPALT=NSTP
C          CALL CHEMIE
C          DO IC=0,ICEND+NFAM
C              PP(IC)=P(IC,1)
C              DD(IC)=D(IC,1)
C          ENDDO
C          IF (NSTPALT .LT. 0) THEN
C              CALL ZEITSCHRITT (IZEIT,C,PP,DD,CZEI,DT,NSTP)
C          ELSE
C              CALL ZEITSCHRITT (IZEIT,C,PP,DD,CZEI,DT,NSTP)
C              IF (TIME+DT .GT. ZT1*3600.) DT=ZT1*3600.-TIME+1.0E-3
C          ENDIF

```

```

      ENDIF
C
30 CONTINUE
C
C   FLUESSIGWASSERKONZENTRATION
C
      IF (IWOL .NE. 0) THEN
C
C   HOEHE DER LUFTSCHICHT AUS DER ES REGNET
      IF (IMOD .EQ. 1) THEN
        HWOLKE=200.
      ELSEIF (IMOD .EQ. 2) THEN
        HWOLKE=HMAX(IT)*100.
      ENDIF
C
      TAG DES REGENS
      IF (ITAGR .LT. 0) THEN
        IREGEN=IT
      ELSE
        IREGEN=ITAGR
      ENDIF
C
      BERECHNUNG DER FLUESSIGEN WASSERMENGE UND DER NEUEN
      KONZENTRATIONEN DER SUBSTANZEN IN DER FLUESSIGEN PHASE
      IF (IWOL .EQ. 1) THEN
        IF ((IT .EQ. IREGEN) .AND. ((LCT .GT. TRB) .AND.
          (LCT .LT. TRE)) .AND. WASSER .GT. 0.) THEN
          FAK=RAIN/HWOLKE*DT/WASSER
          WASSER=DMAX1(0.D+0,WASSER*(1.D+0-FAK))
          DO IC=1,ICEND
            IF (CZEI(IC) .LT. 1.998) GOTO 40
            DO I=1,IBOX
              C(IC,I)=C(IC,I)*(1.-FAK)
            ENDDO
            CONTINUE
          ENDDO
          ENDDO
        ELSEIF (IWOL .EQ. 2) THEN
          IF ((IT .EQ. IREGEN) .AND. ((LCT .GT. TRB) .AND.
            (LCT .LT. TRE))) THEN
            WASSER=RAIN/HWOLKE*DT
            DO IC=1,ICEND
              IF (CZEI(IC) .LT. 1.998) GOTO 50
              DO I=1,IBOX
                C(IC,I)=0.
              ENDDO
            CONTINUE
          ENDDO
          ENDDO
        ELSE
          WASSER=0.
        ENDIF
      ENDIF
    ENDIF
  ENDIF
C
C   Bestimmung der Multiplikationsfaktoren der Quellstaerken
C   -----
ccc   ANT=ANT0+(ANT1-ANT0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0)
ccc   BIO=BIO0+(BIO1-BIO0)/(ZT1-ZT0)*(T-ZT0)
      ANT=ANT0
      BIO=BIO0
C
C   Bestimmung der aktuellen Reaktions- und Gleichgewichtskonstanten
C   -----
      DO 29 IB=1,IBOX
      DO 19 IR=1,HREND
        IF (KON(IR,7) .LE. 1.05) THEN
          IF (LCT.GT.SUNRIS .AND. LCT.LT.SUNSET) THEN
            IF (CHI*KON(IR,3) .LT. PI/2.) THEN
              RK(IR,IB)=KON(IR,1)*DEXP(KON(IR,2)*(1.-1./COS(KON(IR,3)
                *CHI)))
            ELSE
              RK(IR,IB)=1.0D-50
            ENDIF
          ELSE
            RK(IR,IB)=1.0D-50
          ENDIF
        ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 2.05) THEN
          RK(IR,IB)=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(IB))
        ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 3.05) THEN
          RK(IR,IB)=KON(IR,1)*(TEMP(IB)/300.)**(-KON(IR,2))
        ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 4.05) THEN
          RK(IR,IB)=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(IB))*(TEMP(IB)/
            300.)**(-KON(IR,3))
        ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 5.05) THEN
          X=KON(IR,1)*(TEMP(IB)/300.)**(-KON(IR,2))*MEDIUM(IB)
          20
        ENDIF
      ENDIF
    ENDIF
  ENDIF

```

```

      Y=X/(KON(IR,3)*(TEMP(IB)/300.))**(-KON(IR,4)))
      RK(IR,IB)=X/(1.+Y)*KON(IR,5)**(1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(IB)
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 6.05) THEN
        X=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(IB))*MEDIUM(IB)
        Y=X/(KON(IR,3)*DEXP(-KON(IR,4)/TEMP(IB)))
        RK(IR,IB)=X/(1.+Y)*KON(IR,5)**(1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(IB)
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 7.05) THEN
        X=KON(IR,1)*DEXP(KON(IR,2)/TEMP(IB))
        Y=KON(IR,3)*DEXP(KON(IR,4)/TEMP(IB))
        Z=KON(IR,5)*DEXP(KON(IR,6)/TEMP(IB))
        RK(IR,IB)=X+(Z*MEDIUM(IB)/(1+(Z*MEDIUM(IB)/Y)))
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 8.05) THEN
        IF (WASSER .GT. 1.0E-25) THEN
          X=KON(IR,1)/(KON(IR,2)+pH)
          RK(IR,IB)=X*1000./(6.022E+23*WASSER)
        ELSE
          RK(IR,IB)=1.0D-99
        ENDIF
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 9.05) THEN
        IF (WASSER .GT. 1.0E-25) THEN
          X=KON(IR,1)+(KON(IR,2)/pH)
          RK(IR,IB)=X*1000./(6.022E+23*WASSER)
        ELSE
          RK(IR,IB)=1.0D-99
        ENDIF
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 10.05) THEN
        IF (WASSER .GT. 1.0E-25) THEN
          GGK(IR)=KON(IR,1)
        ELSE
          GGK(IR)=1.0D-99
        ENDIF
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 11.05) THEN
        IF (WASSER .GT. 1.0E-25) THEN
          X1=KON(IR,2)/pH
          X2=(KON(IR,2)*KON(IR,3))/(pH*pH)
          GGK(IR)=KON(IR,1)*(1.+X1+X2)
        ELSE
          GGK(IR)=1.0D-99
        ENDIF
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 12.05) THEN
        X=KON(IR,1)*((TEMP(IB)/300.))**(-KON(IR,2))*
          DEXP(-KON(IR,3)/TEMP(IB))*MEDIUM(IB)
        Y=X/(KON(IR,4)*((TEMP(IB)/300.))**(-KON(IR,5))*
          DEXP(-KON(IR,6)/TEMP(IB)))
        RK(IR,IB)=X/(1.+Y)*0.33*(1./(1.+(LOG10(Y))**2))/MEDIUM(IB)
      ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 13.05) THEN
        X=KON(IR,1)*DEXP(-KON(IR,2)/TEMP(IB))
        Y=KON(IR,3)*DEXP(-KON(IR,4)/TEMP(IB))
        RK(IR,IB)=X+(Y*MEDIUM(IB))
      ENDIF
19 CONTINUE
29 CONTINUE

      END

      FORTRAN PROGRAMM A U S T A U S C H

      UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER TRANSPORTTERME ZWISCHEN DEN
      BOXEN UND AUS DIESEN HERAUS

      SUBROUTINE AUSTAUSCH

      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NBOX=3)

      DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
      DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
      DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
      DOUBLE PRECISION QU(NCONC),QZEI(NCONC),TRDE(NCONC)
      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)

      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
      COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
      COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
      COMMON /AUSTAU/ QU,QZEI,TRDE

      INITIALISIERUNG DER ANFANGSWERTE FUEER DIE FAMILIEN

      DO I=1,NFAM
        TTP(ICEND+I,1)=0.
        TTP(ICEND+I,2)=0.

```

```

      TTD(ICEND+I,1)=0.
      TTD(ICEND+I,2)=0.
ENDDO
C
C   SCHLEIFE UEBER ALLE SUBSTANZEN
C
DO 9 IC=2,ICEND+NFAM
C
C   NEUE KONZENTRATIONEN BEI KONST. MISCHUNGSVERHAELTNISSEN
C
      C(IC,1)=C(IC,1)/C(1,1)*MEDIUM(1)
      C(IC,2)=C(IC,2)/C(1,2)*MEDIUM(2)
C
      IF (CZEI(IC) .LT. 0.001) GOTO 9
C
C   ENTRAINMENT BEI VARIABLER MISCHUNGSSCHICHTHOEHE
C
      IF (IBA .EQ. 1 .AND. IMOD .EQ. 2) THEN
        C(IC,2)=C(IC,1)
      ELSEIF (IBA .EQ. 2 .AND. HT .LE. MISCH) THEN
        C(IC,1)=(C(IC,1)*HT+C(IC,2)*(MISCH-HT))/MISCH
      ELSEIF (IBA .EQ. 2 .AND. HT .GT. MISCH) THEN
        C(IC,2)=C(IC,1)
        C(IC,1)=1.D-10
      ENDIF
      IF (IC .GT. ICEND) GOTO 10
C
C   BERECHNUNG DER TRANSPORTTERME FUER DIE UNTERE BOX
C   EMISSIONEN
C
      IF (QZEI(IC) .LE. 0.005) THEN
        EM=QU(IC)*ANT/(MISCH*100.)
      ELSEIF (QZEI(IC) .GT. 1.995) THEN
        EM=QU(IC)*BIO/(MISCH*100.)
      ELSE
        EM=0.D0
      ENDIF
C
C   TROCKENE DEPOSITION
C
      TD=TRDE(IC)*C(IC,1)/(MISCH*100.)
C
C   AUSTAUSCH MIT FREIER TROPOSPHAERE
C
C   BERECHNUNG DER TRANSPORTTERME FUER DIE BOXEN 1 UND 2
C
      IF (IMOD .EQ. 1) THEN
        TTP(IC,1)=EM
        TTD(IC,1)=TD
      ELSEIF (IBA .EQ. 2) THEN
        TTP(IC,1)=EM
        TTD(IC,1)=TD
        TTP(IC,2)=KA*C(IC,3)
        TTD(IC,2)=KA*C(IC,2)
      ELSEIF (IBA .EQ. 1) THEN
        TTP(IC,1)=EM+KA*C(IC,3)
        TTD(IC,1)=TD+KA*C(IC,1)
        TTP(IC,2)=0.
        TTD(IC,2)=0.
      ENDIF
C
10   CONTINUE
C
C   BERECHNUNG DER TRANSPORTTERME FUER DIE FAMILIEN IN DEN BOXEN
C
DO 29 IJ=1,NFAM
  NF=FAM(IJ,-1)
  DO 39 IK=1,NF
    IF (IC .EQ. FAM(IJ,IK)) THEN
      TTP(ICEND+IJ,1)=TTP(ICEND+IJ,1)+TTP(IC,1)
      TTD(ICEND+IJ,1)=TTD(ICEND+IJ,1)+TTD(IC,1)
      TTP(ICEND+IJ,2)=TTP(ICEND+IJ,2)+TTP(IC,2)
      TTD(ICEND+IJ,2)=TTD(ICEND+IJ,2)+TTD(IC,2)
    ENDIF
  39   CONTINUE
29   CONTINUE
C
9   CONTINUE
C
      C(1,1)=MEDIUM(1)
      C(1,2)=MEDIUM(2)

```

