

Bepaling van de best beschikbare grootschalige concentratiekaarten luchtkwaliteit voor België



Studie uitgevoerd in opdracht van
MIRA, Milieurapport Vlaanderen

Onderzoeksrapport

MIRA/2013/01, december 2012

Bepaling van de best beschikbare grootschalige concentratiekaarten luchtkwaliteit voor België

Bino Maiheu, Nele Veldeman, Peter Viaene, Koen De Ridder, Dirk Lauwaet,
Nele Smeets, Felix Deutsch, Stijn Janssen

Unit Ruimtelijke Milieuaspecten
VITO

**Studie uitgevoerd in opdracht van MIRA,
Milieurapport Vlaanderen**

MIRA/2013/01

December 2012



Documentbeschrijving

Titel

Bepaling van de best beschikbare grootschalige concentratiekaarten luchtkwaliteit voor België

Dit rapport verschijnt in de reeks MIRA Ondersteunend Onderzoek van de Vlaamse Milieumaatschappij. Deze reeks bevat resultaten van onderzoek gericht op de wetenschappelijke onderbouwing van het Milieurapport Vlaanderen. Dit rapport is ook beschikbaar via www.milieurapport.be.

Samenstellers

Bino Maiheu, Nele Veldeman, Peter Viaene, Koen De Ridder, Dirk Lauwaet, Nele Smeets, Felix Deutsch, Stijn Janssen, Unit Ruimtelijke Milieuaspecten, VITO.

Inhoud

In dit project worden verschillende technieken voor het aanmaken van jaargemiddelde grootschalige concentratiekaarten voor PM₁₀, PM_{2,5}, NO₂ en O₃ en voor het aanmaken van overschrijdingskaarten voor PM₁₀ geanalyseerd. De analyse gebeurt op basis van jaargemiddelde concentratie- en overschrijdingskaarten voor 2009. De kaarten worden met behulp van verschillende technieken doorgerekend, kritisch geanalyseerd en vervolgens gevalideerd. Aan de hand van een onderlinge vergelijking wordt ten slotte bestudeerd met welke techniek de best mogelijke grootschalige concentratie- en overschrijdingskaarten gemodelleerd kunnen worden.

Wijze van refereren

Maiheu B., Veldeman N., Viaene P., De Ridder K., Lauwaet D., Smeets N., Deutsch F. & Janssen S. (2013), Bepaling van de best beschikbare grootschalige concentratiekaarten luchtkwaliteit voor België, studie uitgevoerd in opdracht van de Vlaamse Milieumaatschappij, MIRA, MIRA/2013/01, Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek (VITO).

Vragen in verband met dit rapport

Vlaamse Milieumaatschappij
Milieurapportering (MIRA)
Van Benedenlaan 34
2800 Mechelen
tel. 015 45 14 61
mira@vmm.be

D/2013/6871/006
ISBN 9789491385186
NUR 973/943

Woord vooraf

Grootschalige concentratiekaarten zijn zowel in het kader van milieurapportering als voor tal van luchtkwaliteitsdossiers zoals de EU-inbreukprocedure, zonegerichte actieplannen, MER-studies, overleg met federaties, sectoren en lokale besturen belangrijk. Momenteel zijn verschillende technieken voorhanden om dergelijke concentratiekaarten te genereren.

In dit project worden de verschillende technieken voor het aanmaken van jaargemiddelde grootschalige concentratiekaarten voor PM_{10} , $PM_{2.5}$, NO_2 en O_3 en voor het aanmaken van overschrijdingskaarten voor PM_{10} geanalyseerd. De analyse gebeurt op basis van jaargemiddelde concentratie- en overschrijdingskaarten voor 2009. Dit zichtjaar wijkt af van wat in het contract werd vastgelegd, zijnde 2007. Omwille van beschikbaarheid van $PM_{2.5}$ meetgegevens (nagenoeg geen Waalse $PM_{2.5}$ meetstations in 2007) werd in overleg met de opdrachtgevers besloten te opteren voor 2009. De verschillende technieken voor het bepalen van jaargemiddelde concentratiekaarten betreffen (i) de meest recente versie van het RIO-interpolatiemodel, waarbij onderscheid gemaakt wordt tussen het standaard RIO-model dat gebruikt maakt van trends op basis van langlopende gemiddelden en een RIO-09-model dat enkel gebruikt maakt van meetgegevens voor 2009, (ii) het deterministische AURORA-model met vier verschillende manieren van kalibratie: eenvoudige klassieke biascorrectie, eenvoudige biascorrectie volgens orthogonale regressie, geavanceerde biascorrectie op basis van *Kalman-Filtering* en 'Optimal Interpolation' data-assimilatie en (iii) het VLOPS-model met kalibratie voor NO_2 (via verschillende kalibratiefuncties) en PM_{10} . De verschillende technieken voor het bepalen van overschrijdingskaarten betreffen alle bovenstaande technieken met uitzondering van AURORA met geavanceerde biascorrectie op basis van *Kalman-Filtering* en VLOPS (alle varianten).

De kaarten worden met behulp van de verschillende technieken doorgerekend, kritisch geanalyseerd en vervolgens gevalideerd. Aan de hand van een onderlinge vergelijking wordt ten slotte bestudeerd met welke techniek de best mogelijke grootschalige concentratie- en overschrijdingskaarten gemodelleerd kunnen worden.

Inhoudstafel

| | |
|--|----|
| Woord vooraf | 2 |
| Inhoudstafel | 3 |
| Inhoudstafel figuren | 5 |
| Inhoudstafel tabellen | 9 |
| Samenvatting..... | 10 |
| Engelse samenvatting | 11 |
| Inleiding | 12 |
| Projectbeschrijving | 12 |
| Grootschalige concentratiekaart versus achtergrondconcentratiekaart | 12 |
| Projectuitvoering..... | 13 |
| Modeltechnieken | 14 |
| RIO | 14 |
| <i>Beschrijving RIO configuratie</i> | 14 |
| <i>Impact jaarlijkse update trendfuncties</i> | 15 |
| <i>Impact volledig onafhankelijke validatie</i> | 15 |
| AURORA | 20 |
| <i>BIAS correctie en orthogonale regressie</i> | 20 |
| <i>Data assimilatie met Kalman Filter</i> | 21 |
| <i>Optimal interpolation data assimilatie</i> | 21 |
| VLOPS..... | 21 |
| Beschrijving gebruikte emissie-informatie voor AURORA/VLOPS | 22 |
| Beschrijving gebruikte meetstations in de validatie oefening..... | 24 |
| <i>Gebruikte PM₁₀ meetstations</i> | 25 |
| <i>Gebruikte PM_{2.5} meetstations</i> | 26 |
| <i>Gebruikte NO₂ meetstations</i> | 27 |
| <i>Gebruikte O₃ meetstations</i> | 28 |
| Overzicht en vergelijkbaarheid modeltechnieken..... | 29 |
| Modelvalidatie..... | 32 |
| Grootschalige concentratiekaarten..... | 32 |
| <i>Kaartmateriaal voor NO₂</i> | 32 |
| <i>Kaartmateriaal voor O₃</i> | 35 |
| <i>Kaartmateriaal voor PM₁₀</i> | 36 |
| <i>Kaartmateriaal voor PM_{2.5}</i> | 39 |
| Overschrijdingskaarten voor PM ₁₀ | 42 |
| Temporele Validatie | 44 |
| <i>Inleiding, statistische indicatoren en grafische voorstellingen</i> | 44 |
| <i>Temporele Validatie NO₂</i> | 50 |
| <i>Temporele Validatie O₃</i> | 56 |

| | |
|--|---------|
| <i>Temporele Validatie PM₁₀</i> | 61 |
| <i>Temporele Validatie PM_{2,5}</i> | 67 |
| Kwantitatieve vergelijking temporele validatie: scoretabel | 72 |
| Ruimtelijke Validatie | 76 |
| <i>Ruimtelijke validatie NO₂ voor alle Belgische stations</i> | 77 |
| <i>Ruimtelijke validatie NO₂ voor enkel de Vlaamse stations</i> | 79 |
| <i>Ruimtelijke validatie O₃ voor alle Belgische stations</i> | 83 |
| <i>Ruimtelijke validatie O₃ voor enkel de Vlaamse stations</i> | 85 |
| <i>Ruimtelijke validatie PM₁₀ voor alle Belgische stations</i> | 87 |
| <i>Ruimtelijke validatie PM₁₀ voor enkel de Vlaamse stations</i> | 89 |
| <i>Ruimtelijke validatie PM_{2,5} voor alle Belgische stations</i> | 92 |
| <i>Ruimtelijke validatie PM_{2,5} voor enkel de Vlaamse stations</i> | 94 |
| Kwantitatieve vergelijking ruimtelijke validatie: scoretabel..... | 97 |
| Robuustheid van de ruimtelijke correlatie | 100 |
| Discussie en Besluit | 102 |
| Ter inleiding | 102 |
| Algemene observaties uit voorliggend onderzoek | 102 |
| Verdere overwegingen | 103 |
| Besluit..... | 105 |
| Referenties | 107 |
| Begrippen | 108 |
| Afkortingen | 109 |

Inhoudstafel figuren

| | |
|---|----|
| Figuur 1: Illustratie van het robuuste fitting algoritme voor het bepalen van de trendfuncties in RIO. We merken dat het laatste datapunt sterk afwijkt van de andere datapunten, een gewone kleinste kwadraat regressie is daar gevoelig aan (geïllustreerd door de rode lijn), een robuuste regressie (zoals gebruikt voor het bepalen van de RIO trendfuncties) veel minder (groene lijn). | 16 |
| Figuur 2: Invloed van het weglaten van een aantal stations op de trendfuncties. De blauwe volle lijn stelt de huidige PM ₁₀ trends voor in RIO (clc06d driver) voor daggemiddelde concentraties (geen onderscheid week/weekend). Afgebeeld zijn de trendfuncties waarbij het station 43R801 en 44N092 respectievelijk zijn weggelaten (niet zichtbaar verschillend van de originele trendfunctie) en de trendfunctie waarbij het station 43N085 is weggelaten (laagste □ waarde) in de blauwe stippellijn. ... | 17 |
| Figuur 3: Vergelijking in de R ² voor een leaving-one-out validatie. De blauwe staafjes geven de leaving one out validatie voor RIO v3.4, de rode staafjes geven de validatie waarbij gebruik is gemaakt van het trendmodel zonder station 43N085. | 17 |
| Figuur 4: Analooq aan Figuur 3 maar voor de RMSE. | 18 |
| Figuur 5: Analooq aan Figuur 3 maar voor de BIAS. | 18 |
| Figuur 6: Verschil in de leaving-one-out validatie statistieken wanneer we het station 43N085 weglaten uit de bepaling van de trendfunctie. Van boven naar onder geven we het verschil van de absolute waarde van de BIAS, het verschil van de RMSE en het verschil in correlatie coëfficiënt. De ellips geeft telkens de verschillen aan voor het 43N085 station, welk uit de trendfuncties werd weggelaten. | 19 |
| Figuur 7: Voorbeeld van een ordinare (links) en orthogonale regressie voor eenzelfde dataset (rechts). | 20 |
| Figuur 8: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS (zonder correcties). Voor VLOPS worden de NO ₂ resultaten voor de verschillende NO _x → NO ₂ parametrisaties (vito vs. rivm) weergegeven. | 32 |
| Figuur 9: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor NO ₂ . Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. | 33 |
| Figuur 10: Vergelijking tussen de verschillende VLOPS varianten voor NO ₂ . Bovenaan werden de originele VLOPS jaargemiddelde kaarten hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. In de linker kolom staan de kaarten op basis van de VITO-NO _x relatie, rechts die op basis van de RIVM relatie. Ruwe VLOPS (bovenaam) wordt vergeleken met de BIAS methode (midden) en de orthogonale regressie (onderaan). | 34 |
| Figuur 11: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO en AURORA voor O ₃ . (Met VLOPS kunnen geen O ₃ concentraties berekend worden). | 35 |
| Figuur 12: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor O ₃ . Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen voor de eenvoud. | 36 |
| Figuur 13: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, AURORA en OPS voor PM ₁₀ | 37 |
| Figuur 14: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor PM ₁₀ . Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. | 38 |
| Figuur 15: Vergelijking tussen de verschillende OPS varianten voor PM ₁₀ . Bovenaan links werd de originele OPS jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. | 39 |
| Figuur 16: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten voor de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS voor PM _{2.5} | 40 |
| Figuur 17: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor PM _{2.5} . Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. | 41 |
| Figuur 18: Vergelijking tussen de verschillende VLOPS varianten voor PM _{2.5} . Bovenaan links werd de originele VLOPS jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. | 42 |
| Figuur 19: Gemodelleerde aantal overschrijdingen van de PM ₁₀ dagnorm van 50 µg/m ³ in 2009. Van boven naar onder en links naar rechts hebben we de resultaten van het RIO model, de ruwe AURORA resultaten, AURORA + BIAS correctie, AURORA + orthogonale regressie en de Optimal Interpolation techniek. | 43 |
| Figuur 20: Voorbeeld van een typische boxplot. | 45 |
| Figuur 21: Interpretatie van een boxplot t.a.v. een normale (Gaussische) verdeling. De interkwartiel range komt voor een normale verdeling overeen met +/- 0.67σ, de extremen met +/- 2.7σ. De IQR staat voor Inter Quartile Range. Bron: Wikipedia. | 46 |
| Figuur 22: Typisch voorbeeld van een target plot. Links staan de target x,y paren per station, rechts is per model het middelpunt van alle target waarden over de stations berekend. | 47 |
| Figuur 23: Enkele typische voorbeelden van QQ-plots. | 48 |
| Figuur 24: Illustratie van de afleiding van de QQ-indicator. | 49 |

| | |
|---|----|
| Figuur 25: Temporele validatie voor NO ₂ : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R ² . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse. | 51 |
| Figuur 26: Temporele validatie NO ₂ : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 52 |
| Figuur 27: Temporele validatie NO ₂ : Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 53 |
| Figuur 28: Temporele validatie voor NO ₂ : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts). | 54 |
| Figuur 29: Voorbeeld NO ₂ QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Evergem (onder). | 55 |
| Figuur 30: Temporele validatie voor O ₃ : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R ² . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse. | 56 |
| Figuur 31: Temporele validatie O ₃ : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 57 |
| Figuur 32: Temporele validatie O ₃ : Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 58 |
| Figuur 33: Temporele validatie voor O ₃ : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts). | 59 |
| Figuur 34: Voorbeeld O ₃ QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Sint-Kruiswinkel (onder). | 60 |
| Figuur 35: Temporele validatie voor PM ₁₀ : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R ² . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse. | 61 |
| Figuur 36: Temporele validatie PM ₁₀ : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 62 |
| Figuur 37: Temporele validatie PM ₁₀ : Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 63 |
| Figuur 38: Temporele validatie voor PM ₁₀ : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts). | 64 |
| Figuur 39: Voorbeeld PM ₁₀ QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Evergem (onder). | 65 |
| Figuur 40: Temporele validatie PM ₁₀ : statistische indicatoren relevant voor het aantal overschrijdingen van de dagnorm PM ₁₀ van 50 µg/m ³ , links opnieuw de boxplots voor alle stations in België, rechts enkel voor de Vlaamse stations. Van boven naar onder hebben we de FCF, FFA en de RPE. | 66 |
| Figuur 41: Temporele validatie voor PM _{2.5} : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R ² . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse. | 67 |
| Figuur 42: Temporele validatie PM _{2.5} : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 68 |
| Figuur 43: Temporele validatie PM _{2.5} : Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld. | 69 |
| Figuur 44: Temporele validatie voor PM _{2.5} : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts). | 70 |
| Figuur 45: Voorbeeld PM _{2.5} QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Evergem (onder). | 71 |
| Figuur 46: Grafiek ter illustratie van de systematiek die gebruikt wordt voor het opstellen van scoretabellen. De modellen worden op een horizontale as gerangschikt volgens de mediaan over een statistische indicator (RMSE in dit voorbeeld). Een score 10 wordt toegekend aan het beste model en een score 5 aan de mediaan over de modellen. In dit geval, gezien het oneven aantal modellen, komt | |

