

NILU  
TEKNISK NOTAT NR: 15/79  
REFERANSE: 23378  
DATO: FEBRUAR 1980

PROGRAM "TFKJEMI"  
MODELLBEREGNINGER AV FOTOKJEMISKE  
OKSYDANTER I GRENLAND  
AV  
F. GRAM OG K.E. GRØNSKEI

NORSK INSTITUT FOR LUFTFORSKNING  
POSTBOKS 130, 2001 LILLESTRØM  
NORGE

ISBN- 82-7247-145-0

INNHALDSFORTEGNELSE

	Side
1 INNLEDNING .....	5
2 HOVEDPROGRAMMET .....	8
2.1 Datalagring .....	8
2.2 Initialverdier .....	11
2.3 Data for utslipp, spredning og kjemiske reaksjoner	11
2.4 Tidsintegrasjon .....	12
2.5 Utskrift av resultatene .....	12
2.6 Programutskrifter .....	13
3 UTSLIPP .....	20
3.1 EMIS .....	20
3.2 PUFF .....	21
3.3 Programutskrifter .....	32
4 SPREDNING .....	35
4.1 Programutskrifter .....	37
5 FOTOKJEMI .....	40
5.1 Programutskrifter .....	42
6 UTSKRIFTSRUTINER .....	50
6.1 SKRV (KF, KODE, NIV, ITID, CI) .....	50
6.2 SKRI (IRS, JRS, K1, K2, K3) og S2 (IRS, JRS) ..	50
6.3 PROPP (IST,JST) .....	50
6.4 LINPL, LIN og XX .....	51
6.5 Programutskrifter .....	52
7 INPUT DATA .....	55
8 PSEUDOSPEKTRALMETODEN .....	58
8.1 Programutskrifter .....	59
9 REFERANSELISTE .....	62
VEDLEGG A: Beregning av middelutslippet i hver km <sup>2</sup> - rute, - Program AREA .....	63
A1 Program AREA .....	65
A2 Utgangsdata .....	66
A3 Programutskrift .....	67



PROGRAM "TFKJEMI"  
 MODELLBEREGNINGER AV FOTOKJEMISKE  
 OKSYDANTER I GRENLAND

1 INNLEDNING

TFKJEMI er et regnemaskinprogram som kombinerer modellberegninger av utslipp, spredning og kjemiske reaksjoner innen et område. Programmet er utarbeidet i forbindelse med NILUs prosjekt for Statens Forurensningstilsyn, Fotokjemiske oksydanter i Grenland, og denne programbeskrivelsen bygger i stor utstrekning på hovedrapporten fra dette prosjektet (1), nedenfor kalt hovedrapporten. Ved programmeringen er det imidlertid lagt vekt på at en enkelt skal kunne skifte såvel beregningsområde, reaksjonsskjema eller andre deler av programmet. Det består av hovedprogrammet TFKJEMI og 37 forskjellige subrutiner. Disse kan deles inn i grupper etter deres funksjon som vist i tabell 1.1, og gruppene omtales nærmere nedenfor, sammen med programutskrifter av rutinene.

Tabell 1.1: Program-deler i TFKJEMI

Gruppe	Rutine	Gruppe	Rutine
PROGRAM	TFKJEMI	UTSKRIFT	SKRV
	START		PROPP
(FILE)	INIT		S2
	FILE		SKRI
	ERR		LINPL
	TFGET		LIN
	TFPUT		XX
	TGET	Pseudospektral-	RANDA
	TPUT	metoden	RANDU
UTSLIPP	EMIS		RAND2
	UTSL		DXY
	PUFF		DERIVH
	PIPER		DERIVX
SPREDN.	ADVH		PROCl
	DXYF		FFTR
	VIND		
	TURB		
	VKZ		
KJEMI	KJEMI		
	KJEMR		
	KORTLAN		
	KOLALA		
	LANG		

Ved beregningene er det benyttet et modellområde med 1 km<sup>2</sup>-ruter innen et område på 16 x 32 km. Området er vist i figur 1, og det er beregnet middelkonsentrasjoner av 29 komponenter i 3 nivåer. Nivå 1 går fra 0 til 50 m, og en har her utslipp som kan betraktes som arealkilder. Nivå 3 går fra 100 til 200 m, og er valgt slik at alle punktkilder har sitt utslipp i dette nivået. Nivå 2 som går fra 50 til 100 m er nærmest å betrakte som et utvekslingsområde mellom nivå 1 og 3. Hvert av nivåene kan ha forskjellige spredningsforhold med videre. Beregning av utveksling mellom lagene er beskrevet i vedlegg C i hovedrapporten.

I den fotokjemiske reaksjonsmodellen regner en med 29 komponenter, som vist i tabell 1.2. Endel av disse forekommer bare som ustabile intermediære reaksjonsprodukter. Det er regnet med utslipp av 9 komponenter, merket med en stjerne i tabell 1.2. Vedlegg B i hovedrapporten omhandler det reaksjonsskjema som er benyttet.

Tabell 1.2: Kjemikomponenter i oksydantberegningene.

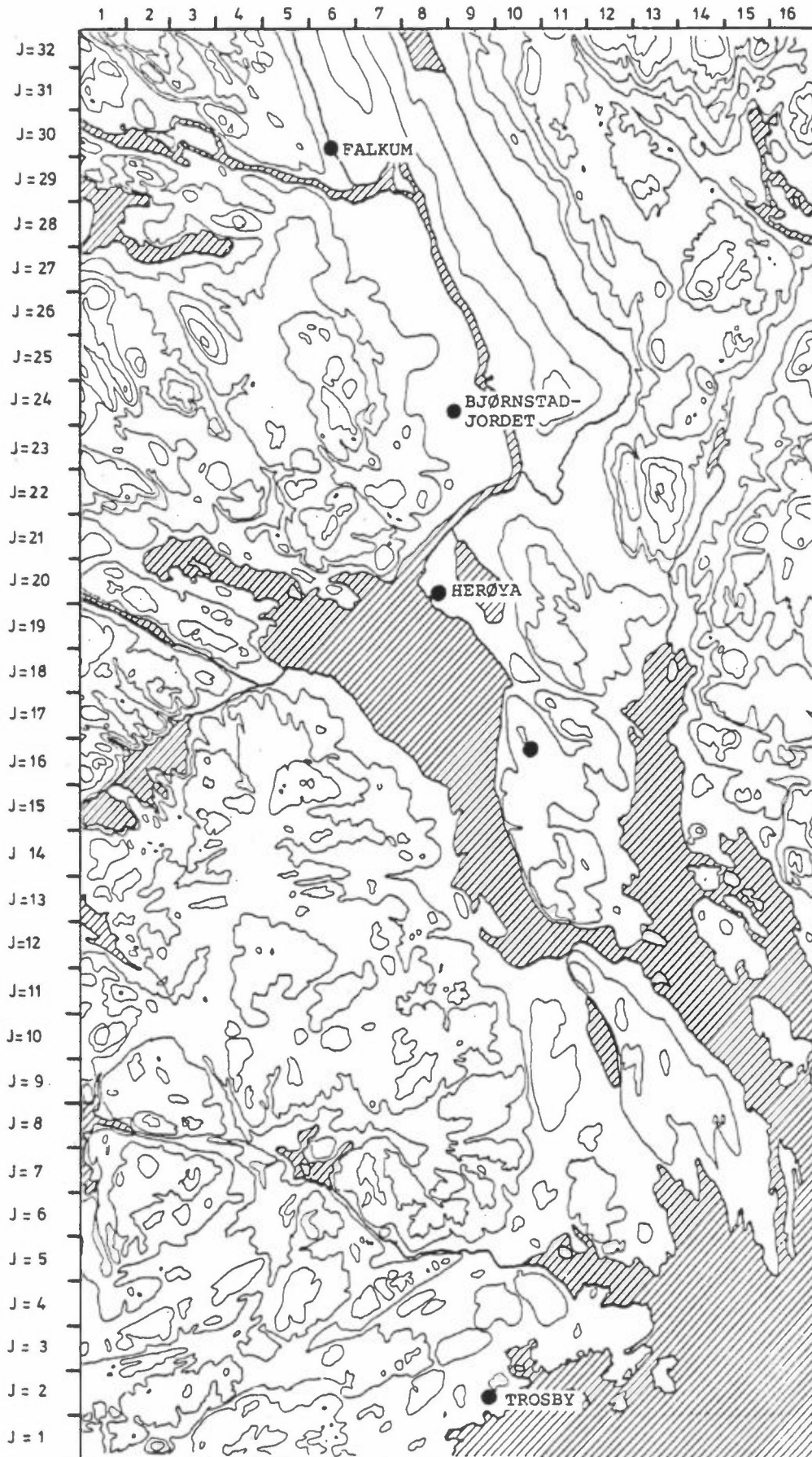
Nr.	Modell- betegnelse	Kjemisk navn	Nr.	Modell- betegnelse	Kjemisk navn
1	O3	Ozon	*16	CO	Karbon- monoksyd
*2	NO	Nitrogen- monoksyd	*17	CH3O	Formaldehyd
3	O3NO		*18	CH3CHO	Acetaldehyd
4	CH3XX		19	HCOHCO	
5	CH2O2O		20	RCOHCO	
6	CH3X		21	CH3COX	
7	C4H9O2		22	CH3COY	
8	CH3COB		*23	C2H4	Etylen
9	C2H5O2		*24	C3H6	Propylen
10	AR1		*25	C4H10	n-butan
11	AR3		*26	C6HXR	Xylen
12	AR6		27	PAN	Peroxy- acetyl- nitrat
13	CH3O2		28	NOX	Nitrogen- oksyder
14	HO2		*29	NO2	Nitrogen- dioksyd
15	H2O2	Hydrogen- peroksyd			

## 2 HOVEDPROGRAMMET

### 2.1 Datalagring

Med et beregningsområde på 16 x 32 ruter, 29 komponenter i tre nivåer, samt behov for å holde rede på konsentrasjoner, tidsderiverte og vertikalgradienter av alle komponenter i alle ruter og nivåer, er det nødvendig å bruke filer<sup>1</sup> for lagring av mellomregninger. I programmet benyttes et lagerområde /HOVE/ dimensjonert til X(16, 32, 98). Første og andre indeks i X(I,J,K) angir km<sup>2</sup>-

<sup>1</sup> fil: datafil som betegner lagerområde i regneanlegget.



Figur 2.1: Beregningsområdet med plassering av stasjoner for måling av meteorologiske parametre og av forurensningskonsentrasjoner (●). Ekvidistanse: 50 m.



rute i området, tredje indeks K angir hvilken parameter det er gitt verdier for. Verdiene av en parameter i samtlige  $\text{km}^2$ -ruter kalles siden for et felt. Betydningen av de forskjellige feltene i HOVE er angitt i tabell 2.1.

Det er videre laget en ord-adresserbar lagerfil med tre blokker som inneholder de 33 første feltene i HOVE i tre nivåer. Den ord-adresserbare filstruktur gjør det mulig å legge opp og ta ned samtlige konsentrasjonsfelter for ett nivå, og samtidig kan vi hente ned ett og ett felt fra et annet nivå når vi skal beregne vertikalutveksling. Rutinene TFPUT legger opp data på filen og TFGET henter ned data. Det er også nødvendig å kunne avbryte og senere fortsette en beregning, derfor legges alle konsentrasjonsfeltene ut på magnetbånd ved slutten av hver time. Til dette benyttes rutinen TPUT. Når vi senere ønsker å fortsette beregningene leser vi oss frem på magnetbåndet til det ønskede starttidspunktet, og leser så i rutinen TGET ned konsentrasjonsfeltene, og disse legges på riktig plass ved rutinen START. Regnemaskinteknisk er en slik tredimensjonal matrisestruktur uøkonomisk, idet den medfører omfattende beregninger av adresser som krever regnetid. I og med at vi tar for oss en og en rute i ett og ett felt kan mye av adresseberegningene reduseres til adresser innen feltet. Funksjonen ISTART i en rutine benyttes til å beregne startadressen for et felt, og feltene gjennomgås så ved å øke alle adresser med en og en. Dette er gjennomført i alle rutinene, (unntatt i DXYF hvor gradientene i x- og y-retningen beregnes) og reduserer regnetiden betydelig.

Tabell 2.1: Lagerområdet /HOVE/ X(16, 32, 98)

1		35		64	
2		36		65	
3		37		66	
4		38		67	KR 1-6
5		39		68	vindkompo-
6		40		69	nenter u og
7		41		70	v i 3 nivåer
8		42		71	
9		43		72	
10		44		73	
11		45		74	
12		46		75	
13		47	Tidsderiverte	76	
14		48	$dC_i/dt$ av	77	
15	Konsentrasjoner	49	komponent 1-29	78	Utveksling av
16	$C_i$ av komponent	50		79	forurensninger
17	1-29	51		80	mellom lagene
18		52		81	
19		53		82	
20		54		83	
21		55		84	
22		56		85	
23		57		86	
24		58		87	
25		59		88	
26		60		89	
27		61		90	
28		62		91	
<u>29</u>		<u>63</u>		<u>92</u>	
30	u KU 1-3			93	KZO ruhetspar.
31	v KV 1-3			94	KDX $\partial c/\partial x$ $\Sigma HC$
32	dz/dt KDZ 1-3 utveksl.			95	KDY $\partial c/\partial y$
33	M 1-3 randbet.			96	K2X $\partial^2 c/\partial x^2$
34	Ci nivået over			97	K2Y $\partial^2 c/\partial y^2$
				98	KND tørravsetn.h.

Rutinene FILE og ERR brukes til lagerfilen, FILE definerer denne. ERR er en rutine som brukes ved evt. feil.

## 2.2 Initialverdier

Ved programstart leser vi i hovedprogrammet inn kontrollparametre, hastigheter for eventuell tørravsetning, bakgrunnsverdier for 29 komponenter, og data for skorsteinsutslippene (i PIPER, via PUFF (0)).

Det leses videre inn et felt med ruhetsparameter  $Z_0$ , som legges i flak 93 ( $KZ_0$ ).

Rutinen START starter opp beregningen. Verdiene i konsentrasjonsfeltene settes lik bakgrunnsverdiene, og det legges opp 29 felter med bakgrunnskonsentrasjoner i tre nivåer. Beregninger kan også utføres ved å lese konsentrasjonsfeltene fra tape som beskrevet ovenfor. Ved gjennomføringen av prosjektet ble det utført noen beregninger som startet kl. 07, og det ble da regnet med en bakgrunnskonsentrasjon som var lik middelkonsentrasjonen langs den sørlige randen av feltet estimert i tidligere beregninger. Det ble her regnet med at vinden i løpet av natten hadde blåst fra Grenland og sydover, og idet vinden skiftet til vind fra mer sydlig retning utover formiddagen, ville luften som var forurenset av utslipp om natten være den bakgrunnsluften som kom inn over området. Konsentrasjonsendringer på grunn av kjemiske reaksjoner beregnes for bakgrunnsluften langs kanten av området, og påvirker konsentrasjonene i luften som strømmer inn i området.

## 2.3 Data for utslipp, spredning og kjemiske reaksjoner

For hver time leses midlere utslippsdata fra filen EMIS, disse multipliseres med faktoer for ukedag og tid på døgnet, og det legges opp på en ny file for utslippsfelt (UTSL) i enheten molekyl/sekund·m<sup>3</sup>. Rutinen INIT kaller videre i hvert nivå VIND der vinddata leses inn og turbulensdata genereres, kfr. C3.4 i vedlegg C. Utvekslingen mellom lagene  $d\bar{z}/dt$  beregnes som beskrevet i Vedlegg C, punkt 3.3. Rutinene RANDA,

RANDU og RAND2 benyttes ved pseudospektralmetoden (kap. 8), og er normalt ikke i bruk. u-feltet, v-feltet,  $\bar{dz}/dt$ -feltet og et rand-felt legges opp på plass 30-34 i lagerfilen i de tre nivåene. Nye dissosiasjonskonstanter leses i KJEMR.

#### 2.4 Tidsintegrasjon

For hvert tidsskritt (vanligvis 60 sekunder), leses konsentrasjons- og spredningsfeltene ned fra lagerfilen på plass 1-33, utslippsfeltene UTSL i nivå i på plass 35-63. Vi beregner så utvekslingen for en og en komponent ved at vi ved nivå 1 og 2 leser konsentrasjonen i laget over og legger dette på plass 34. Fluks beregnes som vist i vedlegg C 3.3, og tørravsetning etter C 4.1. Det som forsvinner ut og kommer inn i et nivå adderes de tidsderiverte på plass 35-63. Samtidig må vi huske på hvor mye som går fra ett nivå til neste, dette ligger i plass 64-92.

I nivå 3 undersøker vi i PUFF om det er noen puff som er blitt store nok til å gi utslippsbidrag i gridsystemet.

De tidsderiverte får videre bidrag på grunn av adveksjon og horisontaldiffusjon. Beregningsmetoden er beskrevet i ADVH, kapittel 4. Nye konsentrasjonsverdier beregnes for hver gridrute på grunnlag av det kjemiske reaksjonsskjemaet og verdiene av de tidsderiverte. Integrasjonsmetoden er beskrevet i Vedlegg B i hovedrapporten. KJEMI og KJEMR beregner nye konsentrasjoner og legger disse på plass 1-29, mens feltene for konsentrasjonsendring med tiden 35-63 nullstilles.

#### 2.5 Utskrift av resultatene

Ved slutten av hver time legges konsentrasjonsfeltene på magnetbånd, og vi får skrevet ut feltene av  $O_3$ , NO og  $NO_2$  og  $\Sigma HC$  i nivå 1 og 3. Det er også lagt inn muligheten for forskjellige typer utskrift, som beskrevet i kapittel 5. Rutine SKRV skriver ut ett helt felt, PROPP skriver ut verdiene i ett punkt fra hvert av de 98 feltene. S2 skriver ut verdiene for 3 og 3 felt i 9 punkter rundt  $km^2$ -rutene angitt ved (IST,JST).

I rutinen LIN får vi lagt opp i et dataområde konsentrasjoner av enkelte komponenter i forskjellige punkter for hver time, og til slutt kan vi så plotte tidsforløpet av komponentene.

Rutinene TFPUT og TFGET kan virke på to forskjellige måter. De benytter begge kallparametrene NIV, IFL, NFL og KR. Hvis NFL = 1, leses/skrives felt nr KR i X-matrisen. Hvis NFL > 1, leses/skrives NFL felt fra og med nr. IFL. NIV angir nivået (1-3), samtidig nummererer NIV de tre blokkene som danner den ord-adresserbare filstrukturen.

## 2.6 Programutskrifter

TFKJEMI

```
1      PROGRAM TFKJEMI (INPUT, OUTPUT, TAPE2, TAPE1, TAPE3, TAPE4=0, TAPE7=0)
      COMMON /HOVE/ X(16, 32, 98)
      COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AL(3), XNS(3), XDV(3), T, DELT, BST(29)
2, M1, M2, M3, D, SIGT
5      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON/STRUK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
2, KV2, KU3, KV3, KZ0, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
      COMMON /INF/NIV, KONT, KT
10     COMMON /LINP/ AK(72, 3), BK(72, 3), CK(72, 3), DK(72, 3)
      DIMENSION UT(98)
      DIMENSION RO(29)
      DIMENSION NI(3), NJ(3)
      DIMENSION JDAG(7)
15     DATA JDAG/4H MAN, 4HTIRS, 4H ONS, 4HTORS, 4H FRE, 4H LØR, 4H SØN/
502  FORMAT(*O O3 NO O3NO CH3XX CH2O2O CH3X C4H9O2
2 CH3COB C2H5O2 AR1 AR3 AR6 CH3O2 H02 H2O2*)
503  FORMAT(IHO, 15E8, 2)
504  FORMAT(*O CO CH2O CH3CHO HCOHCO RCOHCO CH3COX CH3COY
20 2 C2H4 C3H6 C4H10 C6HXR PAN NOX NO2*)
505  FORMAT(IHO*BAKGRUNNSKONSENTRASJONER*)
      ISTART(J)=(J-1)*IR+1
      KS1=1 A KSTM=29 A KS2=1 A KS2M=29 A KS3=1 A KS3M=29
25     KDT1=35 A KDTM=63 A KW1=64 A KWM=92
      KU1=30 A KV1=31 A KDZ1=32
      KU2=30 A KV2=31 A KDZ2=32
      KU3=30 A KV3=31 A KDZ3=32
      KZ0=93 A KDX=94 A KDY=95 A K2X=96 A K2Y=97 A KND=98
30     KR1=64 A KR2=65 A KR3=66 A KR4=67 A KR5=68 A KR6=69
      M1=M2=M3=33 A KVK=70
      KR=34
      REWIND 3
      KTT=1
      KS=0
35     KDT2=KDT1-1
      N2=0
      LUN=4
      READ 501, DT, FAK3, K, KKL, KKLM, NLPL, IST, JST, KRO, IS2
40     501  FORMAT (2F6. 0, 10I4)
      C K=1 MANDAG
      C KKL ER KLOKKESLETT VI STARTER BEREGNINGENE FRA.
      C KKL=1, START MED BST
      C KKL>1, LES FELT FRA TAPE KL, KKL.
      PRINT 507, JDAG(K), KKL, KKLM, DT
45     507  FORMAT (*1BEREGNINGENE GÅR FRA *A4*DAG KL. *I3* TIL KL. *I3* MED TID
      1SSTEP PÅ *F5. 0* SEKUNDER*)
      IF (NLPL. GT. 0) READ 508, (NI(I), NJ(I), I=1, NLPL)
508  FORMAT (6I4)
```

```
50      DO 110 KST=1,KSTM
      RO(KST)=1.0E+08
110     CONTINUE
      IF (KRO.GT.0) READ 506,(M,RO(M),KR=1,KRO)
506     FORMAT(6(I4,F8.2))
      IM=16 A JM=32 A IM1=IM-1 A JM1=JM-1
55     IM2=IM-2
      JM2=JM-2
      DX=1000.
      DZ(1)=50.
60     DZ(2)=50.
      DZ(3)=100.
      V(1)=DX*DX*DZ(1)
      V(2)=DX*DX*DZ(2)
      V(3)=DX*DX*DZ(3)
      IR=IM*JM
65     READ 512,(BST(KST),KST=1,KSTM)
512     FORMAT(E6.1,9E7.1)
      CALL PUFF(0)
      CALL FILE
      DO 10 J=1,JM
70     READ 511,(X(I,J,KZ0),I=1,IM)
511     FORMAT(16F3.2)
      10 CONTINUE
      CALL START(KKL)
75     PRINT 502
      PRINT 503,(RO(KST),KST=1,15)
      PRINT 504
      PRINT 503,(RO(KST),KST=16,KSTM)
      PRINT 505
      PRINT 502
80     PRINT 503,(BST(KST),KST=1,15)
      PRINT 504
      PRINT 503,(BST(KST),KST=16,KSTM)
      DO 103 KT2=KKL,KKLM
      REWIND 2
85     CALL EMIS(K,KT2)
      CALL INIT
      N2=N2+1
      DO 104 KT=1,KTM
      IF (KT.EQ.1) KTT=KTT+1
90     CBEREGNING AV DERIVERTE I NIVA 1.
      NIV=1
      NQ1=1
      NQ2=33
      NQ3=0
95     CALL TFGET(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
      C LESER N.E.D DATA FOR ETT NIVA
      IF (KT.GT.1) CALL UTSL
      NIV=2
      NQ2=1
100    NQ3=KR
      DO 301 KST=1,KSTM
      NQ1=KST
      CALL TFGET(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
      C KALLER ETT FLAK I NIVA 2 OG LEGGER I 34
105    KW=KW1-1+KST
      KDT=KDT2+KST
      CALL RANDU(KDT,KU1,KV1,KST)
      IDZ=ISTART(KDZ1)
      IND=ISTART(KND)
110    IW=ISTART(KW)
      IST=ISTART(KST)
      IRS=ISTART(KR)
      IDT=ISTART(KDT)
      DO 307 I=1,IR
115    DZDT=X(IDZ)
      VO=1.0/(X(IND)+RO(KST))
      X(IW)=DZDT*(X(IST)-X(IRS))
      X(IDT)=X(IDT)-(2.0*VO*X(IST)+X(IW))/DZ(1)
      IDZ=IDZ+1 A IW=IW+1 A IST=IST+1 A IDT=IDT+1
120    IRS=IRS+1 A IND=IND+1
307    CONTINUE
301    CONTINUE
      NIV=1
      CALL ADVH(KS1,KU1,KV1,M1)
125    CALL KJEMI(KTT)
      KTT=0
      IF (KT.EQ.KTM) CALL TPUT(LUN,KT2)
```