```

C      RETURN
C      END
*
C
C      FORTRAN PROGRAMM Z E I T S C H R I T T
C
C      UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DES ZEITSCHRITTES
C
C      SUBROUTINE ZEITSCHRITT (IZEIT,C,PP,DD,CZEI,DT,NSTP)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),PP(0:NCONC),DD(0:NCONC)
C      DOUBLE PRECISION PPALT(0:NCONC),DDALT(0:NCONC)
C      DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC)
C      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C
C      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C
C      ccc SAVE
C
C      DTALT=DT
C      DT=2.*DT
C      DTMIN=1.E-03
C      DTMAX=300.
C      EPSchang=0.005
C      EPSroeth=5.0E-4
C
C      IF (IZEIT .EQ. 2) THEN
C
C      Zeitschrittberechnung nach Chang (Umsatzkontrolliert)
C      -----
C
C      DO IC=2,ICEND+NFAM
C        IF (CZEI(IC) .LT. 0.001) GOTO 10
C        IF (C(IC,1)/C(1,1) .LT. 1.00E-14) GOTO 10
C        DO IJ=1,NFAM
C          NF=FAM(IJ,-1)
C          DO IK=1,NF
C            IF (FAM(IJ,IK) .EQ. IC) GOTO 10
C          ENDDO
C          ENDDO
C          Y=DMAX1(ABS(PP(IC)-DD(IC)*C(IC,1)),1.0D-25)
C          DTchang=ABS(EPSchang*C(IC,1)/Y)
C          IF (DTchang .lt. DT) iz=ic
C          DT=DMIN1(DTchang,DT)
C10      CONTINUE
C      ENDDO
C
C      ELSEIF (IZEIT .EQ. 3) THEN
C
C      Zeitschrittberechnung nach Roeth (Fehlerkontrolliert)
C      -----
C
C      IF (NSTP .EQ. 0) THEN
C        DO IC=2,ICEND+NFAM
C          PPALT(IC)=PP(IC)
C          DDALT(IC)=DD(IC)
C        ENDDO
C        DT=1.E-3
C        NSTP=1
C      ELSE
C        DO IC=2,ICEND+NFAM
C          IF (CZEI(IC) .LT. 0.001) GOTO 20
C          IF (C(IC,1)/C(1,1) .LT. 1.00E-14) GOTO 20
C          DO IJ=1,NFAM
C            NF=FAM(IJ,-1)
C            DO IK=1,NF
C              IF (FAM(IJ,IK) .EQ. IC) GOTO 20
C            ENDDO
C          ENDDO
C          IF (DMIN1(170.D+0,DD(IC)*DT) .GT. 1.0E-10 .OR.
C            DMIN1(170.D+0,DDALT(IC)*DT) .GT. 1.0E-10) THEN
C            IF (PP(IC)/DD(IC) .EQ. PPALT(IC)/DDALT(IC)) THEN
C              ALPHA=1.0E-25
C            ELSE
C              ALPHA=ABS(PP(IC)/DD(IC)-PPALT(IC)/DDALT(IC))
C            ENDIF
C            IF (EPSroeth .GT. ALPHA/C(IC,1)) TH123
C            DTroeth=DT

```

```

        ELSE
          DTroeth=(-1./DD(IC))*DLOG(1.D0-EPSroeth*C(IC,1)/ALPHA)
        ENDIF
        IX=1
      ELSE
        IF (PP(IC) .NE. PPALT(IC)) THEN
          DTroeth=EPSroeth*C(IC,1)/(ABS(PP(IC)-PPALT(IC)))
        ENDIF
        IX=2
      ENDIF
      DTroeth=ABS(DTroeth)
      IF (DTroeth .lt. DT) IZ=IC
      DT=DMIN1(DTroeth,DT)
20    CONTINUE
      PPALT(IC)=PP(IC)
      DDALT(IC)=DD(IC)
    ENDDO
  ENDIF
C
  ENDIF
C
ccc  DT=DMIN1((DMAX1((DT+DTALT)/2.,DTMIN)),DTMAX)
      DT=DMIN1((DMAX1(DT,DTMIN)),DTMAX)
      NSTP=1
C
      RETURN
      END
*
C
C   FORTRAN PROGRAMM C H E M I E
C
C   UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER TERME P UND D :
C
C   SUBROUTINE CHEMIE
C
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C   PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C   DOUBLE PRECISION  RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
C   DOUBLE PRECISION  C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C   DOUBLE PRECISION  CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C   INTEGER  FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C   INTEGER  SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
C
C   COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C   COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C   COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
C   COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
C   COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C
C   SCHLEIFE UEBER DIE BOXEN:
C
C   DO 4 IB=1,IBOX
C
C   VORBEREITUNG DER TERME:
C   DO 9 IC=1,ICEND+NFAM
C     P(IC,IB)=0.
C     D(IC,IB)=0.
9  CONTINUE
C
C   SCHLEIFE UEBER DIE REAKTIONEN :
C   DO 19 IR=1,IEND
C     J1=SYM(IR,1)
C     J2=SYM(IR,2)
C     J3=SYM(IR,3)
C     J4=SYM(IR,4)
C     J5=SYM(IR,5)
C     J6=SYM(IR,6)
C     J7=SYM(IR,7)
C     V=RK(IR,IB)*C(J1,IB)*C(J2,IB)*C(J3,IB)
C     D(J1,IB)=D(J1,IB)+V
C     D(J2,IB)=D(J2,IB)+V
C     D(J3,IB)=D(J3,IB)+V
C     P(J4,IB)=P(J4,IB)+V
C     P(J5,IB)=P(J5,IB)+V
C     P(J6,IB)=P(J6,IB)+V
C     P(J7,IB)=P(J7,IB)+V
C
C   DO 29 IJ=1,NFAM
C     IND=0.
C     NF=FAM(IJ,-1)
C     DO 39 IK=1,NF
C       IF (J1 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1.
24

```

```

        IF (J2 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1.
        IF (J3 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1.
        IF (J4 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1.
        IF (J5 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1.
        IF (J6 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1.
        IF (J7 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1.
39      CONTINUE
        IF (IND .LT. 0.) D(ICEND+IJ,IB)=D(ICEND+IJ,IB)-V*IND
        IF (IND .GT. 0.) P(ICEND+IJ,IB)=P(ICEND+IJ,IB)+V*IND
29      CONTINUE
19     CONTINUE
C
      DO 49 IC=2, ICEND+NFAM
        P(IC,IB)=P(IC,IB)+TTP(IC,IB)
        D(IC,IB)=(D(IC,IB)+TTD(IC,IB))/(C(IC,IB)+1.0E-25)
49     CONTINUE
C
      4 CONTINUE
C
      RETURN
      END
*
C
C      FORTRAN PROGRAMM E U L E R
C
C      UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER NEUEN KONZENTRATIONEN
C
C      SUBROUTINE EULER (DT)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
C      DOUBLE PRECISION KON(NREAK,7)
C      DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION GGK(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
C      DOUBLE PRECISION FAK(10),FAK1,FAK2
C      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C      INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
C      INTEGER HREND
C      INTEGER IZA1(NCONC)
C
C      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C      COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
C      COMMON /RKONST/ KON
C      COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
C      COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C      COMMON /WOLKEN/ HREND,GGK,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE ANZAHL DER BOXEN
C
C      DO 4 IB=1,IBOX
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE KONZENTRATIONEN
C
C      DO 9 IC=2,ICEND+NFAM
C      IF (CZEI(IC) .LT. 0.001) GOTO 9
C      CHANGs CHEMICAL SOLVER
C>>      X=DT*P(IC,IB)+(1.D0-DT/2.D0*D(IC,IB)*C(IC,IB))*C(IC,IB)
C>>      Y=1+DT/2.D0*D(IC,IB)*C(IC,IB)
C>>      C(IC,IB)=X/Y
C      X=DMIN1(170.D0,D(IC,IB)*DT)
C      IF (X .GT. 1.0D-10) THEN
C        Y0=P(IC,IB)/D(IC,IB)
C        Y=Y0+(C(IC,IB)-Y0)*DEXP(-X)
C      ELSE
C        Y=P(IC,IB)*DT
C        Y=(Y+C(IC,IB))/(1.+X)
C      ENDIF
C      Y=Y+(TTP(IC,IB)-TTD(IC,IB))*DT
C      C(IC,IB)=DMAX1(1.0D-25,Y)
C      9 CONTINUE
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE FAMILIEN
C
C      DO 19 J=1,NFAM
C      NF=FAM(J,-1)
C      SUM=0.
C      DO 29 I=1,NF
C      IFA=FAM(J,I)
C      IZA1(IFA)=1

```

```

        SUM=SUM+C(IFA,IB)
29    CONTINUE
        IFA=FAM(J,0)
        FAK(J)=C(IFA,IB)/SUM
19    CONTINUE
        DO 39 J=1,NFAM
            NF=FAM(J,-1)
            DO 44 I=1,NF
                IFA=FAM(J,I)
                IF (IZA(IFA) .EQ. 1) THEN
                    C(IFA,IB)=C(IFA,IB)*FAK(J)
                ELSEIF (IZA(IFA) .GT. 1 .AND. IZA1(IFA) .NE. 0) THEN
                    FAK1=0.
                    FAK2=0.
                    DO 46 IJ=1,IZA(IFA)
                        FAK1=FAK1+FAK(IZF(IFA,IJ))/C(FAM(J,0),IB)
                        FAK2=FAK2+(1./C(FAM(J,0),IB))
46        CONTINUE
                    C(IFA,IB)=C(IFA,IB)*FAK1/FAK2
                    IZA1(IFA)=0
                ENDIF
                C(IFA,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(IFA,IB))
44    CONTINUE
39    CONTINUE

```

C
C
C

SCHLEIFE UEBER DIE HETEROGENEN GLEICHGEWICHTSREAKTIONEN

```

IF (WASSER .GT. 1.E-25) THEN
DO 49 IR=IREND+1,HREND
    IF (KON(IR,7) .LT. 10.05) THEN
        J1=SYM(IR,1)
        J4=SYM(IR,4)
        CGES=C(J1,IB)+C(J4,IB)
        VER=1.+GGK(IR)*(6.022E+23*WASSER)/(1000.*MEDIUM(1))
        C(J1,IB)=CGES/VER
        C(J4,IB)=CGES-C(J1,IB)
        C(J1,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J1,IB))
        C(J4,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J4,IB))
    ELSE
        J1=SYM(IR,1)
        J4=SYM(IR,4)
        J5=SYM(IR,5)
        J6=SYM(IR,6)
        CGES=C(J1,IB)+C(J4,IB)+C(J5,IB)+C(J6,IB)
        VER=1.+GGK(IR)*(6.022E+23*WASSER)/(1000.*MEDIUM(1))
        VER1=KON(IR,1)/GGK(IR)
        VER2=(KON(IR,1)*KON(IR,2))/(pH*GGK(IR))
        VER3=KON(IR,1)*KON(IR,2)*KON(IR,3)/(pH*pH*GGK(IR))
        C(J1,IB)=CGES/VER
        C(J4,IB)=(CGES-C(J1,IB))*VER1
        C(J5,IB)=(CGES-C(J1,IB))*VER2
        C(J6,IB)=(CGES-C(J1,IB))*VER3
        C(J1,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J1,IB))
        C(J4,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J4,IB))
        C(J5,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J5,IB))
        C(J6,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(J6,IB))
    ENDIF
49 CONTINUE
ENDIF

```

C
C
C

NEUE SCHLEIFE UEBER DIE FAMILIEN ZUR KONZENTRATIONSANPASSUNG

```

DO 59 J=1,NFAM
    NF=FAM(J,-1)
    SUM=0.
    DO 69 I=1,NF
        IFA=FAM(J,I)
        SUM=SUM+C(IFA,IB)
69    CONTINUE
        IFA=FAM(J,0)
        C(IFA,IB)=SUM
        C(IFA,IB)=DMAX1(1.0D-25,C(IFA,IB))
59 CONTINUE

```

C
C

4 CONTINUE

RETURN
END

*
C
C
C
C

FORTRAN PROGRAMM O U T P U T

UNTERPROGRAMM ZUR AUSGABE DER KONZENTRATIONEN AUF DEN DRUCKER