| | |
|--|----|
| dit overeen met de waarde van de aurbias techniek. Beide scores en RMSE waarden bepalen een rechte, die de scores voor de andere modellen vastlegt..... | 73 |
| Figuur 47: Illustratie van de hellingsparameter $ 1-\alpha $, waarbij α de richtingscoëfficiënt van een Model versus Observatie lineaire regressie. | 77 |
| Figuur 48: Ruimtelijke validatie NO ₂ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 77 |
| Figuur 49: Ruimtelijke validatie NO ₂ voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 78 |
| Figuur 50: Ruimtelijke validatie NO ₂ voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld..... | 79 |
| Figuur 51: Ruimtelijke validatie NO ₂ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 80 |
| Figuur 52: Ruimtelijke validatie NO ₂ enkel voor de Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 81 |
| Figuur 53: Ruimtelijke validatie NO ₂ voor enkel de Vlaamse stations: rechtsboven en links de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 82 |
| Figuur 54: Ruimtelijke validatie O ₃ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 83 |
| Figuur 55: Ruimtelijke validatie O ₃ voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 84 |
| Figuur 56: Ruimtelijke validatie O ₃ voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 84 |
| Figuur 57: Ruimtelijke validatie O ₃ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 85 |
| Figuur 58: Ruimtelijke validatie O ₃ enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 86 |
| Figuur 59: Ruimtelijke validatie O ₃ voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 86 |
| Figuur 60: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 87 |
| Figuur 61: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 88 |
| Figuur 62: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 88 |
| Figuur 63: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde. Merk op dat de scatterplot voor OPS_VITO_GRID en OPS_VITO_POINT wel degelijk op de figuur staan, maar buiten de schaal vallen. Er is namelijk voor gekozen om alle plots op eenzelfde schaal af te beelden..... | 89 |
| Figuur 64: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 90 |
| Figuur 65: Ruimtelijke validatie PM ₁₀ voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechtsboven de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 91 |
| Figuur 66: Ruimtelijke validatie PM _{2,5} voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 92 |
| Figuur 67: Ruimtelijke validatie PM _{2,5} voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 93 |
| Figuur 69: Ruimtelijke validatie PM _{2,5} enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde..... | 94 |
| Figuur 70: Ruimtelijke validatie PM _{2,5} enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot. | 95 |
| Figuur 71: Ruimtelijke validatie PM _{2,5} voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechtsboven de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld. | 96 |

| | |
|--|-----|
| Figuur 72: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor NO_2 als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen. | 100 |
| Figuur 73: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor O_3 als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen. | 100 |
| Figuur 74: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor PM_{10} als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen. | 101 |
| Figuur 75: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor $\text{PM}_{2.5}$ als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen. | 101 |

Inhoudstafel tabellen

| | |
|--|----|
| Tabel 1: Vlaamse emissie-cijfers voor 2009 (in kton) gebruikt als input voor de berekening van emissies met E-MAP v2.0 voor AURORA en VLOPS..... | 23 |
| Tabel 2: Stationslijst voor RIO PM ₁₀ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen. | 25 |
| Tabel 3: Stationslijst voor RIO PM _{2.5} - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen. | 26 |
| Tabel 4: Stationslijst voor RIO NO ₂ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen. | 27 |
| Tabel 5: Stationslijst voor RIO O ₃ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen. | 28 |
| Tabel 6: Overzicht van de gebruikte acronyemen voor de verschillende modellen..... | 29 |
| Tabel 7: Overzichtstabel met de vergelijkbaarheid van de verschillende modellen..... | 31 |
| Tabel 8: Scoretabel voor de temporele validatie voor NO ₂ | 74 |
| Tabel 9: Scoretabel voor de temporele validatie voor O ₃ | 74 |
| Tabel 10: Scoretabel voor de temporele validatie van PM ₁₀ (traditionele indicatoren)..... | 74 |
| Tabel 11: Scoretabel voor de temporele validatie van PM ₁₀ (overschrijdingsindicatoren)..... | 74 |
| Tabel 12: Scoretabel voor de temporele validatie van PM _{2.5} | 74 |
| Tabel 13: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor NO ₂ voor gans België..... | 97 |
| Tabel 14: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor O ₃ voor gans België..... | 97 |
| Tabel 15: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM ₁₀ voor gans België..... | 97 |
| Tabel 16: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM _{2.5} voor gans België..... | 97 |
| Tabel 17: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor NO ₂ voor de Vlaamse stations..... | 98 |
| Tabel 18: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor O ₃ voor de Vlaamse stations..... | 98 |
| Tabel 19: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM ₁₀ voor de Vlaamse stations..... | 99 |
| Tabel 20: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM _{2.5} voor de Vlaamse stations..... | 99 |

Samenvatting

In dit project werden de verschillende technieken voor het aanmaken van jaargemiddelde grootschalige concentratiekaarten voor PM_{10} , $PM_{2.5}$, NO_2 en O_3 geanalyseerd. De analyse gebeurde op basis van jaargemiddelde concentratiekaarten voor 2009. De verschillende technieken betroffen (i) de meest recente versie van het RIO-interpolatiemodel, waarbij onderscheid gemaakt werd tussen het standaard RIO-model dat gebruikt maakt van trends op basis van langlopende gemiddelden en een RIO-09-model dat enkel gebruikt maakt van meetgegevens voor 2009, (ii) het deterministische AURORA-model met vier verschillende manieren van kalibratie: eenvoudige klassieke biascorrectie, eenvoudige biascorrectie volgens orthogonale regressie, geavanceerde biascorrectie op basis van *Kalman-Filtering* en 'Optimal Interpolation' data-assimilatie en (iii) het VLOPS-model met kalibratie voor NO_2 (via verschillende kalibratiefuncties) en PM_{10} . Naast grootschalige concentratiekaarten werden ook kaarten van het aantal overschrijdingsdagen voor PM_{10} aangemaakt met RIO en met de AURORA varianten (met uitzondering van de *Kalman-Filtering* techniek). In het contract werd ook voorzien dat de indicator 'aandeel van de bevolking blootgesteld aan dagen met PM_{10} concentratie hoger dan de Europese grenswaarden' zou worden bepaald. Om de hierboven opgesomde technieken vergelijkbaar te houden, werd gekozen voor een resolutie van 4x4 km. Omdat het berekenen van blootstellingsindicatoren op deze resolutie weinig zinvol is, werd ervoor gekozen deze indicator finaal niet op te nemen in het project.

De verschillende technieken en kaarten werden kritisch geanalyseerd, gevalideerd en onderling vergeleken met als doel per pollutant / indicator de best mogelijke grootschalige concentratiekaart per toepassingsgebied te identificeren. De validatie gebeurde per onderzochte pollutant / indicator via de "leaving-one-out" techniek. Bovendien werd onderscheid gemaakt tussen een temporele en een ruimtelijke validatie.

Uit de temporele analyse werd duidelijk dat het RIO-model over de hele lijn als beste model naar voren komt. Het ongecorrigeerde, deterministische AURORA-model scoort het minst goed. Het AURORA-model gekalibreerd aan de hand van meetgegevens op basis van verschillende technieken (eenvoudige biascorrectie, bias correctie met orthogonale regressie, 'Optimal Interpolation') levert duidelijk betere resultaten dan het ruwe AURORA-model, maar de resultaten blijven systematisch ondergeschikt aan de resultaten bekomen met het RIO-model. Met VLOPS kunnen omwille van modeltechnische redenen geen tijdsreeksen gegenereerd worden. Er kan dan ook besloten worden dat RIO het best beschikbare model is om de temporele aspecten van de luchtkwaliteit in Vlaanderen (en bij uitbreiding in België) voor de onderzochte pollutanten te modelleren.

Uit de ruimtelijke analyse werd duidelijk dat onderscheid naargelang de beschouwde pollutant gemaakt dient te worden. Voor de fijn stof fracties (PM_{10} en $PM_{2.5}$) slaagt het RIO-model er het best in het ruimtelijk patroon van de geobserveerde jaargemiddelde concentraties te genereren. De deterministische modellen AURORA en VLOPS blijven ver achter, zelfs wanneer ze met verschillende correctie en data-assimilatie technieken gecorrigeerd worden. Voor O_3 slaagt het met 'Optimal Interpolation' gecorrigeerde AURORA-model er het best in om het ruimtelijke O_3 patroon te reproduceren. Voor NO_2 dient onderscheid gemaakt te worden tussen modellering voor Vlaanderen of België. Op Belgisch niveau slaagt het RIO-model er het best in het ruimtelijk patroon van de geobserveerde jaargemiddelde NO_2 concentraties te verklaren. Op Vlaams niveau zijn het RIO-model en het VLOPS-model waarop een biascorrectie wordt toegepast (eenvoudige biascorrectie of op basis van orthogonale regressie) aan elkaar gewaagd.

Verder werd duidelijk dat de performantie van het huidige operationele RIO-model enerzijds en van het RIO-model dat enkel data van 2009 gebruikt (RIO 09) anderzijds erg vergelijkbaar is. Beide modelvarianten presteren nagenoeg equivalent. Dit is een niet onbelangrijke observatie vanuit overwegingen rond continuïteit.

Om tot een evenwichtige besluitvorming te komen, dienen verschillende aspecten in overweging genomen te worden. Zo spelen naast kwantitatieve ook kwalitatieve aspecten een belangrijke rol. De initiële vraag 'Welke techniek is het meest geschikt voor het modelleren van grootschalige concentratiekaarten?' vraagt dan ook om een genuanceerd antwoord. In dit project werden de hierboven besproken kwantitatieve beschouwingen gecombineerd met kwalitatieve aspecten en werd een genuanceerd antwoord op de onderzoeksvraag gegeven.

Engelse samenvatting

In this project, different techniques for creating large-scale annual mean concentration maps for PM10, PM2,5, NO2 en O3 were analyzed. The analysis was based on annually averaged concentration maps for 2009. The different techniques taken into account were (i) the most recent version of the RIO interpolation model for which a distinction was made between 'the standard RIO model' that uses trends based on long-term averages and 'the RIO-09 model' that only uses data for 2009; (ii) the deterministic AURORA model with four different methods of calibration: simple classical bias correction, simple bias correction according to orthogonal regression, advanced bias correction based on 'Kalman Filtering' and 'Optimal Interpolation' data assimilation; (iii) the VLOPS model with calibration for NO2 (using different calibration functions) and PM10. In addition to large-scale concentration maps also maps of the number of exceedance days for PM10 were generated with RIO and with the AURORA variants (with the exception of the Kalman Filtering technique). The contract also provided that the indicator 'proportion of the population exposed to days with PM10 concentrations higher than the European limit values' would be determined. To allow fair comparison of the above-mentioned techniques, a model resolution of 4x4 km was chosen. At this resolution the calculation of exposure indicators makes little sense, therefore it was decided not to include computation and comparison of this exposure indicator in the project.

The various techniques and maps were critically analyzed, validated and compared aiming at identifying the best possible large-scale concentration map for each pollutant / indicator. The validation occurred per pollutant / indicator and was based on the 'leaving-one-out' technique. Furthermore, a distinction was made between a temporal and a spatial validation.

The temporal analysis revealed that the RIO model in general seems to be the best model to capture temporal variations. The uncorrected, deterministic AURORA model scores the least. The AURORA model calibrated with measurements using different techniques (simple bias correction, bias correction with orthogonal regression, and 'Optimal Interpolation') provides significantly better results than the uncorrected AURORA model, but the results remain systematically subordinated to the results obtained with the RIO model. With VLOPS no time series can be generated due technical model restrictions. It can therefore be concluded that the RIO model is the best available technique to capture the temporal aspects of the air quality in Flanders (and by extension in Belgium) for the investigated pollutants.

From the spatial analysis it became clear that distinction between the considered pollutants should be made. For particulate matter fractions (PM10 and PM2.5) the RIO model performs best in generating the spatial pattern of the observed annually averaged concentrations. The deterministic models AURORA and VLOPS remain far behind, even when corrected with different correction and data assimilation techniques. For O3 the with 'Optimal Interpolation' corrected AURORA model succeeds best in reproducing the spatial pattern of O3. For NO2 distinction should be made between modeling for Flanders or for Belgium. At Belgian level the RIO model manages best in explaining the spatial pattern of the observed annually averaged NO2 concentrations. At Flemish level, the RIO model and the VLOPS model for which a bias correction is applied (simple bias correction or based on orthogonal regression) are competitive.

It also became clear that the performance of the current operational RIO model one hand and the RIO model that uses only data from 2009 (RIO-09) on the other hand is very similar. Both model variants are practically equivalent. This is a significant observation in view of continuity.

To ensure a balanced decision making, different aspects have to be considered. As well as quantitative, qualitative aspects play an important role. The initial question "Which technology is best suited for modeling large-scale concentration maps?" therefore requires a nuanced answer. In this project the quantitative considerations discussed above were combined with qualitative aspects and a nuanced answer to the research question was formulated.

Inleiding

Projectbeschrijving

Grootschalige concentratiekaarten zijn zowel in het kader van milieurapportering als voor tal van luchtkwaliteitsdossiers zoals de EU-inbreukprocedure, zonegerichte actieplannen, MER-studies, overleg met federaties, sectoren en lokale besturen belangrijk. Momenteel zijn verschillende technieken voorhanden om dergelijke concentratiekaarten te genereren.

In dit project worden de verschillende technieken voor het aanmaken van jaargemiddelde grootschalige concentratiekaarten voor PM₁₀, PM_{2,5}, NO₂ en O₃ geanalyseerd. De analyse gebeurt op basis van jaargemiddelde concentratiekaarten voor 2009. De verschillende technieken betreffen (i) de meest recente versie van het RIO-interpolatiemodel, waarbij onderscheid gemaakt wordt tussen het standaard RIO-model dat gebruik maakt van trends op basis van langlopende gemiddelden en een RIO-09-model dat enkel gebruik maakt van meetgegevens voor 2009, (ii) het deterministische AURORA-model met vier verschillende manieren van kalibratie: eenvoudige klassieke biascorrectie, eenvoudige biascorrectie volgens orthogonale regressie, geavanceerde biascorrectie op basis van *Kalman-Filtering* en '*Optimal Interpolation*' data-assimilatie en (iii) het VLOPS-model met kalibratie voor NO₂ (via verschillende kalibratiefuncties) en PM₁₀.