TFKJEMI (forts.)

```
IF(KT.EQ.KTM) 71,75
130 71 CALL SKRV(1,1,NIV,KT2,0.37E-15)
    CALL SKRV(2,2,NIV,KT2,0.37E-15)
    CALL SKRV(29,29,NIV,KT2,0.37E-15)
    I=93*IR+1
    DO 78 JS=1,JM
    DO 78 IS=1,IM
135     X(I)=XX(JS,JS)
    I=I+1
    78 CONTINUE
    CI=0.37E-15
    MR=94
140     CALL SKRV(MR,MR,NIV,KT2,CI)
    CALL PROPP(IST,JST)
    IF (IS2.GT.0) CALL S2(IST,JST)
    IF (NLPL.EQ.0) GO TO 75
    DO 74 K=1,NLPL
145     IS=NI(K) A JS=NJ(K)
    CALL LIN(K,IS,JS,N2)
    74 CONTINUE
    75 CONTINUE
    NQ1=1
150     NQ2=KSTM
    NQ3=0
    CALL TFPUT(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
    CBEREGNING AV DERIVERTE I NIVA 2.
    NIV=2
155     NQ1=1
    NQ2=33
    NQ3=0
    CALL TFGET(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
    NIV=3
160     NQ2=1
    NQ3=KR
    DO 303 KST=KS2,KS2M
    NQ1=KST
165     CALL TFGET(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
    KW=KW1-1+KST
    KDT=KDT2+KST
    CALL RAND2(KDT,KU2,KV2,KST)
    IDZ=ISTART(KDZ2)
    IST=ISTART(KST)
170     IRS=ISTART(KR)
    IDT=ISTART(KDT)
    IW =ISTART(KW)
    DO 308 I=1,IR
    DZDT=X(IDZ)
175     VTR=DZDT*(X(IST)-X(IRS))
    X(IDT)=X(IDT)-(VTR-X(IW))/DZ(2)
    X(IW)=VTR
    IDZ=IDZ+1 A IW=IW+1 A IST=IST+1 A IDT=IDT+1
    IRS=IRS+1
180     308 CONTINUE
    303 CONTINUE
    NIV=2
    CALL ADVH(KS2,KU2,KV2,M2)
    CALL KJEMI(KTT)
185     IF (KT.EQ.KTM) CALL TPUT(LUN,KT2)
    NQ1=1
    NQ2=KSTM
    NQ3=0
    CALL TFPUT(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
190     CBEREGNING AV DERIVERTE I NIVA 3.
    NIV=3
    KS=KS+1
    NQ1=1
195     NQ2=33
    NQ3=0
    CALL TFGET(NIV,NQ1,NQ2,NQ3)
    CALL PUFF(KS)
    DO 305 KST=KS3,KS3M
    KW=KW1-1+KST
200     KDT=KDT2+KST
    CALL RAND2(KDT,KU3,KV3,KST)
    IDZ=ISTART(KDZ3)
    IST=ISTART(KST)
    IDT=ISTART(KDT)
205     IW =ISTART(KW)
```

TFKJEMI (forts.)

```
DO 309 I=1, IR
DZDT=X(IDZ)
VTR=VTR*FAK3
X(IDT)=X(IDT)-(VTR-X(IW))/DZ(3)
210 IDZ=IDZ+1 A IW=IW+1 A IST=IST+1 A IDT=IDT+1
309 CONTINUE
305 CONTINUE
CALL ADVH(KS3, KU3, KV3, M3)
CALL KJEMI(KTT)
215 IF (KT. EQ. KTM) CALL TPUT(LUN, KT2)
IF (KT. EQ. KTM) 73, 77
73 CALL SKRV(1, 1, NIV, KT2, 0. 37E-15)
CALL SKRV(2, 2, NIV, KT2, 0. 37E-15)
220 CALL SKRV(29, 29, NIV, KT2, 0. 37E-15)
I=93*IR+1
DO 79 JS=1, JM
DO 79 IS=1, IM
X(I)=XX(IS, JS)
I=I+1
225 79 CONTINUE
CI=0. 37E-15
MR=94
CALL SKRV(MR, MR, NIV, KT2, CI)
CALL PROPP(IST, JST)
230 77 CONTINUE
NQ1=1
NQ2=KSTM
NQ3=0
CALL TFPUT(NIV, NQ1, NQ2, NQ3)
235 104 CONTINUE
103 CONTINUE
IF (NLPL. EQ. 0) GO TO 5
CALL LINPL(AK, 3, 1, N2)
CALL LINPL(BK, 3, 1, N2)
240 CALL LINPL(CK, 3, 1, N2)
CALL LINPL(DK, 3, 1, N2)
5 CONTINUE
REWIND 3
ITID=1
245 50 READ(3) UT
PRINT 600, ITID
600 FORMAT (*0 ITID=* I3)
IF (EOF(3)) 60, 55
250 55 CONTINUE
PRINT 502
PRINT 503, (UT(KST), KST=1, 15)
PRINT 504
PRINT 503, (UT(KST), KST=16, 29)
ITID=ITID+1
255 GO TO 50
60 CONTINUE
STOP
END
```

START

```
1 SUBROUTINE START(KKL)
COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
2, M1, M2, M3, D, SIGT
5 COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
COMMON/STRUK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
2, KV2, KU3, KV3, KZ0, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
IF(KKL. GT. 1) GO TO 120
10 I=1
DO 101 KST=1, KSTM
BS=BST(KST)
DO 101 J=1, IR
X(I)=BS
15 I=I+1
101 CONTINUE
DO111NAV=1, 3
NIV=NAV
NQ1=1
20 NQ2=KSTM
NQ3=0
CALL TFPUT(NIV, NQ1, NQ2, NQ3)
111 CONTINUE
RETURN
```



START (forts.)

```
25      120 LIN=7A LUN=4
          CIM=3.0*IM
          DO 129 KST=1, KSTM
          BST(KST)=0.0
30      129 CONTINUE
          KKL=KKL-1
          DO121 NAV=1, 3
          CALL TGET(LIN, KKL)
          CALL TPUT(LUN, KKL)
          NQ1=1
35      NQ2=KSTM
          NQ3=0
          CALL TFPUT(NAV, NQ1, NQ2, NQ3)
          DO 130 KST=1, KSTM
          DO 131 I=1, IM
40      BST(KST)=BST(KST)+X(I, 1, KST)
          131 CONTINUE
          130 CONTINUE
          121 CONTINUE
          KKL=KKL+1
45      DO 132 KST=1, KSTM
          BST(KST)=BST(KST)/CIM
          132 CONTINUE
          RETURN
          END
```

INIT

```
1      SUBROUTINE INIT
          COMMON/HQVE/ X(16, 32, 98)
          REAL KZ
          COMMON/DIV/ DZ(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOV(3), T, DELT, BST(29)
5      2, M1, M2, M3, D, SIGT
          COMMON/DJM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
          COMMON/STRIK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
          2, KV2, KU3, KV3, KZ0, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
10      3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
          FF(A, B)=SQRT(A*A+B*B)
          ISTART(J)=(J-1)*IR+1
          AA=0.95
          BB=1.06
          CKZ=1.2
15      CKZ2=1.4
          CALL VIND
          IU=ISTART(KU1)
          IV=ISTART(KV1)
          IRU=ISTART(KR1)
20      IRV=ISTART(KR2)
          IZ=ISTART(KDZ1)
          IVK=ISTART(KVK)
          DO 103 J=1, JM A DO 103 I=1, IM
          UU=X(IU)=X(IRU)
25      VV=X(IV)=X(IRV)
          UZ=FF(UU, VV)
          KZ=X(IVK)
          IF(UZ.LT.1.0) UZ=1.0
          TYK=0.5*(DZ(1)+DZ(2))
30      DZDT=UZ*AA*(KZ/(TYK*UZ))**BB
          X(IZ)=DZDT
          IU=IU+1 A IV=IV+1 A IRU=IRU+1 A IRV=IRV+1
          IZ=IZ+1 A IVK=IVK+1
103     CONTINUE
35      CALL RANDA(KU1, KV1, KR1)
          NIV=1
          NQ3=0
          NQ1=30
          NQ2=4
40      CALL TFPUT(NIV, NQ1, NQ2, NQ3)
          IU=ISTART(KU2)
          IV=ISTART(KV2)
          IRU=ISTART(KR3)
          IRV=ISTART(KR4)
45      IZ=ISTART(KDZ2)
          IVK=ISTART(KVK)
          DO 104 J=1, JM A DO 104 I=1, IM
          UU=X(IU)=X(IRU)
          VV=X(IV)=X(IRV)
50      UZ=FF(UU, VV)
          IF(UZ.LT.1.0) UZ=1.0
```

INIT (forts.)

```

KZ=X(IVK)*CKZ
TYK= 0.5*(DZ(2)+DZ(3))
DZDT=UZ*AA*(KZ/(TYK*UZ))*BB
55 X(IZ)=DZDT
IU=IU+1 A IV=IV+1 A IRU=IRU+1 A IRV=IRV+1
IZ=IZ+1 A IVK=IVK+1
104 CONTINUE
NIV=2
60 NQ3=0
CALL RANDA(KU2, KV2, KR1)
NQ1=30
NQ2=4
CALL TFPUT(NIV, NQ1, NQ2, NQ3)
65 IU =ISTART(KU3)
IV =ISTART(KV3)
IRU=ISTART(KR5)
IRV=ISTART(KR6)
IZ =ISTART(KJZ3)
70 IVK=ISTART(KVK)
DO 105 J=1, JM A DO 105 I=1, IM
UU=X(IU)=X(IRU)
VV=X(IV)=X(IRV)
UZ=FF(UU, VV)
75 KZ=X(IVK)*CKZ2
IF(UZ.LT.1.0) UZ=1.0
TYK=DZ(3)
DZDT=UZ*AA*(KZ/(TYK*UZ))*BB
X(IZ)=DZDT
80 IU=IU+1 A IV=IV+1 A IRU=IRU+1 A IRV=IRV+1
IZ=IZ+1 A IVK=IVK+1
105 CONTINUE
CALL RANDA(KU3, KV3, KR1)
NIV=3
85 NQ3=0
NQ1=30
NQ2=4
CALL TFPUT(NIV, NQ1, NQ2, NQ3)
RETURN
90 END

```

RANDA

```

1 SUBROUTINE RANDA(KUX, KVX, LC)
COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XDV(3), T, DELT, BST(29)
2, M1, M2, M3, D, SIGT
5 COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
COMMON/STRUK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
2, KV2, KU3, KV3, KZO, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
IDR=(M1-1)*IR+1
10 DO 1 I=1, IR
X(IDR)=0.0
1 IDR=IDR+1
RETURN
ENTRY RANDU
RETURN
ENTRY RAND2
RETURN
END

```

FILE

```

1 SUBROUTINE FILE
COMMON/FILE/IFIT(36)
EXTERNAL ERR
5 CALL FILEWA(IFIT, 3LLFN, 5LFILE1, 2LFO, 2LWA, 2LRT, 1LF, 2LFL, 5120, 3LERL,
15, 2LEX, ERR)
CALL OPENM(IFIT, 3LI-0)
RETURN
END

```

ERR

```

1 SUBROUTINE ERR
COMMON /FILE/ IFIT(36)
101 PRINT 101, IFIT
5 CALL CLOSEM(IFIT)
STOP
END

```

TGET

```
1      SUBROUTINE TGET (LD,KPL)
      COMMON/HOVE/ X(16,32,98)
      BUFFER IN (LD ,1) (X(1,1,1) , X(16,32,29) )
      IF (UNIT(LD)) 2,3,4
5      2 CONTINUE
      PRINT 201,LD,KPL
201  FORMAT(*ODATA FRA TIME : * 215)
      RETURN
      3 PRINT 100,LD,KPL
10     100 FORMAT (*OFEIL DATAOVERFØRING: EOF*1/ * PA INPUT TAPE* 215)
      STOP
      4 PRINT 200,LD,KPL
200  FORMAT (*OFEIL DATAOVERFØRING:      * / * PA INPUT TAPE* 215)
      STOP
15     END
```

TPUT

```
1      SUBROUTINE TPUT (LUP,KPL)
      COMMON/HOVE/ X(16,32,98)
      BUFFER OUT (LUP,1) (X(1,1,1) , X(16,32,29) )
      IF (UNIT(LUP)) 2,3,4
5      2 CONTINUE
      PRINT 201 ,LUP,KPL
201  FORMAT (*O DATA PA TAPE TIME : *,215)
      RETURN
      3 PRINT 100,LUP,KPL
10     100 FORMAT (*OFEIL DATAOVERFØRING: EOF* / * PA OUTPUT TAPE* 215)
      STOP
      4 PRINT 200,LUP,KPL
200  FORMAT (*OFEIL DATAOVERFØRING:      * / * PA OUTPUT TAPE* 215)
      STOP
15     END
```

TFGET

```
1      SUBROUTINE TFGET(NIV,IFL,NFL,KR)
C      LESER FLAK FRA FILE, NIV=NIVA, IFL=FLAK NR. , NFL ANTALL FLAK
C      DATA LEGGES TIL PLASS KR I X HVIS KR>0
      COMMON/HOVE/ X(16,32,98)
5      COMMON /FILE/ IFIT(36)
      EXTERNAL ERR
      J=((NIV-1)*33+IFL-1)*512+1
      IF (NFL.GT.1) KR=0
      IF (KR.GT.0) NFL=1
10     JFL=IFL+NFL-1 A KT=KR
      DO 1 K=IFL,JFL
      IF (KR.EQ.0) KT=K
      CALL GET(IFIT,X(1,1,KT),J,0,0,5120,ERR)
      J=J+512
15     1 CONTINUE
      RETURN
      END
```

TFPUT

```
1      SUBROUTINE TFPUT(NIV,IFL,NFL,KR)
C      LESER FLAK TIL FILE, NIV=NIVA, IFL=FLAK NR. , NFL ANTALL FLAK
C      DATA HENTES FRA PLASS KR I X HVIS KR>0
      COMMON/HOVE/ X(16,32,98)
5      COMMON /FILE/ IFIT(36)
      EXTERNAL ERR
      J=((NIV-1)*33+IFL-1)*512+1
      IF (NFL.GT.1) KR=0
      IF (KR.GT.0) NFL=1
10     JFL=IFL+NFL-1 A KT=KR
      DO 1 K=IFL,JFL
      IF (KR.EQ.0) KT=K
      CALL PUT(IFIT,X(1,1,KT),5120,J,0,0 ,ERR)
      J=J+512
15     1 CONTINUE
      RETURN
      END
```

### 3. UTSLIPP

Utslippsdata for området er utarbeidet i samarbeid med Kontrollseksjonen, SFT, og er beskrevet i vedlegg A i hovedrapporten (1). En regner her med utslipp av 9 forskjellige kjemiske komponenter, som kan skje på 4 forskjellige måter:

- a. arealutslipp fordelt etter trafikk tetthet, nedenfor kalt X
- b. " " " befolkningstetthet, " " Y
- c. " " " skogdekningsgrad, " " T
- d. utslipp fra punktkilder

I programmet behandles utslippene ved at de gir sitt bidrag til konsentrasjonsendringen med tiden  $dC_i/dt$  som legges i feltene 35-63 i /HOVE/. Utslipp av type a, b og c behandles av rutinen EMIS hver gang vi er i nivå 1, mens utslipp av type d skjer i høye piper og beregnes for nivå 3 ved rutinen PUFF.

#### 3.1 EMIS

I et program AREA som er beskrevet i vedlegg A, er det midlere døgnutslipp for de enkelte km<sup>2</sup>-ruter beregnet på forhånd og lagret på en fil som kalles EMIS, 19 utslippsfelter, X(1-9), Y(1-6) og T(1-4), tilsvarende type a, b og c ovenfor.

Tabell 3.1 viser lagringsstrukturen for utslippsdata. Utslipppet er angitt i molekyler/time · m<sup>3</sup>, basert på at utslippet er jevnt fordelt innen en boks på 1000x1000x50 m.

Tabell 3.1: Utslippsfelter på filen EMIS.

	X	Y	T
Formaldehyd	X1	Y1	-
Acetaldehyd	X2	Y2	-
N-butan	X3	Y3	T1
Etylen	X4	Y4	T2
Xylen	X5	Y5	T3
Propylen	X6	Y6	T4
CO	X7	-	-
NO-N	X8	-	-
NO <sub>2</sub> -N	X9	-	-

Hver gang vi i hovedprogrammet begynner på en ny time, leser vi i nivå 1 ned utslippsfeltene i rutinen EMIS. X-feltene multipliseres med uke- og døgnfaktorene for trafikk, Y-feltene for annen virksomhet, mens T-feltene brukes som de er. Feltene adderes, og utslippene legges på riktig plass ifølge tabell 1.2. i en matrise B med 29 felter, som på forhånd er nullstilt. Denne matrisen legges så på fil 2. Utslippet er her angitt som molekyler/sekund  $\cdot$  m<sup>3</sup>.

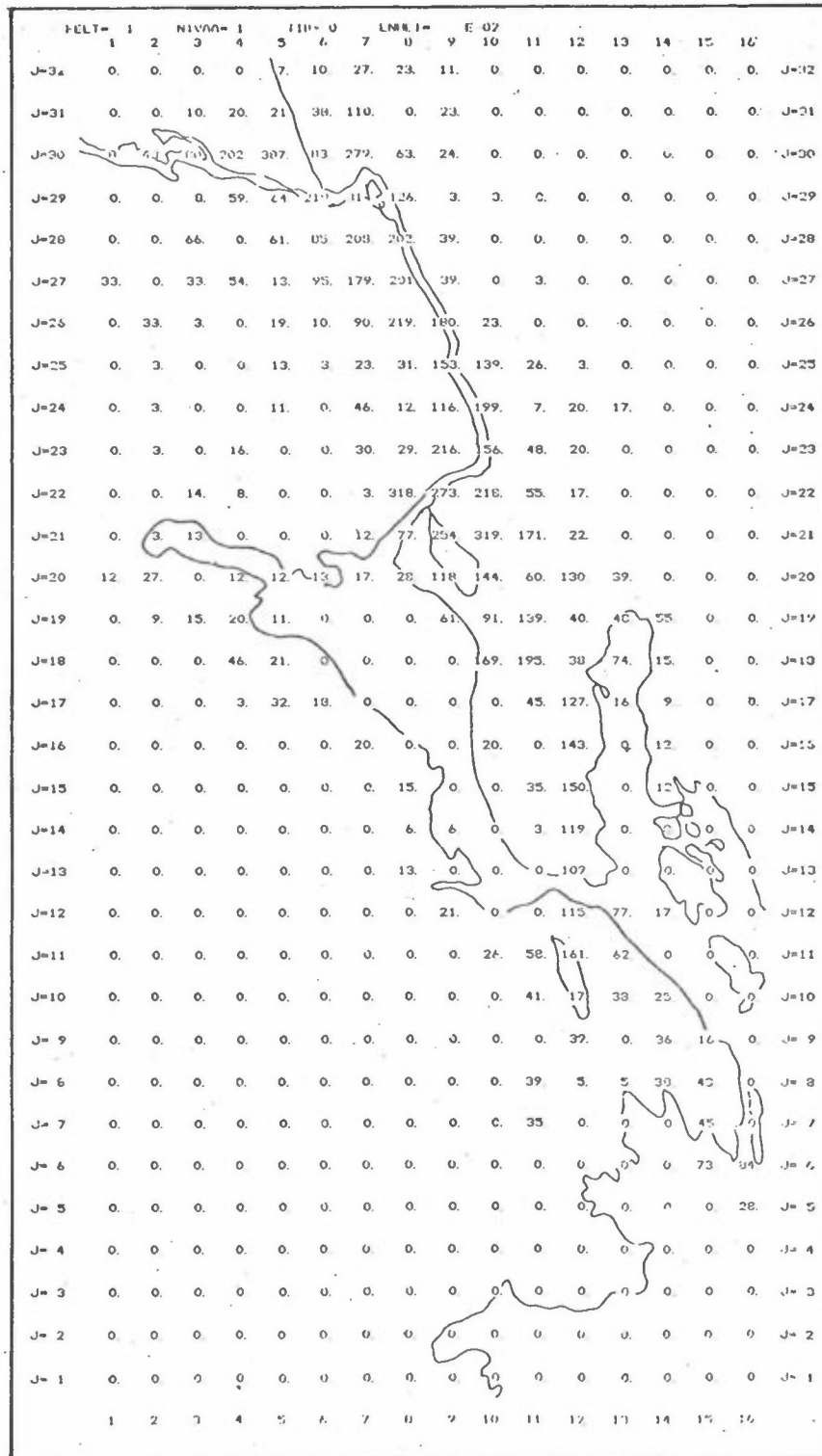
For hvert tidsskritt i nivå 1 leses utslippsfeltet ned fra file 2 til plass 35-63 i /HOVE/, der de deriverte av konsentrasjonene med hensyn på tiden  $dc_i/dt$  etter hvert samles opp før integrasjon foretas i rutinen KJEMR.

Bidraget fra utslippsgruppene a., b. og c. til de enkelte forurensningskomponenter er summert, og i figur 3.1-3.9 er det vist midlere døgnutslipp for hydrokarboner, CO og nitrogenoksyder, angitt som kg/døgn km<sup>2</sup>.