```

C      SUBROUTINE OUTPUT (TIME,TEMP,PHI,TET,CHI,ISW)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NTIME=2200,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION GGK(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
C      DOUBLE PRECISION TEMP(NBOX)
C      DOUBLE PRECISION COUT(0:NCONC,NTIME)
C      INTEGER SUMSYM(10,0:10,2)
C      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C      INTEGER HREND
C      CHARACTER*8 CTEXT(0:NCONC)
C
C      DOUBLE PRECISION T(NTIME),TEM(NTIME),LAENGE(NTIME),BREITE(NTIME)
C      DOUBLE PRECISION ZENIT(NTIME)
C
C      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C      COMMON /CHECK / SUMSYM,NSUM
C      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C      COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C      COMMON /WOLKEN/ HREND,GGK,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR
C      COMMON /ZEICHN/ CTEXT
C
C      SAVE
C      DATA KZEIT /0/
C
C      1 FORMAT (/, ' Mixing Ratios : ' /)
C      2 FORMAT (A19,8X,I5,A12,9X,I3,A21,I3)
C      3 FORMAT (14X,10(4X,A8)/(14X,10(4X,A8)))
C      4 FORMAT (14X,10(4X,A8))
C      5 FORMAT ( ' t= ',I2, ' : ',I2, ' , ',I2, ' UT ',1P10E12.2)
C      6 FORMAT ( ' T= ',F6.1, ' K ',3X,1P10E12.2)
C      7 FORMAT (F5.1, ' N/ ',F5.1, ' E ',1P,10E12.2)
C      8 FORMAT (F5.1, ' ø ',7X,1P10E12.2/(14X,10E12.2))
C
C      GOTO (10,100),ISW
C
C      SPEICHERN DER DATEN:
C
C      10 CONTINUE
C      KZEIT=KZEIT+1
C      IF (KZEIT .GT. NTIME) THEN
C      IF (KZEIT .EQ. NTIME+1)
C      WRITE (16,*) ' vorzeitiger Abbruch, da KZEIT > NTIME'
C      RETURN
C      ENDIF
C      COUT(0,KZEIT)=WASSER
C      DO 9 IC=1,ICEND+NFAM
C      COUT(IC,KZEIT) = C(IC,1)
C      9 CONTINUE
C      DO 19 IC=ICEND+NFAM+1,ICEND+NFAM+NSUM
C      COUT(IC,KZEIT) = 0.
C      ICSUM=IC-ICEND-NFAM
C      DO 29 IS=1,SUMSYM(ICSUM,0,2)
C      IL=SUMSYM(ICSUM,IS,1)
C      COUT(IC,KZEIT)=COUT(IC,KZEIT)+SUMSYM(ICSUM,IS,2)*C(IL,1)
C      29 CONTINUE
C      19 CONTINUE
C      T(KZEIT) = TIME
C      TEM(KZEIT) = TEMP(1)
C      LAENGE(KZEIT) = PHI
C      BREITE(KZEIT) = TET
C      ZENIT(KZEIT) = DMIN1(CHI*180./3.1415927,99.9)
C
C      Ausgabe der Daten auf die temporären Dateien
C      outconc.tmp / outprod.tmp / outdest/tmp
C
C      IF (KZEIT .EQ. 1) THEN
C
C      OPEN (30,file='outconc.tmp')
C      WRITE (30,1)
C      WRITE (30,2) 'Anzahl Zeitpunkte: ',KZEIT,' Substanzen:',
C      (ICEND+NFAM+NSUM+1)
C      WRITE (30,3) 'WASSER ',(CTEXT(IC),IC=1,ICEND+NFAM+NSUM)
C      WRITE (30,*)
C
C      OPEN (31,file='outprod.tmp')
C      WRITE (31,1)
C      WRITE (31,2) 'Anzahl Zeitpunkte: ',KZEIT,' Substanzen:',
C      (ICEND+NFAM+NSUM+1)

```

```

C      WRITE (31,3) 'WASSER  ', (CTEXT(IC), IC=1, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (31,*)
C
C      OPEN (32,file='outdest.tmp')
      WRITE (32,1)
      WRITE (32,2) 'Anzahl Zeitpunkte: ', KZEIT, ' Substanzen:',
      (ICEND+NFAM+NSUM+1)
      WRITE (32,3) 'WASSER  ', (CTEXT(IC), IC=1, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (32,*)
C
C      ELSE
C
C      KTEMP=KZEIT
      IST=T(KTEMP)/3600.
      MIN=(T(KTEMP)-IST*3600.)/60.
      ISEC=(T(KTEMP)-IST*3600-MIN*60)
      AIR=COUT(1, KTEMP)
      WASSER=COUT(0, KTEMP)
C
      WRITE (30,5) IST, MIN, ISEC, WASSER, AIR, (COUT(IC, KTEMP)/AIR,
      IC=2,9)
      WRITE (30,6) TEM(KTEMP), (COUT(IC, KTEMP)/AIR, IC=10,19)
      WRITE (30,7) LAENGE(KTEMP), BREITE(KTEMP),
      (COUT(IC, KTEMP)/AIR, IC=20,29)
      WRITE (30,8) ZENIT(KTEMP), (COUT(IC, KTEMP)/AIR,
      IC=30, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (30,*)
      WRITE (30,*)
C
      WRITE (31,5) IST, MIN, ISEC, WASSER, AIR, (P(IC,1), IC=2,9)
      WRITE (31,6) TEM(KTEMP), (P(IC,1), IC=10,19)
      WRITE (31,7) LAENGE(KTEMP), BREITE(KTEMP), (P(IC,1), IC=20,29)
      WRITE (31,8) ZENIT(KTEMP), (P(IC,1)/AIR, IC=30, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (31,*)
      WRITE (31,*)
C
      WRITE (32,5) IST, MIN, ISEC, WASSER, AIR, (D(IC,1), IC=2,9)
      WRITE (32,6) TEM(KTEMP), (D(IC,1), IC=10,19)
      WRITE (32,7) LAENGE(KTEMP), BREITE(KTEMP), (D(IC,1), IC=20,29)
      WRITE (32,8) ZENIT(KTEMP), (D(IC,1)/AIR, IC=30, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (32,*)
      WRITE (32,*)
C
C      ENDIF
C
C      RETURN
C
C      DRUCKEN DER DATEN
C
100 CONTINUE
      WRITE (16,1)
      WRITE (16,2) 'Anzahl Zeitpunkte: ', KZEIT, ' Substanzen:',
      (ICEND+NFAM+NSUM+1)
      WRITE (16,3) 'WASSER  ', (CTEXT(IC), IC=1, ICEND+NFAM+NSUM)
      WRITE (16,*)
      DO 109 K=1, KZEIT
        IST=T(K)/3600.
        MIN=(T(K)-IST*3600.)/60.
        ISEC=(T(K)-IST*3600-MIN*60)
        AIR=COUT(1, K)
        WASSER=COUT(0, K)
        WRITE (16,5) IST, MIN, ISEC, WASSER, AIR, (COUT(IC, K)/AIR,
        IC=2,9)
        WRITE (16,6) TEM(K), (COUT(IC, K)/AIR, IC=10,19)
        WRITE (16,7) LAENGE(K), BREITE(K), (COUT(IC, K)/AIR, IC=20,29)
        WRITE (16,8) ZENIT(K), (COUT(IC, K)/AIR, IC=30, ICEND+NFAM+NSUM)
        WRITE (16,*)
        WRITE (16,*)
      109 CONTINUE
C
      RETURN
      END
*
C
C      FORTRAN PROGRAMM D I A G N
C
C      UNTERPROGRAMM ZUR DIAGNOSE. DAS PROGRAMM ERRECHNET FUER ALLE
C      SUBSTANZEN DIE PRODUKTIONS- UND DESTRUKTIONSFLUESSE.
C
C      SUBROUTINE DIAGN (IDD, TKRIT, DIATIME)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)          28
      PARAMETER (NCONC=100, NREAK=200, NSUB=7, NBOX=3)

```

```

C      DOUBLE PRECISION  RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
DOUBLE PRECISION  C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION  CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION  FLD(NCONC,NREAK,4),FLP(NCONC,NREAK,4)
DOUBLE PRECISION  CDIA(NCONC,4),PROD(NCONC,4),DEST(NCONC,4)
DOUBLE PRECISION  FLDR(NCONC,150,4),FLPR(NCONC,150,4),LB(NCONC,4)
DOUBLE PRECISION  LBE(NCONC,4),TI(4),ZUSAM(NCONC,4),VS(NREAK,4)
INTEGER  FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
INTEGER  SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
INTEGER  GESP(NREAK,NCONC,4),GESD(NREAK,NCONC,4),GES
INTEGER  LBEMIN(NCONC,4),KENN(NCONC,4)
INTEGER  NRD(NREAK),NRP(NREAK),EDD(NREAK,3),PRD(NREAK,NSUB-3),
      EDP(NREAK,3),PRP(NREAK,NSUB-3)
INTEGER  JP(NCONC,NREAK,4),JD(NCONC,NREAK,4)
CHARACTER*8  TXT(0:NCONC)
CHARACTER*3  WX(0:4)
CHARACTER*10  ART(1:3)
CHARACTER*11  VER(1:3)

C
COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
COMMON /ZEICHN/ TXT

C
ccc  SAVE
C
DATA WX /'***','***','** ','* ',' ' /
DATA ART /'Steady-St.',' ' zeitab. ',' konstant '/
DATA VER /' ' 'Produktion ','Destruktion'/

C
1 FORMAT (' Diagnose f•r',3X,A8,' mit Konz. =',33X,
      4(1P,E14.2), '[cm-3]')
2 FORMAT (' Produktionen :')
3 FORMAT (I5,3X,2(A8,'+'),A8,'-->',3(A8,'+'),A8,
      1P,4(2P,F11.2,A3), '[%]')
4 FORMAT (52X,'Gesamtproduktion =',4(1P,E14.2), '[cm-3*s-1]')
5 FORMAT (' Destruktionen:')
6 FORMAT (52X,'Gesamtdestruktion=',4(1P,E14.2), '[cm-3*s-1]')
7 FORMAT (' Lebensdauer f•r ein Molek•l',3X,A8,
      ' nach [C/D]',19X,4(1P,E14.2), '[s]')
8 FORMAT (' Lebensdauer f•r',3X,A8,12X,
      ' nach [C/(P-D)]',15X,4(1P,E14.2), '[s]')
11 FORMAT (' Die Substanz-Konz. f•r einen kritischen ',
      ' Zeitschritt von ',F4.0,' s ist: ',5X,A10,4X,A10,4X,A10,4X,A10)
12 FORMAT (' Die Substanz-Konz. f•r einen kritischen ',
      ' Zeitschritt von ',F4.0,' Min ist: ',3X,A10,4X,A10,4X,A10,4X,A10)
13 FORMAT (' Die Substanz-Konz. f•r einen kritischen ',
      ' Zeitschritt von ',F4.0,' h ist: ',5X,A10,4X,A10,4X,A10,4X,A10)
14 FORMAT (71X,4(F10.2,' Uhr'))
15 FORMAT (///,' *****',/,
      ' Reaktionssystem:',48X,'Summe der Sternchen')
16 FORMAT (I5,3X,2(A8,'+'),A8,'-->',3(A8,'+'),A8,I5,4(1P,E14.2))
17 FORMAT (' KenngröÖe [P/D]',52X,4(1P,E14.2))
18 FORMAT (' Vermutlich kann bei der Analyse vernachlaessigt ',
      ' werden:',18X,A11,3X,A11,3X,A11,3X,A11)

C
OPEN (19,FILE='diagn.dat') ! Diagnose

C
WRITE (6,*) ' Diagnose',idd

C
IST=DIATIME/3600.
MIN=(DIATIME-IST*3600.)/60.
TI(IDD)=IST+MIN/100.