De verschillende technieken en kaarten worden kritisch geanalyseerd, gevalideerd en onderling vergeleken met als doel per pollutant / indicator de best mogelijke grootschalige concentratiekaart per toepassingsgebied te identificeren.

De validatie gebeurt per onderzochte pollutant / indicator via de "*leaving-one-out*" techniek.

De Europese PM₁₀-dagnorm wordt nog steeds op een groot aantal (meet)locaties in Vlaanderen overschreden. Om deze reden zijn modelresultaten en kaarten van deze indicator van groot belang. Omwille van zijn karakter als overschrijdingsindicator is het aantal dagen met daggemiddelde PM₁₀-concentraties boven 50 µg/m³ echter zeer moeilijk te modelleren en onderworpen aan een (veel) grotere onzekerheidsmarge dan de jaargemiddelde concentraties. Doeltreffende kalibratiemethoden zijn dan ook van zeer groot belang voor deze indicator.

In dit project worden kaarten van het aantal overschrijdingsdagen aangemaakt met RIO en met de AURORA varianten (met uitzondering van de *Kalman-Filtering* techniek). VLOPS maakt gebruik van meteostatistieken en niet van "echte" meteo en is dus niet geschikt om het aantal dagen boven een bepaalde drempel te berekenen. De verkregen kaarten worden geanalyseerd, gevalideerd en onderling vergeleken met als doel de bestmogelijke kaart voor het aantal dagen boven 50 µg/m³ PM₁₀ te identificeren.

Grootschalige concentratiekaart versus achtergrondconcentratiekaart

Bij de titel van voorliggend project dient een belangrijke opmerking gemaakt te worden. Initieel was de titel 'Bepaling van de best beschikbare achtergrondconcentratiekaarten luchtkwaliteit voor België'. Tijdens uitvoering van het project werd er echter voor gekozen de titel te wijzigen in 'Bepaling van de best beschikbare grootschalige concentratiekaarten luchtkwaliteit voor België'. De belangrijkste reden hiervoor was om eventuele verkeerde interpretatie van de kaarten die in dit project werden gemodelleerd te vermijden. De kaarten die in het kader van dit project werden gemodelleerd werden immers bepaald aan de hand van hetzij het RIO-model hetzij het AURORA- of VLOPS-model of een variant daarvan. In het geval van RIO komen de kaarten tot stand door interpolatie van gemeten concentraties, in het geval van AURORA of VLOPS worden concentraties ingeschat op basis van (o.a.) alle emissies. Bijgevolg zijn de resulterende kaarten geen 'achtergrondconcentratiekaarten' maar eerder 'grootschalige concentratiekaarten'. Bij gebruik van de modeltechnieken beschreven in dit rapport of van de in dit project gemodelleerde kaarten, dient de nodige aandacht besteed te worden aan al dan niet nodige 'dubbelcorrecties' bij koppeling met andere modellen (zoals bijvoorbeeld IFDM).

Projectuitvoering

Voorliggend rapport is als volgt opgebouwd.

In een eerste hoofdstuk worden de verschillende modeltechnieken die in deze studie ten opzichte van elkaar werden vergeleken, besproken. De nadruk ligt hierbij op de configuratie van de modelversies en op de kalibratie en data-assimilatie technieken, en niet zozeer op de technische aspecten van de modellen zelf. In dit hoofdstuk wordt ook aandacht besteed aan de meetstations die voor de validatie-oefening in beschouwing werden genomen, rekening houdend met hun representativiteit. Bovendien wordt ook een kwalitatieve vergelijking van de verschillende modeltechnieken besproken.

In het tweede hoofdstuk wordt de eigenlijke validatie van de verschillende modeltechnieken in detail beschreven. In eerste instantie wordt een visuele vergelijking van concentratiekaarten, berekend met de verschillende modeltechnieken, besproken. Vervolgens wordt de doorgedreven temporele validatie op de uurlijkse waarden die binnen dit project werd uitgevoerd (enkel voor RIO en de AURORA varianten) toegelicht. Tot slot wordt de uitgebreide ruimtelijke validatie van de jaargemiddelden voor alle modellen beschreven: enkel voor het Vlaams grondgebied in het geval van VLOPS, voor heel België in het geval van RIO en AURORA.

In een laatste hoofdstuk worden de resultaten van zowel de kwalitatieve vergelijking uit het eerste hoofdstuk als de resultaten uit de kwantitatieve vergelijking uit het tweede hoofdstuk samengebracht in een uitgebreid besluit.

Modeltechnieken

In onderstaand hoofdstuk wordt de configuratie van de modellen die werden meegenomen in deze vergelijkende studie beschreven. Het is echter niet de bedoeling om voor elk model op zich een gedetailleerde beschrijving te geven.

RIO

RIO is een geo-statistisch interpolatiemodel dat op basis van concentratiemetingen en een landgebruik-gebaseerde proxy variabele, β , ruimtelijk expliciete concentratie informatie genereert. De RIO methodiek staat uitgebreid beschreven in de literatuur (Janssen et al., 2008 en 2012, Hooyberghe et al., 2006). RIO wordt ondermeer operationeel gebruikt in België voor het genereren van near-real-time concentratiekaarten (zie: www.irceline.be).

Voor het aanmaken van de kaarten in dit project werd gebruik gemaakt van de huidige operationele RIO versie (v3.4), geïmplementeerd in FORTRAN. Er werd voor elke pollutant een dataset gegenereerd met uurlijkse concentratiekaarten voor het volledige jaar 2009, vertrekkende vanaf de gevalideerde metingen, door IRCEL aangeleverd.

Beschrijving RIO configuratie

Interpolatie PM₁₀

Voor PM₁₀ bevat de huidige operationele RIO versie de bijgewerkte CORINE 2006 (clc06) als landgebruik-driver. Deze werd opgesteld in de nasleep van het project "Analyse overschrijdingen RIO" (Maiheu, 2011a). De aanpassingen t.o.v. de verouderde ruimtelijke driver, gebaseerd op CORINE 2000 (clc00) werden hieronder nogmaals in detail opgenomen:

- Er werd gebruik gemaakt van clc06d (bijgewerkte clc06) als basis land cover dataset.
- De opdeling in 11 RIO klassen werd uitgebreid naar 13 klassen met "Container port area" en "Harbour waterbodies" als extra klassen.
- Het gewicht van de klasse "Mines, dumps en construction sites" werd gereduceerd t.o.v. de oude driver en een aantal zones die in de CORINE dataset als "construction site" werden ingekleurd, werden gecorrigeerd en aangepast aan de werkelijke situatie. De exacte locaties staan beschreven in Maiheu (2011a).
- De bufferstraal voor het station Roeselare Haven (44M705) werd tot 250 m teruggebracht wegens een vermoede beperkte representativiteit van het station.
- Analoog werd voor Oostrozebeke de beta waarde op 1 gezet¹.

De lange termijn gemiddelden en trendfuncties werden bepaald op de periode 2009-2010. De gebruikte stationslijst voor PM₁₀ werd opgenomen in Tabel 2 (zie verder).

Interpolatie PM_{2,5}

Voor PM_{2,5} werd gebruik gemaakt van de experimentele RIO AODBETA driver, die een remote sensing AOD kaart combineert met de CORINE land cover dataset. De details van het tot stand komen van deze driver staan beschreven in Maiheu et al. (2011b). Voor de AODBETA driver werd gewerkt met MODIS AOD data, gemiddeld voor de jaren 2007-2009. De gebruikte stationslijst voor PM_{2,5} werd opgenomen in Tabel 3 (zie verder).

¹ Door de specifieke inkleuring van het landgebruik in die regio was het niet mogelijk om dit op consistente manier adhv de bufferstraal te doen.

Interpolatie NO₂

Voor NO₂ bevat de operationele FORTRAN versie op dit ogenblik de verouderde 'CorineID', die gebaseerd is op de CORINE 2000 landgebruiksdataset, als ruimtelijke driver. De trendfuncties dateren van voor 2009 en zijn op de lange termijn statistieken voor de periode 2004-2008 gebaseerd. De gebruikte stationslijst voor NO₂ werd opgenomen in Tabel 4 (zie verder).

Interpolatie O₃

Voor ozon geldt een analoge situatie als voor NO₂ inzake de trendfuncties, lange termijn gemiddelden en ruimtelijke driver. De gebruikte stationslijst voor O₃ werd opgenomen in Tabel 5 (zie verder).

Impact jaarlijkse update trendfuncties

Zoals werd afgesproken met de opdrachtgever, werd gebruik gemaakt van de huidige implementatie van het RIO model (v3.4). Deze versie bevat echter niet voor alle pollutanten de meest recente trendfuncties. Daarom werd nagegaan wat de invloed is van het gebruik van een RIO versie die enkel gebruik maakt van data voor 2009. Concreet betekent dit dat trendfuncties herbepaald werden aan de hand van jaargemiddelde concentraties voor 2009.

Voor het operationele RIO model is het belangrijk te werken met stabiele trendfuncties die bepaald werden op basis van lange termijn gemiddelden (typisch worden die functies bepaald a.d.h.v. lange termijn gemiddelden over een periode van 4 jaar). Voor het genereren van retrospectieve concentratiekaarten met het RIO model, is het aannemelijk te stellen dat het model volledig geoptimaliseerd dient te worden voor het beschouwde jaar. Deze techniek zou jaar na jaar herhaald kunnen worden bij de opmaak van nieuwe grootschalige concentratiekaarten.

In deze studie wordt de impact van een jaarlijkse update van de trendfuncties nagegaan door enerzijds de concentratiekaarten te berekenen met het huidige RIO model (v3.4) en anderzijds met de voor 2009 geoptimaliseerde versie. Deze laatste versie zal in het rapport aangeduid worden met RIO09. Het resultaat van deze vergelijking wordt samen met de resultaten van de andere modellen besproken.

Impact volledig onafhankelijke validatie

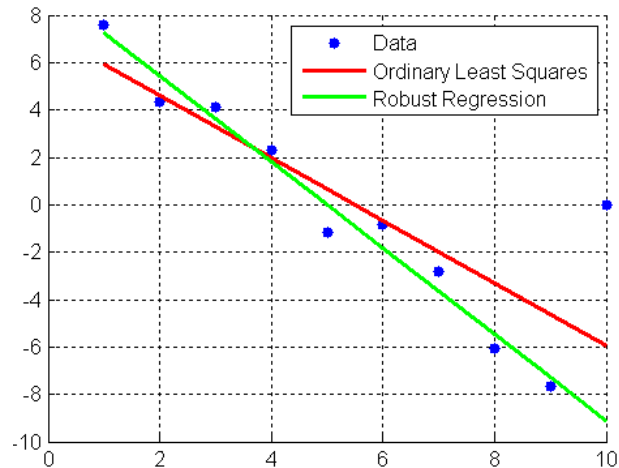
Door de opdrachtgever werd de vraag gesteld of er in de traditionele *leaving-one-out* validatie methode effectief sprake is van een onafhankelijke validatie. Deze vraag is niet geheel onterecht, gezien bij het opstellen van de trendfuncties en het bepalen van de RIO a_i gewichten² weldegelijk gebruik gemaakt wordt van alle stations waarvoor RIO wordt opgezet. Hierdoor wordt in een normale *leaving-one-out* validatie op basis van de RIO stationslijst inderdaad informatie gebruikt van de stations waartegen men wenst te valideren. Om een volledig onafhankelijke validatie te bekomen, zou men voor ieder station waartegen men wenst te valideren het betreffende station moeten weglaten uit de optimalisatie van de a_i gewichten en het bepalen van de trendfuncties.

Om de invloed van het weglaten van één enkel station na te gaan, werd vooraf een impactstudie uitgevoerd. Voor een 2-tal stations werd de gebruikelijke *leaving-one-out* validatie vergeleken met een volledig onafhankelijke *leaving-one-out* validatie. Hiertoe werd een stedelijk en een ruraal station voor PM₁₀ gekozen: als stedelijk station werd 42R801 (Borgerhout) genomen, als ruraal station 44N029 (Houtem). Deze keuze werd gemaakt op basis van het feit dat voor beide stations alle 4 de beschouwde pollutanten gemeten worden.

Voor elk station moet in principe een volledige RIO versie worden opgesteld die geen gebruik maakt van het betreffende station. In deze analyse beperkten we ons echter tot het herbepalen van de trendfuncties.

² Dit zijn de gewichten die worden toegekend aan elke CORINE landgebruiksklasse bij het opstellen van de zgh beta-parameter die als proxy variabele gebruikt wordt in het RIO interpolatie.

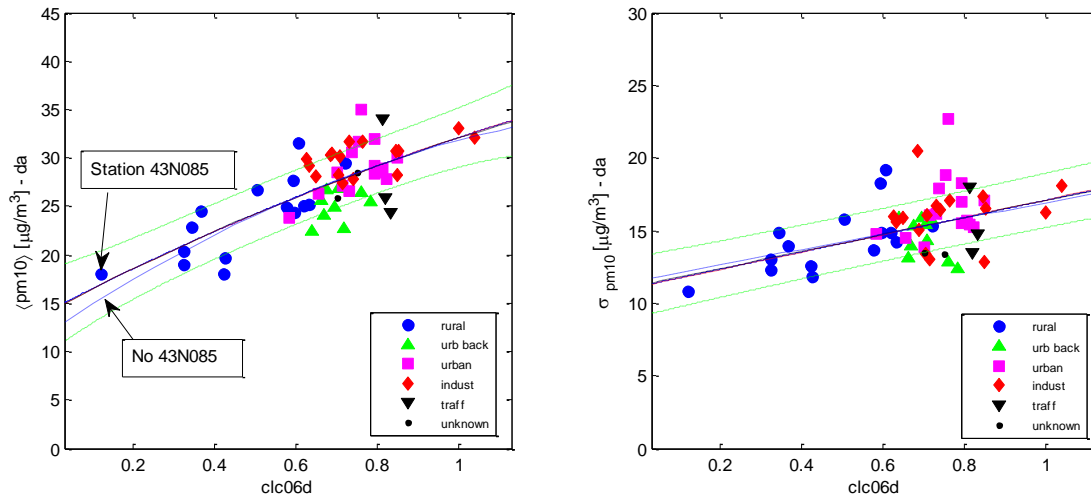
Een eerste opmerking die gemaakt dient te worden is dat de routines waarmee trendfuncties gefit worden in RIO ongevoelig zijn aan outliers. Er wordt namelijk gebruik gemaakt van een robuust fitting algoritme (cfr. MATLAB referenties DuMouchel et al 1989; Holland et al, 1977; Huber 1981 en Street et al 1988) waardoor de invloed van één enkel punt sterk gereduceerd wordt. Een voorbeeld wordt gegeven in Figuur 1, waarin geïllustreerd wordt dat een gewone kleinste kwadraat regressie gevoelig is voor een afwijkend datapunt en een robuuste regressie veel minder.