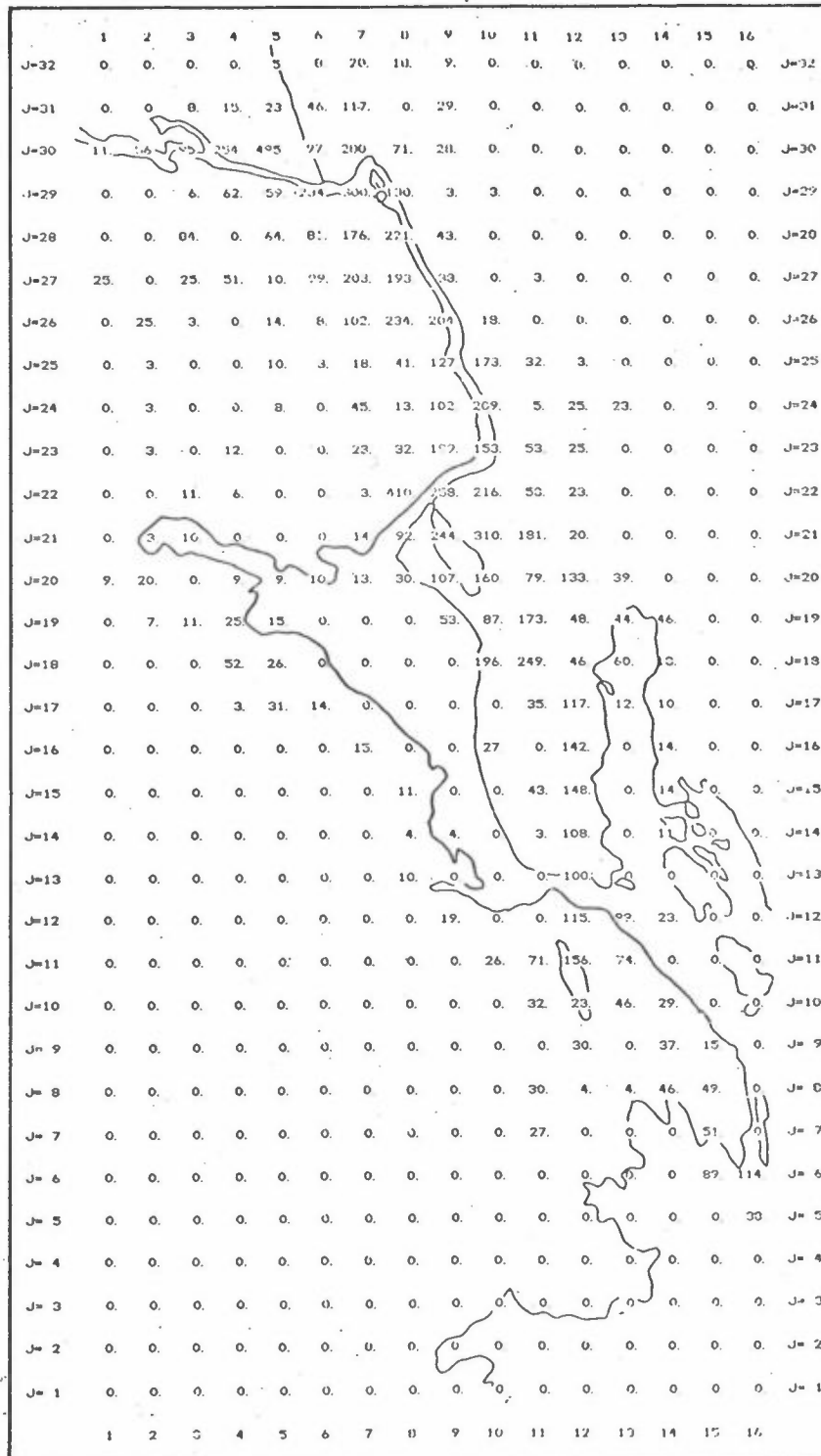
### 3.2 PUFF

I tabell 3.2 (tabell A9 i vedlegg A til hovedrapporten (1)) er det ført opp de punktkildene som er av betydning for modellberegningene. Nedre grense for utslipp har vært satt til 0.5 kg HC/time, 10 kg CO/time og 3 kg NOX-N/time.\* Mindre pipeutslipp er tatt med i arealkildene og fordelt etter befolkningstettheten.

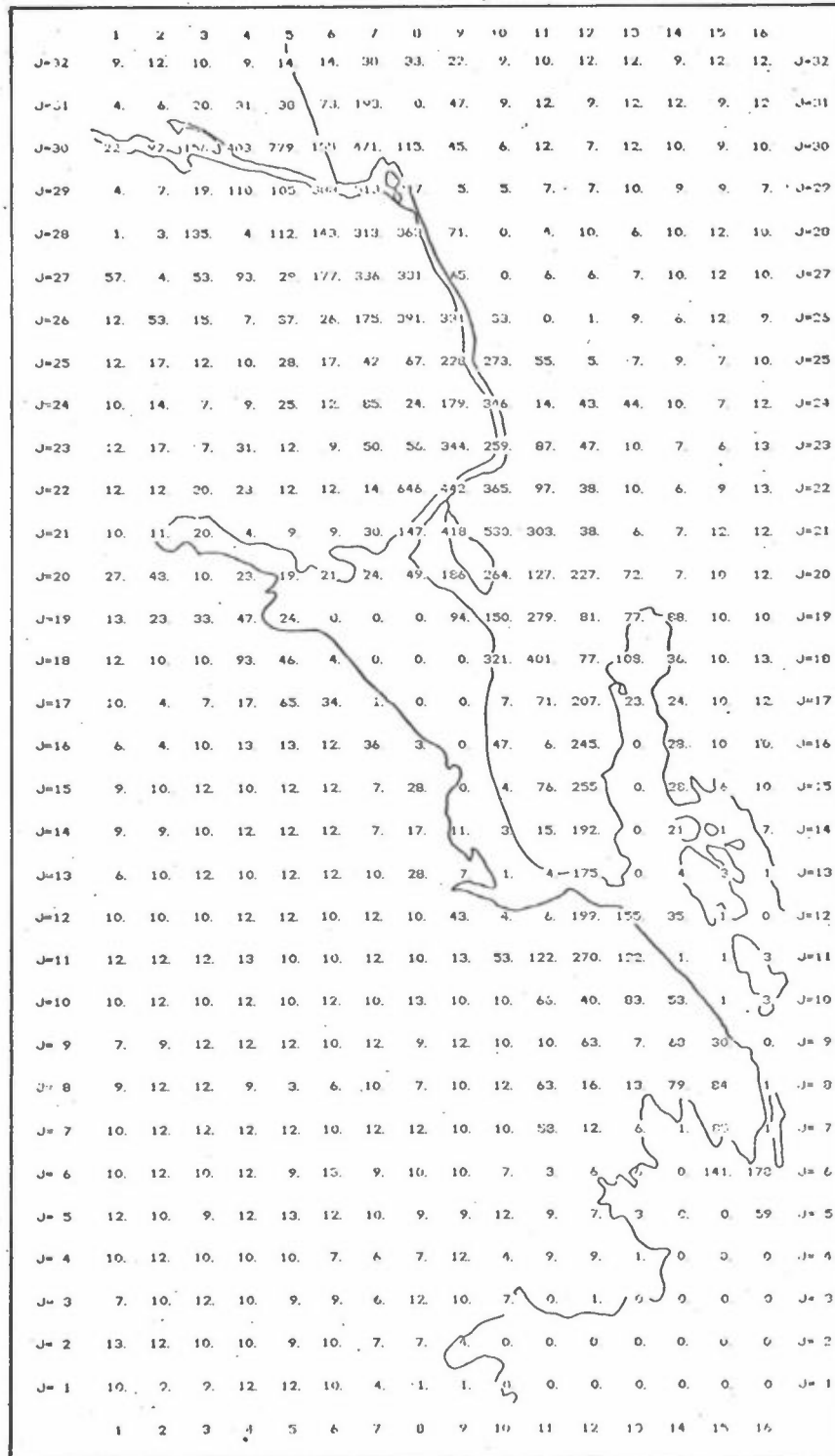
\* NOX-N betyr nitrogenoksyder (NOX) regnet som nitrogen (N).



Figur 3.1: Midlere døgnutslipp av formaldehyd (CH<sub>2</sub>O) for hver km<sup>2</sup>.  
 Enhet: 10<sup>-2</sup> kg/døgn.

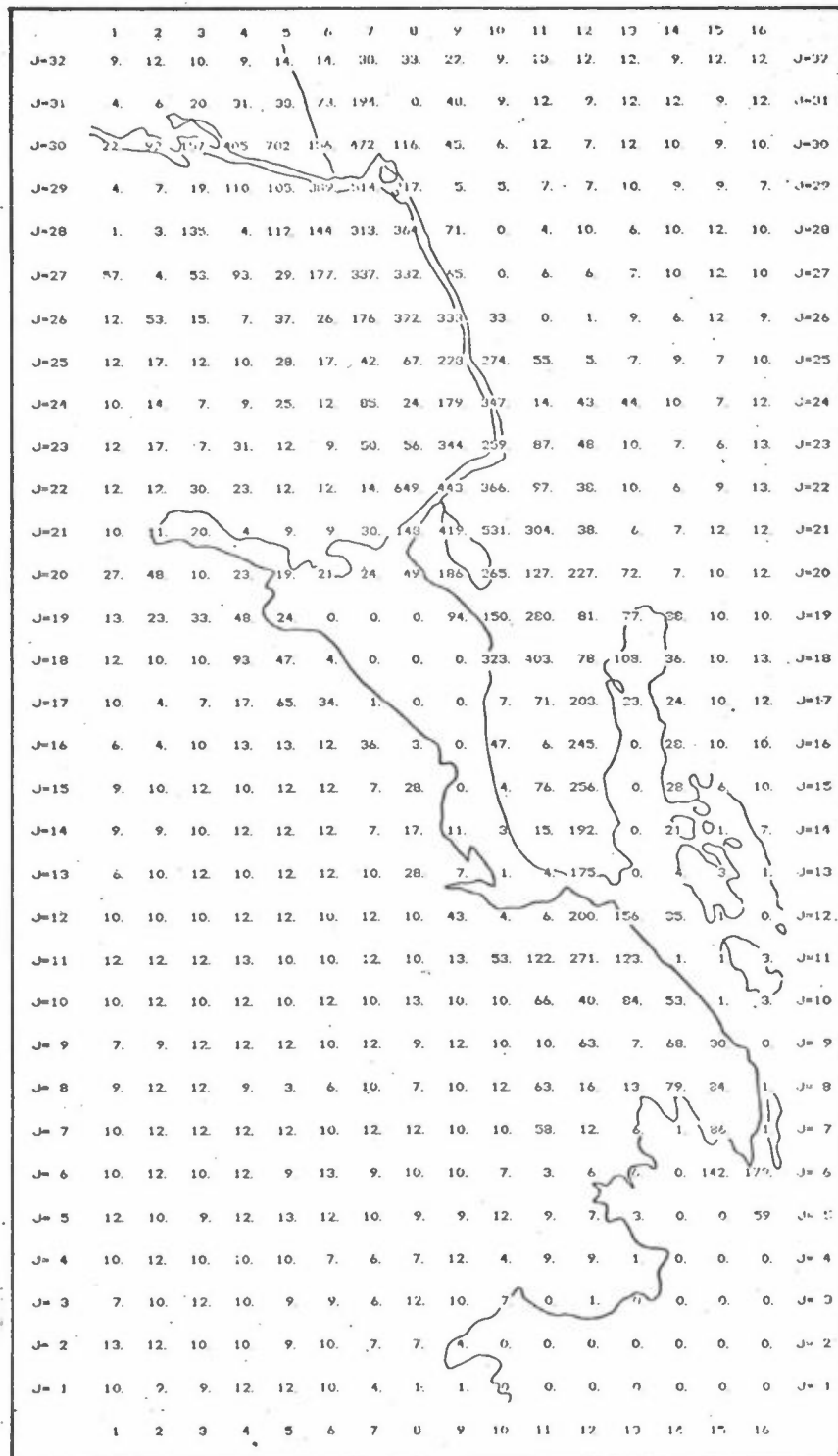


Figur 3.2: Midlere døgnutslipp av acetaldehyd (CH<sub>3</sub>CHO) for hver km<sup>2</sup>.  
 Enhet: 10<sup>-2</sup>kg/døgn.

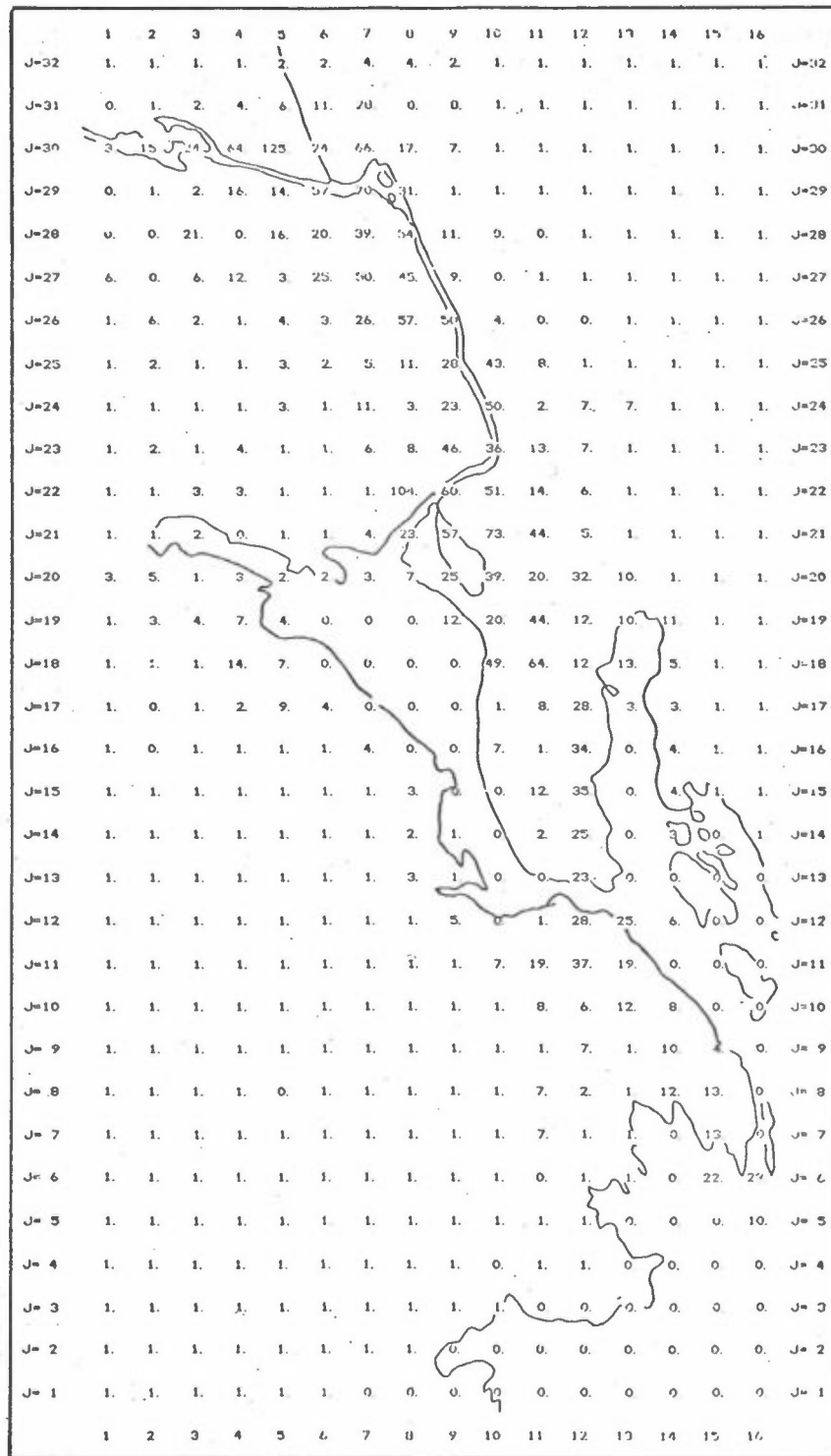


Figur 3.3: Midlere døgnutslipp av n-butan ( $C_4H_{10}$ ) for hver  $km^2$ .  
 Enhet:  $10^{-1}$  kg/døgn.

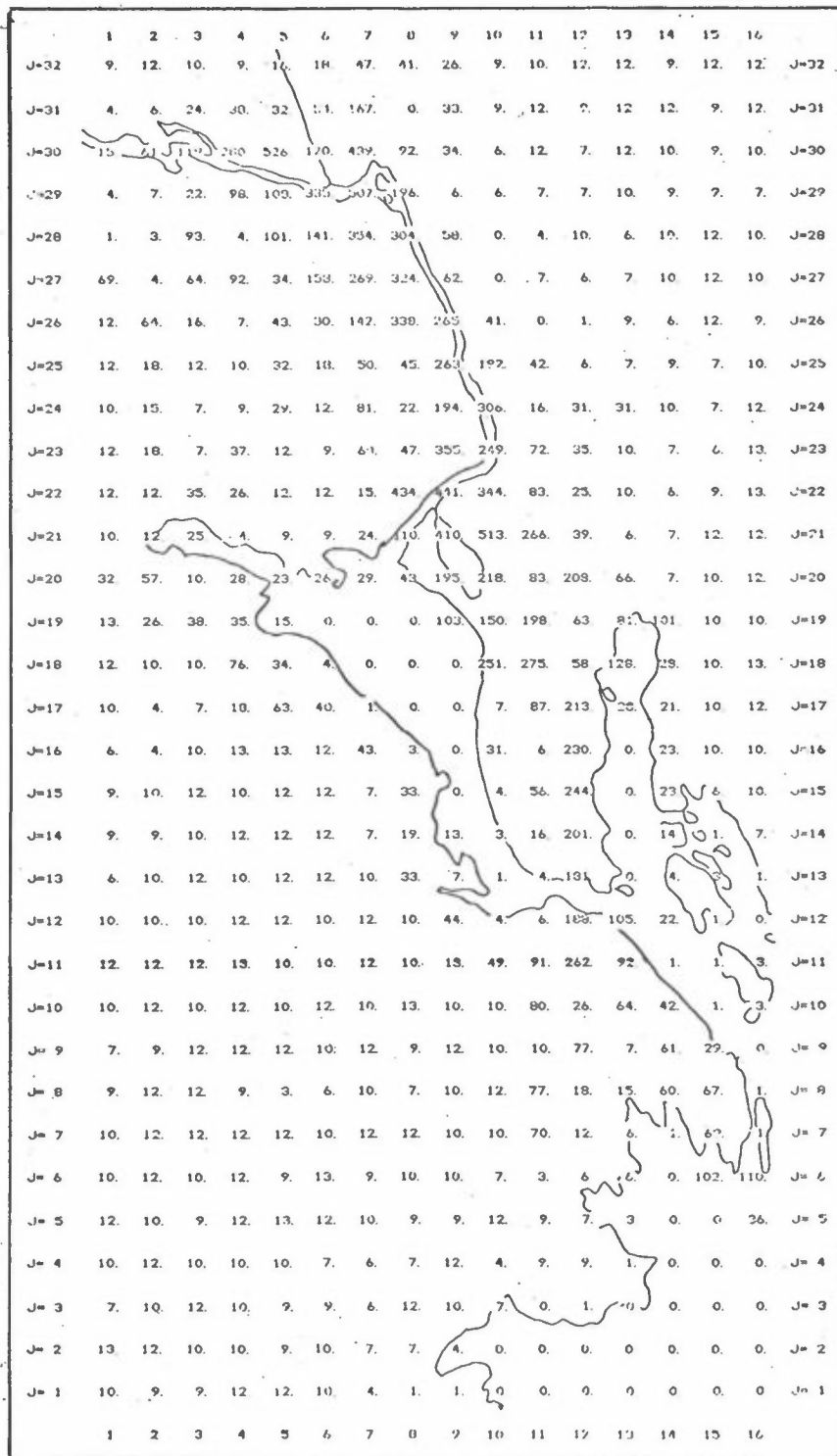




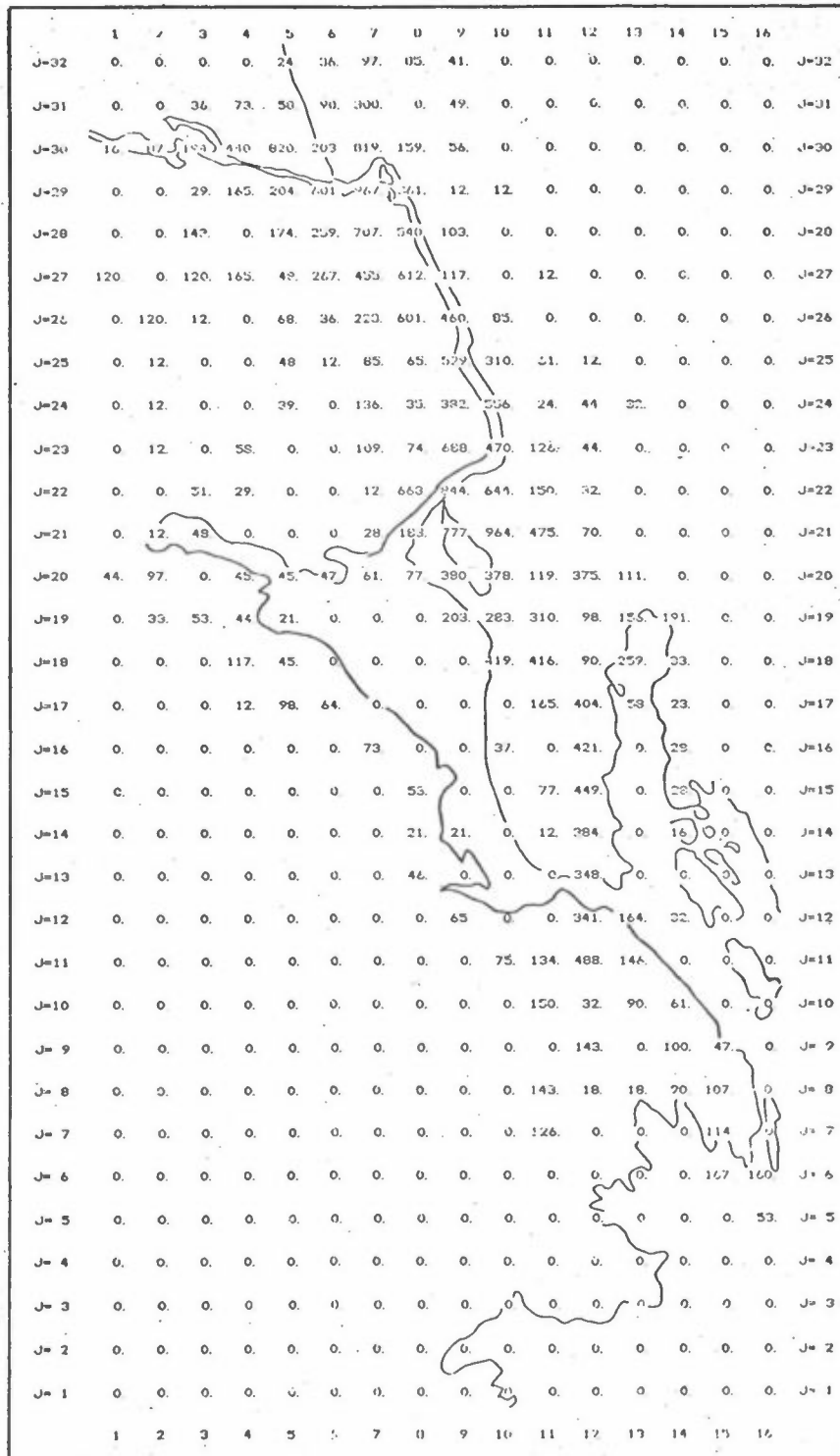
Figur 3.4: Midlere døgnutslipp av etylen ( $C_2H_4$ ) for hver  $km^2$ .  
 Enhet:  $10^{-1}$  kg/døgn.