C
C
BESTIMMUNG DER GRENZEN DES KRITISCHEN ZEITSCHRITTES

C
TKRITMIN=0.05*TKRIT
TKRITMAX=50.*TKRIT
TKRITMAX=DMIN1(TKRITMAX,86400.D0)

C
C
INITIALISIERUNG DER ANFANGSWERTE

C
ISA=2
IDDE=4
ISE=ICEND+NFAM
IND=0

C
C
SCHLEIFE UEBER ALLE SUBSTANZEN

C
DO 9 IS=ISA,ISE

```

```

C
C   INITIALISIERUNG ALLER SUMMEN, DIE FUEER DIE SUBSTANZ NOETIG SIND
      DO IR=1,IREND
        GESD(IR,IS,IDD)=0
        GESD(IR,IS,IDD)=0
      ENDDO
      IF (CZEI(IS) .LT. .0001) GOTO 19
      CDIA(IS,IDD)=C(IS,1)
      PROD(IS,IDD)=0.
      DEST(IS,IDD)=0.
      ZUSAM(IS,IDD)=0
      ID=0
      IP=0

C
C   SCHLEIFE UEBER ALLE REAKTIONEN
      DO 29 IR=1,IREND
        J1=SYM(IR,1)
        J2=SYM(IR,2)
        J3=SYM(IR,3)
        J4=SYM(IR,4)
        J5=SYM(IR,5)
        J6=SYM(IR,6)
        J7=SYM(IR,7)
        V=RK(IR,1)*C(J1,1)*C(J2,1)*C(J3,1)
        VS(IR,IDD)=V
        IF (IS .GT. ICEND) THEN
          IJ=IS-ICEND
          NF=FAM(IJ,-1)
          IND=0
          DO 39 IK=1,NF
            IF (J1 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1
            IF (J2 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1
            IF (J3 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND-1
            IF (J4 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1
            IF (J5 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1
            IF (J6 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1
            IF (J7 .EQ. FAM(IJ,IK)) IND=IND+1
          39 CONTINUE
          V=V*ABS(IND)
        END IF

C
C   ERKENNEN, OB AKTUELLE SUBSTANZ EDUKT DER AKTUELLEN REAKTION
      IF (J1.EQ.IS .OR. J2.EQ.IS .OR. J3.EQ.IS .OR. IND.LT.0) THEN
        ID=ID+1
        NRD(ID)=IR
        EDD(ID,1)=J1
        EDD(ID,2)=J2
        EDD(ID,3)=J3
        PRD(ID,1)=J4
        PRD(ID,2)=J5
        PRD(ID,3)=J6
        PRD(ID,4)=J7
        FLD(IS,ID,IDD)=V
        DEST(IS,IDD)=DEST(IS,IDD)+V
        IF (J1 .EQ. J2 .AND. J2 .NE. 0 .AND. J2 .EQ. IS) THEN
          DEST(IS,IDD)=DEST(IS,IDD)+V
        ELSEIF (J2 .EQ. J3 .AND. J3 .NE. 0 .AND. J3 .EQ. IS) THEN
          DEST(IS,IDD)=DEST(IS,IDD)+V
        ENDIF
      END IF

C
C   ERKENNEN, OB AKTUELLE SUBSTANZ EDUKT DER AKTUELLEN REAKTION
      IF (J4.EQ.IS .OR. J5.EQ.IS .OR. J6.EQ.IS .OR. J7.EQ.IS
        .OR. IND.GT.0) THEN
        IP=IP+1
        NRP(IP)=IR
        EDP(IP,1)=J1
        EDP(IP,2)=J2
        EDP(IP,3)=J3
        PRP(IP,1)=J4
        PRP(IP,2)=J5
        PRP(IP,3)=J6
        PRP(IP,4)=J7
        FLP(IS,IP,IDD)=V
        PROD(IS,IDD)=PROD(IS,IDD)+V
        IF (J4 .EQ. J5 .AND. J5 .NE. 0 .AND. J5 .EQ. IS) THEN
          PROD(IS,IDD)=PROD(IS,IDD)+V
        ELSEIF (J5 .EQ. J6 .AND. J6 .NE. 0 .AND. J6 .EQ. IS) THEN
          PROD(IS,IDD)=PROD(IS,IDD)+V
        ELSEIF (J6 .EQ. J7 .AND. J7 .NE. 0 .AND. J7 .EQ. IS) THEN
          PROD(IS,IDD)=PROD(IS,IDD)+V
        ENDIF
      END IF

```

49 CONTINUE
29 CONTINUE

C
C
C

AUSGABE DER KOPFZEILE FUER DIE AKTUELLE SUBSTANZ

```
IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
  WRITE (19,*)
  WRITE (19,*)
  WRITE (19,*) '-----'
  WRITE (19,14) (TI(IDDL),IDDL=1,IDDE)
  WRITE (19,1) TXT(IS),(CDIA(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
  WRITE (19,2)
ENDIF
```

C
C
C

SCHLEIFE UEBER ALLE PRODUKTIONSREAKTIONEN DIESER SUBSTANZ

```
DO 59 I=1,IP
  J1=EDP(I,1)
  J2=EDP(I,2)
  J3=EDP(I,3)
  J4=PRP(I,1)
  J5=PRP(I,2)
  J6=PRP(I,3)
  J7=PRP(I,4)
  XFLP=FLP(IS,I,IDDL)
  IF (J4 .EQ. J5 .AND. J5 .NE. 0 .AND. J5 .EQ. IS) THEN
    XFLP=XFLP+FLP(IS,I,IDDL)
  ELSEIF (J5 .EQ. J6 .AND. J6 .NE. 0 .AND. J6 .EQ. IS) THEN
    XFLP=XFLP+FLP(IS,I,IDDL)
  ELSEIF (J6 .EQ. J7 .AND. J7 .NE. 0 .AND. J7 .EQ. IS) THEN
    XFLP=XFLP+FLP(IS,I,IDDL)
  ENDIF
  FLPR(IS,I,IDDL)=XFLP/(PROD(IS,IDDL)+1.0E-33)
  J=-LOG10(FLPR(IS,I,IDDL))+1
  J=MIN0(4,J)
  jp(is,i,idl)=J
  GESP(NRP(I),IS,IDDL)=GESP(NRP(I),IS,IDDL)+(4-J)
  IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
    WRITE (19,3) NRP(I),TXT(J1),TXT(J2),TXT(J3),TXT(J4),TXT(J5),
    .   TXT(J6),TXT(J7),(FLPR(IS,I,IDDL),wx(jp(is,i,idl))),
    .   IDDL=1,IDDE)
  ENDIF
59 CONTINUE
  WRITE (19,4) (PROD(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
  IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
    WRITE (19,5)
  ENDIF
```

C
C
C

SCHLEIFE UEBER ALLE DESTRUKTIONSREAKTIONEN DIESER SUBSTANZ

```
DO 69 I=1,ID
  J1=EDD(I,1)
  J2=EDD(I,2)
  J3=EDD(I,3)
  J4=PRD(I,1)
  J5=PRD(I,2)
  J6=PRD(I,3)
  J7=PRD(I,4)
  XFLD=FLD(IS,I,IDDL)
  IF (J1 .EQ. J2 .AND. J2 .NE. 0 .AND. J2 .EQ. IS) THEN
    XFLD=XFLD+FLD(IS,I,IDDL)
  ELSEIF (J2 .EQ. J3 .AND. J3 .NE. 0 .AND. J3 .EQ. IS) THEN
    XFLD=XFLD+FLD(IS,I,IDDL)
  ENDIF
  FLDR(IS,I,IDDL)=XFLD/(DEST(IS,IDDL)+1.00E-33)
  J=-LOG10(FLDR(IS,I,IDDL))+1
  J=MIN0(4,J)
  jd(is,i,idl)=J
  GESD(NRD(I),IS,IDDL)=GESD(NRD(I),IS,IDDL)+(4-J)
  IF ((ZUSAM(IS,IDDL).EQ.0).AND.(FLDR(IS,I,IDDL).GT..98)) THEN
    ZUSAM(IS,IDDL)=I
  ENDIF
  IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
    WRITE (19,3) NRD(I),TXT(J1),TXT(J2),TXT(J3),TXT(J4),TXT(J5),
    .   TXT(J6),TXT(J7),(FLDR(IS,I,IDDL),wx(jd(is,i,idl))),
    .   IDDL=1,IDDE)
  ENDIF
69 CONTINUE
```

C
C
C

AUSGABE DER LEBENSZEITEN, BERECHNUNGSART USW.

```
WRITE (19,6) (DEST(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE);31
LB(IS,IDDL)=CDIA(IS,IDDL)/(DEST(IS,IDDL)+1.00E-33)
```

```

C      LBE(IS,IDD)=CDIA(IS,IDD)/(DEST(IS,IDD)-PROD(IS,IDD)+1.00E-33)
C
C      IF (PROD(IS,IDD)/(DEST(IS,IDD)+1.00E-33) .LT. 1.E-5) THEN
C          KENN(IS,IDD)=2
C      ELSEIF (PROD(IS,IDD)/(DEST(IS,IDD)+1.00E-33) .GT. 1.E+5) THEN
C          KENN(IS,IDD)=3
C      ELSE
C          KENN(IS,IDD)=1
C      ENDIF
C
C      IF ((ABS(LB(IS,IDD)) .LT. TKRITMIN) .AND. (ABS(LBE(IS,IDD))
C          .GT. TKRITMAX)) THEN
C          LBEMIN(IS,IDD)=1
C      ELSEIF ((ABS(LB(IS,IDD)) .GT. TKRITMAX) .AND. (ABS(LBE(IS,IDD))
C          .GT. TKRITMAX)) THEN
C          LBEMIN(IS,IDD)=3
C      FALLS SUBSTANZKONZENTRATION KONSTANT, WERDEN STERNE
C      NICHT MITGEZAEHLT
C      DO I=1,IP
C      GESP(NRP(I),IS,IDD)=0
C      ENDDO
C      DO I=1,ID
C      GESD(NRD(I),IS,IDD)=0
C      ENDDO
C      ELSE
C          LBEMIN(IS,IDD)=2
C      ENDIF
C
C      IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
C          WRITE (19,*)
C          WRITE (19,7) TXT(IS),(LB(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
C          WRITE (19,8) TXT(IS),(LBE(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
C          IF (TKRIT .LT. 60.) THEN
C              WRITE (19,11) TKRIT,(ART(LBEMIN(IS,IDDL)),IDDL=1,IDDE)
C          ELSEIF (TKRIT .LT. 3600.) THEN
C              TKRITm=TKRIT/60.
C              WRITE (19,12) TKRITm,(ART(LBEMIN(IS,IDDL)),IDDL=1,IDDE)
C          ELSEIF (TKRIT .GE. 3600.) THEN
C              TKRITH=TKRIT/3600.
C              WRITE (19,13) TKRITH,(ART(LBEMIN(IS,IDDL)),IDDL=1,IDDE)
C          ENDIF
C          WRITE (19,17) ((PROD(IS,IDDL)/(DEST(IS,IDDL)+1.00E-33)),
C              IDDL=1,IDDE)
C          WRITE (19,18) (VER(KENN(IS,IDDL)),IDDL=1,IDDE)
C          IF ((ZUSAM(IS,1) .EQ. ZUSAM(IS,2)) .AND.
C              (ZUSAM(IS,1) .EQ. ZUSAM(IS,3)) .AND.
C              (ZUSAM(IS,1) .EQ. ZUSAM(IS,4)) .AND.
C              (ZUSAM(IS,1) .NE. 0.)) THEN
C              WRITE (19,*) ' Vermutlich kann die Substanz ',TXT(IS),
C              ' durch ihr Folgeprodukt ersetzt werden, da der Abbau ',
C              ' zu mehr als 98% ueber eine einzige Reaktion erfolgt.'
C          ENDIF
C      ENDIF
C
C      19 CONTINUE
C      9 CONTINUE
C
C      AUSGABE DES REAKTIONSSYSTEMS MIT DER SUMME DER STERNCHEN
C
C      IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
C          WRITE (19,15)
C          DO 109 IR=1,IEND
C              GES=0
C              J1=SYM(IR,1)
C              J2=SYM(IR,2)
C              J3=SYM(IR,3)
C              J4=SYM(IR,4)
C              J5=SYM(IR,5)
C              J6=SYM(IR,6)
C              J7=SYM(IR,7)
C              V=RK(IR,1)*C(J1,1)*C(J2,1)*C(J3,1)
C              DO IS=ISA,ISE
C                  DO IDDL=1,IDDE
C                      GES=GES+GESP(IR,IS,IDDL)+GESD(IR,IS,IDDL)
C                  ENDDO
C              ENDDO
C              WRITE (19,16) IR,TXT(J1),TXT(J2),TXT(J3),TXT(J4),TXT(J5),
C                  TXT(J6),TXT(J7),GES,(VS(IR,I),I=1,IDDE)
C          109 CONTINUE
C      ENDIF
C
C      CLOSE (UNIT=19)

```