Figuur 1: Illustratie van het robuuste fitting algoritme voor het bepalen van de trendfuncties in RIO. We merken dat het laatste datapunt sterk afwijkt van de andere datapunten, een gewone kleinste kwadraat regressie is daar gevoelig aan (geïllustreerd door de rode lijn), een robuuste regressie (zoals gebruikt voor het bepalen van de RIO trendfuncties) veel minder (groene lijn).

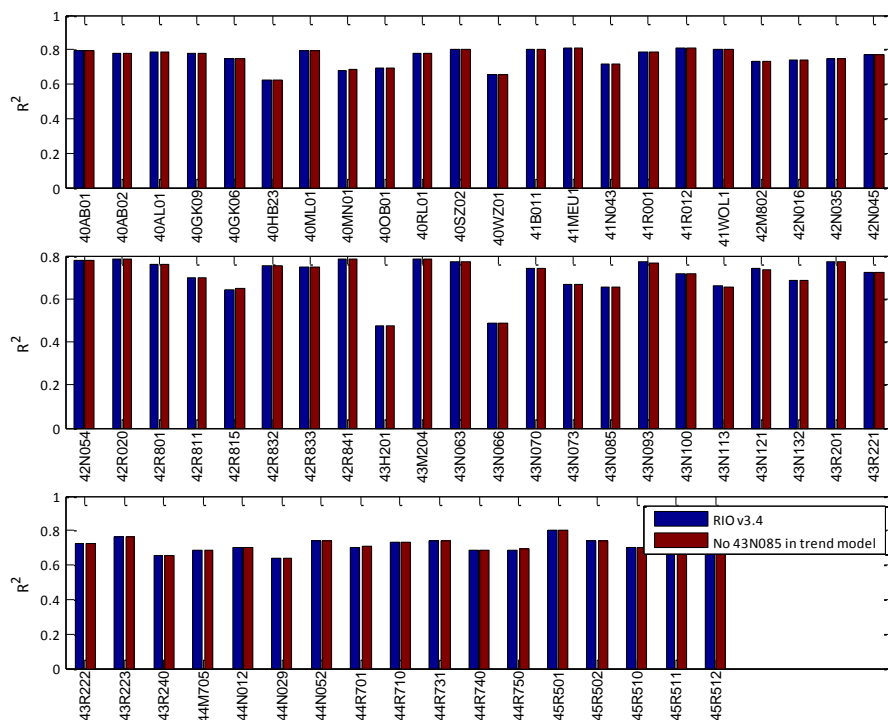
In Figuur 2 wordt het resultaat van het herbepalen van de trendfuncties voor PM_{10} , wanneer enkele stations worden weg gelaten, getoond. Als voorbeeld werd de PM_{10} trend waarbij het stedelijk station 42R801 (Borgerhout) en het ruraal station 44N029 (Houtem) werden weggelaten, gekozen. Uit de figuur blijkt dat de trendfunctie nagenoeg ongewijzigd blijft, dit deels door het robuuste fitting algoritme, deels door het feit dat de β waarden van beide stations niet aan de extremen van de range liggen. Er zijn met andere woorden nog stations met hogere en lagere β waarden om de trendfunctie vast te houden.

Om de maximale impact na te gaan, werd eveneens een station met extreme β waarde onderzocht. Hiertoe werd het station met laagste β waarde voor PM_{10} (43N085, Vielsalm) weggelaten. Uit Figuur 2 wordt duidelijk dat er bij weglaten van dergelijk station wel een kleine wijziging in de trendlijn waarneembaar is. Daarom werd de verdere impact analyse uitgewerkt voor dit station, of nog, er werd nagegaan wat de invloed van de gewijzigde trendlijn is op de *leaving-one-out* validatie.

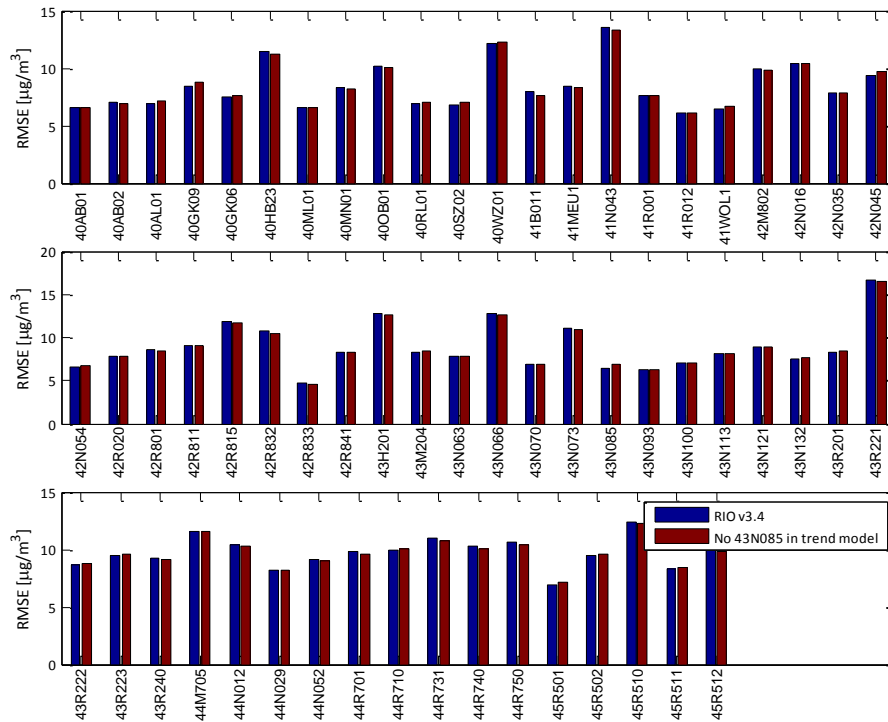


Figuur 2: Invloed van het weglaten van een aantal stations op de trendfuncties. De blauwe volle lijn stelt de huidige PM_{10} trends voor in RIO (clc06d driver) voor daggemiddelde concentraties (geen onderscheid week/weekend). Afgebeeld zijn de trendfuncties waarbij het station 43R801 en 44N092 respectievelijk zijn weggelaten (niet zichtbaar verschillend van de originele trendfunctie) en de trendfunctie waarbij het station 43N085 is weggelaten (laagste \square waarde) in de blauwe stippellijn.

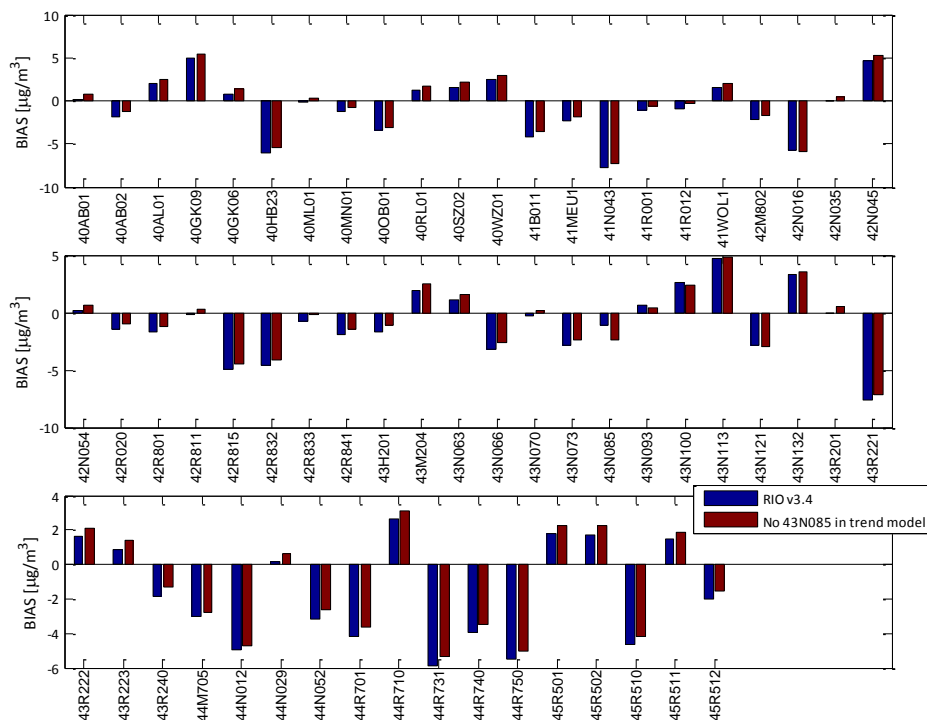
Hierna worden de validatie statistieken die bekomen worden met de traditionele *leaving-one-out* en de *leaving-one-out* waarbij het station 43N085 is weggelaten in het bepalen van de trendfuncties getoond. Merk op dat deze oefening voor de eenvoud gedaan werd op basis van interpolaties van de daggemiddelden (en niet de uurlijkse waarden). Hierdoor zijn de RMSE over het algemeen lager en de R^2 hoger dan wanneer de validatie zou gebeuren voor de uurlijkse waarden.



Figuur 3: Vergelijking in de R^2 voor een *leaving-one-out* validatie. De blauwe staafjes geven de *leaving one out* validatie voor RIO v3.4, de rode staafjes geven de validatie waarbij gebruik is gemaakt van het trendmodel zonder station 43N085.

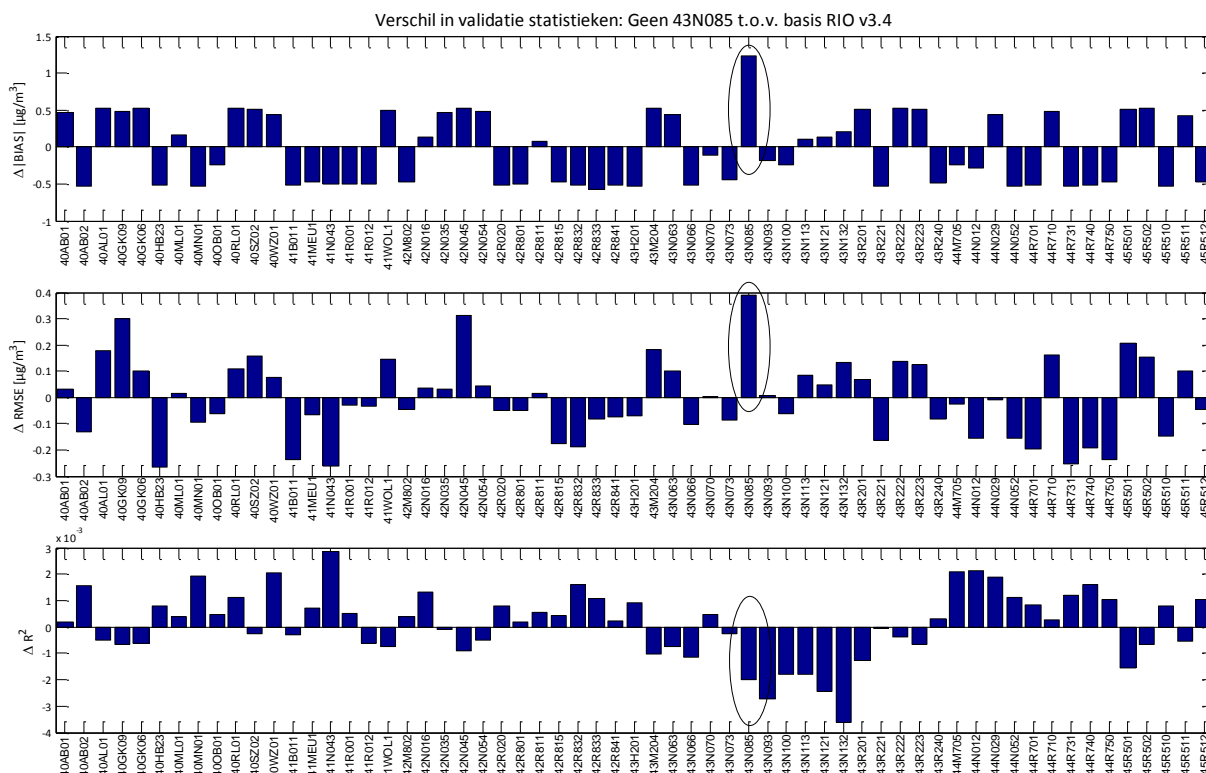


Figuur 4: Analooq aan Figuur 3 maar voor de RMSE.



Figuur 5: Analooq aan Figuur 3 maar voor de BIAS.

Uit bovenstaande figuren is duidelijk dat er weinig verschil is in de validatie statistieken van beide *leaving-one-out* technieken. De grootste verschillen zijn op te tekenen (niet verwonderlijk) voor de model BIAS. In Figuur 6 worden de effecten van de verschillende trendfuncties op de validatie statistieken getoond door per indicator en per station de verschillen uit te zetten.



Figuur 6: Verschil in de leaving-one-out validatie statistieken wanneer we het station 43N085 weglaten uit de bepaling van de trendfunctie. Van boven naar onder geven we het verschil van de absolute waarde van de BIAS, het verschil van de RMSE en het verschil in correlatie coëfficiënt. De ellips geeft telkens de verschillen aan voor het 43N085 station, welk uit de trendfuncties werd weggelaten.

De grootste verschillen vallen uiteraard op te tekenen voor het station 43N085, gezien daar de afwijking in de trendfunctie het grootst is (cfr. Figuur 2). Het verschil in absolute waarde van de BIAS voor dit station bedraagt $1.23 \mu\text{g}/\text{m}^3$, het verschil in RMSE $0.40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en in de verklaarde variantie $R^2 -0.002$.

Deze verschillen zijn relatief klein en gezien deze verschillen de impact van de meest extreme situatie weergeven (een station aan de rand van het beta spectrum) kan besloten worden dat de gewone *leaving-one-out* validatie, waarbij hetzelfde trendmodel gebruikt wordt voor alle stations, een afdoende manier is om de kwaliteit van het RIO model op de stationslocaties in te schatten. De fout in de validatie statistieken die hierdoor gemaakt wordt is in het slechtste geval van de grootteorde aangegeven door bovenstaande getallen.

Tot slot, bij deze impactstudie dient opgemerkt te worden dat gelijkaardige bemerkingen rond al dan niet volledige onafhankelijkheid ook gemaakt kunnen worden voor kalibratie- en of data-assimilatie technieken. In beide technieken gebeuren immers parametrisaties (bvb. ruimtelijke correlatie lengte van de fouten covariantie) die gebaseerd zijn op stationsgegevens. Voor deze technieken werd geen doorgedreven impactstudie uitgevoerd. Op basis van bovenstaande analyse werd echter besloten dat uitgebreide modelaanpassingen om tot een volledig onafhankelijke validatie te komen niet tot significant andere resultaten zouden leiden dan wat met de standaard *leaving-one-out* validatie bekomen zou worden.

