

Bevindingen OPS v5.1.0.2

Gerard Cats, Geetacs

20 april 2023

Bevindingen OPS v 5.1.0.2

Samenvatting

Ik stel enkele aanpassingen aan OPS versie 5.1.0.2 voor, en een verbetering aan SRM2 voor zover dat voor depositieberekeningen wordt gebruikt, hoewel het meer in de rede ligt OPS te gebruiken.

1. Afrondingseffecten

AERIUS gebruikt OPS bij vergunningsverlening tweemaal: eenmaal voor de referentie- of salderings-situatie, en eenmaal met het te vergunnen project. De vergunbaarheid van het project wordt beoordeeld aan de hand van de toename van depositie door het project, dus het verschil van de twee berekeningen. Bij een project is de depositie in de referentiesituatie veelal honderden malen hoger dan de toename door het project. Er worden dus twee hoge getallen van elkaar afgetrokken. Dat is altijd een bron van fouten.

OPS leest een lijst van rekenpunten. De op die punten berekende concentratie en depositie wordt gerapporteerd met 4 significante cijfers (Fortran format e12.4). Dit volstaat niet om de verschillen voldoende nauwkeurig te berekenen. Met een kleine ingreep in OPS kan een extra decimaal aan de uitvoer worden toegevoegd. Ik heb in bestand m_ops_plot_uitv.f90 het format e12.4 vervangen door e12.5.

NB Voor stikstofberekeningen is het format f12.7 nog veel meer geschikt! De benodigde ingreep in m_ops_plot_uitv.f90 is dan iets groter indien OPS gebruikt moet kunnen worden voor stoffen die in veel lagere concentraties dan NH₃ en NO_x voorkomen.

In onderstaand voorbeeld wordt aannemelijk gemaakt dat de huidige rapportage met 4 significante cijfers niet volstaat.

De gebruikte configuratie is de volgende:

```

year 2023
FM_type SRM2Road
SpecifiedHeatContent 0
elevation NORMAL
emissionHeight 2.5
maximumSpeed,1 100
roadManager STATE
sectorId 3100
spread 2,5
vehicleType LIGHT_TRAFFIC
stagnationFactor 0
strictEnforcement false
  
```

Op een rechte weg van west naar oost met een lengte van 400 km rijden in de referentiesituatie 100.000 personenauto's, en in de projectsituatie zijn dat 101.000; een toename van 1% dus. De weg is opgesplitst in 799 segmenten, met lengten die oplopen van 1 m in het midden tot 4675 m aan de twee uiteinden. Hiernaast staan de eigenschappen van deze segmenten.

Een raai van rekenpunten staat in het midden van en loodrecht op deze weg, naar het noorden. De ligging van de weg en de rekenpunten staat in Figuur 1.

Deze configuratie is doorgerekend met AERIUS. Daarbij is dus SRM2+ gebruikt tot 5 km van de bron, en OPS vanaf 5 km.

AERIUS rapporteert de emissie vanaf elk wegsegment. Deze emissies zijn vervolgens toegekend aan puntbronnen, gelegen in de middens van elk van de segmenten. Ook deze configuratie is met AERIUS doorgerekend, nu dus met OPS op alle afstanden tot 25 km van de bron.