```

DO 10 IC=ISA,ISE
  IF ((CZEI(IC) .LT. 2.001) .OR. (IC .LT. 2)) GOTO 10
  IF (C(IC,1) .LE. 1.05D-25) GOTO 10
  IF (P(IC,1) .LT. 1.05D-25) GOTO 10
  IF (D(IC,1) .LT. 1.05D-25) GOTO 10
ccc  IF (ABS(C(IC,1)/(P(IC,1)-D(IC,1)*C(IC,1))) .GT. TKRIT) GOTO 10
ccc  IF (ABS(1./D(IC,1)) .GT. TKRIT) GOTO 10
      NSUBST=NSUBST+1
      ISUB(NSUBST)=IC
10   CONTINUE
      write (*,*) nsubst
C
C   BERECHNUNG DES BASISLAUFES (FUER KONZ. UND REAK. GLEICH)
C   -----
C
C   I=2
C
DO IR=1,IEND
  RKR(IR)=RK(IR,1)
ENDDO
DO IC=0,ICEND+NFAM
  CSEN(IC,2)=C(IC,1)
ENDDO
C
ccc DO WHILE (ZEIT .LT. TKRIT)
  DO II=1,ITKRIT/10
    DT=10.
    CALL PRODES (I)
ccc   CALL ZEITSCHRITT (IZEIT,CSEN,PROS,DESS,CZEI,DT,NSTP)
    CALL EUSEN (1,I,NSUBST,ISUB,DT)
ccc   ZEIT=ZEIT+DT
  ENDDO
ccc ENDDO

C
C   SCHLEIFE UEBER JEDE REAKTION BEI AENDERUNG DER GESCHWINDIGKEITSKON.
C   -----
C
DO 9 IS=1,IEND
C
C   BESTIMMUNG DER GRENZEN DES INTERVALLS
C
IF (RKUN(IS) .GT. 0.D0) THEN
  DELT(1)=(1.+RKUN(IS))
  DELT(2)=1.
  DELT(3)=1./(1.+RKUN(IS))
ELSE
  DELT(1)=(1.+DELTA)
  DELT(2)=1.
  DELT(3)=(1.-DELTA)
ENDIF
C
C   SCHLEIFE UEBER DIE DREI FAELLE
C
DO 19 I=1,3
C
C   VORBEREITUNG DER TERME:
C
DO IR=1,IEND
  RKR(IR)=RK(IR,1)
ENDDO
DO IC=0,ICEND+NFAM
  CSEN(IC,I)=C(IC,1)
ENDDO
C
IF (I .EQ. 2) GOTO 19
C
RKR(IS)=RK(IS,1)*DELT(I)
ccc ZEIT=0.
ccc DO WHILE (ZEIT .LT. TKRIT)
  DO II=1,ITKRIT/10
    DT=10.
    CALL PRODES (I)
ccc   CALL ZEITSCHRITT (IZEIT,CSEN,PROS,DESS,CZEI,DT,NSTP)
    CALL EUSEN (1,I,NSUBST,ISUB,DT)
ccc   ZEIT=ZEIT+DT
  ENDDO
ccc ENDDO
C
19 CONTINUE
C
cccaltdo 29 JS=ISA,ISE
      DO 29 JJ=1,NSUBST

```

```

        JS=ISUB(JJ)
        SR(IS,JS,IDD)=(CSEN(JS,1)-CSEN(JS,3))/CSEN(JS,2)*1./
            (DELT(1)-DELT(3))
        UNSR(IS,JS,IDD)=((CSEN(JS,1)-CSEN(JS,3))/2.)*2.
29 CONTINUE
C
    9 CONTINUE
C
cccaltdo JS=ISA,ISE
    DO JJ=1,NSUBST
        JS=ISUB(JJ)
        GESUNR(JS,IDD)=0.
        DO IS=1,IEND
            GESUNR(JS,IDD)=GESUNR(JS,IDD)+UNSR(IS,JS,IDD)
ccc    write (99,*) 'BEITRAG VON ',IS,' ZU ',CTEXT(JS),UNSR(IS,JS,IDD)
        ENDDO
        GESUNR(JS,IDD)=SQRT(GESUNR(JS,IDD))
        GESUNR(JS,IDD)=GESUNR(JS,IDD)/C(JS,1)*100.
    ENDDO
C
    IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
        OPEN (20,FILE='sensiind.rk') ! Sensitivitaetsanalyse RK
        Write (20,*) 'Normierte Sensitivitaetskoeffizienten bez.glich',
            ' RK'
cccaltdo 49 IS=ISA,ISE
    DO 49 JJ=1,NSUBST
        IS=ISUB(JJ)
        WRITE (20,*)
        WRITE (20,*)
        WRITE (20,*) '-----'
        WRITE (20,14) (TI(IDDL),IDDL=1,IDDE)
        WRITE (20,1) CTEXT(IS)
        DO 59 JS=1,IEND
            J1=SYM(JS,1)
            J2=SYM(JS,2)
            J3=SYM(JS,3)
            J4=SYM(JS,4)
            J5=SYM(JS,5)
            J6=SYM(JS,6)
            J7=SYM(JS,7)
            WRITE (20,3) JS,CTEXT(J1),CTEXT(J2),CTEXT(J3),CTEXT(J4),
                CTEXT(J5),CTEXT(J6),CTEXT(J7),(SR(JS,IS,IDDL),
                wx(DMIN1(-DLOG10(ABS(SR(JS,IS,IDDL))+1.D-33)+1.D0,4.D0)),
                IDDL=1,IDDE)
59          CONTINUE
            WRITE (20,5) 'Gesamtunsicherheit durch die Fehler in den ',
                'Reaktionskonstanten betr„gt:',
                (GESUNR(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
49        CONTINUE
        CLOSE (UNIT=20)
    ENDIF
C
C    SCHLEIFE UEBER ALLE SUBSTANZEN BEI AENDERUNG DER KONZENTRATIONEN
C    -----
cccaltdo 1009 IS=ISA,ISE
    DO 1009 JJ=1,NSUBST
        IS=ISUB(JJ)
C
C    BESTIMMUNG DER GRENZEN DES INTERVALLS
C
    IF (UNCONC(IS) .GT. 1.D0) THEN
        DELT(1)=UNCONC(IS)
        DELT(2)=1.
        DELT(3)=1./UNCONC(IS)
    ELSE
        DELT(1)=(1.+DELTA)
        DELT(2)=1.
        DELT(3)=(1.-DELTA)
    ENDIF
C
C    SCHLEIFE UEBER DIE DREI FAELLE
C
    DO 1019 I=1,3
C
C    VORBEREITUNG DER TERME:
C
        DO IR=1,IEND
            RKR(IR)=RK(IR,1)
        ENDDO
        DO IC=0,ICEND+NFAM
            CSEN(IC,I)=C(IC,1)
        ENDDO

```

```

C      IF (I .EQ. 2) GOTO 1019
C
C      CSEN(IS,I)=CSEN(IS,I)*DELT(I)
ccc    ZEIT=0.
ccc    DO WHILE (ZEIT .LT. TKRIT)
      DO II=1,ITKRIT/10
        DT=10.
        CALL PRODES (I)
ccc    CALL ZEITSCHRITT (IZEIT,CSEN,PROS,DESS,CZEI,DT,NSTP)
        CALL EUSEN (1,I,NSUBST,ISUB,DT)
ccc    ZEIT=ZEIT+DT
      ENDDO
ccc    ENDDO
C
      1019 CONTINUE
C
cccaltDO 1029 JS=ISA,ISE
      DO 1029 JJI=1,NSUBST
        JS=ISUB(JJI)
        SKr(JS,JS,IDD)=(CSEN(JS,1)-CSEN(JS,3))/CSEN(JS,2)*1./
          (DELT(1)-DELT(3))
        Ska(JS,JS,IDD)=(CSEN(JS,1)-CSEN(JS,3))/C(JS,1)*1./
          (DELT(1)-DELT(3))
        UNSK(JS,JS,IDD)=((CSEN(JS,1)-CSEN(JS,3))/2.)**2.
      1029 CONTINUE
C
      1009 CONTINUE
C
      smax=0.
cccaltDO JS=ISA,ISE
      DO JJ=1,NSUBST
        JS=ISUB(JJ)
        GESUNK(JS,IDD)=0.
        DO IS=ISA,ISE
          GESUNK(JS,IDD)=GESUNK(JS,IDD)+UNSK(IS,JS,IDD)
ccc    write (99,*) 'BEITRAG VON ',IS,' ZU ',CTEXT(JS),UNSK(IS,JS,IDD)
        ENDDO
        GESUNK(JS,IDD)=SQRT(GESUNK(JS,IDD))
        GESUNK(JS,IDD)=GESUNK(JS,IDD)/C(JS,1)*100.
ccc    write (99,*) IDD,CTEXT(JS),GESUNK(JS,IDD)
        smax=DMAX1(smax,SKr(is,js,idd))
      ENDDO
C
      IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
        OPEN (21,FILE='sensiind.kon') ! Sensitivitaetsanalyse KON
        Write (21,*) 'Sensitivitaetskoeffizienten bez.glich KON'
cccalt DO 1049 IS=ISA,ISE
        DO 1049 JJ=1,NSUBST
          IS=ISUB(JJ)
          WRITE (21,*)
          WRITE (21,*)
          WRITE (21,*) '-----'
          WRITE (21, '(25X,A,50X,A)') 'absolute Werte','relative Werte'
          WRITE (21,15) (TI(IDDL),IDDL=1,IDDE),(TI(IDDL),IDDL=1,IDDE)
          WRITE (21,1) CTEXT(IS)
cccalt DO 1059 JS=ISA,ISE
          DO 1059 JJI=1,NSUBST
            JS=ISUB(JJI)
cccalt WRITE (21,4) JS,CTEXT(JS),(Ska(JS,IS,IDDL),IDDL=1,IDDE),
cccalt (SKr(JS,IS,IDDL),wx(min(-DLOG10(ABS(SKr(JS,IS,IDDL))/smax
cccalt *100.)+1.D-33)+1.D0,4.D0)),IDDL=1,IDDE)
          WRITE (21,4) JS,CTEXT(JS),(Ska(JS,IS,IDDL),IDDL=1,IDDE),
            (SKr(JS,IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
          1059 CONTINUE
          WRITE (21,6) 'Gesamtunsicherheit durch die Meafehler ',
            'in den Konzentrationen betr.,gt: ',
            (GESUNK(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
          1049 CONTINUE
          CLOSE (UNIT=21)
        ENDIF
C
      RETURN
      END
*
C
C      FORTRAN PROGRAMM S E N S I D I R
C
C      Unterprogramm zur Sensitivitaetsanalyse
C      -----
C
C      Das Programm errechnet die Sensitivitaetskoeffizienten nach der
C      direkten Methode fuer Aenderungen in den Konzentrationen und

```

```

C      Reaktionskonstanten.
C      Dabei werden nur Substanzen herangezogen, deren Konzentration
C      groesser als 1E-25 cm-3 und deren Lebensdauer kleiner als Tkrit
C      ist.
C
C      SUBROUTINE SENSIDIR (IDD,DIATIME,TKRIT,DT)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION CSEN(0:NCONC,3),RKR(NREAK)
C      DOUBLE PRECISION PROS(0:NCONC),DESS(0:NCONC)
C      DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
C      DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
C      DOUBLE PRECISION SK(0:NCONC,0:NCONC,4),SR(NREAK,0:NCONC,4)
C      DOUBLE PRECISION TI(4)
C      DOUBLE PRECISION XJ(0:NCONC,0:NCONC),ERK(0:NCONC,NREAK)
C      DOUBLE PRECISION ECJ(0:NCONC,0:NCONC)
C      DOUBLE PRECISION A(0:NCONC,0:NCONC),B(0:NCONC,NREAK)
C      DOUBLE PRECISION UNSR(NREAK,NCONC,4),UNSK(NCONC,NCONC,4)
C      DOUBLE PRECISION GESUNR(NCONC,4),GESUNK(NCONC,4)
C      DOUBLE PRECISION UNKON(NREAK,7),UNCONC(NCONC),RKUN(NREAK)
C      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C      INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
C      INTEGER ISUB(NCONC)
C      INTEGER INDX(NCONC)
C      CHARACTER*8 CTEXT(0:NCONC)
C      CHARACTER*3 WX(0:4)
C
C      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C      COMMON /CPD / RKR,CSEN,PROS,DESS
C      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C      COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
C      COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
C      COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
C      COMMON /UNSICH/ UNKON,UNCONC
C      COMMON /ZEICHN/ CTEXT
C
C      SAVE
C
C      DATA WX /'***','***','** ','* ',' ' /
C
C      WRITE (6,*) ' Sensitivitaetsanalyse (direkte Methode)',idd
C
C      1 FORMAT (' Analyse f.r',3X,A8)
C      3 FORMAT (I5,3X,2(A8,'+'),A8,'-->',3(A8,'+'),A8,
C      . 1P,4(2P,F11.2,A), ' [%]')
C      4 FORMAT (I5,3X,A8,55X,1P,4(2P,F11.2,A), ' [%]')
C      5 FORMAT (/ ,2X,A43,A28,4(F10.2,4X), ' [%]')
C      6 FORMAT (/ ,2X,A39,A32,4(F10.2,4X), ' [%]')
C      14 FORMAT (71X,4(F10.2, ' Uhr'))
C      15 FORMAT (I2,1X,I2,1X,A8,1X,F3.0,1X,1P,8(E13.6,1X))
C
C      IST=DIATIME/3600.
C      MIN=(DIATIME-IST*3600.)/60.
C      TI(IDD)=IST+MIN/100.
C
C      INITIALISIERUNG DER ANFANGSWERTE
C
C      NSUBST=0
C      ISA=2
C      ISE=ICEND+NFAM
C      IDDE=4
C      I=1
C
C      VORBEREITUNG DER TERME:
C
C      DO 10 IC=ISA,ISE
C      IF ((CZEI(IC) .LT. 2.001) .OR. (IC .LT. 2)) GOTO 10
C      IF (C(IC,1) .LE. 1.05D-25) GOTO 10
C      IF (P(IC,1) .LT. 1.05D-25) GOTO 10
C      IF (D(IC,1) .LT. 1.05D-25) GOTO 10
ccc IF (ABS(C(IC,1)/(P(IC,1)-D(IC,1)*C(IC,1))) .GT. TKRIT) GOTO 10
ccc IF (ABS(1./D(IC,1)) .GT. TKRIT*5. .and.
ccc (P(IC,1)/D(IC,1) .gt. 1.1 .or. P(IC,1)/D(IC,1) .lt. 0.95))
ccc GOTO 10
C      NSUBST=NSUBST+1
C      ISUB(NSUBST)=IC
C      10 CONTINUE
C
C      CALL UNSICHER (TEMP,MEDIUM,UNKON,RKUN,IEND)
C

```