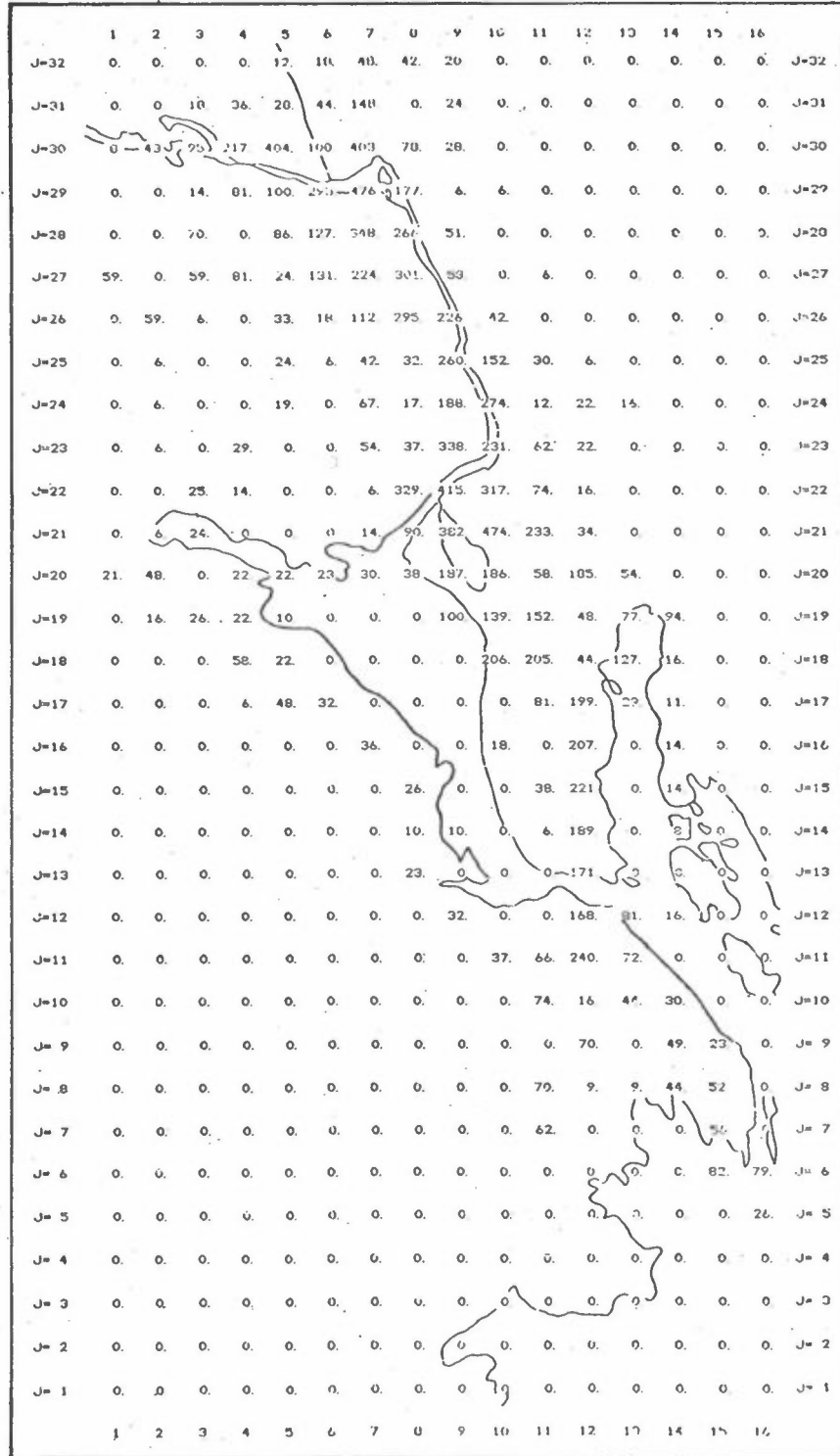
Figur 3.5: Midlere døgnutslipp av xylen ( $C_8H_{10}$ ) for hver  $km^2$ .  
 Enhet:  $10^{-1}$  kg/døgn)



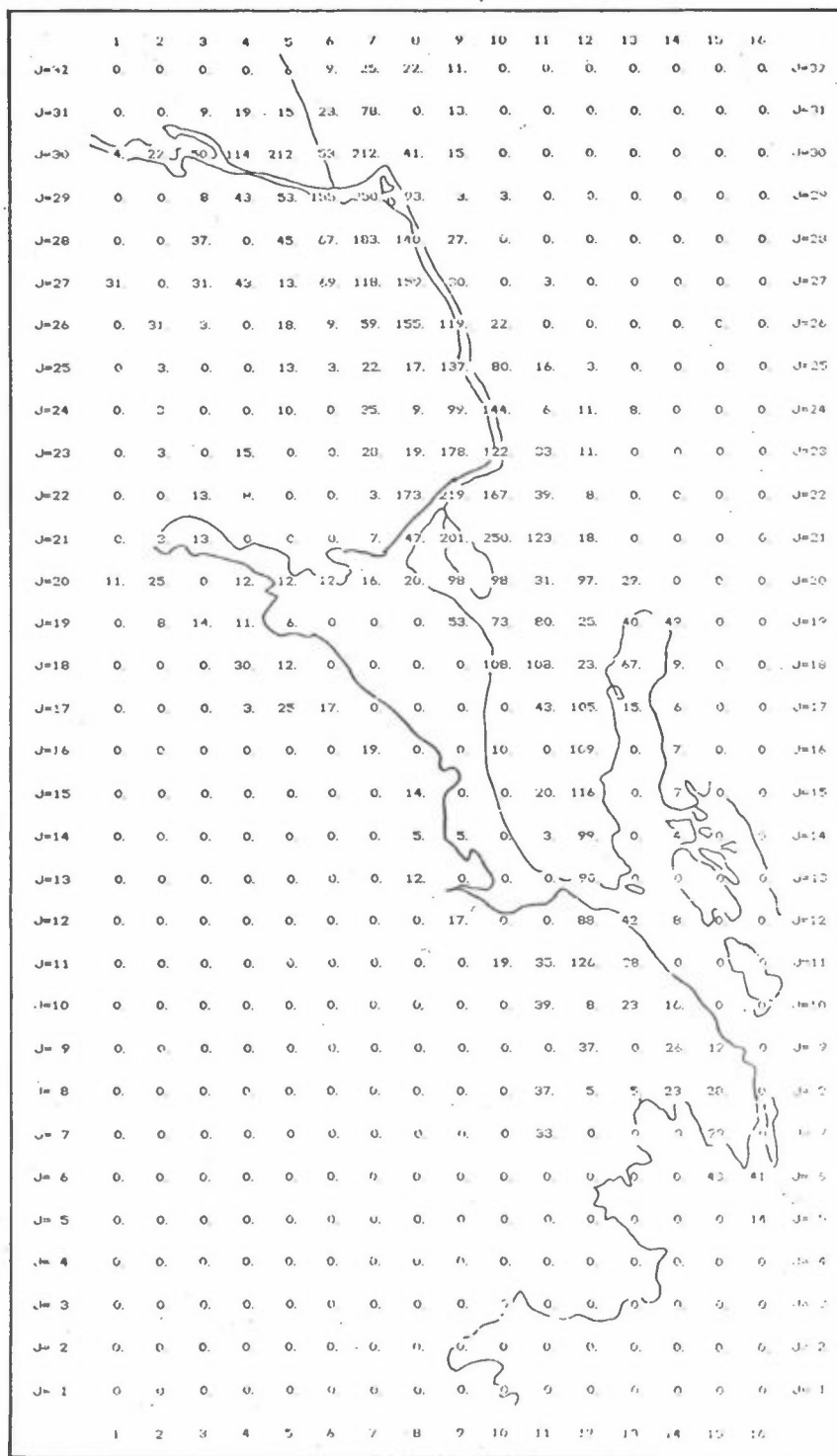
Figur 3.6: Midlere døgnutslipp av propylen ( $C_3H_6$ ) for hver  $km^2$ .  
 Enhet:  $10^{-1}$  kg/dogn.



Figur 3.7: Midlere døgnutslipp av karbonmonoksyd (CO) for hver km<sup>2</sup>.  
 Enhet: kg/døgn.



Figur 3.8: Midlere døgnutslipp av nitrogenmonoksyd (NO) for hver km<sup>2</sup>.  
 Enhet: 10<sup>-1</sup> kg/døgn.



Figur 3.9: Midlere døgnutslipp av nitrogendioksyd (NO<sub>2</sub>) for hver km<sup>2</sup>.  
 Enhet: 10<sup>-2</sup> kg/døgn.

Tabell 3.2: Utslipp av HC, CO og NO<sub>x</sub> fra punktkilder, Grenland

Navn	x (km)	y (km)	h (m)	d (m)	t <sub>g</sub> (°C)	v <sub>g</sub> (m/s)	HC (kg/h)	Indeks	CO (kg/h)	NO <sub>x</sub> (kg/h)	NO <sub>2</sub> /NO <sub>x</sub>
PF MGI	8.6	20.0	35	1.2	130	14.5	0.5	3		2.9	0.05
PF MGI A	8.8	19.8	40	1.4	300	16.6	0.5	3		2.9	0.05
PF MG4	8.7	20.4	42	2.0	210	13.3	0.7	3		4.3	0.05
PF S2	8.6	20.5	91	3.2	20	8.0			860		
PF S3	8.5	20.6	100	3.2	20	8.0			1140		
PF FA	8.3	20.3	59	1.5	65	11.6				4.8	0.05
PF F24A	8.0	20.7	50	0.9	90	18.5				8.4	0.05
PF N2	8.6	20.6	80	2.5	200	23.6	4.2	3		25.9	0.05
PF DAMP	8.5	19.9	38	1.6	15	7.6	1.4	3		8.7	0.05
PF NITROSE	8.6	20.1	100	3.0	20	14.0				112.3	0.5
NORCEM 4	12.1	13.8	50	4.0	188	4.1	1.0	3		50.2	0.25
NORCEM 5	12.1	13.8	50	4.0	150	3.3	1.6	3		41.4	0.25
NORCEM 6	12.1	13.8	50	4.0	177	5.6	2.1	3		68.5	0.25
BA DAMP	7.2	17.2	50	2.8	160	10.7	1.0	3		18.3	0.05
BA ETYLEN	7.2	17.2	50	3.9	250	5.5				12.5	0.05
BA IAVF	6.8	17.1	130							7.6	0.05
BA VCM	6.7	17.7	50	2.7	110	5.4	300.0	7		6.1	0.05
BA SAGA	8.0	16.3	60	2.5	200	5.0	1.2	1		7.3	0.05

Som det fremgår av tabell 3.2, skjer de fleste utslippene fra skorsteiner lavere enn 100 m, men utslippsbetingelsene forøvrig tilsier en overhøyde som gjør at en kan regne med at punktkildene har sitt utslipp i nivå 3, over 100 m. Rutinen PUFF behandler utslippene fra punktkildene i beregningene. I rutinen PIPER leses først pipe-data, og det regnes ut hvor meget av de 9 komponentene hver pipe slipper ut pr. sekund. For hvert tidsskritt (1 minutt) slipper hver skorstein et puff med forurensninger. Puffet beveger seg så med vindfeltet fra tidsskritt til tidsskritt mens det samtidig øker i bredde  $b$  og høyde  $h$  p.g.a. turbulens:

$$b_{t+dt} = b_t + \Delta t \cdot u \cdot \sigma_\theta \cdot B, \quad (3.1)$$

hvor  $u$  = vindstyrken

$\Delta t$  = tidsskrittet

$\sigma_\theta$  = standardavviket i vindretningsfluktuasjonene.

En typisk verdi for denne spredningsparameteren er 10-15°

$B = 1.0$  for  $b_t < 100$  m,  $0.5$  for  $b_t \geq 100$  m

Økningen av høyden fåes ved integrasjon av ligning C6 i vedlegg C til hovedrapporten:

$$h_{t+dt}^{2,06} = h_t^{2,06} + 271.6 \cdot \Delta t \cdot K_z \quad (3.2)$$

hvor  $K_z$  : den vertikale turbulente utvekslingskoeffisient.

Når et puff har vokst slik at det er større enn halvparten av rutestørrelsen, tilføres forurensningene den ruten puffet befinner seg i, og  $dC_i/dt$ -feltene får bidrag tilsvarende mengden av forurensninger i puffet, uttrykt ved utslippet multiplisert med tidsskrittet, og angitt som molekyler/m<sup>3</sup> · sek. Hvis et puff har drevet med vinden i 40 tidsskritt uten å sprekke, sprekker det der det måtte befinne seg. Et puff kan godt bevege seg utover randen av modellområdet og så komme inn igjen, men puff som sprekker utenfor området regnes ikke med. For hver ny time fore-



tas det først en sanering av puffene slik at bare puff fra forrige time som ennå ikke har sprukket, kan bevege seg videre.

### 3.3 Programutskrifter

```

                                                    EMIS
1          SUBROUTINE EMIS(K,L)
C          LESER UTSLIPPSFELT FRA FILE 1
C          GIR UTSLIPPET Z I MOLEKYLER PR. SEKUND FOR 9 KOMPONENTER KL. L,
C          UKEDAG K
5          OG LEGGER DET I FLAK 35-63, SAMT PA FILE 2
C          RUTINEN KALLES HVER TIME
C          COMMON /HOVE/
A          X(16,32,9), Y(16,32,6), T(16,32,4), Z(16,32,9)
1          D(16,32,6) , B(16,32,29), C(16,32,35)
10         COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, W(3), IR, IM2, JM2
          DIMENSION UKE(7), DOGT(24), DOGN(24)
          DIMENSION NPL(9), ZZ(9)
          DATA UKE/2(1.05), 3(1.1), 2(0.8)/
          DATA DOGT/0.2, 2(0.1), 0.0, 0.1, 0.3, 0.9, 2(1.1), 1.2, 1.4, 4(1.6), 1.9,
15         12(1.6), 1.5, 1.3, 1.2, 0.9, 0.7, 0.4/
          DATA DOGN/4(.6), 2(0.8), 2(1.0), 2(1.2), 6(1.4), 2(1.2), 2(1.0), 2(0.8),
          12(0.6)/
          DATA NPL./17, 18, 25, 23, 26, 24, 16, 2, 29/
          NUL=IR*29
20         FA=1.0/(60.*60.)
          REWIND 1
          READ (1) X, Y, T
          FAK=UKE(K)*FA
          DOT=DOGT(L)*FAK A DOB=DOGN(L)*FAK
25         DO 1 I=1, NUL
1          B(I)=0.0
          IS=1
          DO 4 J=1, JM A DO 4 I=1, IM
          L=IS
30         DO 2 M =1, 6
          ZZ(M)=X(L)*DOT+Y(L)*DOB
2          L=L+IR
          DO 5 M=7, 9
          ZZ(M)=X(L)*DOT
35         5 L=L+IR
          L=IS
          DO 3 M=1, 4
          N=M+2
          ZZ(N)=ZZ(N)+T(L)*FA
40         3 L=L+IR
          L=IS
          IS=IS+1
          DO 4 M=1, 9
          Z(L)=ZZ(M)
          L=L+IR
45         4 CONTINUE
          KS=1
          DO 6 M=1, 9
          J=NPL(M)
          MS=(J-1)*IR+1
          DO 6 I=1, IR
          B(MS)=Z(KS)
          KS=KS+1 A MS=MS+1
50         6 CONTINUE
          WRITE(2) B
          IPR=0
          IPR=1
          IF (IPR.EQ.0) RETURN
          DO 7 M=1, 9
          N=M+19
60         CI=0.0 A NIV=1 A ITID=L
          CALL SKRV(N, M, NIV, ITID, CI)
          7 CONTINUE
          RETURN
65         END
```

UTSL

```
1      SUBROUTINE UTSL
      COMMON /HOVE/ A(16,32,34),B(16,32,29),C(16,32,35)
      REWIND 2
      READ (2) B
5      RETURN
      END
```

PUFF

```
1      SUBROUTINE PUFF(KS)
      COMMON /HOVE/ XX(16,32,29),U(16,32),V(16,32),AKZ(16,32),D(16,32,2)
1. AX(16,32,29),Z(16,32,35)
      COMMON /PUF/ X(800,6)
5      COMMON/UITM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, W(3), IR, IM2, JM2
      COMMON /KILDE/ NQ,GNAVN(20),QX(20),QY(20),IQ(20),YNU(20),ZNU(20)
1. QC(20,9)
      DIMENSION NPL(9)
      DATA NPL/17,18,25,23,26,24,16,2,29/
10     DIA(A,B)=SQRT(A*A+B*B)
      C
      L=0
      IF (KS.GT.0) GO TO 2
      YL=250.
      ZL=50.
      DXY=DX
15     C
      PIR=3.14/180.
      SIGM=25 0
      SIGT=SIGM*PIR
      FAK=DT
      XMIN=FAK/60.
      TIDP=XMIN*40.
      XMA=(IM+0.5)*DXY A YMA=(JM+0.5)*DXY
25     XMI=YMI=0.5*DXY
      CALL PIPER
      C
      LESER FØRST PIPE-DATA
      GO TO 12
30     C 2 CONTINUE
      MÅ FØRST OVERFØRE AKTIVE PUFF FRA FORRIGE TIME
      DO 1 M=1,NP
      IF (X(M,3).EQ.0) GO TO 1
      L=L+1
      DO 4 N=1,6
35     4 X(L,N)=X(M,N)
      1 CONTINUE
      N=0
      C
      SA SKAL PUFFENE BEVEGE SEG
      DO 7 M=1,L
40     N=N+1
      IX=X(M,1)/DXY+0.5 A IY=X(M,2)/DXY+0.5
      IF (IX.LE.0) IX=1
      IF (IX.GT.IM) IX=IM
      IF (IY.LE.0) IY=1
45     IF (IY.GT.JM) IY=JM
      UU=U(IX,IY) A VV=V(IX,IY)
      HAST=DIA(UU,VV)
      X(N,1)=X(M,1)+FAK*UU
      X(N,2)=X(M,2)+FAK*VV
50     X(N,3)=X(M,3)
      SIGY=X(M,4)
      B=1.0 A IF (SIGY.GE.100.) B=0.5
      X(N,4)=SIGY+DT*HAST*SIGT*B
      X(N,5)=(X(M,5)**2.06+DT*271.6*AKZ(IX,IY))**0.49
55     X(N,6)=X(M,6)+XMIN
      IF (X(N,4).GT.YL) GO TO 6
      IF (X(N,5).GT.ZL) GO TO 6
      IF(X(N,6).GT.TIDP) GO TO6
      GO TO 7
60     6 IK=X(N,3)
      X(N,3)=0.0
      C
      PUFF SOM SPREKKER UTENFOR OMRADET REGNES IKKE MED
      IF (X(N,1).GT.XMA) GO TO 8
      IF (X(N,1).LT.XMI) GO TO 8
65     IF (X(N,2).LT.YMI) GO TO 8
      IF (X(N,2).GT.YMA) GO TO 8
      IRU=IY*JM+IX
      DO 5 JK=1,9
      QQ=QC(IK,JK)
70     C
      QC HAR DIMENSJONEN MOLEKYLER/MINUTT
```

PUFF (forts.)

```
IF (QQ. LE. 0.) GO TO 5
IFL=NPL(JK)
IPL=IRU+(IFL-1)*IR
AX(IPL)=AX(IPL)+QQ/(60.*W(3))
75 C I AX LIGGER DE DERIVERTE DX/DT, OG
C DX/DT HAR DIMENSJONEN MOLEKYLER/M3*SEK
5 CONTINUE
GO TO 7
8 CONTINUE
80 7 CONTINUE
12 CONTINUE
C NYE PUFF
DO 3 M=1, NQ
L=L+1
85 X(L, 1)=QX(M)
X(L, 2)=QY(M)
X(L, 3)=M
X(L, 4)=YNU(M)
X(L, 5)=ZNU(M)
90 X(L, 6)=0. 0
3 CONTINUE
NP=L
RETURN
END
```

PIPER

```
1 SUBROUTINE PIPER
COMMON /KILDE/ NQ, QNAVN(20), QX(20), QY(20), IQ(20), YNU(20), ZNU(20)
1, QC(20, 9)
5 COMMON /FAKT/ FAK(6, 8)
DIMENSION Y(3)
DIMENSION AMOL(9)
DATA AMOL/30., 44., 58., 28., 106., 42., 28., 14., 14. /
TUS=1000.
AVOGA=6. 02257E23
FA=AVOGA*1000. /60.
10 DO 7 II=1, 6
READ 103, (FAK(II, JJ), JJ=1, 8)
103 FORMAT (8F8. 2)
7 CONTINUE
15 I=1
1 READ 101, QNAVN(I), QX(I), QY(I), QHC, IQ(I), Y, YNU(I), ZNU(I)
101 FORMAT(A10, 2F5. 1, 20X, F5. 1, I5, 3F5. 1, 2F5. 1)
IF (QX(I). LE. 0) GO TO 6
DO 2 J=1, 9
20 2 QC(I, J)=0. 0
IF (IQ(I). LE. 0) GO TO 4
DO 3 J=1, 6
3 QC(I, J)=QHC*FAK(J, IQ(I))
4 QC(I, 7)=Y(1)
25 QC(I, 8)=Y(2)*(1. 0-Y(3))
QC(I, 9)=Y(2)*Y(3)
PRINT 102, QNAVN(I), QX(I), QY(I), IQ(I), (QC(I, J), J=1, 9)
102 FORMAT (1X, A10, 2F8. 2, I4, 9F8. 2)
30 QX(I)=QX(I)*TUS
QY(I)=QY(I)*TUS
DO 5 J=1, 9
QC(I, J)=QC(I, J)*FA/AMOL(J)
5 CONTINUE
IF (YNU(I). LE. 0.) YNU(I)=1. 0
35 IF (ZNU(I). LE. 0.) ZNU(I)=1. 0
I=I+1 A GO TO 1
6 NQ=I-1 A RETURN
END
```

#### 4 SPREDNING

Spredningen og utvekslingen mellom rutene og med omgivelsene behandles dels i hovedprogrammet, dels i rutinene ADVH og DXYF. I tillegg benyttes rutinene VIND, TURB og VKZ. Den teoretiske bakgrunnen for spredningsdelen er beskrevet nærmere i vedlegg C til hovedrapporten (1).