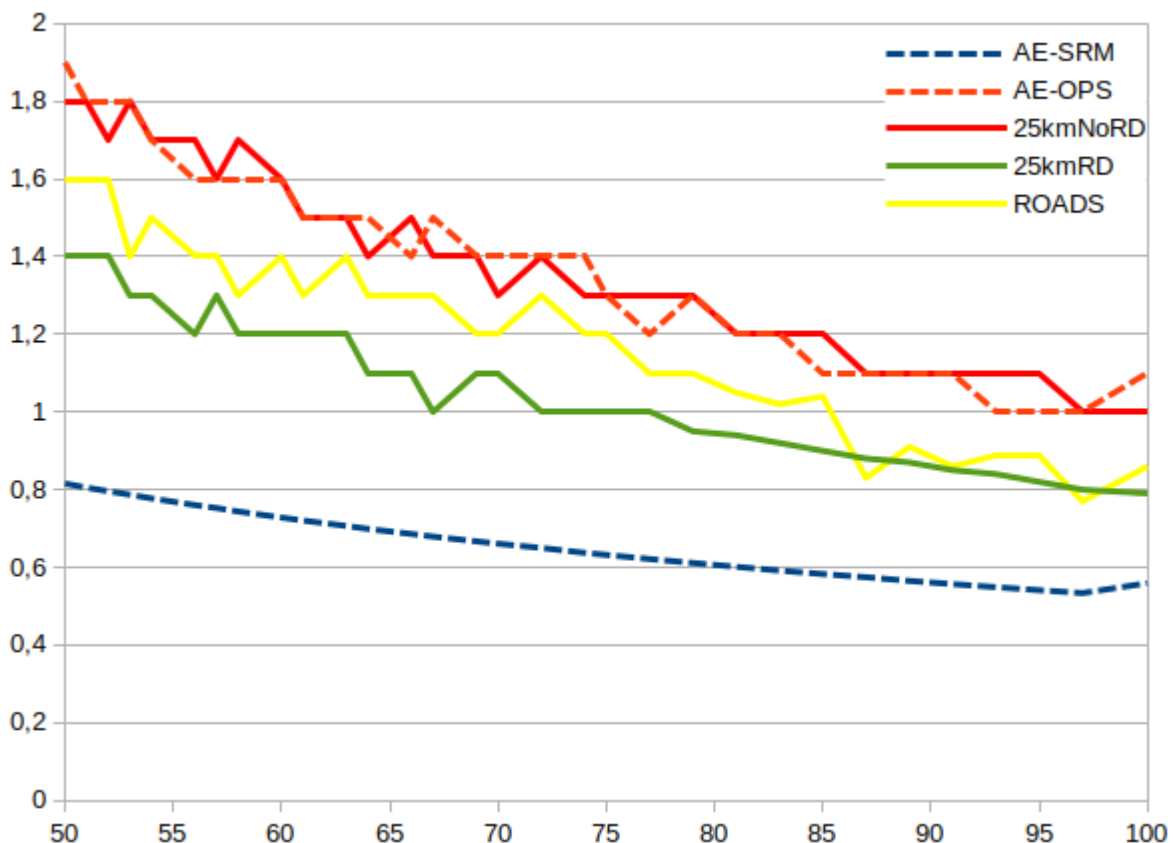


Figuur 1: De ligging van de raai van rekenpunten (naar het noorden) en de weg (west-oost). De zwarte cirkel heeft een straal van 25 km.

De configuratie van puntbronnen is vervolgens ook doorgerekend met de Geetacs (Linux) versie van OPS versie 5.1.0.2. Daarbij is afgekapt op 25 km (optie -maxdist). In deze versie is het tevens mogelijk om de puntbronnen door te rekenen met de Van den Hout benadering voor de verhouding tussen concentraties NO₂ en NO_x. Deze benadering maakt ook deel uit van SRM2 voor berekeningen van luchtvervuiling. Ik heb de configuratie nog tweemaal doorgerekend met de Van den Hout benadering ingeschakeld, eenmaal met en eenmaal zonder de afkap op 25 km. Tabel 1 omschrijft de 5 runs. In sectie 3 ga ik dieper in op de Van den Hout benadering.

Tabel 1: De 5 berekeningen

runnr	acroniem	model	afkap 25 km als road	
1	AE-SRM	AERIUS, SRM2+	Ja	Ja
2	AE-OPS	AERIUS, enkelOPS	Ja	Nee
3	25kmNoRD	OPS	Ja	Nee
4	25kmRD	OPS	Ja	Ja
5	ROADS	OPS	Nee	Ja



Figuur 2: De depositie (mol/ha/jr) langs de raai van rekenpunten, als functie van de afstand tot de weg (m), voor de 5 configuraties; voor de acroniemen, zie Tabel 1. Alle OPS berekeningen met uitvoer format e12.4.