```

DO JC=0, ICEND+NFAM
  CSEN(JC, I)=C(JC, I)
DO IC=0, ICEND+NFAM
  XJ(JC, IC)=0.D0
  ECJ(JC, IC)=0.D0
  A(JC, IC)=0.D0
  SK(JC, IC, IDD)=0.D0
ENDDO
DO IR=1, IREND
  ERK(JC, IR)=0.D0
  B(JC, IR)=0.D0
  SR(IR, IC, IDD)=0.D0
ENDDO
ENDDO
DO IR=1, IREND
  RKR(IR)=RK(IR, I)
ENDDO
C
CALL PRODES (I)
CALL EUSEN (2, I, NSUBST, ISUB, DT)
C
C
C BESTIMMUNG DER JACOBI-MATRIX
C
DO 9 IS=1, NSUBST
  II=ISUB(IS)
  DO 19 IR=1, IREND
    XRK=RK(IR, I)
    if (xrk .lt. 1.05d-50) xrk=0.d0
    XNU=NU(IR, II)*1.D0
    XNU=DMIN1(1.D0, XNU)
    RKR(IR)=XRK*XNU/CSEN(IR, II)
  19 CONTINUE
  CALL PRODES (I)
  DO 29 JS=1, NSUBST
    JJ=ISUB(JS)
    XJ(JS, IS)=PROS(JJ)-DESS(JJ)
  29 CONTINUE
9 CONTINUE
ccc write (99,*) idd, ' jACOBI', NSUBST, NSUBST
ccc DO JS=1, NSUBST
ccc   write (99,*) (XJ(JS, IS), IS=1, NSUBST)
ccc ENDDO
C
C BESTIMMUNG DER EXPLIZITEN DIFFERENTIALE NACH DEN GESCHWINDIGKEITSK.
C
DO 109 IR=1, IREND
  DO 119 JR=1, IREND
    IF (JR.EQ.IR) THEN
      RKR(JR)=1.
    ELSE
      RKR(JR)=0.
    ENDIF
  119 CONTINUE
  CALL PRODES (I)
  DO 129 IS=1, NSUBST
    II=ISUB(IS)
    ERK(IR, IS)=PROS(IR, II)-DESS(IR, II)
  129 CONTINUE
109 CONTINUE
ccc write (98,*) idd, ' ERK', NSUBST, IREND
ccc DO JS=1, NSUBST
ccc   write (98,*) (ERK(JS, IR), IR=1, IREND)
ccc ENDDO
C
C BESTIMMUNG DER EXPLIZITEN DIFFERENTIALE NACH DEN KONZENTRATIONEN
C
DO 209 IS=ISA, ISE
  DO 219 IR=1, IREND
    XRK=RK(IR, I)
    if (xrk .lt. 1.05d-50) xrk=0.d0
    XNU=NU(IR, IS)*1.D0
    XNU=DMIN1(1.D0, XNU)
    RKR(IR)=XRK*XNU/CSEN(IR, IS)
  219 CONTINUE
  CALL PRODES (I)
  DO 229 JS=1, NSUBST
    JJ=ISUB(JS)
    ECJ(JS, IS)=PROS(JJ)-DESS(JJ)
  229 CONTINUE
209 CONTINUE
ccc write (97,*) idd, ' ECJ', NSUBST, (ISE-ISA)
ccc DO JS=1, NSUBST
ccc   write (97,*) (ECJ(JS, IS), IS=ISA, ISE)

```

```

ccc ENDDO
C
C BERECHNUNG DER NORMIERTEN SENSITIVITAETSKOEFFIZIENTEN FUER EINE
C AENDERUNG DER GESCHWINDIGKEITSKONSTANTE
C
DO 239 IS=1, NSUBST
DO 249 JS=1, NSUBST
A(IS,JS)=XJ(IS,JS)
249 CONTINUE
239 CONTINUE
DO 259 IR=1, IREND
DO 269 IS=1, NSUBST
B(IS,IR)=(-1.D0)*ERK(IS,IR)
269 CONTINUE
259 CONTINUE
CALL GAUSS (A, NSUBST, B, 1, IREND)
ccc CALL GAUSSA (A, NSUBST, B, 1, IREND)
DO 280 IS=1, NSUBST
II=ISUB(IS)
DO 281 IR=1, IREND
SR(IR,II,IDD)=B(IS,IR)*RK(IR,1)/CSEN(II,I)
UNSR(IR,II,IDD)=(B(IS,IR)*RKUN(IR)*RK(IR,1))*2.
ccc write (99,*) 'U RK', IR, ' ZU ', CTEXT(II), UNSR(IR,II,IDD)
ccc write (99,*) b(is,ir), rkun(ir), rk(ir,1), c(ii,1)
281 CONTINUE
280 CONTINUE
C
C BERECHNUNG DER NORMIERTEN SENSITIVITAETSKOEFFIZIENTEN FUER EINE
C AENDERUNG DER KONZENTRATION
C
DO 289 IS=1, NSUBST
INDX(IS)=0
DO 294 JS=1, NSUBST
A(IS,JS)=XJ(IS,JS)
294 CONTINUE
289 CONTINUE
DO 299 KS=ISA, ISE
DO 309 JS=1, NSUBST
B(JS,KS)=(-1.D0)*ECJ(JS,KS)
309 CONTINUE
299 CONTINUE
CALL GAUSS (A, NSUBST, B, ISA, ISE)
ccc CALL GAUSSA (A, NSUBST, B, ISA, ISE)
DO 319 IS=1, NSUBST
II=ISUB(IS)
DO 321 KS=ISA, ISE
SK(KS,II,IDD)=B(IS,KS)*CSEN(KS,I)/CSEN(II,I)
UNSK(KS,II,IDD)=(B(IS,KS)*(UNCONC(KS)-1.)*CSEN(KS,I))*2.
ccc write (99,*) 'U', CTEXT(KS), ' ZU ', CTEXT(II), UNSK(KS,II,IDD)
ccc write (99,*) b(is,ks), unconc(ks), csen(ks,i), c(ii,1)
321 CONTINUE
319 CONTINUE
C
DO JS=ISA, ISE
GESUNR(JS,IDD)=0.
DO IS=1, IREND
GESUNR(JS,IDD)=GESUNR(JS,IDD)+UNSR(IS,JS,IDD)
ENDDO
GESUNR(JS,IDD)=SQRT(GESUNR(JS,IDD))
GESUNR(JS,IDD)=GESUNR(JS,IDD)/C(JS,1)*100.
ENDDO
C
DO JS=ISA, ISE
GESUNK(JS,IDD)=0.
DO IS=ISA, ISE
GESUNK(JS,IDD)=GESUNK(JS,IDD)+UNSK(IS,JS,IDD)
ENDDO
GESUNK(JS,IDD)=SQRT(GESUNK(JS,IDD))
GESUNK(JS,IDD)=GESUNK(JS,IDD)/C(JS,1)*100.
ccc write (99,*) IDD, CTEXT(JS), GESUNK(JS,IDD)
ENDDO
C
IF (IDD .EQ. IDDE) THEN
OPEN (22, FILE='sensidir.rk') ! Sensitivitaetsanalyse RK
Write (22,*) 'Normierte Sensitivitaetskoeffizienten bez.glich',
' RK'
ccc DO 1049 IS=1, NSUBST
DO 1049 IS=ISA, ISE
ccc II=ISUB(IS)
II=IS
WRITE (22,*)
WRITE (22,*)
WRITE (22,*) '-----'

```

```

        WRITE (22,14) (TI(IDDL),IDDL=1,IDDE)
        WRITE (22,1) CTEXT(II)
        DO 1059 JS=1,IEND
            J1=SYM(JS,1)
            J2=SYM(JS,2)
            J3=SYM(JS,3)
            J4=SYM(JS,4)
            J5=SYM(JS,5)
            J6=SYM(JS,6)
            J7=SYM(JS,7)
            WRITE (22,3) JS,CTEXT(J1),CTEXT(J2),CTEXT(J3),CTEXT(J4),
                CTEXT(J5),CTEXT(J6),CTEXT(J7),
                (SR(JS,II,IDDL),wx(DMIN1(DMAX1(-log10(ABS(SR(JS,II,IDDL)
                    +1.D-25)),0.D0)+1.D0,4.D0)),IDDL=1,IDDE)
1059      CONTINUE
        WRITE (22,5) 'Gesamtunsicherheit durch die Fehler in den ',
            'Reaktionskonstanten betr„gt:',
            (GESUNR(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
1049      CONTINUE
        CLOSE (UNIT=22)
    ENDIF
C
    IF (IDD.EQ.IDDE) THEN
        OPEN (23,FILE='sensidir.kon') ! Sensitivitaetsanalyse KON
        Write (23,*) 'Normierte Sensitivitaetskoeffizienten bez„glich',
            ' KON'
ccc      DO 2049 IS=1,NSUBST
        DO 2049 IS=ISA,ISE
            II=IS
ccc      II=ISUB(IS)
            WRITE (23,*)
            WRITE (23,*)
            WRITE (23,*) '-----'
            WRITE (23,14) (TI(IDDL),IDDL=1,IDDE)
            WRITE (23,1) CTEXT(II)
            DO 2059 JS=ISA,ISE
                WRITE (23,4) JS,CTEXT(JS),(SK(JS,II,IDDL),
                    wx(DMIN1(DMAX1(-log10(ABS(SK(JS,II,IDDL)+1.D-25)),0.D0)
                    +1.D0,4.D0)),IDDL=1,IDDE)
2059      CONTINUE
            WRITE (23,6) 'Gesamtunsicherheit durch die Meafehler ',
                'in den Konzentrationen betr„gt: ',
                (GESUNK(IS,IDDL),IDDL=1,IDDE)
2049      CONTINUE
        CLOSE (UNIT=23)
    ENDIF
C
    RETURN
    END
*
C      FORTRAN PROGRAMM P R O D E S
C
C      DAS UNTERPROGRAMM BERECHNET DIE PRODUKTIONS- UND DESTRUKTIONSRATEN
C      FUER DIE KONZENTRATIONEN UND GESCHWINDIGKEITSKONSTANTEN BEI EINER
C      SENSITIVITAETSANALYSE
C
C      SUBROUTINE PRODES (I)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION CSEN(0:NCONC,3),RKR(NREAK)
C      DOUBLE PRECISION PROS(0:NCONC),DESS(0:NCONC)
C      INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
C      INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
C
C      COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
C      COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
C      COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
C      COMMON /CPD / RKR,CSEN,PROS,DESS
C
C      VORBEREITUNG DER TERME
C      DO 9 IC=0,ICEND+NFAM
        PROS(IC)=0.
        DESS(IC)=0.
9    CONTINUE
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE REAKTIONEN :
C      DO 19 IR=1,IEND
        J1=SYM(IR,1)
        J2=SYM(IR,2)
        J3=SYM(IR,3)
        J4=SYM(IR,4)

```