AURORA

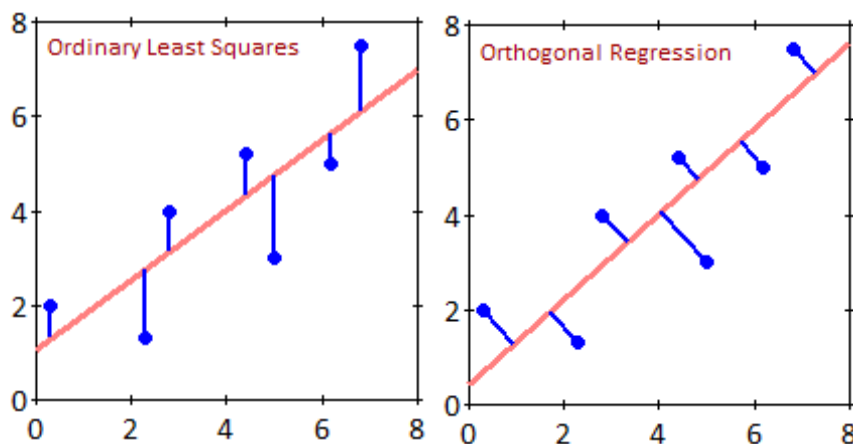
AURORA is een Euleriaans chemisch transport model. Het model is opgebouwd uit een aantal modules. De emissiegenerator berekent per uur de uitstoot van schadelijke stoffen op de gewenste resolutie, op basis van beschikbare emissiegegevens. Hierbij worden proxy-gegevens gebruikt om data op een lagere resolutie te verfijnen. Het chemisch transport model combineert vervolgens uurlijkse meteorologische invoergegevens afkomstig van ARPS (Xue et al, 1995) of ECMWF met de emissiegegevens om het dynamisch gedrag van zowel gassen als deeltjes te berekenen voor het modeldomein. Voor de randvoorwaarden kan het model genest worden in een aantal verschillende regionale modellen (BELEUROS, LOTOS EUROS, CHIMERE ...) of in een grootschalige AURORA versie. De modeluitvoer bestaat uit uurlijkse driedimensionale en tweedimensionale concentratie- en depositievelden voor alle relevante polluenten. Bij de AURORA berekeningen in dit project werden randvoorwaarden afkomstig van BELEUROS gebruikt. De meteorologische invoer is afkomstig van ECMWF.

In de berekeningen uitgevoerd met het AURORA³ model worden de PM₁₀- en PM_{2,5}-concentraties, zoals bij alle andere vergelijkbare deterministische modellen, systematisch onderschat. Voor deze systematische onderschatting dient via een kalibratiemethode gecorrigeerd te worden. In deze studie werden vier verschillende technieken toegepast, die hieronder worden beschreven.

BIAS correctie en orthogonale regressie

Bij de eenvoudige biascorrectie werden de modelresultaten gecorrigeerd op basis van de gemiddelde afwijking van de metingen ten opzichte van de modelresultaten (BIAS) voor de achtergrondmeetstations. Deze methode sluit aan bij de methode gebruikt in Nederland voor het aanmaken van de Grootschalige Concentratiekaart (GCN). Voor het GCN worden de bias waarden voor de stations echter geïnterpoleerd tot een landsdekkende verschilkaart met Ordinary Kriging (Matthijssen en Visser, 2006) en vervolgens bij de modelresultaten gevoegd.

Naast een eenvoudige bias correctie werd ook nagegaan in hoeverre de AURORA resultaten verbeteren als er gecorrigeerd wordt door middel van orthogonale regressie. In vergelijking met normale lineaire regressie wordt bij orthogonale regressie voor de minimalisatie van de som van kwadratische afstanden tussen de datapunten en de regressielijn niet de y-afstand maar de orthogonale (loodrechte) afstand genomen. Dit wordt geïllustreerd in Figuur 7.



Figuur 7: Voorbeeld van een ordinaire (links) en orthogonale regressie voor eenzelfde dataset (rechts).

Bij de jaargemiddelde kaarten werden de biascorrectie en de orthogonale regressie rechtstreeks toegepast op de jaargemiddelde kaart. Voor de temporele validatie gebeurde de correctie op de uurlijkse waarden.

³ Voor de AURORA berekeningen werd de versie die in SVN onder de tag 'juni2012' bewaard is, gebruikt (revisie 1872).

Data assimilatie met Kalman Filter

Een geavanceerdere methode voor de BIAS-correctie wordt momenteel bij VITO geïmplementeerd in het kader van de luchtkwaliteitsvoorspellingen, maar kan in principe ook toegepast worden op retrospectieve modelresultaten, mits enkele aanpassingen. Het basisidee is dat op de meetpunten een lineaire regressie gebeurt van de gemeten concentraties ten opzichte van de gesimuleerde waarden, die dan toelaat om de additieve en multiplicatieve modelbias te corrigeren. Het bijzondere aan de techniek die momenteel getest wordt, is dat de regressiecoëfficiënten dynamisch evolueren ('adaptive regression'), door gebruik te maken van de Kalman Filter (KF). In de literatuur zijn verschillende methoden beschreven om de KF te gebruiken, VITO volgt de methode van Kalnay (2002). De KF laat verder ook toe om de biascorrectie ruimtelijk te spreiden vanuit de stationslocaties naar het volledige domein. Hierbij wordt gewerkt op uurbasis, en wordt in de tijd geaggregeerd om jaarwaarden te bekomen.

In het kader van het voorgestelde onderzoek werd de KF toegepast op output van een simulatie van de meest recente AURORA versie, in combinatie met metingen van de drie gewesten die door IRCEL ter beschikking worden, voor het jaar 2009. Het is belangrijk dat enkel die meetstations in het KF schema betrokken worden die representatief zijn voor de 4 km resolutie van AURORA, wat bijvoorbeeld 'traffic stations' uitsluit.

Optimal interpolation data assimilatie

Als alternatief voor de bias correctie werd AURORA recent uitgebreid met "Optimal Interpolation" (OI) data assimilatie, waarbij modelresultaten gecombineerd worden met meetwaarden om op die manier een 'beste' schatting te kunnen maken van de werkelijke concentratievelden. Het model-vs-meting increment wordt daarbij geïnterpoleerd van de stationslocaties naar het volledige domein. De fundamentele hypothese van OI is dat er voor iedere model variabele slechts enkele meetpunten belangrijk zijn voor het bepalen van het increment. Deze meetpunten worden geselecteerd op basis van een empirisch selectie criterium. Bij de implementatie van OI voor AURORA werd gebruik gemaakt van de Hollingsworth-Lönnberg (1986) methode. Een manuscript met de beschrijving van deze methode en de eerste experimentele resultaten is momenteel in review bij Atmospheric Environment. Het OI schema is ontwikkeld om assimilatie te doen voor uurwaarden. Dit schema blijft behouden; om jaarwaarden te bekomen zal er geaggregeerd worden in de tijd. Wat betreft de metingen wordt er gebruik gemaakt van dezelfde dataset als hierboven beschreven bij de Kalman Filter.

VLOPS

Het OPS-model (van Jaarsveld, 2004) is een atmosferisch transport- en dispersiemodel dat voornamelijk wordt gebruikt om de depositie en luchtconcentratie van verzurende bestanddelen op regionale schaal te modelleren. Het model wordt daarnaast ook gebruikt voor de modellering van CO, benzeen en PM₁₀. Het OPS-model is een analytisch model dat voor de lokale schaal gebruik maakt van de Gaussische dispersieformule. Voor transport over grote afstand werkt het model als een trajectoriemodel en bij tussenliggende situaties als een combinatie van beide. Op deze manier kunnen bijdragen van lokale, regionale en buitenlandse bronnen in één berekening worden gecombineerd. Het model is statistisch in de zin dat meteorologische waarnemingen en voorkomende verspreidings situaties vooraf in een preprocessor worden verdeeld over een aantal klassen (transportrichting, atmosferische stabiliteit, transportschaal) waarbij de bijbehorende verspreidingsparameters worden bepaald aan de hand van de eigenschappen van alle trajectorieën die binnen de klasse vallen. Een jaargemiddelde concentratie of depositie wordt dan bepaald door de resultaten door te rekenen voor alle klassen en deze te combineren volgens de frequentie van voorkomen. Voor gebruik in Vlaanderen werd het OPS model aangepast tot VLOPS. Voor deze studie werd de versie 12.0 gebruikt.

Het VLOPS model levert jaargemiddelde kaarten op een 1 km grid voor Vlaanderen of een aantal receptoren (vb. meetpunten van VMM). PM_{10} en $PM_{2.5}$ wordt door VLOPS berekend op basis van (primaire) PM_{10} - en $PM_{2.5}$ -emissies. Verder wordt er via een parametrisatie op basis van achtergrondconcentratiekaarten ook sulfaat, nitraat en ammonium berekend op basis van SO_x , NH_3 en NO_x emissies. Als de primaire PM_{10} - of $PM_{2.5}$ -concentraties en de concentraties sulfaat, nitraat en ammonium bij elkaar opgeteld worden, wordt een kaart verkregen van de "totale" PM_{10} - of $PM_{2.5}$ -concentraties. PM_{10} - en $PM_{2.5}$ -concentratiekaarten werden tot nu toe in Vlaanderen nog niet gemaakt met VLOPS, in Nederland werd dit echter wel reeds gedaan. Met betrekking tot NO_2 berekent VLOPS NO_x concentraties die vervolgens vertaald worden naar NO_2 -concentraties. In dit project werd aandacht besteed aan de keuze van de kalibratiefunctie bij het omrekenen van de NO_x tot NO_2 concentraties. Daarom werden twee verschillende kalibratiefuncties toegepast, enerzijds de "Vlaamse" omzettingcoëfficiënten (Janssen en Janssen, 2006) en anderzijds de "Nederlandse" omzettingcoëfficiënten van RIVM. De VLOPS resultaten voor zowel $PM_{10}/PM_{2.5}$ als voor NO_2 werden nadien gecorrigeerd met eenvoudige bias correctie en met orthogonale regressie. De toegepaste technieken zijn analoog als die voor AURORA, hierboven beschreven.

De vergelijking met de RIO- en AURORA-kaarten kan enkel uitgevoerd worden voor Vlaanderen.

Beschrijving gebruikte emissie-informatie voor AURORA/VLOPS

Voor zowel de AURORA als de VLOPS berekeningen werden emissies gebruikt die gegenereerd werden met E-MAP. Hiertoe werd EMAP v2.0 gebruikt.

De belangrijkste eigenschappen van E-MAP v2.0 kunnen als volgt worden samengevat:

- De Vlaamse puntbron emissies zijn identiek aan de puntbron emissies opgenomen in het EIL datawarehouse, januari 2012. Verdere informatie over de integratie van het EIL datawarehouse in E-MAP is te vinden in (Veldeman et al., 2012d).
- De geografische spreidingspatronen voor Vlaamse, niet-puntbron emissies zijn de patronen zoals beschreven in (Veldeman, 2012c) en referenties daarin.
- De geografische spreidingspatronen voor niet-Vlaamse puntbron emissies zijn gebaseerd op Europese puntbrongegevens (E-PRTR 2007).
- De geografische spreidingspatronen voor niet-Vlaamse niet-puntbron emissies zijn de patronen zoals beschreven in (Veldeman et al., 2012a) en (Veldeman et al., 2012b).

Vlaamse emissie-cijfers voor 2009 werden aangeleverd door EIL en worden samengevat in Tabel 1. De niet-Vlaamse emissie-cijfers werden uit de EMEP inventaris voor 2009 gehaald.

Tabel 1: Vlaamse emissie-cijfers voor 2009 (in kton) gebruikt als input voor de berekening van emissies met E-MAP v2.0 voor AURORA en VLOPS.

| sector | CO | NH3 | NMVOs | NOx | PM10 | PM2.5 | PMcoarse | SO2 |
|--------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1 | 41.70304 | 1.493187 | 2.121442 | 7.543906 | 1.116108 | 1.006275 | 0.109832 | 6.477251 |
| 2 | 0 | 0 | 9.478256 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 7.281004 | 0.000043 | 0.240474 | 0.105426 | 0.621156 | 0.621156 | 0 | 0.000156 |
| 4 | 0.609609 | 0 | 0.251948 | 2.448234 | 0.291441 | 0.281378 | 0.010063 | 0.514885 |
| 5 | 1.891801 | 0.383459 | 9.682106 | 5.604738 | 0.233205 | 0.13014 | 0.103065 | 2.15342 |
| 6 | 0 | 0 | 3.492138 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 0.003881 | 0 | 0.010377 | 0.058664 | 0.019149 | 0.017973 | 0.001176 | 0.063591 |
| 8 | 118.6648 | 0 | 0.965169 | 4.283605 | 0.625966 | 0.531502 | 0.094465 | 3.785816 |
| 9 | 1.992838 | 0 | 0.339321 | 4.764079 | 1.016764 | 0.877404 | 0.13936 | 3.182938 |
| 10 | 4.410959 | 0.387599 | 3.28875 | 2.507105 | 0.67998 | 0.548172 | 0.131808 | 7.359708 |
| 11 | 0 | 0 | 15.73682 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 12 | 0.083864 | 0.000068 | 0.039924 | 0.339063 | 0.019185 | 0.013377 | 0.005809 | 0.000454 |
| 13 | 3.555408 | 0.0009 | 1.000196 | 2.317373 | 0.209825 | 0.129257 | 0.080568 | 0.011393 |
| 14 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 1.764213 | 0 | 0.385082 | 2.903166 | 0.105491 | 0.081498 | 0.023993 | 9.24661 |
| 17 | 2.290065 | 0.001384 | 3.831223 | 1.644614 | 0.111931 | 0.053811 | 0.058121 | 13.10255 |
| 18 | 1.467781 | 0 | 0.184771 | 10.08995 | 0.321681 | 0.185761 | 0.023993 | 3.428195 |
| 19 | 0.167539 | 0 | 2.36234 | 0.910639 | 0.000502 | 0.000502 | 0 | 0 |
| 20 | 0.116056 | 0 | 0.013402 | 0.045054 | 0.000057 | 0.000057 | 0 | 0 |
| 21 | 1.072643 | 0.000649 | 0.605735 | 3.093916 | 1.135109 | 1.076547 | 0.058562 | 0.757759 |
| 22 | 0 | 3.357292 | 0 | 2.279746 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 23 | 0 | 36.70232 | 0 | 4.853506 | 2.043308 | 0.506006 | 1.537302 | 0 |
| 24 | 6.769848 | 0.000001 | 0.825358 | 2.664653 | 0.283094 | 0.244112 | 0.038982 | 2.103674 |
| 25 | 0.092625 | 0 | 0.018525 | 0.108249 | 0.026926 | 0.025509 | 0.001417 | 0.008536 |
| 26 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2.806875 | 0.025038 | 2.781836 | 0 |
| 27 | 1.047682 | 0.000007 | 0.475461 | 0.010013 | 0.01253 | 0.009751 | 0.002779 | 0.000043 |
| 28 | 0.042787 | 0.000001 | 0.014072 | 0.003272 | 0.000809 | 0.000809 | 0 | 0.000009 |
| 29 | 28.35582 | 0.678254 | 6.056407 | 59.59272 | 3.613317 | 2.721424 | 0.891893 | 0.062738 |
| 30 | 2.4303 | 0 | 0.4088 | 1.326874 | 0.077163 | 0.038551 | 0.038612 | 0.107891 |
| 31 | 4.728484 | 0.002801 | 0.813539 | 20.71199 | 0.917025 | 0.86876 | 0.048264 | 8.166639 |
| 32 | 0.525659 | 0.000609 | 0.108215 | 2.73791 | 0.089735 | 0.085012 | 0.004723 | 0.121752 |
| 33 | 0.381084 | 0.000227 | 0.063435 | 1.114549 | 0.341632 | 0.222027 | 0.119605 | 0.000454 |
| 34 | 0 | 0 | 0.667965 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 35 | 0.136213 | 0.000855 | 0.071979 | 1.454603 | 0.00859 | 0.00647 | 0.00212 | 0.074294 |
| 36 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 37 | 0 | 0 | 0.532834 | 0 | 0.155633 | 0.155633 | 0 | 0 |
| 38 | 0 | 0 | 0.550454 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 39 | 0.027558 | 0 | 0.003268 | 0.010898 | 0.000014 | 0.000014 | 0 | 0 |
| 40 | 1.991175 | 0 | 0.189771 | 2.227219 | 0.087807 | 0.076052 | 0.011756 | 1.003116 |
| 41 | 0.680401 | 0.00015 | 0.132202 | 0.010976 | 0.001324 | 0.001151 | 0.000172 | 0.000034 |
| 42 | 0.009172 | 0.000005 | 0.002843 | 0.028253 | 0.003086 | 0.002017 | 0.001068 | 0.000056 |
| 43 | 0.160078 | 0.000109 | 0.022945 | 0.355205 | 0.016736 | 0.01554 | 0.001196 | 0.001392 |
| 44 | 0.021647 | 0.00005 | 0.004072 | 0.050159 | 0.002668 | 0.002475 | 0.000192 | 0.000137 |
| 45 | 0.004749 | 0.000004 | 0.000887 | 0.011574 | 0.000617 | 0.00048 | 0.000137 | 0.000046 |