Figuur 3: Als Figuur 2, maar de OPS berekeningen met uitvoer format e12.5.

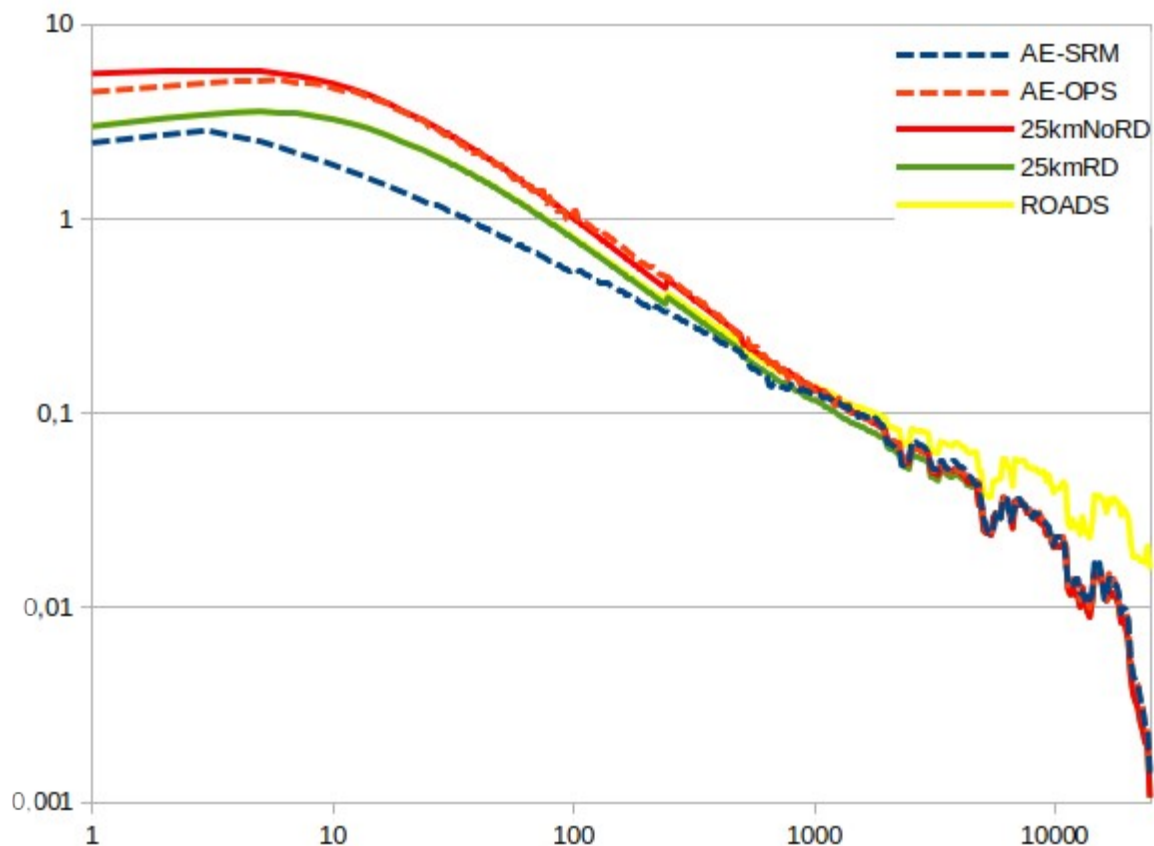
De resultaten op de rekenpunten tussen 50 en 100 m afstand van de weg met de default versie (4 cijfers in de uitvoer) staan in Figuur 2, die met een extra cijfer in de uitvoer van OPS in Figuur 3. Uiteraard zijn van AERIUS de resultaten met 5 cijfers niet beschikbaar.