```

J5=SYM(IR,5)
J6=SYM(IR,6)
J7=SYM(IR,7)
V=(RKR(IR)*CSEN(J1,I))*CSEN(J2,I)*CSEN(J3,I)
DESS(J1)=DESS(J1)+V
DESS(J2)=DESS(J2)+V
DESS(J3)=DESS(J3)+V
PROS(J4)=PROS(J4)+V
PROS(J5)=PROS(J5)+V
PROS(J6)=PROS(J6)+V
PROS(J7)=PROS(J7)+V
C
DO 29 IJ=1,NFAM
  INZ=0.
  NF=FAM(IJ,-1)
  DO 39 IK=1,NF
    IF (J1 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ-1.
    IF (J2 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ-1.
    IF (J3 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ-1.
    IF (J4 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ+1.
    IF (J5 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ+1.
    IF (J6 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ+1.
    IF (J7 .EQ. FAM(IJ,IK)) INZ=INZ+1.
39  CONTINUE
  IF (INZ .LT. 0.) DESS(ICEND+IJ)=DESS(ICEND+IJ)-V*INZ
  IF (INZ .GT. 0.) PROS(ICEND+IJ)=PROS(ICEND+IJ)+V*INZ
29  CONTINUE
19 CONTINUE
C
C  VORSICHT !!!
C  DESS WIRD IN DIESEM UNTERPROGRAMM ALS RATE ERRECHNET
C
DO 49 IC=2,ICEND+NFAM
  PROS(IC)=DMAX1(PROS(IC),1.00D-20)
  DESS(IC)=DMAX1(DESS(IC),1.00D-20)
49 CONTINUE
C
RETURN
END
*
C
C  FORTRAN PROGRAMM E U S E N
C
C  UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER NEUEN KONZENTRATIONEN INNERHALB
C  DER SENSITIVITAETSANALYSE
C
SUBROUTINE EUSEN (ISW,I,NSUBST,ISUB,DT)
C
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
DOUBLE PRECISION CSEN(0:NCONC,3),RKR(NREAK)
DOUBLE PRECISION PROS(0:NCONC),DESS(0:NCONC)
DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
DOUBLE PRECISION KON(NREAK,7)
DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
DOUBLE PRECISION G GK(NREAK),WASSER,pH,RAIN,TRB,TRE
DOUBLE PRECISION CALTS(NCONC,3)
DOUBLE PRECISION FAK(10),FAK1,FAK2
INTEGER FAM(10,-1:12),IZA(NCONC),IZF(NCONC,10)
INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
INTEGER HREND
INTEGER IZA1(NCONC)
INTEGER ISUB(NCONC)
C
COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
COMMON /CPD / RKR,CSEN,PROS,DESS
COMMON /FAMILY/ FAM,NFAM,IZA,IZF
COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
COMMON /RKONST/ KON
COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
COMMON /WOLKEN/ HREND,G GK,WASSER,pH,Rain,TRB,TRE,ITAGR
C
GOTO (10,100) ISW
C
10 CONTINUE
C
Zeitabhaengige Konzentrationsberechnung f•r indirekte Methode
C
SCHLEIFE UEBER DIE KONZENTRATIONEN
41
C

```

```

DO 19 IC=2, ICEND+NFAM
  IF (CZEI(IC) .LT. 0.001) GOTO 19
  X=DMIN1(170.D0, DESS(IC)*DT/CSEN(IC, I))
  IF (X .GT. 1.0D-10) THEN
    Y0=PROS(IC)/(DESS(IC)/CSEN(IC, I))
    Y=Y0+(CSEN(IC, I)-Y0)*DEXP(-X)
  ELSE
    Y=PROS(IC)*DT
    Y=(Y+CSEN(IC, I))/(1.+X)
  ENDIF
  CSEN(IC, I)=DMAX1(1.0D-25, Y)
19 CONTINUE

C
C
C
SCHLEIFE UEBER DIE FAMILIEN

DO 29 J=1, NFAM
  NF=FAM(J, -1)
  SUM=0.
  DO 39 INF=1, NF
    IFA=FAM(J, INF)
    IZA1(IFA)=1
    SUM=SUM+CSEN(IFA, I)
39 CONTINUE
  IFA=FAM(J, 0)
  FAK(J)=CSEN(IFA, I)/SUM
29 CONTINUE
DO 49 J=1, NFAM
  NF=FAM(J, -1)
  DO 59 INF=1, NF
    IFA=FAM(J, INF)
    IF (IZA(IFA) .EQ. 1) THEN
      CSEN(IFA, I)=CSEN(IFA, I)*FAK(J)
    ELSEIF (IZA(IFA) .GT. 1 .AND. IZA1(IFA) .NE. 0) THEN
      FAK1=0.
      FAK2=0.
      DO 69 IJ=1, IZA(IFA)
        FAK1=FAK1+FAK(IZF(IFA, IJ))/CSEN(FAM(J, 0), I)
        FAK2=FAK2+(1./CSEN(FAM(J, 0), I))
69 CONTINUE
      CSEN(IFA, I)=CSEN(IFA, I)*FAK1/FAK2
      IZA1(IFA)=0
    ENDIF
    CSEN(IFA, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(IFA, I))
59 CONTINUE
49 CONTINUE

C
C
C
SCHLEIFE UEBER DIE HETEROGENEN GLEICHGEWICHTSREAKTIONEN

IF (WASSER .GT. 1.E-25) THEN
DO 79 IR=IREND+1, HREND
  IF (KON(IR, 7) .LT. 10.05) THEN
    J1=SYM(IR, 1)
    J4=SYM(IR, 4)
    CGES=CSEN(J1, I)+CSEN(J4, I)
    VER=1.+GGK(IR)*(6.022E+23*WASSER)/(1000.*MEDIUM(1))
    CSEN(J1, I)=CGES/VER
    CSEN(J4, I)=CGES-CSEN(J1, I)
    CSEN(J1, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J1, I))
    CSEN(J4, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J4, I))
  ELSE
    J1=SYM(IR, 1)
    J4=SYM(IR, 4)
    J5=SYM(IR, 5)
    J6=SYM(IR, 6)
    CGES=CSEN(J1, I)+CSEN(J4, I)+CSEN(J5, I)+CSEN(J6, I)
    VER=1.+GGK(IR)*(6.022E+23*WASSER)/(1000.*MEDIUM(1))
    VER1=KON(IR, 1)/GGK(IR)
    VER2=(KON(IR, 1)*KON(IR, 2))/(pH*GGK(IR))
    VER3=KON(IR, 1)*KON(IR, 2)*KON(IR, 3)/(pH*pH*GGK(IR))
    CSEN(J1, I)=CGES/VER
    CSEN(J4, I)=(CGES-CSEN(J1, I))*VER1
    CSEN(J5, I)=(CGES-CSEN(J1, I))*VER2
    CSEN(J6, I)=(CGES-CSEN(J1, I))*VER3
    CSEN(J1, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J1, I))
    CSEN(J4, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J4, I))
    CSEN(J5, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J5, I))
    CSEN(J6, I)=DMAX1(1.0D-25, CSEN(J6, I))
  ENDIF
79 CONTINUE
ENDIF

C
C
C
NEUE SCHLEIFE UEBER DIE FAMILIEN ZUR KONZI42'RATIONSANPASSUNG

```

```

DO 89 J=1,NFAM
  NF=FAM(J,-1)
  SUM=0.
  DO 99 INF=1,NF
    IFA=FAM(J,INF)
    SUM=SUM+CSEN(IFA,I)
99  CONTINUE
    IFA=FAM(J,0)
    CSEN(IFA,I)=SUM
    CSEN(IFA,I)=DMAX1(1.0D-25,CSEN(IFA,I))
89  CONTINUE
C
  GOTO 1000
C
100 CONTINUE
C
C    Steady-State Konzentrationsberechnung f•r direkte Methode
C
  FCRIT=1.D-3
  IZMAX=10000
  IZ=0
  FMAX=1.D0
  DO WHILE (IZ .LE. IZMAX .AND. FMAX .GT. FCRIT)
    IZ=IZ+1
    FMAX=0.D0
    DO 109 IC=1,NSUBST
      II=ISUB(IC)
      CALTS(II,I)=CSEN(II,I)
      DO 119 JJ=1,3
        RAT=1.-(JJ-1.)/2.
        CSEN(II,I)=(PROS(II)*CALTS(II,I)/DESS(II)
        +CSEN(II,I)*RAT)/(1.+RAT)
ccc      CONTINUE
ccc      CSEN(II,I)=CALTS(II,I)*(0.5+0.5*PROS(II)/DESS(II))
ccc      CSEN(II,I)=DMAX1(1.0D-25,CSEN(II,I))
ccc      write (*,*) iz,ic,csen(ii,i),calts(II,i)
cc119 109 CONTINUE
C
      CALL PRODES (I)
      DO 129 IC=1,NSUBST
        II=ISUB(IC)
        FMAX=MAX(ABS((PROS(II)-DESS(II))/(PROS(II)+DESS(II))),FMAX)
129    CONTINUE
      ENDDO
C
1000 CONTINUE
C
  RETURN
  END
*
C
C    FORTRAN PROGRAMM G A U S S
C
C    UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER LOESUNG DER LINEAREN GLEICHUNGS-
C    SYSTEME MIT HILFE DES GAUSS-ALGORITHMUS
C
C    QUELLE: W.H.Press, B.P.Flannery, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling
C            Numerical Recipes
C            Cambridge, 1988
C            S.28-29
C
C    SUBROUTINE GAUSS (A,N,B,M1,M2)
C
C    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C    PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200)
C
C    DIMENSION A(0:NCONC,0:NCONC),B(0:NCONC,NREAK)
C    DIMENSION IPIV(NCONC),INDXR(NCONC),INDXC(NCONC)
C
C    DO 11 J=1,N
C      IPIV(J)=0
11  CONTINUE
C    DO 22 I=1,N
C      BIG=0.
C      DO 13 J=1,N
C        IF(IPIV(J).NE.1)THEN
C          DO 12 K=1,N
C            IF (IPIV(K).EQ.0) THEN
C              IF (ABS(A(J,K)).GE.BIG)THEN
C                BIG=ABS(A(J,K))
C                IROW=J
C                ICOL=K
C              ENDIF
C            ENDIF
C          ENDIF
C        ENDIF
C      ENDIF
C    ENDIF

```

```

        ELSE IF (IPIV(K).GT.1) THEN
            PAUSE 'Singular matrix 1'
        ENDIF
12      CONTINUE
        ENDIF
13      CONTINUE
        IPIV(ICOL)=IPIV(ICOL)+1
        IF (IROW.NE.ICOL) THEN
            DO 14 L=1,N
                DUM=A(IROW,L)
                A(IROW,L)=A(ICOL,L)
                A(ICOL,L)=DUM
14          CONTINUE
            DO 15 L=M1,M2
                DUM=B(IROW,L)
                B(IROW,L)=B(ICOL,L)
                B(ICOL,L)=DUM
15          CONTINUE
            ENDIF
            INDXR(I)=IROW
            INDXC(I)=ICOL
            IF (A(ICOL,ICOL).EQ.0.) THEN
                write(*,*) 'Singular matrix. 2',m1,irow,icol
                pause
            ENDIF
            PIVINV=1./A(ICOL,ICOL)
            A(ICOL,ICOL)=1.
            DO 16 L=1,N
                A(ICOL,L)=A(ICOL,L)*PIVINV
16          CONTINUE
            DO 17 L=M1,M2
                B(ICOL,L)=B(ICOL,L)*PIVINV
17          CONTINUE
            DO 21 LL=1,N
                IF (LL.NE.ICOL) THEN
                    DUM=A(LL,ICOL)
                    A(LL,ICOL)=0.
                    DO 18 L=1,N
                        A(LL,L)=A(LL,L)-A(ICOL,L)*DUM
18                    CONTINUE
                    DO 19 L=M1,M2
                        B(LL,L)=B(LL,L)-B(ICOL,L)*DUM
19                    CONTINUE
                ENDIF
            ENDIF
            CONTINUE
21          CONTINUE
22          CONTINUE
            DO 24 L=N,1,-1
                IF (INDXR(L).NE.INDXC(L)) THEN
                    DO 23 K=1,N
                        DUM=A(K,INDXR(L))
                        A(K,INDXR(L))=A(K,INDXC(L))
                        A(K,INDXC(L))=DUM
23                    CONTINUE
                ENDIF
            ENDIF
24          CONTINUE
C
        RETURN
        END