Beschrijving gebruikte meetstations in de validatie oefening

In deze validatie studie werd gebruik gemaakt van een gemeenschappelijke set van meetstations per pollutant voor alle modeltechnieken. Hieronder wordt een overzicht van deze set gegeven. De lijsten zijn gebaseerd op de stationslijsten die gebruikt worden in het actuele RIO v3.4 model met bijhorende classificatie in stationstypes: 1 = *ruraal*, 2 = *stedelijke achtergrond*, 3 = *stedelijk*, 4 = *industrieel*, 5 = *verkeersstation*.

In principe mogen correctie en data-assimilatie technieken enkel gebaseerd zijn op een subset van meetstations die representatief zijn voor de toegepaste rekenresolutie. Validatie kan dan weer wel gebeuren op de volledige set meetstations. Dit omdat het interessant is na te gaan hoe de modellen presteren op locaties die sterk beïnvloed worden door lokale bronnen.

Het is niet eenvoudig een set meetstations te bepalen die representatief is voor de gewenste rekenresolutie en bovendien te garanderen dat de verschillende modeltechnieken opgenomen in deze studie op eerlijke wijze met elkaar vergeleken kunnen worden. Inderdaad, zowel verkeersstations als industriële en stedelijke stations zijn niet altijd even representatief. Indien deze stations alle uit de correctie en data-assimilatietechniek geweerd zouden worden, is vergelijking van de gecorrigeerde, deterministische modellen (AURORA en VLOPS) met het RIO-model, waarin wel alle meetstations worden meegenomen, niet langer relevant. De mogelijkheid om deze niet representatieve stations dan ook uit RIO te weren, werd niet verder beschouwd. Dit omwille van het feit dat in dit project op zoek wordt gegaan naar de 'best beschikbare techniek'. Een interpolatiemodel waarin slechts enkele stations worden opgenomen, zou sowieso niet representatief zijn voor de performantie van het standaard RIO-model.

Op basis van deze beschouwingen werd in overleg met de stuurgroep finaal beslist de verkeersstations als niet representatief te beschouwen. De industriële en de stedelijke stations worden (in het kader van deze studie) wel als representatief beschouwd. Concreet komt dit erop neer dat de verkeersstations niet werden meegenomen in de modelberekeningen, of nog, ze werden uit het RIO-interpolatie-model gehaald en werden ook niet gebruikt in de verschillende correctie en data-assimilatie technieken toegepast op de deterministische modellen.

In onderstaande tabellen wordt per pollutant een overzicht gegeven van alle gebruikte en niet gebruikte stations. Niet gebruikte stations zijn alle verkeersstations en worden in het grijs gearceerd.

Gebruikte PM₁₀ meetstations

Tabel 2: Stationslijst voor RIO PM₁₀ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen.

| ID | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | BETA | ID | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | BETA |
|----|----------|--------|--------|------|----------|----|----------|--------|--------|------|----------|
| 1 | 40AB01 | 147285 | 219017 | 4 | 0.850325 | 31 | 43H201 | 233400 | 146700 | 3 | 0.737044 |
| 2 | 40AB02 | 146729 | 225661 | 4 | 0.706713 | 32 | 43M204 | 237930 | 145320 | 2 | 0.695104 |
| 3 | 40AL01 | 151150 | 214030 | 2 | 0.78599 | 33 | 43N063 | 171200 | 149460 | 1 | 0.595632 |
| 4 | 40GK09 | 229010 | 181080 | 5 | 0.835126 | 34 | 43N066 | 265570 | 147740 | 1 | 0.606514 |
| 5 | 40GK06 | 227463 | 180307 | 0 | 0.703132 | 35 | 43N070 | 119540 | 128350 | 3 | 0.657561 |
| 6 | 40HB23 | 148059 | 206699 | 4 | 0.688809 | 36 | 43N073 | 193960 | 132620 | 1 | 0.594769 |
| 7 | 40ML01 | 156569 | 189536 | 2 | 0.709912 | 37 | 43N085 | 266325 | 111525 | 1 | 0.121418 |
| 8 | 40MN01 | 61230 | 165530 | 4 | 0.71536 | 38 | 43N093 | 211760 | 107410 | 1 | 0.324235 |
| 9 | 40OB01 | 75367 | 179078 | 4 | 1 | 39 | 43N100 | 166170 | 87160 | 1 | 0.322726 |
| 10 | 40RL01 | 62340 | 183280 | 2 | 0.760712 | 40 | 43N113 | 237720 | 80250 | 1 | 0.422679 |
| 11 | 40SZ02 | 160087 | 178087 | 2 | 0.66887 | 41 | 43N121 | 209920 | 63190 | 1 | 0.345029 |
| 12 | 40WZ01 | 211133 | 211068 | 4 | 0.687234 | 42 | 43N132 | 240980 | 46070 | 1 | 0.427062 |
| 13 | 41B011 | 144338 | 171963 | 3 | 0.703744 | 43 | 43R201 | 235350 | 147130 | 3 | 0.716899 |
| 14 | 41MEU1 | 151686 | 176084 | 3 | 0.849758 | 44 | 43R221 | 239030 | 150490 | 3 | 0.759926 |
| 15 | 41N043 | 151000 | 174800 | 5 | 0.813472 | 45 | 43R222 | 235031 | 145438 | 4 | 0.741474 |
| 16 | 41R001 | 147540 | 171030 | 3 | 0.809101 | 46 | 43R223 | 231130 | 146160 | 3 | 0.792997 |
| 17 | 41R012 | 149280 | 165130 | 2 | 0.663978 | 47 | 43R240 | 222850 | 141940 | 4 | 0.648462 |
| 18 | 41WOL1 | 154010 | 171800 | 5 | 0.819631 | 48 | 44M705 | 64521 | 182374 | 4 | 1.040318 |
| 19 | 42M802 | 153884 | 216790 | 4 | 0.853742 | 49 | 44N012 | 79753 | 216550 | 1 | 0.504866 |
| 20 | 42N016 | 205542 | 214045 | 1 | 0.367959 | 50 | 44N029 | 24655 | 191071 | 1 | 0.576158 |
| 21 | 42N035 | 182928 | 185359 | 1 | 0.620125 | 51 | 44N052 | 76269 | 167678 | 1 | 0.722319 |
| 22 | 42N045 | 220258 | 181520 | 2 | 0.718848 | 52 | 44R701 | 105169 | 194435 | 3 | 0.794183 |
| 23 | 42N054 | 201869 | 155940 | 1 | 0.633037 | 53 | 44R710 | 108394 | 194736 | 2 | 0.638325 |
| 24 | 42R020 | 154777 | 181235 | 3 | 0.794946 | 54 | 44R731 | 105947 | 201811 | 4 | 0.730557 |
| 25 | 42R801 | 154407 | 211080 | 3 | 0.81293 | 55 | 44R740 | 110815 | 204603 | 4 | 0.709266 |
| 26 | 42R811 | 158560 | 215807 | 2 | 0.70594 | 56 | 44R750 | 111845 | 209705 | 4 | 0.632492 |
| 27 | 42R815 | 147446 | 211639 | 4 | 0.626603 | 57 | 45R501 | 155930 | 122050 | 3 | 0.82308 |
| 28 | 42R832 | 148937 | 196707 | 4 | 0.764394 | 58 | 45R502 | 156390 | 124240 | 3 | 0.731219 |
| 29 | 42R833 | 149547 | 224206 | 0 | 0.751627 | 59 | 45R510 | 160830 | 122850 | 3 | 0.756019 |
| 30 | 42R841 | 157059 | 188039 | 2 | 0.67453 | 60 | 45R511 | 153980 | 118520 | 3 | 0.583567 |
| | | | | | | 61 | 45R512 | 151930 | 121880 | 4 | 0.84809 |

Gebruikte PM_{2.5} meetstations

Tabel 3: Stationslijst voor RIO PM_{2.5} - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen.

| NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | AODBeta | NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | AODBeta |
|----|----------|--------|--------|------|---------|----|----------|--------|--------|------|---------|
| 1 | 40AL02 | 140660 | 221640 | 0 | 0.2695 | 18 | 43M204 | 237930 | 145320 | 0 | 0.1282 |
| 2 | 40AL03 | 138320 | 216020 | 0 | 0.2955 | 19 | 43N063 | 171200 | 149460 | 1 | 0.1133 |
| 3 | 40AL04 | 144738 | 220093 | 0 | 0.2435 | 20 | 43N066 | 265570 | 147740 | 1 | 0.0842 |
| 4 | 40AL05 | 143727 | 217029 | 0 | 0.1557 | 21 | 43N070 | 119540 | 128350 | 3 | 0.1444 |
| 5 | 40KO01 | 72860 | 169480 | 2 | 0.2203 | 22 | 43N085 | 266325 | 111525 | 1 | 0.0138 |
| 6 | 40ML01 | 156569 | 189536 | 2 | 0.1644 | 23 | 43N093 | 211760 | 107410 | 1 | 0.0495 |
| 7 | 40MN01 | 61230 | 165530 | 4 | 0.1836 | 24 | 43N100 | 166170 | 87160 | 1 | 0.0417 |
| 8 | 40SZ01 | 159524 | 178259 | 2 | 0.1426 | 25 | 43N132 | 240980 | 46070 | 1 | 0.0573 |
| 9 | 41B011 | 144338 | 171963 | 3 | 0.1653 | 26 | 43R201 | 235350 | 147130 | 3 | 0.1364 |
| 10 | 41MEU1 | 151686 | 176084 | 3 | 0.207 | 27 | 43R223 | 231130 | 146160 | 3 | 0.1648 |
| 11 | 41N043 | 151000 | 174800 | 5 | 0.1994 | 28 | 43R240 | 222850 | 141940 | 4 | 0.1777 |
| 12 | 41R001 | 147540 | 171030 | 3 | 0.2014 | 29 | 44N029 | 24655 | 191071 | 1 | 0.1251 |
| 13 | 41R012 | 149280 | 165130 | 2 | 0.1467 | 30 | 44R701 | 105169 | 194435 | 3 | 0.1845 |
| 14 | 42N045 | 220258 | 181520 | 2 | 0.1364 | 31 | 44R731 | 105947 | 201811 | 4 | 0.175 |
| 15 | 42R801 | 154407 | 211080 | 3 | 0.1929 | 32 | 45R501 | 155930 | 122050 | 3 | 0.1787 |
| 16 | 42R833 | 149547 | 224206 | 0 | 0.1656 | 33 | 45R502 | 156390 | 124240 | 3 | 0.1706 |
| 17 | 42R841 | 157059 | 188039 | 2 | 0.1589 | 34 | 45R511 | 153980 | 118520 | 3 | 0.1252 |
| | | | | | | 35 | 45R512 | 151930 | 121880 | 4 | 0.2241 |

Gebruikte NO₂ meetstations

Tabel 4: Stationslijst voor RIO NO₂ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen.

| NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | beta | NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | beta |
|----|----------|--------|--------|------|----------|----|----------|--------|--------|------|----------|
| 1 | 40HB23 | 148059 | 206699 | 4 | 0.534816 | 36 | 42R831 | 147976 | 226558 | 4 | 0.421525 |
| 2 | 40LD01 | 194547 | 200179 | 4 | 0.550383 | 37 | 42R832 | 148937 | 196707 | 4 | 0.630882 |
| 3 | 40LD02 | 195718 | 201462 | 4 | 0.53841 | 38 | 42R841 | 157059 | 188039 | 2 | 0.709364 |
| 4 | 40ML01 | 156569 | 189536 | 2 | 0.749484 | 39 | 42R891 | 151159 | 216212 | 4 | 1.176147 |
| 5 | 40OB01 | 75367 | 179078 | 4 | 0.321325 | 40 | 42R892 | 143727 | 217020 | 4 | 0.783332 |
| 6 | 40SZ01 | 159524 | 178259 | 2 | 0.660715 | 41 | 42R893 | 151187 | 219057 | 4 | 1.343373 |
| 7 | 40SZ02 | 160087 | 178087 | 2 | 0.647194 | 42 | 42R894 | 148656 | 219293 | 4 | 1.136189 |
| 8 | 41AND3 | 145969 | 167729 | 3 | 1.056003 | 43 | 42R897 | 148139 | 215578 | 4 | 0.788654 |
| 9 | 41B003 | 149995 | 170590 | 5 | 1.023182 | 44 | 43N063 | 171200 | 149460 | 1 | 0.371719 |
| 10 | 41B004 | 148580 | 171157 | 3 | 1.220328 | 45 | 43N066 | 265570 | 147740 | 1 | 0.372899 |
| 11 | 41B005 | 150703 | 169968 | 3 | 0.900469 | 46 | 43N070 | 119540 | 128350 | 3 | 0.755085 |
| 12 | 41B006 | 150397 | 169802 | 3 | 0.938769 | 47 | 43N073 | 193960 | 132620 | 1 | 0.369768 |
| 13 | 41B011 | 144338 | 171963 | 3 | 0.729522 | 48 | 43N085 | 266325 | 111525 | 1 | 0.021878 |
| 14 | 41MEU1 | 151686 | 176084 | 3 | 1.077783 | 49 | 43N093 | 211760 | 107410 | 1 | 0.081864 |
| 15 | 41N043 | 151000 | 174800 | 5 | 1.02777 | 50 | 43N100 | 166170 | 87160 | 1 | 0.149972 |
| 16 | 41R001 | 147540 | 171030 | 3 | 1.144095 | 51 | 43N121 | 209920 | 63190 | 1 | 0.146127 |
| 17 | 41R002 | 151125 | 168300 | 5 | 0.88856 | 52 | 43N132 | 240980 | 46070 | 1 | 0.175449 |
| 18 | 41R012 | 149280 | 165130 | 2 | 0.691794 | 53 | 43R201 | 235350 | 147130 | 3 | 0.801439 |
| 19 | 41WOL1 | 154010 | 171800 | 5 | 0.777239 | 54 | 43R222 | 235031 | 145438 | 4 | 0.81057 |
| 20 | 42M802 | 153884 | 216790 | 4 | 1.06591 | 55 | 43R223 | 231130 | 146160 | 3 | 0.757955 |
| 21 | 42N015 | 165538 | 216667 | 1 | 0.426774 | 56 | 43R240 | 222850 | 141940 | 4 | 0.519692 |
| 22 | 42N016 | 205542 | 214045 | 1 | 0.233503 | 57 | 44M702 | 107569 | 206396 | 4 | 0.444923 |
| 23 | 42N035 | 182928 | 185359 | 1 | 0.511973 | 58 | 44M705 | 64521 | 182374 | 4 | 0.69669 |
| 24 | 42N040 | 139873 | 161970 | 1 | 0.337426 | 59 | 44N012 | 79753 | 216550 | 1 | 0.233969 |
| 25 | 42N045 | 220258 | 181520 | 2 | 0.594105 | 60 | 44N029 | 24655 | 191071 | 1 | 0.257367 |
| 26 | 42N046 | 237950 | 175401 | 1 | 0.383599 | 61 | 44N050 | 79401 | 160647 | 1 | 0.359078 |
| 27 | 42N054 | 201869 | 155940 | 1 | 0.55072 | 62 | 44N052 | 76269 | 167678 | 1 | 0.595774 |
| 28 | 42R010 | 154201 | 172749 | 4 | 0.753649 | 63 | 44R701 | 105169 | 194435 | 3 | 1.047951 |
| 29 | 42R020 | 154777 | 181235 | 3 | 0.627002 | 64 | 44R710 | 108394 | 194736 | 2 | 0.574592 |
| 30 | 42R801 | 154407 | 211080 | 3 | 1.324652 | 65 | 44R721 | 104275 | 197850 | 4 | 0.875569 |
| 31 | 42R811 | 158560 | 215807 | 2 | 0.650616 | 66 | 44R731 | 105947 | 201811 | 4 | 0.603481 |
| 32 | 42R815 | 147446 | 211639 | 4 | 0.613238 | 67 | 44R740 | 110815 | 204603 | 4 | 0.605457 |
| 33 | 42R821 | 141724 | 211734 | 2 | 0.466067 | 68 | 44R750 | 111845 | 209705 | 4 | 0.499768 |
| 34 | 42R822 | 148082 | 217156 | 4 | 0.977399 | 69 | 45R501 | 155930 | 122050 | 3 | 0.805044 |
| 35 | 42R830 | 142601 | 223162 | 4 | 0.379781 | 70 | 45R502 | 156390 | 124240 | 3 | 0.740635 |
| | | | | | | 71 | 45R512 | 151930 | 121880 | 4 | 0.735468 |

Gebruikte O₃ meetstations

Tabel 5: Stationslijst voor RIO O₃ - v3.4. De verkeersstations (type 5) die werden weggelaten uit de interpolatie werden in grijs aangeduid. De coördinaten zijn gegeven in Belgische Lambert 72. In de laatste kolom is telkens de RIO β parameter opgenomen.

| NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | beta | NR | STATCODE | XLAMB | YLAMB | TYPE | beta |
|----|----------|--------|--------|------|----------|----|----------|--------|--------|------|----------|
| 1 | 41AND3 | 145969 | 167729 | 3 | 0.918091 | 21 | 43N070 | 119540 | 128350 | 3 | 0.663039 |
| 2 | 41B004 | 148580 | 171157 | 3 | 0.829004 | 22 | 43N073 | 193960 | 132620 | 1 | 0.523448 |
| 3 | 41B006 | 150397 | 169802 | 3 | 0.756277 | 23 | 43N085 | 266325 | 111525 | 1 | 0.081866 |
| 4 | 41B011 | 144338 | 171963 | 3 | 0.69779 | 24 | 43N093 | 211760 | 107410 | 1 | 0.242492 |
| 5 | 41N043 | 151000 | 174800 | 5 | 0.883294 | 25 | 43N100 | 166170 | 87160 | 1 | 0.29239 |
| 6 | 41R001 | 147540 | 171030 | 3 | 0.761782 | 26 | 43N113 | 237720 | 80250 | 1 | 0.306224 |
| 7 | 41R012 | 149280 | 165130 | 2 | 0.664002 | 27 | 43N121 | 209920 | 63190 | 1 | 0.279675 |
| 8 | 41WOL1 | 154010 | 171800 | 5 | 0.757452 | 28 | 43N132 | 240980 | 46070 | 1 | 0.350571 |
| 9 | 42N016 | 205542 | 214045 | 1 | 0.317261 | 29 | 43R201 | 235350 | 147130 | 3 | 0.70106 |
| 10 | 42N035 | 182928 | 185359 | 1 | 0.551272 | 30 | 43R222 | 235031 | 145438 | 4 | 0.743881 |
| 11 | 42N040 | 139873 | 161970 | 1 | 0.500281 | 31 | 43R240 | 222850 | 141940 | 4 | 0.565291 |
| 12 | 42N045 | 220258 | 181520 | 2 | 0.618388 | 32 | 44M705 | 64521 | 182374 | 4 | 0.701265 |
| 13 | 42N046 | 237950 | 175401 | 1 | 0.486031 | 33 | 44N012 | 79753 | 216550 | 1 | 0.447642 |
| 14 | 42N054 | 201869 | 155940 | 1 | 0.670812 | 34 | 44N029 | 24655 | 191071 | 1 | 0.551776 |
| 15 | 42R801 | 154407 | 211080 | 3 | 0.901679 | 35 | 44N050 | 79401 | 160647 | 1 | 0.602575 |
| 16 | 42R811 | 158560 | 215807 | 2 | 0.647572 | 36 | 44N051 | 119090 | 165475 | 1 | 0.476392 |
| 17 | 42R831 | 147976 | 226558 | 4 | 0.570877 | 37 | 44N052 | 76269 | 167678 | 1 | 0.66007 |
| 18 | 42R841 | 157059 | 188039 | 2 | 0.692795 | 38 | 44R701 | 105169 | 194435 | 3 | 0.806711 |
| 19 | 43N063 | 171200 | 149460 | 1 | 0.568299 | 39 | 44R710 | 108394 | 194736 | 2 | 0.603357 |
| 20 | 43N066 | 265570 | 147740 | 1 | 0.500987 | 40 | 44R740 | 110815 | 204603 | 4 | 0.784956 |
| | | | | | | 41 | 45R502 | 156390 | 124240 | 3 | 0.702082 |

Overzicht en vergelijkbaarheid modeltechnieken

In Tabel 6 wordt een overzicht gegeven van de verschillende modeltechnieken die in deze studie beschouwd worden. Bovendien worden de bijhorende acroniemen, die in het vervolg van dit rapport in tabellen en figuren gebruikt worden, opgelijst.

Tabel 6: Overzicht van de gebruikte acroniemen voor de verschillende modellen.

| acroniem | Modeltechniek |
|---|---|
| rio | RIO v3.4 |
| rio09 | RIO v3.4, maar dan met trendfuncties & statistieken enkel voor 2009 |
| aur | Ruwe AURORA output zonder |
| aurbias | AURORA met ruimtelijk uniforme, additieve BIAS correctie |
| aurortho | AURORA met orthogonale regressie correctie |
| auroi | AURORA met optimal interpolation data assimilatie |
| aurkf | AURORA met kalman filtering data assimilatie |
| ⁽¹⁾ ops_[rivm,vito]_[grid,point] | Ruwe VLOPS resultaten |
| ops_[rivm,vito]_[grid,point]_bias | VLOPS met ruimtelijk uniforme, additieve BIAS correctie |
| ops_[rivm,vito]_[grid,point]_ortho | VLOPS met orthogonale regressie |

⁽¹⁾ Voor de VLOPS varianten wordt er voor NO₂ onderscheid gemaakt tussen de Vlaamse ("vito") en de Nederlandse ("rivm") NO_x omzettingcoëfficiënten. Verder wordt ook een onderscheid gemaakt in verrasterde resultaten, waarbij het standaard VLOPS rooster op 1x1 km² werd geaggregeerd naar het 4x4 km² grid enerzijds ("grid") en anderzijds de resultaten op receptor niveau, op de stationslocaties ("point"). Uiteraard zullen niet voor elke validatie analyse alle combinaties voorkomen, gezien bijvoorbeeld de opdeling tussen rivm en vito slechts voor NO₂ geldig is.

Elke van deze modeltechnieken heeft zijn specifieke sterktes en zwaktes. Een modelvergelijking enkel en alleen op basis van validatie statistieken, zoals beschreven in volgend hoofdstuk, zal geen informatie verschaffen over de toepasbaarheid van de verschillende technieken in verschillende toepassingsgebieden (ruimtelijke en temporele resolutie, domeingrootte, actuele luchtkwaliteit versus prognoses ...). In Tabel 7 worden de verschillende modeltechnieken daarom in eerste instantie kwalitatief vergeleken aan de hand van een aantal specifieke criteria: inzetbaarheid, resolutie, vereiste input data, mogelijke output data en model performantie.

Alle modeltechnieken zijn geschikt voor het uitvoeren van assessments (actuele en historische luchtkwaliteit), maar enkel de ruwe AURORA (aur) en VLOPS (ops) zijn geschikt voor scenario analyses. De AURORA en VLOPS varianten maken, net als RIO (rio), gebruik van concentratiemetingen die voor de toekomst uiteraard niet beschikbaar zijn. In het geval van RIO en de varianten van AURORA en VLOPS moet echter opgemerkt worden dat op basis van een combinatie van modellen en aan de hand van specifieke technieken toch scenario's kunnen worden doorgerekend. Zo kan men bijvoorbeeld vertrekken van een basis RIO (of AURORA/VLOPS –variant) kaart en er vervolgens de relatieve/absolute verschillen uit een prognose berekening met het ruwe AURORA of VLOPS model op toepassen. Dit werd in Tabel 7 aangegeven met een ± symbool onder "scenario".

De huidige VLOPS configuratie is enkel inzetbaar voor Vlaanderen, RIO en de AURORA varianten zijn voor heel België inzetbaar.

Naar resolutie toe zijn zowel de RIO als de AURORA varianten in staat uurlijkse concentratievelden door te rekenen, het VLOPS model en bijhorende varianten kunnen enkel jaargemiddelde kaarten produceren op basis van een meteostatistiek.

Ruimtelijk kan gesteld worden dat de typische resolutie van RIO 3-4 km bedraagt, die van AURORA varieert van 1 tot 10 km, VLOPS is momenteel op 1 km geïmplementeerd.

Door het Euleriaans karakter van AURORA werkt het AURORA model enkel op grid-cel niveau. RIO is een interpolatiemodel met een proxy bepaald in een buffer rond een receptorpunt en VLOPS is gebaseerd op bron-receptor relaties. Deze modellen en hun varianten kunnen daarom ook op receptorniveau rekenen. Het is echter wel zo dat de AURORA plus Optimal Interpolation (auroi) techniek ook resultaten op receptor niveau kan genereren, gezien ook hier een interpolatie techniek aan de basis ligt. Voor de AURORA plus Kalman Filter (aurkf) techniek werd omwille van het experimenteel karakter enkel de analyse gedaan op basis van de stations en werd geen kaartmateriaal geproduceerd.

Naar input data toe is RIO het minst complex, aangezien het enkel uurlijkse concentratiemetingen en een landgebruikskaart (typisch CORINE) nodig heeft. Voor de ruwe modellen AURORA en VLOPS zijn geen metingen nodig, maar wel emissies en meteorologische informatie. Voor VLOPS zijn geen randvoorwaarden (grootschaliger concentraties) nodig, voor AURORA wel. Typisch worden hiervoor BelEUROS of CHIMERE modelresultaten gebruikt. Voor de AURORA en VLOPS varianten, gedefinieerd als AURORA/VLOPS plus kalibratie of data-assimilatie zijn uiteraard ook concentratiemetingen nodig.

RIO en de AURORA varianten kunnen zowel voor PM_{10} , $PM_{2.5}$, NO_2 en O_3 berekeningen worden ingezet. RIO gezien het model vertrekt van de metingen zelf en AURORA gezien de atmosferische ozonchemie expliciet wordt doorgerekend. In VLOPS wordt NO_2 vanuit een doorrekening van NO_x bepaald, O_3 concentraties kunnen niet worden afgeleid.

Verder is het met VLOPS ook niet mogelijk tijdsreeksen van uurlijkse concentratievelden te genereren gezien het model enkel rechtstreeks jaargemiddelde kaarten produceert. Met RIO en de AURORA varianten is dit wel mogelijk.

Zowel AURORA als VLOPS kunnen naast concentraties ook de depositie berekenen. Deze depositie resultaten zijn van belang bij de bepaling van de verzuring en vermesting van bodem en water. Depositie kan niet rechtstreeks gemeten worden zodat een rechtstreekse validatie en eventuele correctie met gemeten waarden niet mogelijk is. Aangezien de depositie het product is van de depositie snelheid met de concentratie kunnen de depositie resultaten echter wel herrekend worden met de gecorrigeerde luchtconcentraties die bekomen worden via de verschillende methodes (bias correctie, data assimilatie ...). Dit werd in Tabel 7 aangegeven met een \pm symbool onder depositie.

Naar rekentijd toe is RIO het minst rekenintensief (op 1 CPU typisch enkele uren om een volledig jaar van uurlijkse concentraties door te rekenen), gevolgd door VLOPS (4-5 dagen op 1 CPU) en AURORA (~20 dagen op 1 CPU). Hierbij dient te worden opgemerkt dat men in de praktijk voor AURORA de berekeningen kan paralleliseren, waardoor de effectieve tijd nodig voor de berekening veel korter is.

Bovenstaande beschouwingen rond kwalitatieve vergelijkbaarheid van de modellen zullen in de conclusies, naast resultaten uit de kwantitatieve vergelijking beschreven in volgend hoofdstuk worden meegenomen.