Spredningen skjer dels ved transport med vinden (adveksjon), dels ved turbulent blanding. For hver av de 29 forurensningskomponentene løses ligningen (4.1) numerisk i hver rute for hvert tidsskritt:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\vec{V}_h \cdot \nabla_h C_i - \frac{\partial (W^1 \cdot C_i^1)}{\partial z} - \nabla_h \cdot (\vec{V}^1 \cdot C_i^1) + R_i + Q_i \quad (4.1)$$

$C_i$  = konsentrasjonen av komponent i

$\vec{V}_h = u\vec{i} + v\vec{j}$  = horisontal vindhastighet, med øst-vest-komponent u, og nord-syd komponent v

W = vertikal vindhastighet

$\vec{V}_h \cdot \nabla_h \cdot C_i = u \frac{\partial C_i}{\partial x} + v \frac{\partial C_i}{\partial y}$  horisontal adveksjon av forurensningskomponenter

$$\frac{\partial W^1 C_i^1}{\partial z} = \frac{\partial F_i}{\partial z} = \left[ \left( \frac{d\bar{z}}{dt} \right)_{k+1} \Delta C_{k+1} - \left( \frac{d\bar{z}}{dt} \right)_k \Delta C_k \right] / \Delta z$$

Vertikal blanding på grunn av turbulens. Beregning av parametrene er beskrevet i vedlegg C til hovedrapporten.

$$\nabla_h \cdot (\vec{V}^1 \cdot C_i^1) = \frac{\partial}{\partial x} (u^1 C_i^1) + \frac{\partial}{\partial y} (v^1 C_i^1)$$

Horisontal blanding på grunn av turbulens

$R_i$  = konsentrasjonsendringer pga. kjemiske reaksjoner

$Q_i$  = konsentrasjonsendringer pga. utslipp.

Beregningen av de tidsderiverte  $dC_i/dt$  på grunn av adveksjon, turbulent blanding og fra utslipp utføres hver for seg og de deriverte adderes til feltene 35-63 i HOVE. Utslipet hentes i rutinen UTSL, kfr. kapittel 3. Adveksjon og turbulent spredning behandles i ADVH som beskrives senere.

En gang i timen kalles rutinen VIND. Her leses det inn vindstyrke og vindretning, temperatur, stabilitet og  $\sigma_\theta$ , i de tre nivåer, og det genereres homogene vindfelt som legges på plass 64-69.

I INIT legges disse på riktig plass i datafilen sammen med  $d\bar{z}/dt$ . Senere er det meningen at man skal lese ferdiglagede vindfelt fra filer som er laget i egne vindanalyseprogrammer. VIND beregner også størrelsen  $r$ , som benyttes til beregning av tørravsetningen ( $F_o = c_i r$ ), kfr. vedlegg C4.1, og feltet legges på plass KND = 98. Til slutt i VIND beregnes den turbulente diffusjonskoeffisienten  $D$ , kfr. C.

I rutinen TURB beregnes nye verdier for henholdsvis  $U_*$ ,  $L$  og  $\theta_*$  en gang hver time, som beskrevet i vedlegg C3.4, mens funksjonen VKZ beregner verdien av funksjonen  $\phi_h(Z/L)$ , kfr. (C 12) til senere beregning av vertikal utvekslingskoeffisient  $K_z$  (legges i felt KVK = 70).

For hvert tidsskritt kalles rutinene ADVH og DXYF.

I rutinen DXYF beregnes de deriverte  $\frac{\partial C_i}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial C_i}{\partial y}$ ,  $\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}$  og  $\frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2}$  som legges henholdsvis flak 94, 95, 96 og 97. Randrutene gis samme annen deriverte som i ruten innenfor, de første deriverte beregnes på grunnlag av konsentrasjonen i ruten samt konsentrasjonen i ruten hvor vinden kommer fra. Der vinden blåser inn i beregningsområdet, settes de lik differansen mellom konsentrasjonsverdien og bakgrunnsverdien. Rutinen ADVH kobler sammen de deriverte fra DXYF til tidsderivate fra adveksjon og turbulent diffusjon:

$$\left(\frac{\partial C_i}{\partial t}\right)_1 = \left(\frac{\partial C_i}{\partial t}\right)_0 - \left(u\frac{\partial C_i}{\partial x} + v\frac{\partial C_i}{\partial y} + C_i \cdot M - D\left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2}\right)\right).$$

Bidraget til konsentrasjonsendringene med tiden på grunn av vertikalutveksling beregnes i hovedprogrammet.  $M$  er en hjelpestørrelse som defineres langs randen av området og benyttes i beregningene etter pseudospektralmetoden og som beregnes i RANDU og RAND2.

#### 4.1 Programutskrifter

ADVVH

```
1      SUBROUTINE ADVH(KST1, KU, KV, M)
      COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
      COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
5      2, M1, M2, M3, D, SIGT
      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON/STRUK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
      2, KV2, KU3, KV3, KZO, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
      3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
      ISTART(J)=(J-1)*IR+1
10     KSTO=KST1-1 A KDTO=KDT1-1
      DO 201 N=1, KSTM
      KST=KSTO+N A KDT=KDTO+N
      CALL DXYF(KST, KU, KV)
      IDT=ISTART(KDT)
15     IKU=ISTART(KU)
      IKV=ISTART(KV)
      IDX=ISTART(KDX)
      IDY=ISTART(KDY)
      IST=ISTART(KST)
20     IMM=ISTART(M)
      I2X=ISTART(K2X)
      I2Y=ISTART(K2Y)
      DO 203 J=1, JM A DO 203 I=1, IM
      X(IDT)=X(IDT)-(X(IKU)*X(IDX)+X(IKV)*X(IDY)+X(IST)*X(IMM)-D*(X(I2X)
25     1+X(I2Y)))
      IDT=IDT+1 A IKU=IKU+1 A IKV=IKV+1 A IDX=IDX+1 A IDY=IDY+1
      IST=IST+1 A IMM=IMM+1 A I2X=I2X+1 A I2Y=I2Y+1
203   CONTINUE
201   CONTINUE
30   RETURN
      END
```

DXYF

```
1      SUBROUTINE DXYF(K1, KUX, KVX)
      COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
      COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
5      2, M1, M2, M3, D, SJGT
      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON/STRUK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
      2, KV2, KU3, KV3, KZO, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
      3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
      DO 300 I=1, IM
      DO 301 J=2, JM1
10     X(I, J, K2Y)=(X(I, J+1, K1)+X(I, J-1, K1)-2.0*X(I, J, K1))/(DX*DX)
      IF(X(I, J, KVX).GE.0.0) 400, 401
400   X(I, J, KDY)=(X(I, J, K1)-X(I, J-1, K1))/DX
      GO TO 301
15     401 X(I, J, KDY)=(X(I, J+1, K1)-X(I, J, K1))/DX
301   CONTINUE
      X(I, 1, K2Y)=X(I, 2, K2Y)
      X(I, JM, K2Y)=X(I, JM1, K2Y)
      IF(X(I, JM, KVX).GE.0.0) 410, 411
20     410 X(I, JM, KDY)=(X(I, JM, K1)-X(I, JM1, K1))/DX
      GO TO 412
411   X(I, JM, KDY)=(BST(K1)-X(I, JM, K1))/DX
412   IF(X(I, 1, KVX).GE.0.0) 413, 414
413   X(I, 1, KDY)=(X(I, 1, K1)-BST(K1))/DX
25     GO TO 300
414   X(I, 1, KDY)=(X(I, 2, K1)-X(I, 1, K1))/DX
300   CONTINUE
303   CONTINUE
      DO 310 J=1, JM
30   DO 311 I=2, IM1
      X(I, J, K2X)=(X(I+1, J, K1)+X(I-1, J, K1)-2.0*X(I, J, K1))/(DX*DX)
      IF(X(I, J, KUX).GE.0.0) 420, 421
420   X(I, J, KDX)=(X(I, J, K1)-X(I-1, J, K1))/DX
      GO TO 311
35     421 X(I, J, KDX)=(X(I+1, J, K1)-X(I, J, K1))/DX
311   CONTINUE
      X(1, J, K2X)=X(2, J, K2X)
      X(IM, J, K2X)=X(IM1, J, K2X)
      IF(X(IM, J, KUX).GE.0.0) 422, 423
40     422 X(IM, J, KDX)=(X(IM, J, K1)-X(IM1, J, K1))/DX
      GO TO 424
```

DXYF (forts.)

```

423 X(IM, J, KDX)=(BST(K1)-X(IM, J, K1))/DX
424 IF(X(1, J, KUX).GE.0.0) 425, 426
425 X(1, J, KDX)=(X(1, J, K1)-BST(K1))/DX
45 GO TO 310
426 X(1, J, KDX)=(X(2, J, K1)-X(1, J, K1))/DX
310 CONTINUE
RETURN
END

```

```

1 SUBROUTINE VIND VIND
COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
COMMON/IIIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
2, M1, M2, M3, D, SIGT
5 COMMON/IIIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
COMMON/STRIK/ KSTM, KS2, KS2M, KS3, KS3M, KDT1, KDTM, KW1, KWM, KU1, KV1, KU2
2, KV2, KU3, KV3, KZ0, KVK, KDX, KDY, KND, K2X, K2Y,
3KDZ1, KDZ2, KDZ3, KR1, KR2, KR3, KR4, KR5, KR6
10 ISTART(J)=(J-1)*IR+1
READ500, KL, A(1), B(1), A(2), B(2), A(3), B(3), T, DELT, SIGT
500 FORMAT (IS, 9F5. 2)
DELT=DELT+0. 25
RAD=. 1745329252
15 GREN=0. 01
SIGT=SIGT*RAD
NNOBS=3 A N=1
DO 7 J = 1, NNOBS
IF (B(J).GE.37. .OR. A(J).GE.37. ) GO TO 8
AK(J)=A(J)+18.
20 IF (AK(J).GT.36. ) AK(J)=AK(J)-36.
XNS(J)=B(J)*COS(AK(J)*RAD)
XOV(J)=B(J)*SIN(AK(J)*RAD)
GO TO 7
8 CONTINUE
25 XNS(J)=XOV(J)=0.
7 CONTINUE
DO 100 K=KR1, KR5, 2
KS=(K-1)*IR+1
DO 101 I=1, IR
30 X(KS)=XOV(N)
X(KS+IR)=XNS(N)
101 CONTINUE
PRINT 501, KL, N, XOY(N), XNS(N), A(N), B(N)
501 FORMAT (*OVIND KL, *2I3, 2F10. 3*, DD=*F6. 0*, FF=*F6. 1)
35 N=N+1
100 CONTINUE
TETO=T+273. 0
TETZ=TETO+DELT
Z=25. 0
40 DO 300 I=1, IR
IR1=ISTART(KR1)
IR2=ISTART(KR2)
IKZ=ISTART(KZ0)
45 IVK=ISTART(KVK)
IND=ISTART(KND)
UU=X(IR1) A VV=X(IR2)
UZ=SQRT(UU*UU+VV*VV)
ZO=X(IKZ)
CALL TURB(Z, ZO, UZ, TETZ, TETO, TETST, UST, TM, GREN, SETA, CL)
50 X(IVK)=VKZ(Z, ZO, UST, SETA, CL)
IF (UST.LE.0. ) UST=0. 01
RZ=0. 0
IF (CL.GT.0. 0) RZ=(ALOG(Z/ZO))*(0. 74+(4. 7*ZO/CL))+4. 7*(Z-ZO)/CL)/
55 1(0. 35*UST)
X(IND)=RZ
IR1=IR1+1 A IR2=IR2+1 A IKZ=IKZ+1 A IVK=IVK+1 A IND=IND+1
300 CONTINUE
PRINT 201, Z, ZO, UZ, TM, GREN, TETZ
PRINT 201, TETST, UST, SETA, CL, TETO, DELT
60 201 FORMAT (6E11. 3)
D=SIGT*SIGT*UZ*DX
RETURN
END

```

TURB

```
1      SUBROUTINE TURB(Z, Z0, UZ, TETZ, TETO, TETST, UST, TM, GREN, SETA, CL)
      CK=0.35
      G=9.81
      HPI=1.570796327
5      AG=10. A BG=10.
      DZ=Z
      UST=UZ/10.
      TETST=UST*(TETZ-TETO)*10./DZ
      TM=(TETZ+TETO)/2.0
10     100 CONTINUE
      IF(TETS1.EQ.0.0) 105,103
105    SETA=0.0
      USTN=UZ*CK/ALOG(Z/Z0)
      UST=USTN
15     RETURN
103    CONTINUE
      CL = UST * UST * TM / (CK*G*TETST)
      SETA= (Z+Z0) / CL
      IF(SETA.LT.0.0) GO TO 101
20     USTN= UZ * CK / (ALOG(Z/Z0)+ 4.7*SETA)
      TETSTN= (TETZ-TETO)/(0.74*ALOG(Z/Z0) +4.7*SETA)
      GO TO 102
101    CONTINUE
      X= (1.0 -15.*SETA)**0.25
25     PSI1= 2.0*ALOG( (1.0+X)/2.0) +ALOG( ( 1.0+X*X)/2.0 )- 2.0*ATAN(
      2X+HPI)
      USTN= CK*UZ/ (ALOG(Z/Z0)-PSI1)
      Y= (1.0-9.0*SETA)**0.5
      PSI2=ALOG((1.+Y)/2.)
30     TETSTN=(TETZ-TETO)/(0.74*(ALOG(Z/Z0)-PSI2))
102    CONTINUE
      DU = ABS(USTN-UST)
      DTET=ABS(TETSTN-TETST)
      A=DU/USTN
35     B=DTET/1ETSTN
      A=ABS(A)
      B=ABS(B)
      IF((A.LT.GREN).AND.(B.LT.GREN)) GO TO 104
      IF((A.GT.AG).AND.(B.GT.BG)) GO TO 104
40     AG=A
      BG=B
      UST=USTN
      TETST=TETSTN
      GO TO 100
45     104 CONTINUE
      RETURN
      END
```

VKZ

```
1      FUNCTION VKZ(Z, Z0, UST, SETA, CL)
      IF(SETA.EQ.0.)FI=.74
      IF(SETA.LT.0.)FI=.74*(1.0/(1.-9.*(Z/CL))**.5)
      IF(SETA.GT.0.)FI=.74+4.7*(Z/CL)
5      VKZ=.35*UST*Z/FI
      RETURN
      END
```



5 FOTOKJEMI

Fotokjemidelen av programmet består av rutinene KJEMI, KJEMR og integrasjonsrutinene KORTLAN, KOLALA og LANG. Rutinene er skrevet ved Institutt for Geofysikk for en mer komplisert fotokjemimodell og er tilpasset Telemarkmodellen. Bakgrunnen for kjemiberegningene er beskrevet i vedlegg B til hovedrapporten (1). KJEMI administrerer og tilrettelegger data til KJEMR, som er den egentlige fotokjemirutinen. For hvert tidsskritt beregnes først fotokjemiske reaksjoner i luften som strømmer inn i området og deretter regnes det fotokjemi innen alle rutene i feltet. For hver rute overføres verdiene for konsentrasjonene  $C_i$  og gradientene  $dC_i/dt$  til området XX på henholdsvis plass 1-29 og 35-63. I rutinen KJEMR gis komponentene sitt riktige navn, det brukes også betegnelsene G(1)-G(29), til og begynne med som gamle verdier. Betegnelsene angir siden nye konsentrasjoner. Først i rutinen defineres hastighetskonstantene, betegnelsene refererer seg delvis til (2). En gang i timen leses temperaturer samt endel dissosiasjonskoeffisienter, og de temperaturavhengige hastighetskonstanter bestemmes. Programmet tar så for seg en og en reaksjon i reaksjonsskjemaet. Først tas de raskeste reaksjonene, og en regner med at det innstilles en likevekt mellom produksjonsledd  $P_i$  og tapsledd  $Q_i$ . "Tapsleddet  $Q_i$ " kan skyldes fotokjemi og/eller utslipp kombinert med spredning. Det er en sterk kobling mellom konsentrasjonene av  $O_3$  og NO og dels de andre nitrogenoksydene, slik at disse behandles spesielt. Utslippene fra de høye skorsteinene i Grenland er ganske store, og de kan forårsake store konsentrasjonsendringer slik at integrasjonsmetoden blir innstabil. For å unngå dette, reduseres tidsskrittet ytterligere for den aktuelle ruten og integrasjonen foretas for tilsvarende flere trinn, og beregningene fortsetter så for resten av komponentene. Alle komponenter klassifiseres i tre kategorier alt etter hvilken levetid de har i forhold til tidsskrittet DTS.

- 1) Hvis tapsleddet  $Q_i > 10/DTS$  har vi likevekt:

$$C_{i,t+\Delta t} = P_{i,t+\Delta t} / Q_{i,t+\Delta t}$$

- 2) Hvis  $Q_i < 0.03/DTS$  beregnes konsentrasjonen lineært:

$$C_{i,t+\Delta t} = (P_i - Q_{i,t} \cdot C_{i,t}) \cdot \Delta T$$

- 3) Hvis  $\frac{0.03}{DTS} < Q_i < 10/DTS$  beregnes konsentrasjonen ut fra ligningen

$$\frac{dC_i}{dt} = P_i - Q_i C_i,$$

som løses analytisk ved å anta P og Q konstante over tidsskrittet  $\Delta t$ :

$$C_{i,t+\Delta t} = C_{i,e} + (C_{i,t} - C_{i,e}) e^{-Q_i \cdot \Delta t},$$

der  $C_{i,e} = P_i / Q_i$  som er den fotokjemiske likevektskonsentrasjonen.

Man vet ikke på forhånd hvilket integrasjonsuttrykk som skal benyttes, men erfaringen hjelper her. Rutinen KORTLAN inneholder alle tre mulighetene, og benyttes på komponenter med middels lang levetid (kan være både lang og kort, avhengig av konsentrasjonsforholdene). KOLALA benyttes på komponenter med lang levetid hvor det ikke innstilles noen likevekt, og rutinen LANG benyttes til de mest stabile komponentene som  $NO_x$  og CO.

### 5.1 Programutskrifter

KJEMI

```
1      SUBROUTINE KJEMI(KST)
      COMMON /HOVE/ X(16,32,98)
      COMMON/IIIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AL(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
5      2, M1, M2, M3, D, SIGT
      COMMON /TEST/ ST, QLIN, QTEST, DTS
      COMMON /INF/NIV, KONT, KT
      DIMENSION XX(63)
      IF (NIV.GT.1) GO TO 101
10     DTS=DT
      QLIN = 0.03/DTS
      ST = 10.0/DTS
      QTEST = 1.0/DTS
      DO 102 K=1,29
15     102 XX(K)=BST(K)
      DO 104 K=30,63
104    XX(K)=0.0
      CALL KJEMR(XX, KST, 1, 1)
      KST=0
20     DO 105 K=1,29
105    BST(K)=XX(K)
101    CONTINUE
      DO 200 J=1, JM
      DO 200 I=1, IM
25     IDR=(J-1)*IM+I
      DO 50 K=1,29
      XX(K)=X(IDR)
      IDR=IDR+IR
50     CONTINUE
30     DO 55 K=30,34
      XX(K)=X(IDR)
      IDR=IDR+IR
55     CONTINUE
35     DO 56 K=35,63
      XX(K)=X(IDR)
      IDR=IDR+IR
56     CONTINUE
      CALL KJEMR(XX, KST, I, J)
      IDR=(J-1)*IM+I
40     DO 60 K= 1,29
      X(IDR)=XX(K)
      IDR=IDR+IR
60     CONTINUE
      IDR=IDR+5*IR
45     DO 65 K=35,63
      X(IDR)=0.0
      IDR=IDR+IR
65     CONTINUE
50     200 CONTINUE
      RETURN
      END
```

KJEMR

```
1      SUBROUTINE KJEMR(XX, KST, I, J)
      COMMON /TEST/ ST, QLIN, QTEST, DTS
      COMMON /INF/NIV, KONT, KT
      DIMENSION XX(63)
5      INTEGER O3TEL
      REAL NO, NOX, NOZ, NO2, NO3, N2O5
      C1=1.0E-06
      G1 =O3      =C1*XX(1)
      G2 =NO      =C1*XX(2)
10     G3 =O3NO   =C1*XX(3)
      G4 =CH3XX   =C1*XX(4)
      G5 =CH2O2OH=C1*XX(5)
      G6 =CH3X    =C1*XX(6)
      G7 =C4H9O2  =C1*XX(7)
15     G8 =CH3CDB  =C1*XX(8)
      G9 =C2H5O2  =C1*XX(9)
      G10 =AR1    =C1*XX(10)
      G11 =AR3    =C1*XX(11)
      G12 =AR6    =C1*XX(12)
20     G13 =CH3O2  =C1*XX(13)
      G14 =HO2    =C1*XX(14)
```

KJEMR (forts.)