Opvallend zijn de sprongen van 0,1 mol/ha/jr in alle krommen met OPS (alle runs behalve run 1) als er 4 cijfers worden uitgeprint. Die sprongen verdwijnen volledig als er een extra cijfer aan de uitvoer wordt toegevoegd.

Vergunningen worden geweigerd dan wel toegestaan op basis van veel kleinere verschillen dan 0,1 mol/ha/jr. Het zou toch wel onverteerbaar zijn als een vergunning geweigerd wordt alleen omdat OPS te weinig cijfers in de uitvoer rapporteert, te meer waar een kleine ingreep het probleem wegneemt.

Ook opvallend in de Figuur is dat het effect van afkap op 25 km veel kleiner wordt na het toevoegen van een extra cijfer in de uitvoer. Verder valt de goede overeenstemming van de Geetacs OPS versie met de overeenkomstige AERIUS op als er een extra cijfer in de uitvoer wordt gezet: in Figuur 3 is de rode lijn een mooie gladde versie van de rode streepjeslijn.

Voor de volledigheid is Figuur 4 toegevoegd. Deze figuur toont alle rekenresultaten, waarbij gebruik is gemaakt van de versie met een extra cijfer in de uitvoer. Het springerig gedrag op afstanden boven 1000 m is niet het gevolg van een ontoereikend aantal cijfers in de uitvoer. De grootte van de sprongen is immers tientallen malen de eenheid van de laatste decimaal in de uitvoer. De oorzaak van die sprongen kan liggen in sprongen in landgebruik en terreinruwheid. Door de dubbellogaritmische schaal worden die sprongen verticaal sterk uitvergroot weergegeven, maar vooral worden ze horizontaal samengeperst. Overigens valt a priori niet uit te sluiten dat de sprongen het gevolg zijn van de beperkte nauwkeurigheid in *rekenen* (zie subsectie 2.3) - dit dus in tegenstelling tot de beperkte nauwkeurigheid in de *presentatie* van de rekenresultaten.



Figuur 4: Als Figuur 3, voor alle afstanden tussen 1 m en 25 km, op een loglogschaal.

2. Programmasuggesties

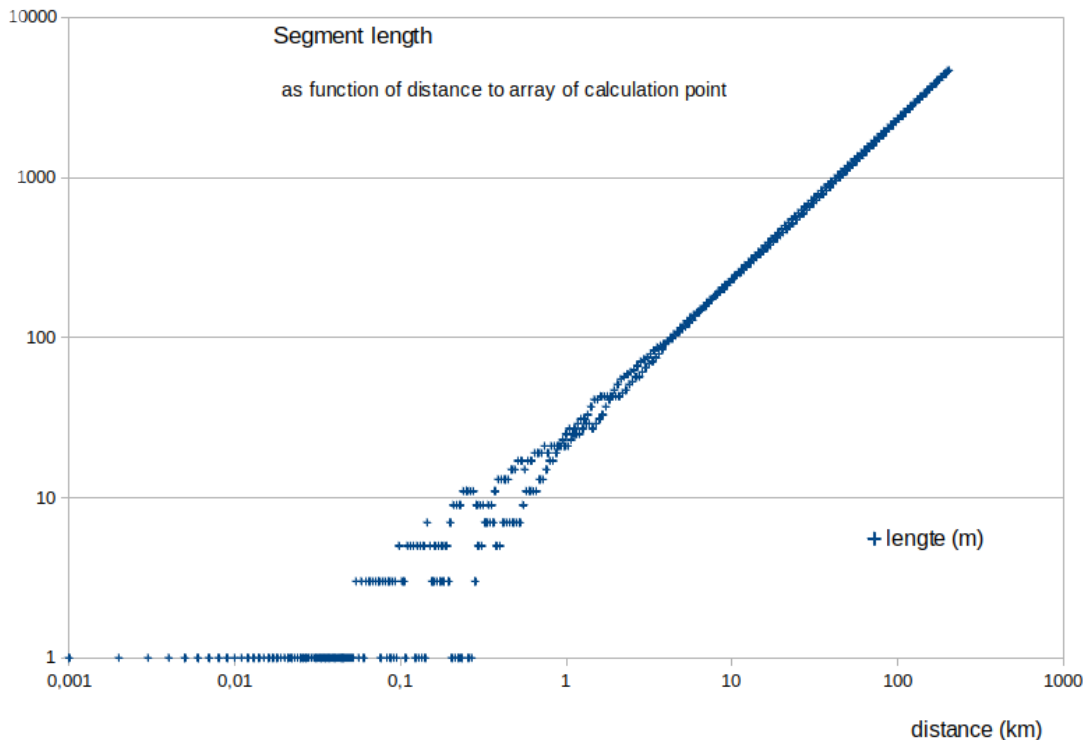
In deze sectie noem ik nog enkele beperkingen van AERIUS en/of OPS, die met eenvoudige ingrepen in de programmatuur weg te nemen zijn.