*
C
C      FORTRAN PROGRAMM G A U S S
C
C      UNTERPROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER LÖSUNG DER LINEAREN GLEICHUNGS-
C      SYSTEME MIT HILFE DES GAUSS-ALGORITHMUS
C
C      SUBROUTINE GAUSSA (A,N,B,M1,M2)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200)
C
C      DOUBLE PRECISION A(0:NCONC,0:NCONC),B(0:NCONC,NREAK)
C      DOUBLE PRECISION X(0:NCONC,NREAK)
C
C      DO I=0,NCONC
C          DO J=1,NREAK
C              X(I,J)=0.D0
C          ENDDO
C      ENDDO
C
C      ZERLEGUNG DER MATRIX
C      -----
C
C      BERECHNEN DER ABSOLUTEN ZEILENSUMMEN

```

```

C      DO 9 IS=1,N
        SUM=0.
        DO 19 JS=1,N
          SUM=SUM+ABS(A(IS,JS))
19      CONTINUE
        IF (SUM.EQ. 0) THEN
          write (*,*) 'L"sung numerisch singulaer',is
        ENDIF
9      CONTINUE

C
C      DIAGONALISIERUNG
C
C      DO 29 IS=2,N
        FAK=0.
        DO 39 JS=IS,N
          FAK=A(JS,IS-1)/A(IS-1,IS-1)
          DO JJ=M1,M2
            B(JS,JJ)=B(JS,JJ)-FAK*B(IS-1,JJ)
          ENDDO
        DO 49 KS=IS-1,N
          A(JS,KS)=A(JS,KS)-FAK*A(IS-1,KS)
49      CONTINUE
39      CONTINUE
29      CONTINUE

C
C      BERECHNUNG DER L"sUNG
C
C      DO JJ=M1,M2
C
C      X(N,JJ)=B(N,JJ)/A(N,N)
        DO IS=N-1,1,-1
          SUM=0.
          IF (A(IS,IS).EQ. 0) THEN
            WRITE (*,*) 'L"sUNG UNBESTIMMT',is
          ENDIF
          DO JS=N,IS,-1
            SUM=SUM+X(JS,JJ)*A(IS,JS)
          ENDDO
          X(IS,JJ)=(B(IS,JJ)-SUM)/A(IS,IS)
        ENDDO
        DO IS=1,N
          B(IS,JJ)=X(IS,JJ)
        ENDDO

C
C      ENDDO

C      RETURN
C      END

*
C
C      FORTRAN PROGRAMM U N S I C H E R
C
C      Das Unterprogramm berechnet die temperaturabhaengigen Unsicher-
C      heiten in den Reaktionskonstanten
C
C      SUBROUTINE UNSICHER (TEMP,MEDIUM,UNKON,RKUN,IEND)
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      PARAMETER (NCONC=100,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
C      DOUBLE PRECISION TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX)
C      DOUBLE PRECISION KON(NREAK,7)
C      DOUBLE PRECISION UNKON(NREAK,7),RKUN(NREAK)
C
C      COMMON /RKONST/ KON
C
C      Bestimmung der relativen Unsicherheiten in den Reaktionskonst.
C      -----
C      DO 9 IR=1,IEND
        IF (KON(IR,7).LE. 1.05) THEN
          RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
        ELSEIF (KON(IR,7).LE. 2.05) THEN
          X=UNKON(IR,1)*EXP(ABS(UNKON(IR,2)*(1/TEMP(1)-1/298.)))
          RKUN(IR)=X-1.
        ELSEIF (KON(IR,7).LE. 3.05) THEN
          X=UNKON(IR,1)*(TEMP(1)/300.)**(-UNKON(IR,2))
          RKUN(IR)=X-1.
        ELSEIF (KON(IR,7).LE. 4.05) THEN
          RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
        ELSEIF (KON(IR,7).LE. 5.05) THEN
          45
          Xfac=UNKON(IR,1)*(TEMP(1)/300.)**(-UNKON(IR,2))-1.

```

```

      Yfac=UNKON(IR,3)*(TEMP(1)/300.)*(-UNKON(IR,3))-1.
      X=KON(IR,1)*(TEMP(1)/300.)*(-KON(IR,2))*MEDIUM(1)
      Y=KON(IR,3)*(TEMP(1)/300.)*(-KON(IR,4))
      RKUN(IR)=SQRT((Xfac*Y/(X+Y))**2.+(Yfac*X/(X+Y))**2.)
    ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 6.05) THEN
      Xfac=(UNKON(IR,1)*EXP(ABS(UNKON(IR,2)*(1/TEMP(1)-1/298.)))-1.)
      Yfac=(UNKON(IR,3)*EXP(ABS(UNKON(IR,4)*(1/TEMP(1)-1/298.)))-1.)
      X=KON(IR,1)*EXP(-KON(IR,2)/TEMP(1))*MEDIUM(1)
      Y=KON(IR,3)*EXP(-KON(IR,4)/TEMP(1))
      RKUN(IR)=SQRT((Xfac*Y/(X+Y))**2.+(Yfac*X/(X+Y))**2.)
    ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 7.05) THEN
      RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
    ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 8.05) THEN
      RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
    ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 9.05) THEN
      RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
ccc  ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 10.05) THEN
ccc  RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
ccc  ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 11.05) THEN
ccc  RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
    ELSEIF (KON(IR,7) .LE. 12.05) THEN
      RKUN(IR)=UNKON(IR,1)-1.
    ENDIF
    IF (RKUN(IR) .LT. 0.) RKUN(IR)=0.D0
9  CONTINUE
C
  RETURN
  END
*
C
  SUBROUTINE DELBLK (LINE)
C
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
  CHARACTER*80 LINE
C
  DO 9 I=1,80
    IBLANK=INDEX(LINE,' ')
    LINE(IBLANK:)=LINE(IBLANK+1:)
9  CONTINUE
C
  RETURN
  END
*
C
C  BLOCK-DATA UNTERPROGRAMM C H A R A C
C
  BLOCK DATA TEXT1
C
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
  PARAMETER (NCONC=100,NxCONC=101,NREAK=200,NSUB=7,NBOX=3)
C
  DOUBLE PRECISION RK(NREAK,NBOX),TEMP(NBOX),MEDIUM(NBOX),MISCH,KA
  DOUBLE PRECISION CSEN(0:NCONC,3),RKR(NREAK)
  DOUBLE PRECISION PROS(0:NCONC),DESS(0:NCONC)
  DOUBLE PRECISION C(0:NCONC,NBOX),P(0:NCONC,NBOX),D(0:NCONC,NBOX)
  DOUBLE PRECISION CZEI(NCONC),TTP(NCONC,NBOX),TTD(NCONC,NBOX)
  DOUBLE PRECISION QU(NCONC),QZEI(NCONC),TRDE(NCONC)
  INTEGER SUMSYM(10,0:10,2)
  INTEGER SYM(NREAK,NSUB),NU(0:NCONC,NREAK)
  CHARACTER*8 CTEXT(0:NCONC)
C
  COMMON /ANZAHL/ ICEND,IEND,IBOX,IMOD,IBA,IWOL
  COMMON /AUSTAU/ QU,QZEI,TRDE
  COMMON /CHECK / SUMSYM,NSUM
  COMMON /CPD / RKR,CSEN,PROS,DESS
  COMMON /REAKT / RK,TEMP,MEDIUM,PRESS,MISCH,HT,ANT,BIO,KA
  COMMON /SYMBOL/ SYM,NU
  COMMON /TERME / C,P,D,CZEI,TTP,TTD
  COMMON /ZEICHN/ CTEXT
C
  DATA ICEND/1/,
.  QU/NCONC*0.D0/,QZEI/NCONC*1./,TRDE/NCONC*0.D0/,
.  SUMSYM/220*0.D0/,
.  CSEN/NxCONC*1.D0,NxCONC*1.D0,NxCONC*1.D0/,
.  SYM/NREAK*0,NREAK*0,NREAK*0,NREAK*0,NREAK*0,NREAK*0,NREAK*0/,
.  C/NxCONC*-1.D0,NxCONC*-1.D0,NxCONC*-1.D0/,CZEI/NCONC*1./,
.  TTP/NCONC*0.D0,NCONC*0.D0,NCONC*0.D0/,
.  TTD/NCONC*0.D0,NCONC*0.D0,NCONC*0.D0/,
.  CTEXT/NxCONC*' '/
C
  END

```

```

C *****
C *
C *      FORTRAN-Program      Z v o n P          R"th, 16.9.94
C *
C *      Purpose : Calculates the altitude (in km) from
C *                  pressure (in mbar) according to the
C *                  Standard Atmosphere for 0 to 100 km
C *
C *****
C
C      FUNCTION ZVONP (pin)
C
C      Implicit Double Precision (A-H,O-Z)
C      Real*4 p(0:50)
C      Real*8 LnPo
C
C      Data p /1013.,795.0,616.6,472.2,356.5,265.0,194.0,141.7,103.5,
C              75.65,55.29,40.48,29.72,21.88,16.16,11.97,8.891,6.634,
C              4.985,3.771,2.871,2.200,1.695,1.313,1.023,.7978,.6221,
C              .4834,.3736,.2872,.2196,.1669,.1261,.09461,.07053,.05221,
C              .03836,.02801,.02033,.01467,.01052,.007501,.005311,.003734,
C              .002617,.001836,.001289,.000906,.000638,.000451,.000320/
C
C      i=99
C      Do j=1,100
C        If (p(j).le.pin) then
C          i=j-1
C          Goto 10
C        Endif
C      Enddo
C 10 Continue
C      z1=2.*i
C      z2=z1+2.
C      h=(z1-z2)/Log(p(i+1)/p(i))
C      LnPo=Log(p(i))+z1/h
C
C      ZvonP=h*(LnPo-Log(pin))
C
C      Return
C      End
C
C *****
C *
C *      FORTRAN-Program      P v o n Z          R"th, 15.9.94
C *
C *      Purpose : Calculates the pressure (in mbar) from
C *                  altitude (in km) according to the
C *                  Standard Atmosphere for 0 to 100 km
C *
C *****
C
C      FUNCTION PVONZ (z)
C
C      Implicit Double Precision (A-H,O-Z)
C      Real*4 p(0:50)
C
C      Data p /1013.,795.0,616.6,472.2,356.5,265.0,194.0,141.7,103.5,
C              75.65,55.29,40.48,29.72,21.88,16.16,11.97,8.891,6.634,
C              4.985,3.771,2.871,2.200,1.695,1.313,1.023,.7978,.6221,
C              .4834,.3736,.2872,.2196,.1669,.1261,.09461,.07053,.05221,
C              .03836,.02801,.02033,.01467,.01052,.007501,.005311,.003734,
C              .002617,.001836,.001289,.000906,.000638,.000451,.000320/
C
C      i=DMin1(49.D+0,z/2.D+0)
C      z1=2.*i
C      z2=z1+2.
C      h=(z1-z2)/Log(p(i+1)/p(i))
C      po=p(i)*Exp(z1/h)
C
C      PvonZ=po*Exp(-z/h)
C
C      Return
C      End
C
C *****
C *
C *      FORTRAN-Program      T v o n Z          Ruhnke, 7.2.95
C *
C *      Purpose : Calculates the temperature (in K) from
C *                  altitude (in km) according to the
C *                  temperature gradient of -6.5 K/km
C *                  for 0 to 11 km
C *
C *****
C
C *****

```

```
C      FUNCTION TVONZ (z)
C
C      Implicit Double Precision (A-H,O-Z)
C
C      TvonZ=288.15-6.5*z
C
C      Return
C      End
```


Jül-3131
November 1995
ISSN 0944-2952