G15 =H2O2 =C1\*XX(15)  
G16 =CO =C1\*XX(16)  
G17 =CH2O =C1\*XX(17)  
25 G18 =CH3CHO =C1\*XX(18)  
G19 =HCOHCO =C1\*XX(19)  
G20 =RCOHCO =C1\*XX(20)  
G21 =CH3COX =C1\*XX(21)  
30 G22 =CH3COY =C1\*XX(22)  
G23 =C2H4 =C1\*XX(23)  
G24 =C3H6 =C1\*XX(24)  
G25 =C4H10 =C1\*XX(25)  
G26 =C6HXR =C1\*XX(26)  
35 G27 =PAN =C1\*XX(27)  
G28 =NOX =C1\*XX(28)  
G29 =NO2 =C1\*XX(29)  
IF (KST-1) 100, 101, 102  
102 CONTINUE  
40 AM=2. 5E19  
O2=5. 1E18  
H2O=5. 2E17  
CH4=4. 0E13  
C  
C CH3COX=CH3COC2H5, CH3COY=CH3COCOC2H5  
45 C C6HXR0 ER EN BENZENFORBINDELSE MED T. EKS. HCO TILKNYTTET.  
C110=9. 12E-12  
C157=7. 6E-13  
C159=3. 5E-12  
C  
50 C2M=4. 2E-11  
C222=2. 3E-10  
C  
C447=5. 7E-12  
55 C449M=5. 1E-13  
C450=3. E-18  
C  
C911=8. 7E-12  
C919M=5. 6E-12  
60 C920=8. 1E-12  
C951C=2. 0E-12  
C959M=3. E-12  
C960C=2. 9E-13  
C960G=2. 9E-13  
C960J=2. 9E-13  
65 C962C=2. 9E-13  
C9AR1=2. 9E-13  
C9AR3=2. 9E-13  
C9AR6=2. 9E-13  
C  
70 C1011M=3. 8E-12  
C1020=1. 6E-12  
C  
C1920=2. E-11  
C1926=1. 3E-13  
75 C RETTING AV OH-REAKSJONER ETTER ATKINSON  
C1948=9. 4E-12  
C1957=7. 9E-12  
C1959C=1. E-011  
C  
80 59C= AROMATER C6HXR  
C1959=1. 53E-11  
C1960 =2. 5E-012  
C 62=C6H14, 80=CH3COC2H5=CH3COX  
C1980=6. E-012  
C  
85 C2051=1. E-12  
C5151A=3. 1E-13  
C5151B=1. 5E-13  
C5159M=2. 6E-14  
90 C5175=2. 6E-14  
C5176=1. 0E-16  
C5160C=2. 6E-14  
C5160G=2. 6E-14  
C5160J=2. 6E-14  
C51AR1=2. 6E-14  
95 C51AR3=2. 6E-14  
C51AR6=2. 6E-14  
C5172=2. 6E-14  
C972=2. 8E-13  
C474=6. E-12

KJEMR (forts.)

```

100      C976=1. E-16
        C975=2. 4E-12
        C1075=1. 4E-12
        C1973=1. 6E-11
        ZZ=ALOG10(0. 7808*AM)
105      AA1=31. 62273
        AA2=-0. 258304
        AA3=-0. 0889287
        AA4=2. 520173E-03
        BB1=-327. 372
110      BB2=44. 5536
        BB3=-1. 38092
        AA=AA1+AA2*ZZ+AA3*ZZ*ZZ+AA4*ZZ*ZZ*ZZ
        BB=BB1+BB2*ZZ+BB3*ZZ*ZZ
101      CONTINUE
115      RFAI( 201, TEMP, DA03, DB03, DNO2, DNO3, DN205, DH202, DACH20, DBCH20, DCH3CH
        10, DCH3COX, DCH3COY
201      FORMAT (12E6. 1)
        PRINT202, TEMP, DA03, DB03, DNO2, DNO3, DN205, DH202, DACH20, DBCH20, DCH3CH
        10, DCH3COX, DCH3COY
120      202 FORMAT(F6. 1, 11E8. 1)
        C104M=1. 07E-34*EXP(510. /TEMP)
        C720=1. 4E-14*EXP(-580. /TEMP)
        C757=9. E-15*EXP(-2560/TEMP)
        C759=6. 1E-15*EXP(-1900. /TEMP)
125      C1011=2. 3E-13*EXP(-1000. /TEMP)
        CC=-AA*TEMP/(BB+TEMP-0. 5*ALOG10(TEMP/280. ))
        C1019=0. 94*(10. 0**CC)
        C1019X=C1019
        C14M=5. 7E14*EXP(-10600. /TEMP)
130      C1923=1. 7E-11*EXP(-910. /TEMP)
        C1956=2. 36E-12*EXP(-1710. /TEMP)
        C2020=3. 8E-14*EXP(1245. /TEMP)
        C76=8. 0E 14*EXP(-12530. /TEMP)
        C1945=2. 7E-13
135      C709=9. 0E-13*EXP(-1200. /TEMP)
        C710=1. 2E-13*EXP(-2450. /TEMP)
        C719=1. 6E-12*EXP(-1000. /TEMP)
C
140      DCH20=DACH20+DBCH20
        DO3=DA03+DB03
        DRCOHC0=DCH20
        DRCOHC0=DCH20
C
C          CH3XX=CH3CH020H, CH3CH0,
145      C          CH3X=CH3CO02, PAN=CH3CO02NO2,
C          CH3XX=72 CH3CH0=73 CH3X=75 PAN=76
C          A1 ER DEN DELEN AV SEC-C4H9O SOM TAPES GJENNOM REAKSJON 47M (CALVERT ET AL
C          A2 ER DEN DELEN AV C2H5O SOM TAPES GJENNOM REAKSJON 47N
        X1=0. 45
        X2=0. 85
150      100 CONTINUE
C          OD (2) KORT
        POD=DB03*03
        QOD=C2M*AM +C222*H20
        OD =POD/QOD
155      C          OH (19) KORT
        POH=2. *DH202*H202+2. *C222*OD*H20+C720*03*H02+C920*H02*NO
        QOH=C919M*NO+C1019X*NO2+C1957*C2H4+C1948*CH20+ C1945*CO+
        1 C1920*H02+C1956*CH4 +C1923*H202+C719*03
160      2 +C1980*CH3COX+ C1959 *C3H6+ C1973*CH3CHO+C1960*C4H10
        3+C1959C*C6HXR
        OH =POH/QOH
C          NOZ (11A) KORT/LANG
        PNOZ=C710*03*NO2
        QNOZ=(C911*NO+C1011*NO2+DNO3)
165      NOZ = PNOZ/QNOZ
C          NO3 (11) KORT
        NO3 =C14M*NOZ /(C14M+C1011M*NO2)
C          N205 (14) KORT
        N205 =C1011M*NO2*NOZ /(C14M+C1011M*NO2)
170      C          OP (1) KORT
        POP=D03*03+DNO2*NO2+DNO3*NO3
        QOP=C104M*AM *02+C110*NO2+C157*C2H4
        OP =POP/QOP
        ITELLO3=1
175      DTSSAVE=DTS
        QLSAVE=QL.IN
        STSAVE=ST
        QTSAVE=QTEST

```

KJEMR (forts.)

```

180      IF (03.GT.NO) DIFFTIL=C1*XX(36)/03
      IF (03.LE.NO) DIFFTIL=C1*XX(35)/NO
93      CONTINUE
      TESTDTS=0.1/DTS
      IF (DIFFTIL.GT.TESTDTS) GO TO 91
      GO TO 92
185      91 CONTINUE
      DTS=DTS/2.0
      ITELLO3=ITELL03*2
      QLIN=QLIN*2.0
      QTEST=QTEST*2.0
190      ST=ST*2.0
      GO TO 93
      92 CONTINUE
      DO 94 I03=1,ITELLO3
      03=G1
195      NO=G2
      NO2=G29
      XNOX=NO+NO2
C
      QN1=C709*03+C951C*CH302+C920*H02+C911*N03+C919M*0H
200      1+C960J*CH3C0B      +C972*CH3XX+C975*CH3X +C960G*C2H502
      2      +C959M*CH2020H+C960C*C4H902
      3      +C9AR1*AR1+      C9AR3*AR3+
      3      C9AR6*AR6+C976*PAN
205      Q01=C709*NO+C710*NO2+C720*H02+C757*C2H4+C222*H20*0D/03+(C110*NO2+
      1      C157*C2H4)*0P/03+C759*C3H6+C719*0H
      IF (03-NO) 85,85,86
86      CONTINUE
      03TEL = 0
C
210      C      HER ER 03 ST/RRE ENN NO      NO      (?)      KORT/LANG
      PNO=      (DNO2+C110*0P+C1011*N03)*XNOX
      QNO=QN1
215      4 +DNO2+C110*0P+C1011*N03
C
      KDT=36
      DIFF=C1*XX(KDT)
      CALL KORTLAN(PNO,QNO,G2,DIFF)
      IF(QN1.GT.QTEST)NO=G2
220      GOTO 87
C
      85 CONTINUE
      03TEL = 1
225      C      HER ER 03 MINDRE ENN NO      03      (?)      KORT/LANG
      XNO2=NO2+03
      P03=DNO2*XNO2
      Q03=Q01+DNO2
230      KDT=35
      DIFF=C1*XX(KDT)
      CALL KORTLAN(P03,Q03,G1,DIFF)
      IF(Q01.GT.QTEST)03=G1
235      87 CONTINUE
      03-NO      03NO      LANG
      QNO=C709*03+C951C*CH302+C920*H02+C911*N03+C919M*0H
      1+C960J*CH3C0B      +C972*CH3XX+C975*CH3X +C960G*C2H502
      2      +C959M*CH2020H+C960C*C4H902
      3      +C9AR1*AR1      +C9AR3*AR3+
240      3      C9AR6*AR6+C976*PAN
      PNO=      (DNO2+C110*0P+C1011*N03)*NO2
      P03=DNO2*NO2
      Q03=C709*NO+C710*NO2+C720*H02+C757*C2H4+C222*H20*0D/03+(C110*NO2+
      1      C157*C2H4)*0P/03+C759*C3H6+C719*0H
245      P03NO=P03-PNO
      Q03NO=(Q03*03-QNO*NO)/G3
      DIFF=C1*(XX(35)-XX(36))
      CALL LANG(P03NO,Q03NO,G3,DIFF)
      IF(03TEL.EQ.0) G1=G2+G3
250      IF(03TEL.EQ.1) G2=G1-G3
C
      PNOX=0
      QNOX=      C976*PAN*NO/NOX
      QNOX=C1019X*0H*NO2 /NOX      +QNOX
255      DIFF=C1*(XX(36)+XX(63)+XX(61))
      CALL LANG(PNOX,QNOX,G28,DIFF)

```

```

NOX = G28
C NO2 (10) BEREGNES FRA NOX
G29 = NOX-G2-G27-N03-N205*2. 0
260 94 CONTINUE
DTS=DTSSAVE
QLIN=QLSAVE
ST=STSAVE
QTEST=QTSAVE
265 C CH3CH020H CH3XX (59J) KORT/LANG
PCH3XX=C1959 *0H*C3H6
QCH3XX=C972*NO
QCH3XX=QCH3XX+C5172*CH302
KDT=38
270 DIFF=C1*XX(KDT)
CALL KORTLAN(PCH3XX, QCH3XX, G4, DIFF)
IF( QCH3XX. GT. QTEST) CH3XX=G4
C CH2020 (59M) KORT/LANG
275 PCH2020=C972*NO*CH3XX
QCH2020=C959M*NO
QCH2020=QCH2020+C5159M*CH302
KDT=39
DIFF=C1*XX(KDT)
280 CALL KORTLAN(PCH2020, QCH2020, G5, DIFF)
IF(QCH2020. GT. QTEST) CH2020H=G5
C CH3C0 KORT
285 PCH3C0=C1973*0H*CH3CH0
PCH3C0=PCH3C0+DCH3COX*CH3COX+2. *DCH3COY*CH3COY
QCH3C0=C474*02
CH3C0 =PCH3C0/QCH3C0
C CH3X (59Q) KORT/LANG
290 PCH3X=QCH3C0*CH3C0+C76*PAN
QCH3X=C1075*NO2 +C975*NO +C5175*CH302
KDT=40
DIFF=C1*XX(KDT)
CALL KORTLAN(PCH3X, QCH3X, G6, DIFF)
IF(QCH3X. GT. QTEST) CH3X=G6
C SEC-C6H1302 C6H1302 (62C) KORT/LANG
C SEC-C4H902 C4H902 (60C) KORT/LANG
295 PC4H902=C1960 *0H*C4H10
QC4H902=C960C*NO
QC4H902=QC4H902+C5160C*CH302
KDT=41
DIFF=C1*XX(KDT)
300 CALL KORTLAN(PC4H902, QC4H902, G7, DIFF)
IF(QC4H902. GT. QTEST) C4H902=G7
C CH3COCH(02)CH3 CH3COB (60J) KORT/LANG
305 PCH3COB=C1980*0H*CH3COX
QCH3COB=C960J*NO+C5160J*CH302
KDT=42
DIFF=C1*XX(KDT)
CALL KORTLAN(PCH3COB, QCH3COB, G8, DIFF)
IF(QCH3COB. GT. QTEST)CH3COB=G8
C C2H502 (60G) KORT/LANG
310 PC2H502= C960C*C4H902*NO*(1. -X1)+DCH3COX*CH3COX
QC2H502= C5160G*CH302+ C960G*NO
PC2H502=PC2H502+C5160C*C4H902*CH302*(1. -X1)
KDT=43
DIFF=C1*XX(KDT)
315 CALL KORTLAN(PC2H502, QC2H502, G9, DIFF)
IF(QC2H502. GT. QTEST) C2H502=G9
C AR1 (63C) KORT/LANG
320 PAR1=C1959C*0H*C6HXR
QAR1=C9AR1*NO+C51AR1*CH302
KDT=44
DIFF=C1*XX(KDT)
CALL KORTLAN(PAR1, QAR1, G10, DIFF)
IF(QAR1. GT. QTEST) AR1=G10
C AR3 (63G) KORT/LANG
325 PAR3=C9AR1*AR1*NO+C51AR1*CH302*AR1
QAR3=C9AR3*NO+C51AR3*CH302
KDT=45
DIFF=C1*XX(KDT)
CALL KORTLAN(PAR3, QAR3, G11, DIFF)
330 IF(QAR3. GT. QTEST) AR3=G11
C AR6 (63N) KORT/LANG
335 PAR6=C9AR3*AR3*NO+C51AR3*CH302*AR3
QAR6=C9AR6*NO+C51AR6*CH302
KDT=46
DIFF=C1*XX(KDT)

```

KJEMR (forts.)

CALL KORTLAN(PAR6, GAR6, G12, DIFF)  
IF(GAR6, GT, QTEST) AR6=G12

C CH3 KORT  
PCH3=(C1957\*OH+C157\*OP)\*C2H4+C1956\*OH\*CH4  
1 +DCH3CHO\*CH3CHO+C975\*NO\*CH3X+0.5\* (C759\*O3+C159\*OP)\*C3H6  
PCH3=PCH3+C960G\*C2H502\*NO\*(1.-X2)  
PCH3 =PCH3 +C5160G\*CH302\*C2H502\*(1.-X2)  
PCH3=PCH3+C5176\*CH302\*CH3X  
QCH3=C449M\*O2  
345 CH3 =PCH3/QCH3

C CH302 (51) KORT/LANG-LIVET  
PCH302=C449M\*O2\*CH3+C757\*O3\*C2H4  
QCH302= C951C\*NO+2. \*C5151A\*CH302+2 \*C5151B\*CH302+C2051\*HO2  
QCH302=QCH302 +C5172\*CH3XX+C5159M\*CH2020H+C5160C\*C4H9O2  
350 1+C5160G\*C2H502+C5160J\*CH3COB +C51AR1\*AR1+  
2 C51AR3\*AR3 +C51AR6\*AR6+C5175\*CH3X  
KDT=47  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL KORTLAN(PCH302, QCH302, G13, DIFF)  
355 IF(QCH302, GT, QTEST)CH302=G13

C CH30 KORT  
PCH30=2. \*C5151B\*CH302\*CH302+C951C\*CH302\*NO+C5172\*CH302\*CH3XX+  
1 (C5159M\*CH2020H+C5160C\*C4H9O2+  
2 C5160G\*C2H502+C5160J\*CH3COB +C51AR1\*AR1  
360 3 +C51AR3\*AR3+ C51AR6\*AR6)\*CH302  
PCH30=PCH30+C5176\*CH302\*PAN+C5175\*CH302\*CH3X  
QCH30=C450\*O2  
CH30 =PCH30/QCH30

C CHO KORT  
QCHO=C447\*O2  
PCHO= C157\*OP\*C2H4+DACH20\*CH20+C1948\*OH\*CH20+  
1 DCH3CHO\*CH3CHO+C9AR6\*AR6\*NO+C51AR6\*CH302\*AR6  
CHO =PCHO/QCHO

C HO2 (20) KORT/LANG  
PHO2= C1945\*CO\*OH+DACH20\*CH20 +C959M\*CH2020H\*NO  
1 +C450\*CH30\*O2+C447\*CHO\*O2  
2 +C1923\*OH\*H202+C719\*OH\*O3+1.5\* C3H6\*(C759\*O3+C159\*OP)  
3 +C960C\*C4H9O2\*NO\*X1+C960J\*CH3COB\*NO+C960G\*C2H502\*NO\*X2  
375 4 +2.0\*C757\*O3\*C2H4+ C5159M\*CH302\*CH2020H+C5160C\*C4H9O2\*CH302\*X1  
PHO2=PHO2+C5160G\*CH302\*C2H502\*X2+C5160J\*CH302\*CH3COB  
QHO2=C920\*NO+C1020\*NO2+2.0\*C2020\*HO2  
1+C720\*O3+C1920\*OH  
KDT=48  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
380 CALL KORTLAN(PHO2, QHO2, G14, DIFF)  
IF(QHO2, GT, QTEST)HO2=G14

C H2O2 (23) KORT/LANG-LANG  
PH202=C2020\*HO2\*HO2  
QH202=DH202+C1923\*OH  
385 KDT=49  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL KOLALA(PH202, QH202, G15, DIFF)

C CO (45) LANG  
PCO=C447\*O2\*CHO +DBCH20\*CH20  
PCO=PCO+DHCOHCO\*HCOHCO+DRCOHCO\*RCOHCO  
QCO=C1945\*OH  
KDT=50  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
395 CALL LANG(PCO, QCO, G16, DIFF)

C CH4 (56) LANG  
C HCHO CH20 (48) KORT/LANG-LANG  
DCH20=DACH20+DBCH20  
QCH20=DCH20+C1948\*OH  
400 PCH20=C450\*O2\*CH30+C5151A\*CH302\*CH302+ C2H4\*(C1957\*OH+C757\*O3)  
PCH20=PCH20+C960G\*C2H502\*NO\*(1.-X2)+0.5\*C3H6\*(C759\*O3+C159\*OP)  
PCH20 =PCH20 +C5160G\*CH302\*C2H502\*(1.-X2)+DHCOHCO\*HCOHCO  
KDT=51  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
405 CALL KOLALA(PCH20, QCH20, G17, DIFF)

C CH3CHO (590) KORT/LANG-LANG  
PCH3CHO=(C972\*NO+C5172\*CH302)\*CH3XX+  
1 (C759\*O3+C159\*OP) \*0.5\*C3H6  
PCH3CHO=PCH3CHO+C960C\*C4H9O2\*NO\*(1.-X1)+C960G\*C2H502\*NO\*X2  
410 PCH3CHO=PCH3CHO+C5160C\*C4H9O2\*CH302\*(1.-X1)  
PCH3CHO=PCH3CHO+C5160G\*CH302\*C2H502\*X2  
PCH3CHO=PCH3CHO+DRCOHCO\*RCOHCO  
QCH3CHO=C1973\*OH+DCH3CHO  
KDT=52  
415 DIFF=C1\*XX(KDT)



KJEMR (forts.)

420 C CALL KOLALA(PCH3CHO, QCH3CHO, G18, DIFF) HCOHCO (64A) KORT/LANG-LANG  
PHCOHCO=C9AR3\*AR3\*NO  
PHCOHCO=PHCOHCO+C51AR3\*AR3\*CH3O2  
QHCOHCO=DHCOHCO  
KDT=53  
DIFF=C1\*XX(KDT)

425 C CALL KOLALA(PHCOHCO, QHCOHCO, G19, DIFF) RCOHCO (64B) KORT/LANG-LANG  
PRCOHCO=C9AR6\*AR6\*NO  
PRCOHCO=PRCOHCO+C51AR6\*AR6\*CH3O2  
QRCOHCO=DRCOHCO  
KDT=54  
DIFF=C1\*XX(KDT)

430 C CALL KOLALA(PRCH3COX, QRCH3COX, G20, DIFF) CH3COX (60E) KORT/LANG-LANG  
CH3COX=C960C\*C4H9O2\*NO\*X1  
PCH3COX=PCH3COX+C5160C\*C4H9O2\*CH3O2\*X1  
QCH3COX=DCH3COX+C1980\*OH  
KDT=55  
DIFF=C1\*XX(KDT)

435 C CALL KOLALA(PCH3COY, QCH3COY, G21, DIFF) CH3COY (60S) KORT/LANG-LANG  
CH3COY=C960J\*CH3COB\*NO  
PCH3COY=PCH3COY+C5160J\*CH3O2\*CH3COB  
QCH3COY=DCH3COY  
KDT=56  
DIFF=C1\*XX(KDT)

445 C CALL KOLALA(PCH3COY, QCH3COY, G22, DIFF) HNO3 (26) LANG  
C2H4 (57) LANG

450 C PC2H4 = 0  
QC2H4=C157\*OP+C757\*O3+C1957\*OH  
KDT=57  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL LANG(PC2H4, QC2H4, G23, DIFF)

455 C PC3H6=0 C3H6 (59) KORT/LANG-LANG  
QC3H6=C1959 \*OH+C759\*O3+C159\*OP  
KDT=58  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL KOLALA(PC3H6, QC3H6, G24, DIFF)

460 C PC4H10=0 C4H10 (60) LANG  
QC4H10=C1960\*OH  
KDT=59  
DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL LANG(PC4H10, QC4H10, G25, DIFF)

465 C AROMATER C6HXR (63) LANG  
PC6HXR=0  
QC6HXR=C1959C\*OH  
KDT=60  
DIFF=C1\*XX(KDT)

470 C CALL LANG(PC6HXR, QC6HXR, G26, DIFF) PAN (59S) KORT/LANG-LANG  
CH3COO2NO2  
PPAN=C1075\*NO2\*CH3X  
QPAN=C976\*NO  
QPAN=QPAN+C76  
KDT=61

475 C DIFF=C1\*XX(KDT)  
CALL KOLALA(PPAN, QPAN, G27, DIFF)  
C2=1.0E06

480 C XX( 1)=C2\* G1  
XX( 2)=C2\* G2  
XX( 3)=C2\* G3  
XX( 4)=C2\* G4  
XX( 5)=C2\* G5  
XX( 6)=C2\* G6

485 C XX( 7)=C2\* G7  
XX( 8)=C2\* G8  
XX( 9)=C2\* G9  
XX(10)=C2\*G10  
XX(11)=C2\*G11

490 C XX(12)=C2\*G12  
XX(13)=C2\*G13  
XX(14)=C2\*G14  
XX(15)=C2\*G15

KJEMR (forts.)

```
495      XX(16)=C2*G16
        XX(17)=C2*G17
        XX(18)=C2*G18
        XX(19)=C2*G19
        XX(20)=C2*G20
        XX(21)=C2*G21
500      XX(22)=C2*G22
        XX(23)=C2*G23
        XX(24)=C2*G24
        XX(25)=C2*G25
505      XX(26)=C2*G26
        XX(27)=C2*G27
        XX(28)=C2*G28
        XX(29)=C2*G29
        RETURN
        END
```

KORTLAN

```
1      SUBROUTINE KORTLAN(P, Q, A, PDIFF)
        COMMON/TEST/ST, QLIN, QTEST, DTS

5      C INTEGRERER KOMPONENTER MED MIDDELS LANG LEVETID (KAN V/RE BADE KORT OG LANG)
        C QUASI STEADY STATE APPROXIMATION (QSSA)

        IF(Q. GE. ST) A=P/Q
        IF(Q. GE. ST) RETURN
        P=P+PDIFF
10     IF(Q. LT. QLIN) GO TO 100
        C KOMPONENTEN ER KORT/LANG-LIVET
        CXE=P/Q
        A      =CXE+(A -CXE)*EXP(-Q*DTS)
        RETURN
15     100 CONTINUE
        C KOMPONENTEN ER LANG-LIVET
        A      = A+(P-Q*A)*DTS

        RETURN
20     END
```

KOLALA

```
1      SUBROUTINE KOLALA(P, Q, A, PDIFF)
        COMMON/TEST/ST, QLIN, QTEST, DTS

5      C INTEGRERER KOMPONENTER MED MIDDELS TIL LANG LEVETID

        P=P+PDIFF
        IF(Q. LT. QLIN) GO TO 100
        C KOMPONENTEN ER KORT/LANG-LIVET
        CXE=P/Q
10     A      =CXE+(A -CXE)*EXP(-Q*DTS)
        RETURN
        100 CONTINUE
        C KOMPONENTEN ER LANG-LIVET
        A      = A+(P-Q*A)*DTS

15     RETURN
        END
```

LANG

```
1      SUBROUTINE LANG(P, Q, A, PDIFF)
        COMMON/TEST/ST, QLIN, QTEST, DTS

5      C INTEGRERER LANG-LIVEDE KOMPONENTER

        P=P+PDIFF
        A      = A+(P-Q*A)*DTS

10     RETURN
        END
```

## 6. UTSKRIFTSRUTINER

### 6.1 SKRV (KF, KODE, NIV, ITID, CI)

Rutinen skriver ut hele felt nr. KF i /HOVE/ X(16, 32, 98), som vist i figur 3.1-3.9. KODE, NIV og ITID er størrelser som brukes til utskriften. CI er en skalafaktor til skifte av enheten slik at alle verdier ganges med CI før utskrift, og utskriftsenheten blir da 1.0/CI. Hvis CI = 0.0, benyttes automatisk skalering. Først undersøkes feltet, verdiene summeres og maksimumsverdien finnes og dette skrives ut.