2.1 Heeltallige coördinaten

In principe zijn coördinaten reële getallen. Maar OPS staat alleen gehele getallen toe voor de posities van bronnen en rekenpunten. Die posities moeten dus worden opgegeven in hele meters (in het Amersfoortse coördinatenstelsel). Op zich lijkt dat nauwkeurig genoeg, maar in sectie 1 is gezien dat afrondingen tot onverwacht grote verschillen kunnen leiden. Om uit te sluiten dat de afrondingen van coördinaten op hele meters mijn resultaten beïnvloeden heb ik ervoor zorg gedragen dat de puntbronnen en de rekenpunten op heeltallige coördinaten liggen. Ik vind dat onbevredigend. Ik stel dan ook voor dat OPS wordt aangepast om ook niet-heeltallige coördinaten te accepteren.

Als gevolg van de afronding op hele getallen loopt de resolutie van de wegsegmenten niet monotoon op met de afstand tot de rekenraai. Zie Figuur 5. Het is onwaarschijnlijk dat dit de resultaten verstoort, omdat de resolutie op alle afstanden toch wel hoog is: minstens 1 m tot 50 m, tot 200 m beter dan 10 m, enzovoort.

2.2 Positieve coördinaten



Figuur 5: Lengte van de wegsegmenten afgezet tegen de afstand tot de rekenraai

In `m_ops_get_dim.f90` wordt de Fortran intrinsic `tiny()` gebruikt als klein getal. Maar `tiny()` is positief. Negatieve getallen zijn dus kleiner. Bijgevolg werkt OPS alleen voor positieve coördinaten van receptorpunten. Voor toepassingen binnen Nederland is dat geen probleem. Toch stel ik voor om `tiny()` te vervangen door een echt klein getal: `-huge()`. Dat voor elk van de twee horizontale coördinaten.

2.3 Woordlengte

In OPS wordt vrij consistent voorgeschreven dat met 32 bits woorden gerekend moet worden. (Merkwaardigerwijs niet in `ops_vchem_ratio_no2_nox_vdhout`). Dit beperkt de rekennauwkeurigheid. Het zou interessant zijn de consequentie daarvan na te gaan, vooral ook om uit te sluiten dat de sprongen in Figuur 4 door de beperkte rekennauwkeurigheid worden veroorzaakt. Normaliter wordt hogere rekennauwkeurigheid bereikt door de compiler te instrueren dat de standaard woordlengte 64 bits is. Helaas is dat bij de huidige vorm van OPS niet mogelijk. Daarom heb ik al eerder voorgesteld om de woordlengte niet in de Fortran code voor te schrijven. Ik herhaal bij dezen dat voorstel.

Ik had dat voorstel al wel in Versie 5.0 geïmplementeerd. Met die versie heb ik de boven beschreven configuratie doorgerekend. Het verschil tussen de met woordlengte 64 en met woordlengte 32 berekende totale depositie was maximaal 0,00254 mol/ha/jr. Bij een verschilberekening tussen project en referentie zou het verschil in principe boven 0,005 mol/ha/jr kunnen komen, maar dat gebeurde in deze situatie niet.