### 6.2 SKRI (IRS, JRS, K1, K2, K3) og S2 (IRS, JRS)

Rutinen SKRI skriver ut ni verdier av feltene nr. K1, K2 og K3 omkring (IRS, JRS) kfr. figur 6.1.

FELT

IRS=11	JRS=11	K1= 1	K2= 3	K3= 4															
.12831E-04	.78163E-05	.47773E-05	.18957E+07	.11346E+07	.37359E+06	.15622E+04	.11345E+04	.72821E+03											
.18147E-04	.10455E-04	.49537E-05	.21909E+07	.14298E+07	.66880E+06	.11314E+04	.87327E+03	.55654E+03											
.19782E-04	.10714E-04	.16771E-05	.24861E+07	.17251E+07	.96402E+06	.79841E+03	.63462E+03	.36074E+03											

Figur 6.1: Utskrift fra SKRI.

Rutinen S2 skriver ut ni verdier av feltet omkring (IRS, JRS) for alle 98 flak i /HOVE/ X(16, 32, 98).

### 6.3 PROPP (IST, JST)

Rutinen skriver ut verdiene i punktet (IST, JST) for alle 98 feltene i /HOVE/ X(16, 32, 98), som vist i figur 6.2. For å følge beregningene skrives også ut hvor lenge programmet har gått. Samtidig legges de 98 verdiene ut på fil 3 for senere utskrift.

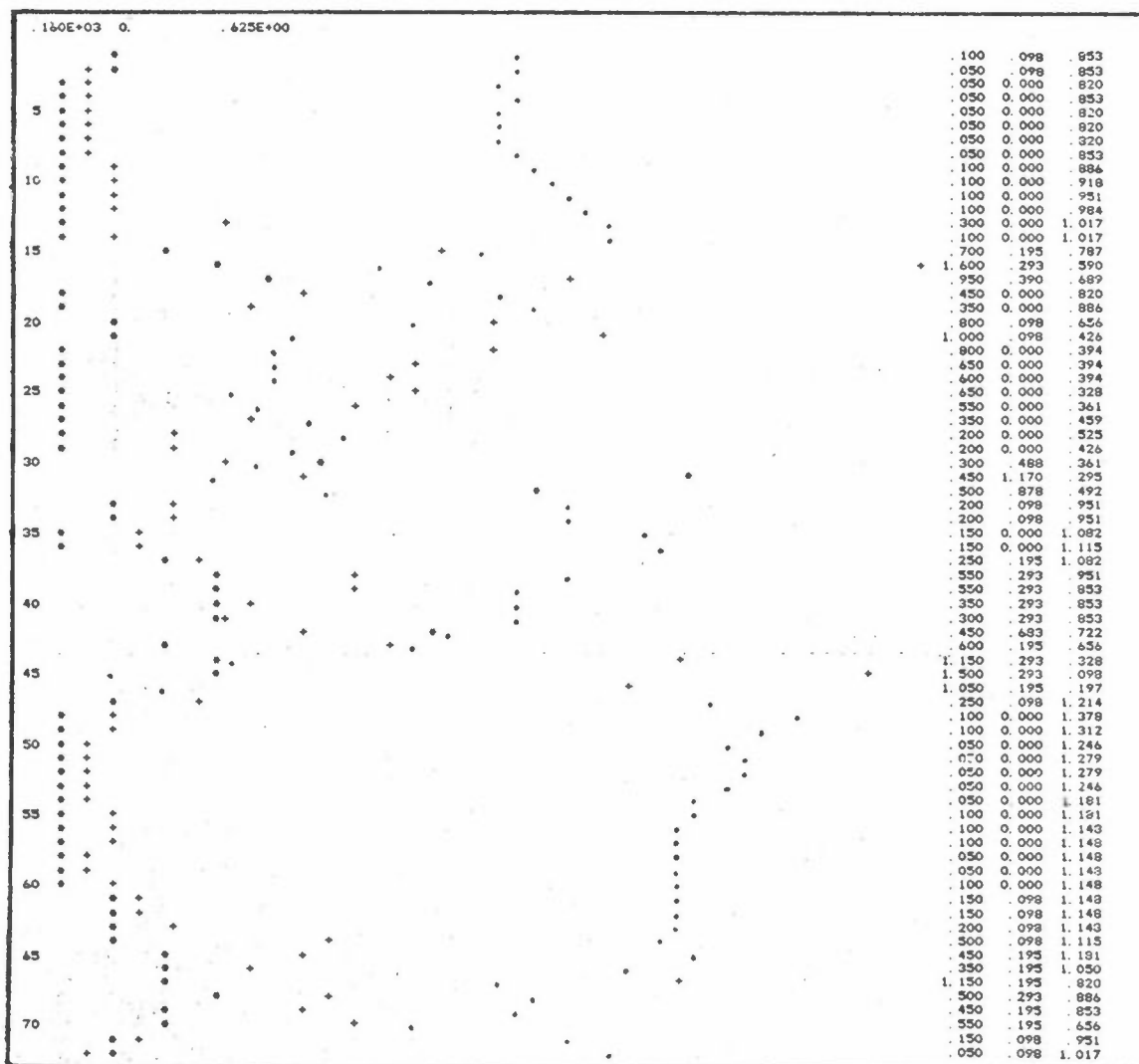
TID=	2519.665																				
1	.0741E+18	2	.2098E+17	3	.8537E+18	4	.3663E+14	5	.1482E+14	6	.1456E+13	7	.4444E+14								
8	.1702E+14	9	.4233E+14	10	.1673E+14	11	.1759E+14	12	.1689E+14	13	.3591E+14	14	.1112E+14								
15	.4069E+17	16	.5699E+19	17	.2443E+17	18	.5368E+16	19	.5562E+15	20	.5340E+15	21	.1631E+16								
22	.6489E+14	23	.7674E+17	24	.5239E+17	25	.4246E+17	26	.2575E+17	27	.1002E+16	28	.1649E+18								
29	.1434E+18	30	.1226E+01	31	.1028E+01	32	.1257E+00	33	0.	34	.4200E+16	35	0.								
36	0.	37	0.	38	0.	39	0.	40	0.	41	0.	42	0.								
43	0.	44	0.	45	0.	46	0.	47	0.	48	0.	49	0.								
50	0.	51	0.	52	0.	53	0.	54	0.	55	0.	56	0.								
57	0.	58	0.	59	0.	60	0.	61	0.	62	0.	63	0.								
64	-.1996E+16	65	.2349E+16	66	-.4559E+16	67	.3602E+13	68	-.3440E+14	69	-.5475E+13	70	-.1076E+14								
71	-.4649E+13	72	-.4736E+13	73	-.2846E+12	74	.7472E+11	75	.4886E+12	76	-.3572E+14	77	-.4135E+14								
78	.5783E+15	79	.2504E+18	80	.9343E+15	81	.4134E+15	82	.1335E+14	83	.1308E+14	84	.2901E+14								
85	.5896E+13	86	.9284E+16	87	.6499E+16	88	.4560E+16	89	.3203E+16	90	.1276E+14	91	.1986E+17								
92	.1751E+17	93	.6000E+00	94	-.2128E+14	95	-.4472E+14	96	-.7966E+14	97	.2869E+14	98	-.1379E+03								

Figur 6.2: Utskrift fra PROPP

### 6.4 LINPL, LIN og XX

For hver time kalles rutinene LIN og XX NLPL 3 ganger. I LIN legges verdiene av O<sub>3</sub>-feltet, NO-feltet og NO<sub>2</sub>-feltet i 3 punkter, henholdsvis i matrisene AK(72,3), BK(72,3) og CK(72,3). I XX summeres konsentrasjonene av de hydrokarbonene vi regner utslipp for, og dette legges i DK(72,3).

Ved slutten av beregningene kalles så LINPL som plotter ut tre kurver for AK, BK, CK og DK på linjeskriveren som vist i figur 6.3. Dette gir da tidsforløpet for konsentrasjonene i tre referansepunkter over beregningsperioden. Rutinen finner høyeste og laveste verdi av de tre kurvene, og deler intervallet i 100. Kurvene plottes ut med symbolene +, \* og ., funksjonsverdiene skaleres og skrives ut.



Figur 6.3: Utskrift fra LINPL.

### 6.5 Programutskrifter

SKRV

```
1          SUBROUTINE SKRV(KF, KODE, NIV, ITID, CI)
          COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
          COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
          DIMENSION XLI(16)
5          500 FORMAT (1X, 2HJ=, I2, 2X, 16F5.0      , 2X, 2HJ=, I2, //)
          501 FORMAT (5X, *FELT=*I3, 5X, *NIVAA=*I2, 5X, *TID=*I2, 5X, *ENHET=*E8. 2)
          502 FORMAT (* XMAX=*E12. 3, * SUM=*E15. 4)
          503 FORMAT (6X, 16I5/)
          504 FORMAT (*OTOMT FELT*)
10         IR=IM*JM
          SX=0. 0
          XMAX=0. 0
          NX=(KF-1)*IR+1
          NXS=NX+IR-1
15         DO 1 I=NX, NXS
          XX=ABS(X(I))
          SX=SX+XX
          IF (XX. GT. XMAX) XMAX=XX
20         1 CONTINUE
          PRINT 502, XMAX, SX
          IF (SX. EQ. 0. ) GO TO 3
          IF (CI. GT. 0. 0) GO TO 2
          MEX=ALOG10(XMAX)
          CI=10. 0**(2-MEX)
25         2 CONTINUE
          CII=1. 0/CI
          PRINT 501, KODE, NIV, ITID, CII
          PRINT 503, (I, I=1, IM)
          IDR=KF*IR-IM+1
30         DO 101 J=1, JM
          J1=JM+1-J
          DO 100 I=1, IM
          XLI(I)=CI*X(IDR)
          IDR=IDR+1
35         100 CONTINUE
          IDR=IDR-2*IM
          101 PRINT 500, J1, (XLI(I), I=1, IM), J1
          PRINT 503, (I, I=1, IM)
          RETURN
40         3 PRINT 501, KODE, NIV, ITID, CII
          PRINT 504
          RETURN
          END
```

SKRI

```
1          SUBROUTINE SKRI(IRS, JRS, K1, K2, K3)
          COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
          COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
5          520 FORMAT (1H0, 3(E12. 5, 1X), 5X, 3(E12. 5, 1X), 5X, 3(E12. 5, 1X))
          521 FORMAT (6H0 IRS=, I2, 5H JRS=, I2, 4H K1=, I4, 4H K2=, I4, 4H K3=, I4)
          522 FORMAT (5HOFELT)
          IR1=IRS-1AIR2=IRS+1AJR1=JRS-1AJR2=JRS+1
          PRINT 522
          PRINT521, IRS, JRS, K1, K2, K3
10         PRINT 520, (X(IT, JR2, K1), IT=IR1, IR2), (X(IT, JR2, K2), IT=IR1, IR2),
          1(X(IT, JR2, K3), IT=IR1, IR2)
          PRINT 520, (X(IT, JRS, K1), IT=IR1, IR2), (X(IT, JRS, K2), IT=IR1, IR2),
          1(X(IT, JRS, K3), IT=IR1, IR2)
          PRINT 520, (X(IT, JR1, K1), IT=IR1, IR2), (X(IT, JR1, K2), IT=IR1, IR2),
15         1(X(IT, JR1, K3), IT=IR1, IR2)
          RETURN

          END
```

S2

```
1          SUBROUTINE S2(IRS, JRS)
          DO 100 I=1, 98, 3
          CALL SKRI(IRS, JRS, I, I+1, I+2)
5          100 CONTINUE
          RETURN
          END
```

OPP

```
1          SUBROUTINE PROPP(IST, JST)
          COMMON /HOVE/X(16, 32, 98)
C          SKRIVER FØRST UT TIDEN
C          SKRIVER UT VERDIER FOR 98 FLAK I PUNKTET (IST, JST)
5          DIMENSION UT(98)
          CALL SECOND(TIM)
          PRINT 101, TIM
101        FORMAT (* TID=*, F10. 3*, IST=*I3*, JST=*I3)
          IDR=(JST-1)*16+IST
          IF (IDR.LT. 0) RETURN
          DO 1 I=1, 98
          UT(I)=X(IDR)
          IDR=IDR+512
          1 CONTINUE
15          PRINT 102, (I, UT(I), I=1, 98)
102        FORMAT (7(I4, E12. 4))
          WRITE(3) UT
          RETURN
          END
```

LINPL

```
1          SUBROUTINE LINPL(F, NK, IMIN, IMAX)
C          SKRIVER UT FUNKSJONSVERDI FOR EKVIDISTANTE PUNKTER
          DIMENSION ISYM(3), NTEGN(101), IN(3), XN(3)
          DIMENSION F(72, 3)
5          ISYM(1)=1R+ A ISYM(2)=1R* A ISYM(3)=1R.
          IDB=1R A IDI=1RI A IDM=1R-
          DO 1 I=1, 110
          1 NTEGN(I)=IDB
          FIN=FAX=0. 0
10          DO 2 L=1, NK
          DO 2 K=IMIN, IMAX
          IF(FAX.LT. F(K, L))FAX=F(K, L)
          IF(FIN.GT. F(K, L))FIN=F(K, L)
          2 CONTINUE
15          FAKT=100. /(FAX-FIN)
          DELG=ALOG10((FAX+FIN)/2. ) A IDEL=DELG+0. 5
          FAK=10. 0**(-IDEL)
          PRINT 102, FAX, FIN, FAKT
102        FORMAT (3E11. 3)
          PRINT 103
20          103 FORMAT (1HQ)
C          RELEASE SIDESKIFT
          DO 8 K=IMIN, IMAX
          DO 4 L=1, NK
25          INT=FAKT*(F(K, L)-FIN)+1. 5
          IN(L)=INT
          XN(L)=F(K, L)*FAK
          4 NTEGN(INT)=ISYM(L)
          KL=(K/5)*5
30          IF (KL.EQ. K) GO TO 5
          PRINT 104, NTEGN, (XN(L), L=1, NK)
104        FORMAT (6X, 101R1, 3F7. 3)
          GO TO 6
          5 PRINT 105, K, NTEGN, (XN(L), L=1, NK)
35          105 FORMAT (14, 2X, 101R1, 3F7. 3)
          DO 7 L=1, NK
          INT=IN(L)
          7 NTEGN(INT)=IDB
          8 CONTINUE
          PRINT 108
40          108 FORMAT (1HR)
C          RESET SIDESKRIFT
          RETURN
          END
```

LIN

```
1      SUBROUTINE LIN(K, IST, JST, N2)
      COMMON /HOVE/ X(16,32,98)
      COMMON /LINP/ AK(72,3), BK(72,3), CK(72,3), DK(72,3)
      IDR=(JST-1)*32+IST
5      AK(N2,K)=X(IDR)
      IDR=IDR+512
      BK(N2,K)=X(IDR)
      IDR=IDR+27*512
10     CK(N2,K)=X(IDR)
      DK(N2,K)=XX(IST, JST)
      RETURN
      END
```

XX

```
1      FUNCTION XX(I, J)
      COMMON /HOVE/ X(16,32,98)
      IDR=(J-1)*32+I
5      K1=IDR+16*512 A K2=K1+512 A K3=K2+5*512 A K4=K3+512 A K5=K4+512
      K6=K5+512
      XX=X(K1)+X(K2)+X(K3)+X(K4)+X(K5)+X(K6)
      RETURN
      END
```

## 7. INPUT DATA

Første kort leses i TFKJEMI, linje 38.

Kol.	Format	
1 - 6	DT F6.0	Tidsskritt i sekunder, f.eks. 60.
7 - 12	FAK3 F6.0	Faktor for utveksling mellom nivå 3 og bakgrunnen, verdier 0.0 eller 1.0
13 - 16	K I4	Ukedag for beregningene, K=1 mandag
17 - 20	KKL I4	Klokkeslettlett vi starter beregningene fra. KKL=1, starter med bakgrunnskonsentrasjoner i hele feltet.  KKL>1, fortsetter beregningene ved å lese ned konsentrasjonsfelt fra tape.
21 - 24	KKLM I4	Slutt - tidspunkt
25 - 28	NLPL I4	Skal plote tidsforløpet av O <sub>3</sub> , NO, NO <sub>2</sub> og ΣHC i NLPL punkter, maks. 3.
29 - 32	IST I4	Skriver ut (X(IST, JST, K), K=1,98) for
33 - 36	JST I4	hver time i PROPP
33 - 40	KRO I4	Leser inn KRO verdier for tørravsetning hvis KRO>0
41 - 44	IS2 I4	Skriver ut verdiene rundt punktet IST, JST for alle 98 variable i nivå 1 hvis IS2 = 1.

Hvis NLPL > 0 leses neste kort i TFKJEMI, linje 47.

Kol.	Format	
1 - 4	NI(1) I4	
5 - 8	NJ(1) I4	
9 - 12	NI(2) I4	Punktene vi ønsker plott for i LINPL
13 - 16	NJ(2) I4	
17 - 20	NI(3) I4	
21 - 24	NJ(3) I4	

Hvis KRO > 0 leses neste kort i TFKJEMI, linje 52.



Kol.	Format	
1 - 4	(M,RO(M), I4	Innlesning av tørravsetningshastigheter
5 - 12	(K=1,KRO) F8.2	RO(M) for KRO komponenter M
13 - 16	I4	
17 - 24	F8.2	
-	-	
-	-	

I TFKJEMI, linje 65, leses 3 kort med bakgrunnsverdier for 29 komponenter.

Kol.	Format	
1 - 6	(BST(KST), E6.1	
7 - 13	KST=1,29) 9E7.1	
14 - 20		
21 - 27		

I PIPER, linje 12, leses 6 kort med fordelingsmatrisen for hydrokarboner, (tabell A1, vedlegg A).

Kol.	Format	
1 - 8	((FAK(II,JJ) 8F8.2	
9 - 16	JJ=1,8),	
-	II=1,6)	
57 - 64		

Data for punktutslipp leses i PIPER, linje 16, (kfr. tabell 3.2).

Kol.	Format	
1 - 10	QNAVN(I) A10	Navn på pipen
11 - 15	QX(I) F5.1	x-koordinat
16 - 20	QY(I) F5.1	y-koordinat
41 - 45	QHC F5.1	Utslipp av hydrokarboner kg/h
46 - 50	IQ(I) I5	Hydrokarbon-indeks - hydrokarboner fordeles etter FAK (II, IQ (I))
51 - 55	Y(1) F5.1	Utslipp av CO, kg/h
56 - 60	Y(2) F5.1	Utslipp av NO <sub>x</sub> , kg N/h
61 - 65	YNU(I) F5.1	Initialstørrelse på puffene, l m hvis intet annet er angitt.
71 - 75	ZNU(I) F5.1	Initialstørrelse på puffene, l m hvis intet annet er angitt.

Ett kort for hver pipe, et blankt kort tilslutt.

I TFKJEMI, linje 70, leses 32 kort med verdier for ruhetsparameteren  $Z_0$ .

Kol.	Format
1 - 3	((X(I,J,KZO) 16F3.0
4 - 6	I = 1,IM), J = 1,JM)

For hver time leses:

Data for vind og spredningsforhold fra VIND, linje 10.

Kol.	Format
1 - 5	KL I5 Klokkeslett
6 - 10	A(1) F5.2 Vindretning nivå 1
11 - 15	B(1) " Vindstyrke
16 - 20	A(2) " " " " 2
21 - 25	B(2) " " " " 2
26 - 30	A(3) " " " " 3
31 - 35	B(3) " " " " 3
36 - 40	T " Lufttemperatur
41 - 45	DELT " Temperaturdifferanse
46 - 50	SIGT " $\sigma_\theta$ i dekadgrader

Data for temperatur og dissosiasjonskoeffisienter leses for hver time i KJEMI linje 115.

Kol.	Format
1 - 6	TEMP E6.1 Temperatur
7 - 12	DAO3 " Dissosiasjonskoeffisienter
13 - 18	DBO3 "
19 - 24	DNO2 "
25 - 30	DNO3 "
31 - 36	DN2O5 "
37 - 42	DH2O2 "
43 - 48	DACH2O "
49 - 54	DBCH2O "
55 - 60	DCH3CHO "
61 - 66	DCH3COX "
67 - 72	DCH3COY "
76 - 80	KL A5 Klokkeslett "KL.08".

8 PSEUDOSPEKTRALMETODEN

Den metoden som er benyttet i modellen ved beregning av adveksjon, har den ulempe at den kan gi stor numerisk diffusjon. For å bøte på dette er det også lagt inn i programmet en annen metode, pseudospektralmetoden etter L. Prahm (3). Innledende beregninger etter denne metoden tok imidlertid ca 4-5 ganger så lang tid som ved den enkle metoden, og den er derfor ikke benyttet ved modellberegningene som krever lang tid.

Da det var behov for å kunne teste begge metodene samtidig, er det lagt opp til at det er relativt enkle forandringer som må til for å innføre pseudospektralmetoden:

TFKJEMI kaller på rutinene RANDA, RANDU og RAND2. Normalt er disse ikke i bruk, men pseudospektralmetoden stiller andre randbetingelser og rutinene som er vist nedenfor må legges inn i programmet. I rutinene ADVH erstattes instruksjonen

CALL DXYF (KST,KU,KV) med følgende kort:

```
CALL DXY(KST,KDX,1)
CALL DXY(KST,KDY,2)
DO 202 I= 1,IM
DO 202 J= 1,JM
X(I,J,KDX)=X(I,J,KDX)/DX
X(I,J,KDY)=X(I,J,KDY)/DX
202 CONTINUE
CALL DXY(KDX,KZX,1)
CALL DXY(KDY,KZY,2)
```

Programmet trenger videre rutinene DXY, DERIVH og DERIVX (se nedenfor), samt PROC 1 og biblioteksrutinen FFTR (Fast Fourier-Transform) fra programbibliotektet IMSL. Den siste får vi ved å føye til kontrollkortene:

```
ATTACH,IMSL
LIBRARY,IMSL
```

### 8.1 Programutskrifter

RANDA

```

1      SUBROUTINE RANDA( M, KU, KV)
      COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
5      DO 109 I=3, IM2
      DO 109 J=3, JM2
109    X(I, J, M)=0.0
      DO 112 I=1, 2
      DO 112 J=1, 2
      X(I, J, M)=SQRT(X(I, J, KU)*X(I, J, KU)+X(I, J, KV)*X(I, J, KV))/DX
10     112 CONTINUE
      DO 113 I=IM1, IM
      DO 113 J=JM1, JM
      X(I, J, M)=SQRT(X(I, J, KU)*X(I, J, KU)+X(I, J, KV)*X(I, J, KV))/DX
15     113 CONTINUE
      DO 114 I=IM1, IM
      DO 114 J=1, 2
      X(I, J, M)=SQRT(X(I, J, KU)*X(I, J, KU)+X(I, J, KV)*X(I, J, KV))/DX
20     114 CONTINUE
      DO 115 I=1, 2
      DO 115 J=JM1, JM
      X(I, J, M)=SQRT(X(I, J, KU)*X(I, J, KU)+X(I, J, KV)*X(I, J, KV))/DX
25     115 CONTINUE
      DO 110 J=3, JM2
      X(1, J, M)=X(1, J, KU)/DX
      X(2, J, M)=X(2, J, KU)/DX
      X(IM, J, M)=X(IM, J, KU)/DX
      X(IM1, J, M)=X(IM1, J, KU)/DX
30     110 CONTINUE
      DO 111 I=3, IM2
      X(I, 1, M)=X(I, 1, KV)/DX
      X(I, 2, M)=X(I, 2, KV)/DX
      X(I, JM1, M)=X(I, JM1, KV)/DX
      X(I, JM, M)=X(I, JM, KV)/DX
35     111 CONTINUE
      DO 120 I=1, IM
      DO 120 J=1, JM
      XX=X(I, J, M)
      IF (XX.LT.0.) X(I, J, M)=-XX
40     120 CONTINUE
      RETURN
      END

```

RANDU

```

1      SUBROUTINE RANDU(M, KU, KV, KST)
      COMMON/HOVE/ X(16, 32, 98)
      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOV(3), T, DELT, BST(29)
5      2, M1, M2, M3, D, SIGT
      DO 112 I=1, 2 ADO112J=1, 2
      X(I, J, M)=0.0
112    CONTINUE
      IM2=IM-2 A JM2=JM-2
10     IM2=IM-2 A JM2=JM-2
      DO 115 I=3, IM2
      IF(X(I, 3, KV).GT.0.0) 150, 151
150    X(I, 3, M)= X(I, 1, M)+X(I, 2, M)+ BST(KST)*X(I, 3, KV)/DX+ X(I, 3, M)
151    X(I, 1, M)=0.0 AX(I, 2, M)=0.0
15     IF(X(I, JM2, KV).LT.0.0) 152, 153
152    X(I, JM2, M)=X(I, JM2, M)+X(I, JM1, M)+X(I, JM, M)-BST(KST)*X(I, JM2, KV)/
2DX
153    X(I, JM1, M)=0.0 A X(I, JM, M)=0.0
20     115 CONTINUE
      DO116 J=3, JM2
      IF(X(3, J, KU).GT.0.0) 154, 155
154    X(3, J, M)=X(1, J, M)+X(2, J, M)+X(3, J, M)+BST(KST)*X(3, J, KU)/DX
155    X(1, J, M)=0.0 AX(2, J, M)=0.0
25     IF(X(IM2, J, KU).LT.0.0) 156, 157
156    X(IM2, J, M)=X(IM2, J, M)+X(IM1, J, M)+X(IM, J, M)-BST(KST)*X(IM2, J, KU)/DX
157    X(IM, J, M)=0.0 AX(IM1, J, M)=0.0
30     116 CONTINUE
      X(IM1, JM, M)=0.0
      X(IM1, JM1, M)=0.0
      X(IM, JM, M)=0.0
      X(IM, JM1, M)=0.0

```

RANDU (forts.)

```

X(1, JM, M)=0.0
X(2, JM, M)=0.0
X(1, JM1, M)=0.0
35 X(2, JM1, M)=0.0
X(IM, 1, M)=0.0
X(IM, 2, M)=0.0
X(IM1, 1, M)=0.0
40 X(IM1, 2, M)=0.0
RETURN
END

```

RAND2

```

1 SUBROUTINE RAND2(M, KU, KV, KST)
COMMON/HOPE/ X(16, 32, 98)
COMMON/DIV/ D2(3), KL, A(3), B(3), AK(3), XNS(3), XOY(3), T, DELT, BST(29)
5 2, M1, M2, M3, D, SIGT
COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
DO 115 I=3, IM2
IF(X(I, 3, KV).GT.0.0)150, 151
150 X(I, 3, M)=BST(KST)*X(I, 3, KV)/DX
151 CONTINUE
10 IF(X(I, JM2, KV).LT.0.0)152, 153
152 X(I, JM2, M)=-BST(KST)*X(I, JM2, KV)/DX
153 CONTINUE
115 CONTINUE
DO 116 J=3, JM2
15 IF(X(3, J, KU).GT.0.0)154, 155
154 X(3, J, M)=BST(KST)*X(3, J, KU)/DX
155 CONTINUE
IF(X(IM2, J, KU).LT.0.0)156, 157
20 156 X(IM2, J, M)=-BST(KST)*X(IM2, J, KU)/DX
157 CONTINUE
116 CONTINUE
RETURN
END

```

DXY

```

1 SUBROUTINE DXY(K1, KDX, KTES)
COMMON/HOPE/ X(16, 32, 98)
COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, DX, DT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
5 DIMENSION CIN(32), GX(32)
NCALL=2
IF(KTES.EQ.1) GO TO 303
DO 300 I = 1, IM
DO 301 J = 1, JM
301 CIN(J)=X(I, J, K1)
10 CALL DERIVH (NCALL, JM, CIN, GX)
DO 302 J=1, JM
302 X(I, J, KDX)=GX(J)
300 CONTINUE
GO TO 304
15 303 CONTINUE
DO 305 J=1, JM
DO 306 I=1, IM
306 CIN(I)=X(I, J, K1)
20 CALL DERIVX(NCALL, IM, CIN, GX)
DO 307 I=1, IM
307 X(I, J, KDX)=GX(I)
305 CONTINUE
304 CONTINUE
RETURN
25 END

```

DERIVH

```

1 SUBROUTINE DERIVH(NCALL, NX, CIN, GX)
DIMENSION IWK(5), FX(17), CIN(NX), GX1(17), GX(32), GXA(32), GXB(32)
COMPLEX GAMN
COMMON/CCN/CN
5 NX1=NX/2
NX2=NX1+1
IF(NCALL.EQ.2) GO TO 111
DO 1 KX=1, NX2
1 FX(KX)=-2.*3.141593*FLOAT(KX-1)/FLOAT(NX**2)
IF(NCALL.EQ.0) GO TO 222
10 111 CONTINUE

```

DERIVH (forts.)

```

CALL FFTR(CIN, GAMN, NX, IWK)
CN=REAL(GAMN)/FLOAT(NX)
DO 3 KX=1, NX1
15 3 GX1(KX)=FX(KX)*CIN(2*KX-1)
   GX1(NX2)=FX(NX2)*REAL(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GX, -1, -1, NX1)
   CALL FFTR(GX, GAMN, NX, IWK)
DO 4 KX=1, NX1
20 4 GX1(KX)=GX(2*KX)
   GX1(NX2)=AIMAG(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GXA, -1, +1, NX1)
DO 5 KX=1, NX1
25 5 GX1(KX)=FX(KX)*CIN(2*KX)
   GX1(NX2)=FX(NX2)*AIMAG(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GX, +1, -1, NX1)
   CALL FFTR(GX, GAMN, NX, IWK)
DO 6 KX=1, NX1
30 6 GX1(KX)=GX(2*KX-1)
   GX1(NX2)=REAL(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GXB, +1, +1, NX1)
DO 7 KX=1, NX
   CIN(KX)=CIN(KX)-CN*(-1)**(KX-1)
35 7 GX(KX)=-1. *(GXA(KX)+GXB(KX))
222 RETURN
END

```

DERIVX

```

1 SUBROUTINE DERIVX(NCALL, NX, CIN, GX)
  DIMENSION IWK(5), FX(17), CIN(NX), GX1(17), GX(32), GXA(32), GXB(32)
  COMPLEX GAMN
  COMMON/CCN/CN
 5 NX1=NX/2
  NX2=NX1+1
  IF(NCALL.EQ.2) GO TO 111
  DO 1 KX=1, NX2
10 1 FX(KX)=-2. *3. 141593*FLOAT(KX-1)/FLOAT(NX**2)
  IF(NCALL.EQ.0) GO TO 222
111 CONTINUE
  CALL FFTR(CIN, GAMN, NX, IWK)
  CN=REAL(GAMN)/FLOAT(NX)
  DO 3 KX=1, NX1
15 3 GX1(KX)=FX(KX)*CIN(2*KX-1)
   GX1(NX2)=FX(NX2)*REAL(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GX, -1, -1, NX1)
   CALL FFTR(GX, GAMN, NX, IWK)
DO 4 KX=1, NX1
20 4 GX1(KX)=GX(2*KX)
   GX1(NX2)=AIMAG(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GXA, -1, +1, NX1)
DO 5 KX=1, NX1
25 5 GX1(KX)=FX(KX)*CIN(2*KX)
   GX1(NX2)=FX(NX2)*AIMAG(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GX, +1, -1, NX1)
   CALL FFTR(GX, GAMN, NX, IWK)
DO 6 KX=1, NX1
30 6 GX1(KX)=GX(2*KX-1)
   GX1(NX2)=REAL(GAMN)
   CALL PROC1(GX1, GXB, +1, +1, NX1)
DO 7 KX=1, NX
   CIN(KX)=CIN(KX)-CN*(-1)**(KX-1)
35 7 GX(KX)=-1. *(GXA(KX)+GXB(KX))
222 RETURN
END

```

PROC 1

```

1 SUBROUTINE PROC1(X1, X, II, IC, NX1)
  DIMENSION X(32), X1(17)
  IM=IC
  IF(II.EQ.1) IM=1
 5 A=FLOAT(II)
  DO 1 I=1, NX1
  X(2*NX1-I+1)=A*X1(I+1)*FLOAT(IM)
  X(I)=X1(I)*FLOAT(IM)
10 1 CONTINUE
  IF(II.EQ.-1) X(NX1+1)=0.
  IF(II.EQ.-1) X(1)=0.
  RETURN
END

```

9     REFERANSELISTE

- (1) Gram, F.,  
Grønskei, K.E.  
Hov, Ø.  
Isaksen, I.S.A.  
Schjoldager, J.                     Fotokjemiske oksydanter i Grenland,  
modellberegninger.  
Lillestrøm 1980. (NILU OR 1/80.)
  
- (2) Hov, Ø.  
Isaksen, I.S.A.  
Hesstvedt, E.                     Diurnal variations of ozone and  
other pollutants in an urban area.  
*Atmos. Environ.* 12, 2469-2479 (1978).
  
- (3) Christensen, O.  
Prahm, L.P.                     A pseudospectral model for dispersion  
of atmospheric pollutants.  
*J. Appl. Meteor.* 15, 1284-1294 (1976).





## VEDLEGG A

BEREGNING AV MIDDELUTSLIPPET I HVER  
KM<sup>2</sup>-RUTE. - PROGRAM AREA.

Al. Program AREA

Dette programmet beregner arealutslipp i nedre Telemark for 9 komponenter til bruk i modellberegninger av fotokjemiske oksydanter. Det er basert på utslippsoversikten som er beskrevet i vedlegg A i hovedrapporten for prosjektet (1).

I programmet leses innbyggertallet, antall bil-km/dag og skogdekningsgrad for 1x1 km<sup>2</sup> ruter innen beregningsområdet på 16x32 km. Videre leses det totalutslipp for 9 kategorier, molekylvekter samt en fordelingsmatrise for hydrokarboner, kfr. tabell Al.

Tabell A1: Fordeling (vekt %) for hydrokarboner, Grenland

	Utslipp kg/d	Ikke- reaktiv	Formaldehyd	Acetaldehyd	n- butan	Etylen	Xylen	Propy- len
Bensin	4500	13	1	1	20	20	20	20
Diesel	2000	12	2	1	15	15	25	30
Forbren- ning,olje	400	70	0	0	10	10	5	5
Maling, lakk	2500	17	1	2	10	15	50	5
Lagring	800	5	0	0	50	30	10	5
Renseri (Etylen)	200	50	0	0	10	30	5	5
Skog	3500				10	10	10	10

Ut fra dette beregnes det så 19 utslippsfelter, X(1-9), Y(1-6) og T(1-4) som angir midlere døgnutslipp i molekyler/time·m<sup>3</sup> innen hver kvadratkilometer fra henholdsvis trafikk, annen virksomhet og utslipp fra skog.

Tabell A2 (tabell 3.1 foran) viser hvilke kildegrupper som bidrar til de enkelte forurensningskomponentene. De 19 feltene er lagt opp på filen EMIS.

Tabell A2: Utslippsfelter på filen EMIS.

	X	Y	T
Formaldehyd	X1	Y1	-
Acetaldehyd	X2	Y2	-
N-butan	X3	Y3	T1
Etylen	X4	Y4	T2
Xylen	X5	Y5	T3
Propylen	X6	Y6	T4
CO	X7	-	-
NO-N	X8	-	-
NO <sub>2</sub> -N	X9	-	-

Når vi i hovedprogrammet skal ha utslippsdata, må filen tilknyttet programmet ved kontrollkortet

ATTACH,TAPE1,EMIS,ID=NILU.

For hver time leses disse feltene ned, X-feltene ganges med uke- og døgnfaktorene for trafikk, Y-feltene for annen trafikk, mens T-feltene brukes som de er. Programmet skriver ut TRAF, BEF og SKOG-feltene, samt totalutslippsfelt for hver av de 9 komponentene.

## A2. Utgangsdata

1. kort leses i linje 36

Format 16 F5.0

((TRAF(I,J), I = 1,IM), J = 1,JM) 32 kort med trafikktetthetsdata

((BEF(I,J), I = 1,IM), J = 1,JM) 32 kort med befolkningstetthet

((SKOG(I,J), I = 1,IM), J = 1,JM) 32 kort med skogdekning

2. kort leses i linje 54 og 55.

Format (9 F5.0)

(UTSL(I), I = 1,9) Utslipp av hydrokarboner fra bensin, diesel, forbrenning, maling/lakk, lagring, renseri, CO, NO<sub>x</sub>-N, skog, angitt i kilo/døgn

(AMOL(I), I = 1,9) Molekylvekter for utslippskomponentene

3. kort leses i linje 56.

Format (2X,6F4.2)

((FAK(I,J), I = 1,6), J = 1,8) Fordelingsmatrise ifølge tabell A1.

A3. Programutskrift

AREA

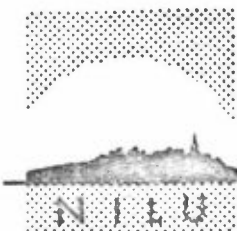
```

1      PROGRAM AREA(INPUT,OUTPUT,TAPE1,TAPE2)
      C      AREA LESFR
      C      TRAFIKK-KART
      C      BEFOLKN-KART
5      C      SKOG-KART
      C      TOTALUTSLIPP FOR 8 KATEGORIER (KG/DØGN)
      C      (IFLG TABELL 1 I NOTAT 5.1.79 V/ JØS)
      C      MOLVEKTER FOR 9 KOMPONENTER
      C      FORDELINGSMATRISSE
10     C      (IFLG TABELL 2 I NOTAT 5.1.79 V/ JØS)
      C      AREA LEGGER FA FILE I FELTENE X,Y,T
      C      SENERE KAN DISSE LESES NED I EMIS OG GANGES MED UKEDAG-
      C      FAKTORER OG DØGNFORDELINGSFAKTORER
      C      OG UTSLIPPET I 9 KOMPONENT-FLAK LEGGES PÅ NY FILE
15     C      FORDELT PÅ DE RIKTIGE FLAKENE, NULL ELLERS
      C      UTSLIPPSFLAKENE LESES SÅ NED FOR HVERT TIDSSSTEP I UTSL
      COMMON/DIM/ IM, JM, IM1, JM1, OX, OT, DZ(3), IDAG, V(3), IR, IM2, JM2
      COMMON /HOVE/
      A      X(16,32,9), Y(16,32,6), T(16,32,4),
20     ITRAF(16,32), BEF(16,32), SKOG(16,32), U(16,32,9), Z(16,32,67)
      COMMON /UTS/ UTSL(9), AMOL(9), AVOGA
      COMMON /FAKT/ FAK(6,8)
      DIMENSION XX(9), YY(9), TT(9), FA(9)
      DZ(1)=50.
25     IM=16 A JM=32 AIR=IM*JM A V(1)=1000.*1000.*DZ(1)
      C      1 FORMALDEHYD  2 ACETALDEHYD  3 N-BUTAN  4 ETYLEN  5 XYLEN
      C      6 PROPYLEN  7 CO  8 NO-N  9 NO2-N
      C      17  18  25  23  26  24  16  2  29
      AVOGA=6.02257E+23
30     AVOG=AVOGA*1000./(24*V(1))
      C      X ER TRAFIKK-FORDELT I MOLEKYLER/TIME*M3
      C      Y ER BEFOLKN-FORDELT I MOLEKYLER/TIME*M3
      C      T ER SKOG -FORDELT I MOLEKYLER/TIME*M3
      C      I RUTE ØST-VEST
35     C      J RUTE NORD-SYD
      READ 101, TRAF, BEF, SKOG
201    FORMAT (16F5.0)
      STRAF=SBEF=0.
      SSK=0
40     DO 1 I=1, IR
      STRAF=STRAF+TRAF(I)
      SSK=SSK+SKOG(I)
      1 SBEF=SBEF+BEF(I)
      PRINT 103, STRAF, SBEF, SSK
45     103 FORMAT (3F10.0)
      NIV=1 A ITID=0 A CI=0.0
      NL=20
      CALL SKRV (NL, 1, NIV, ITID, CI)
      CI=1.0
50     NL=NL+1
      CALL SKRV (NL, 1, NIV, ITID, CI)
      NL=NL+1
      CALL SKRV (NL, 1, NIV, ITID, CI)
      READ 101, UTSL
55     READ 101, AMOL
      READ 102, FAK
202    FORMAT (2X,6F4.2)
      IS=1
      DO 10 K=1,9
60     YY(K)=0.0
      TT(K)=0.0
      10 FA(K)=AVOG/AMOL(K)

```

AREA (forts.)

```
DO 99 J=1, JM A DO 99 I=1, IM
BE=BEF(I, J)/SBEF A TR=TRAF(I, J)/STRAF A SK=SKOG(I, J)/SSK
65 FTR=0.68*TR A FBE=0.32*BE A FSU=FTR+FBE
DO 11 K=1, 6
UT=UTSL(1)*FAK(K, 1)+UTSL(2)*FAK(K, 2)
XX(K)=FTR*UT
YY(K)=FBE*UT
70 11 CONTINUE
DO 12 L=3, 6
DO 12 K=1, 6
12 YY(K)=YY(K)+UTSL(L)*FAK(K, L)*BE
XX(7)=UTSL(7)*FSU
75 X8 =UTSL(8)*FSU
XX(8)=X8*0.95 A XX(9)=X8*0.05
L=IS
DO 13 K=1, 9
X(L)=XX(K)*FA(K)
80 IF (K.GT.6) GO TO 13
Y(L)=YY(K)*FA(K)
13 L=L+IR
L=IS
DO 14 K=3, 6
85 TT(K)=UTSL(9)*FAK(K, 8)*SK
T(L)=TT(K)*FA(K)
14 L=L+IR
L=IS
DO 15 K=1, 9
90 U(L)=XX(K)+YY(K)+TT(K)
15 L=L+IR
IS=IS+1
99 CONTINUE
WRITE(1) X, Y, T
95 DO 20 K=1, 9
CI=0.0 A L=K+22
CALL SKRV(L, K, NIV, ITID, CI)
20 CONTINUE
IF (ITID.EQ.0) GO TO 92
100 ITID=1
IS=9 A I=1
DO 90 M=1, 22
N=M
NIV=1 A ITID=0 A CI=0.0
105 CALL SKRV(N, I, NIV, ITID, CI)
I=I+1 A IF (I.GT.IS) I=1
90 CONTINUE
92 CONTINUE
STOP
110 END
```



TLF. (02) 71 41 70

## NORSK INSTITUTT FOR LUFTFORSKNING

(NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FORSKNINGSRÅD)  
POSTBOKS 130, 2001 LILLESTRØM  
ELVEGT. 52.

RAPPORTTYPE Teknisk notat	RAPPORTNR. TN 15/79	ISBN--82-7247-145-0
DATO FEBRUAR 1980	ANSV.SIGN. B.Ottar	ANT.SIDER 70
TITTEL Program "TFKJEMI". Modellberegninger av fotokjemiske oksydanter i Grenland.	PROSJEKTLEDER K.E.Grønskei	NILU PROSJEKT NR EO 23378
FORFATTER(E) F. Gram K.E. Grønskei	TILGJENGELIGHET **	OPPDRAKSGIVERS REF.
OPPDRAKSGIVER Statens forurensningstilsyn		
3 STIKKORD (å maks.20 anslag) Dataprogram	Modeller	Fotokjemi
REFERAT (maks. 300 anslag, 5-10 linjer) TFKJEMI er et regnemaskinprogram som kombinerer utslipp, spredning og kjemiske reaksjoner innen et område. Det er anvendt på beregninger av fotokjemiske oksydanter i Grenland innen et rutenett på 16x32 km <sup>2</sup> -ruter i 3 nivåer. Det er regnet med 29 forskjellige komponenter som reagerer med hverandre.		
TITTEL Program "TFKJEMI". Modelcalculations of photochemical oxidants in Grenland.		
ABSTRACT (max. 300 characters, 5-10 lines) Description of a computer program for model calculations which combines emission, dispersion and chemical reactions within an area. It is applied to calculations of the formation of photochemical oxidants in the Grenland area, within a 3-level-grid of 16x32 km <sup>2</sup> , and 29 different chemical components.		

\*\*Kategorier: Åpen - kan bestilles fra NILU            A  
Må bestilles gjennom oppdragsgiver            B  
Kan ikke utleveres                                    C