3. De Van den Hout benadering

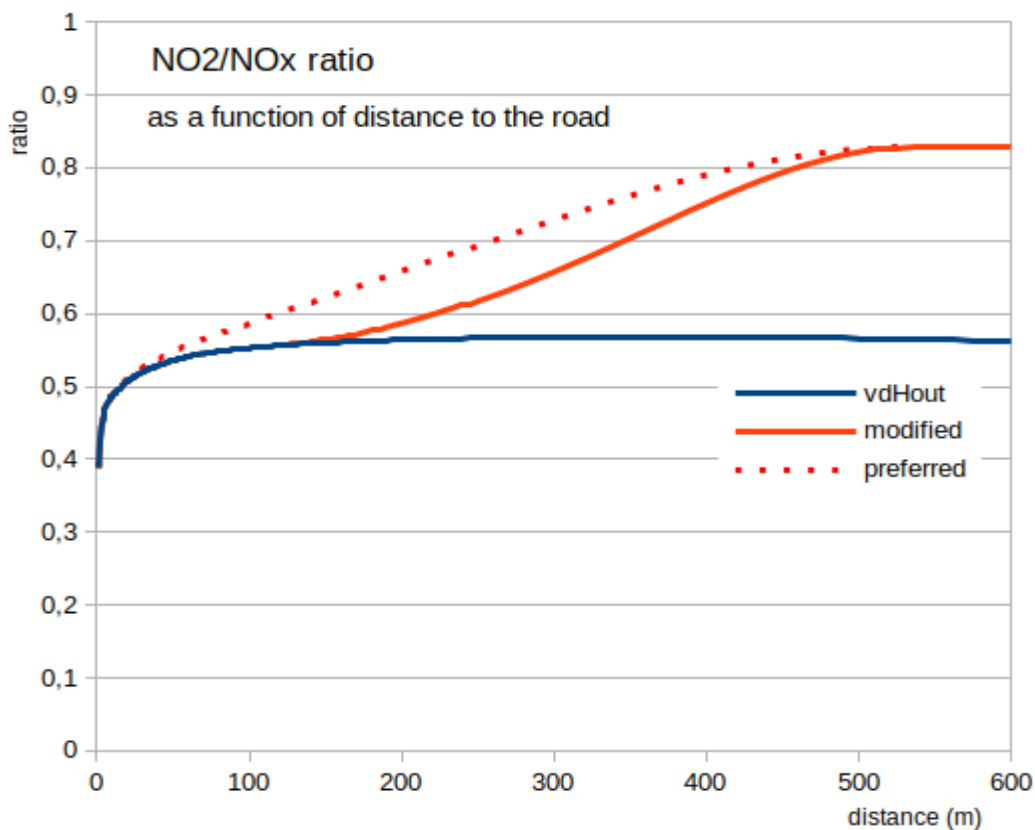
3.1 Empirie en model

In SRM2 wordt het effect van de omzetting van NO naar NO₂ benaderd met een empirische formule, die de Van den Hout benadering wordt genoemd. De formule geeft de verhouding tussen de concentraties NO₂ en NO_x. De verhouding hangt af van de concentratie NO_x en daarmee dus van de afstand tot de weg. Deze benadering is empirisch, op basis van metingen langs snelwegen. Op wat grotere af-

stand van de weg (zeg meer dan 100 m) zou de formule moeten convergeren naar de grootschalige, waargenomen, verhouding, maar dat doet hij niet. Die waargenomen verhouding is ongeveer 0,8¹.

In Figuur 6 staat in blauw de door OPS gerapporteerde verhouding uitgezet. Omdat OPS de Van den Hout formule uitschakelt als de afstand tussen bron en receptor meer dan 5 km is is de weg ingekort tot 6 km. Daardoor is tot op 4 km afstand van de weg de Van den Hout benadering volledig actief. De Van den Hout formule convergeert blijkbaar naar een waarde rond 57% op afstanden groter dan ongeveer 500 m.

Getoond is de verhouding tussen de door OPS gerapporteerde concentraties NO₂_ROADS en NO_x_ROADS; OPS heeft de verhouding forfaitair met 8% verhoogd omdat ook andere chemische omzettingen een rol zouden spelen.



Figuur 6: De verhouding tussen concentratie NO₂ en NO_x als functie van de afstand tot de weg, voor de oorspronkelijke formulering (blauw) en een aangepaste (rode lijn), voor een weg met een lengte van 6 km. Stippellijn: conceptueel betere aanpassing; zie tekst.

De Van den Hout formule wordt toegepast als de afstand tussen wegsegment en rekenpunt minder dan 5 km is. Vermoedelijk is dat omdat SRM2 tot op 5 km wordt toegepast. Dat is een tamelijk arbitraire uitbreiding van het oorspronkelijke SRM2 toepassingsbereik van 3,5 km. De Van den Hout formule bevat een empirische constante, K. Op mijn vragen aan het RIVM naar de empirische achtergrond daarvan heb ik geen antwoord gekregen. Ik vermoed dat K is verkregen door parameterfitting aan metingen langs snelwegen. Bij meetpunten hebben snelwegen waarschijnlijk een veel grotere lengte dan de afstand tussen weg en meetpunt. De meting, en daarmee de empirische waarde van K, is een gewogen gemiddelde over het verkeer over een lange weg. Het is daarom in principe niet correct om het

¹ Gemiddeld over regionale stations 2020, volgens Compendium voor de Leefomgeving, <https://www.clo.nl/indicatoren/nl0231-stikstofdioxide>: 12 µg/m³ NO₂ en <https://www.clo.nl/indicatoren/nl0493-stikstofoxiden> 15 µg/m³ NO_x.

gebruik van de formule af te kappen op 5 km. Ook wegsegmenten verder dan 5 km hebben aan de empirische relatie bijgedragen.

Met een eenvoudige ingreep in `m_ops_vchem.f90` kan voor deze raai van rekenpunten een veel acceptabeler resultaat bereikt worden. Ik heb K afhankelijk gemaakt van de gewogen afstand tussen receptor en wegsegment, waarbij de weging is met de bijdrage van het wegsegment aan de NO_x concentratie in het rekenpunt. Die gewogen afstand is enkele honderden meters voor het rekenpunt het dichtst bij de weg, en die loopt langzaam op met de afstand tot de weg. Als de gewogen afstand minder dan 350 m is gebruik ik Van den Hout, als die afstand boven 1000 m gebruik ik de verhouding in de achtergrondvelden, en daartussenin verloopt K vloeiend, als een sinus tussen $-\pi$ en π . Hoewel er geen goede empirische basis is om Van den Hout alleen te gebruiken als het wegsegment dichterbij dan 5 km bij het rekenpunt ligt heb ik deze maximale toepassingsafstand gehandhaafd. Met deze wijzigingen ontstaat de rode curve in Figuur 6. Tot op 150 m afstand van de weg wordt Van den Hout gevolgd, en boven 500 m is de verhouding van de concentraties die in de achtergrond.

Op het oog volgt de rode curve de Van den Hout benadering te lang; hij vlakt te vroeg af en pas na 2 buigpunten bereikt hij alsnog de limiet op grotere afstand. Zonder kennis van de empirische achtergrond van de keuze van K , lijkt het waarschijnlijker dat K al op kleinere afstanden dan 150 m te groot is. De stippellijn in Figuur 6 oogt dan ook waarschijnlijker; deze lijn is verkregen door de sinuscurve te gebruiken tussen 0 m en 1000 m vanaf de weg. K is dan op 100 m afstand van de weg gedaald van de Van den Hout waarde van $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ naar $91 \mu\text{g}/\text{m}^3$. *Als dat past bij de empirie is heeft die configuratie de voorkeur.*

3.2 Discussie

De verhouding van de concentratie NO_2 tot de concentratie NO_x wordt in SRM2 voorgeschreven door de Van den Hout formule. Deze beschrijft de omzetting van NO naar NO_2 onder invloed van ozon. De formule is empirisch. Fysisch/chemisch is de formule dubieus. Zo wordt in de formule alleen gekeken naar jaargemiddelde concentraties, uitgesplitst naar windrichtingssectoren. De ozonconcentratie is het hoogst in de zomer; de NO_2 -concentratie juist in de winter. Het is onwaarschijnlijk dat het jaargemiddelde van de NO_2 concentratie, dat vooral door de wintersituatie wordt bepaald, afhangt van de jaargemiddelde ozonconcentratie, die immers juist door de zomersituatie wordt bepaald. Als de formule werkt is dat louter toeval. Maar dat kan, bij empirische parameterfitting.

De empirie achter de Van den Hout formule is waarschijnlijk gebaseerd op metingen dicht bij een snelweg. Op wat grotere afstand, zeg boven enkele honderden meters, is de formule niet meer correct, omdat die de waargenomen verhouding tussen concentraties NO_2 en NO_x niet benadert. In de formule zit een parameter, K , die empirisch op $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ is vastgesteld. Deze waarde mag goed werken dicht bij de weg, op wat grotere afstand is die duidelijk te hoog, waardoor de verhouding tussen concentraties NO_2 en NO_x te laag uitpakt. Voor luchtkwaliteit is dat niet een ernstige tekortkoming, omdat de bijdrage van de snelweg op dergelijke afstanden niet tot normoverschrijding leidt. Voor depositie echter is dat anders.

Volgens het Compendium voor de Leefomgeving (zie voetnoot op pagina 7) zijn de gemiddelde concentraties op verkeersbelaste stations $25 \mu\text{g}/\text{m}^3$ NO_2 en $43 \mu\text{g}/\text{m}^3$ NO_x . De verhouding is daar dus 0,58. Uit Figuur 6 blijkt dat de Van den Hout verhouding die waarde juist bereikt ver van de weg; dicht bij de weg geeft Van den Hout een beduidend lagere waarde. Dat werpt twijfel aan de geldigheid van de Van den Hout benadering op, ook dicht bij de weg ².

In OPS versie 5.1 is de Van den Hout formule geprogrammeerd. Bij vergunningsverlening wordt die niet gebruikt, maar de aanwezigheid van de formule in OPS geeft wel de mogelijkheid te onderzoeken hoe groot de fout is die bij vergunningsverlening wordt gemaakt door het gebruik van de formule in SRM2 op afstanden groter dan enkele honderden meters.

Aangetoond is dat het goed mogelijk is om de Van den Hout formule te verbeteren, zodanig dat die zowel de empirische verhouding dicht bij de snelweg als de waargenomen verhouding ver van de

²In Formule 4 in <https://apollonmilieu.nl/documenten/DM002921v3.pdf> geeft Apollon een alternatieve formulering voor de depositie, die de Van den Hout benadering mogelijk op alle afstanden verbetert.

snelweg goed representeert. Dat is bereikt door relaxatie van de parameter K, in afhankelijkheid van de gewogen afstand tussen wegsegment en rekenpunt, waarbij de weging gaat met de concentratiebijdrage van het wegsegment op het rekenpunt. Voor luchtkwaliteitsstudies is dit overbodig, maar bij depositieberekeningen is het een noodzakelijke aanpassing.

Tenslotte merk ik op dat er geen reden is om SRM2 te gebruiken voor depositie vanuit wegen. OPS kan ook die depositie prima berekenen. Het is mij onduidelijk waarom wordt vastgehouden aan het gebruik van twee verschillende modellen, waardoor wegverkeer bevoordeeld wordt.