Tabel 7: Overzichtstabel met de vergelijkbaarheid van de verschillende modellen.

| | | <i>rio</i> | <i>rio</i> <i>09</i> | <i>aur</i> | <i>aur</i> <i>bias</i> | <i>aur</i> <i>ortho</i> | <i>aur</i> <i>oi</i> | <i>aur</i> <i>kf</i> | <i>ops</i> | <i>ops</i> <i>bias</i> | <i>ops</i> <i>ortho</i> |
|---------------|--------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|------------------------|---------------------------|----------------------------|
| inzetbaarheid | assessment | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + |
| | scenario | ± | ± | + | ± | ± | ± | ± | + | ± | ± |
| | domein | BE | BE | BE | BE | BE | BE | BE | VL | VL | VL |
| resolutie | temporeel | uurlijks | uurlijks | uurlijks | uurlijks | uurlijks | uurlijks | uurlijks | jaarlijks | jaarlijks | jaarlijks |
| | ruimtelijk - gridcel | 3-4km | 3-4km | 1-10km | 1-10km | 1-10km | 1-10km | 1-10km | 1km | 1km | 1km |
| | ruimtelijk - receptor | + | + | - | - | - | + | + | + | + | + |
| input data | metingen | + | + | - | + | + | + | + | - | + | + |
| | emissies | - | - | + | + | + | + | + | + | + | + |
| | meteo | - | - | + | + | + | + | + | + | + | + |
| | randvwn | - | - | + | + | + | + | + | - | - | - |
| output data | polluenten | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2; O3 | PM10; PM2.5; NO2 | PM10; PM2.5; NO2 | PM10; PM2.5; NO2 |
| | tijdreeksen | + | + | + | + | + | + | + | - | - | - |
| | depositie | - | - | + | ± | ± | ± | ± | + | ± | ± |
| performantie | Rekentijd | +++ | +++ | + | + | + | + | + | ++ | ++ | ++ |

Modelvalidatie

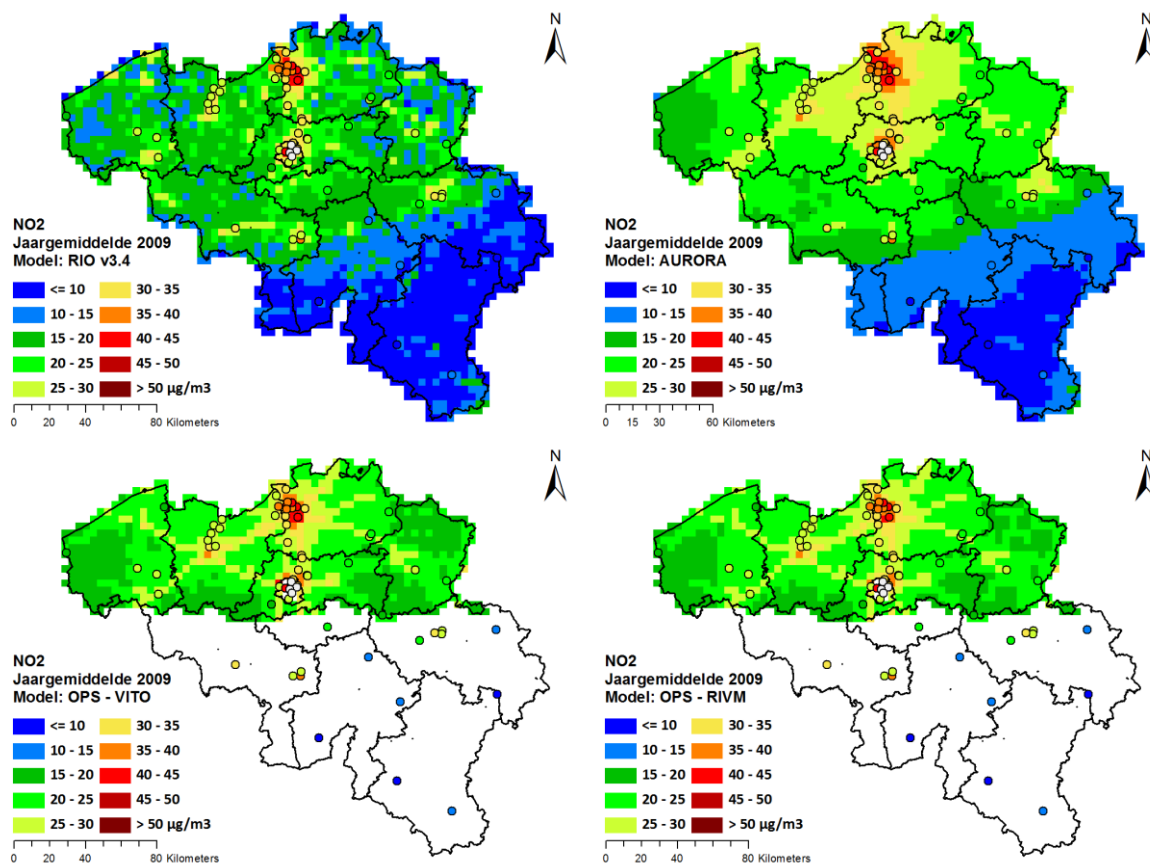
In dit hoofdstuk worden de resultaten van de validatie oefening uitgebreid beschreven. In eerste instantie worden de jaargemiddelde concentratiekaarten voor 2009 voor de verschillende polluenten, zoals berekend met de verschillende modeltechnieken, visueel vergeleken op basis van kaartmateriaal. Vervolgens worden de resultaten van de temporele en de ruimtelijke validatie besproken.

Grootschalige concentratiekaarten

In deze paragraaf wordt een overzicht gegeven van de visuele vergelijking: per polluent wordt zowel het eigenlijke kaartmateriaal als een kwalitatieve bespreking ervan gegeven. Per polluent worden telkens eerst de kaarten van de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS (ops_grid) afgebeeld, gevolgd door een vergelijking van de verschillende correctiemethodes per model. Merk op dat zowel voor RIO09 als voor AURORA plus Kalman Filter geen kaartmateriaal afgebeeld wordt. Voor beide technieken gebeurde de vergelijking enkel in de temporele en ruimtelijke validatie.

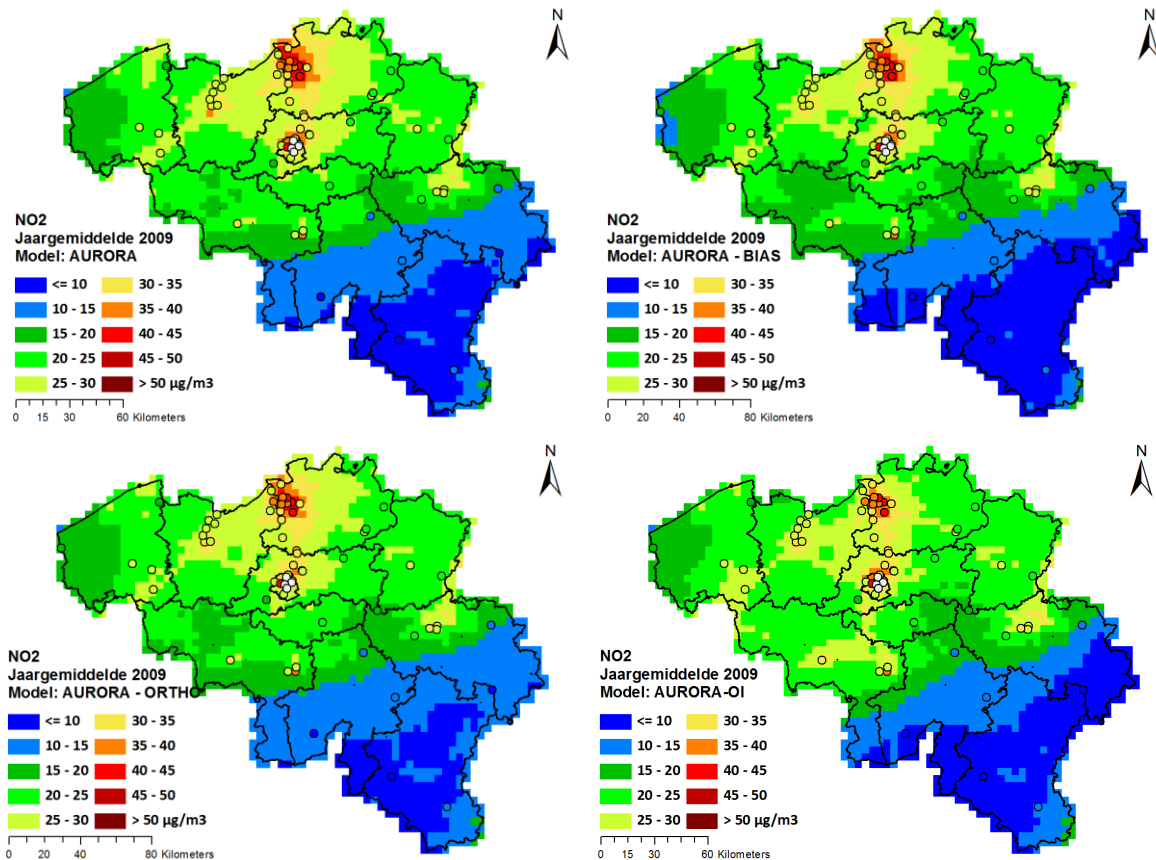
Op de gemodelleerde kaarten zijn telkens ook de jaargemiddelde concentraties voor 2009 in de stations afgebeeld. Verder wordt per polluent voor alle technieken dezelfde kleurcode en schaal gebruikt.

Kaartmateriaal voor NO₂



Figuur 8: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS (zonder correcties). Voor VLOPS worden de NO₂ resultaten voor de verschillende NO_x → NO₂ parametrisaties (vito vs. rivm) weergegeven.

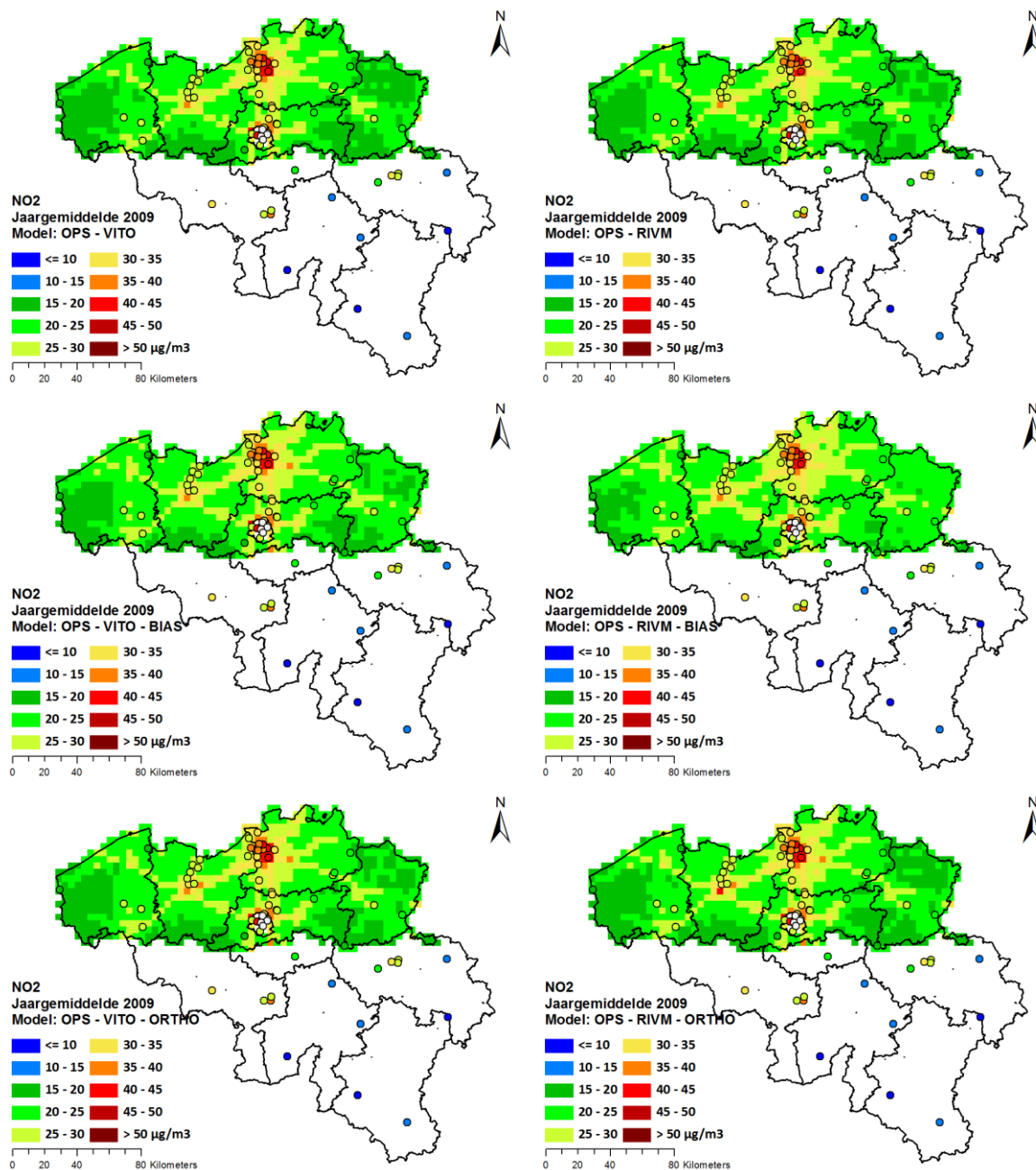
In Figuur 8 worden de grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS (zonder correcties) voor NO₂ getoond. Een aantal zaken vallen onmiddellijk op. Zo vertoont het ruimtelijk patroon in de RIO NO₂ kaart een hogere graad van variabiliteit dan de ruimtelijke patronen in de VLOPS en AURORA kaarten. Wel is het zo dat de snelwegen in de RIO kaart iets minder tot uiting komen, vooral in vergelijking met het VLOPS model dat wel duidelijke gradiënten lijkt te genereren langs de snelwegen. Dit kan echter louter een gevolg zijn van de onderliggende hogere resolutie (1x1 km²) waarop het VLOPS model rekende. Verder lijkt het AURORA model een net iets grotere zone van verhoogde concentraties rond Antwerpen te genereren dan de RIO en VLOPS modellen, en zijn in AURORA de concentraties in Oost-Vlaanderen, Limburg en de Kempen iets hoger dan in VLOPS. RIO genereert in die zones dan weer iets lagere concentraties dan VLOPS, zij het wel met een iets grotere variabiliteit.



Figuur 9: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor NO₂. Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen.

In Figuur 9 wordt een vergelijking getoond van de verschillende correctie en data assimilatie technieken toegepast op het ruwe AURORA model. Uit deze figuur blijkt dat de correctie en data assimilatie technieken voor NO₂ weinig impact hebben, wat zich verder ook zal uiten in de validatie statistieken. Er moet echter opgemerkt worden dat de validatie statistieken voor NO₂ voor de ruwe AURORA reeds relatief goed zijn in vergelijking met de andere modellen (zie verder).

De grootste impact lijkt verkregen te worden bij de Optimal Interpolation techniek, met vooral rond Antwerpen iets lagere concentraties in vergelijking met de ruwe AURORA: van 35 - 40 µg/m³ in de rand naar 30 - 35 µg/m³.

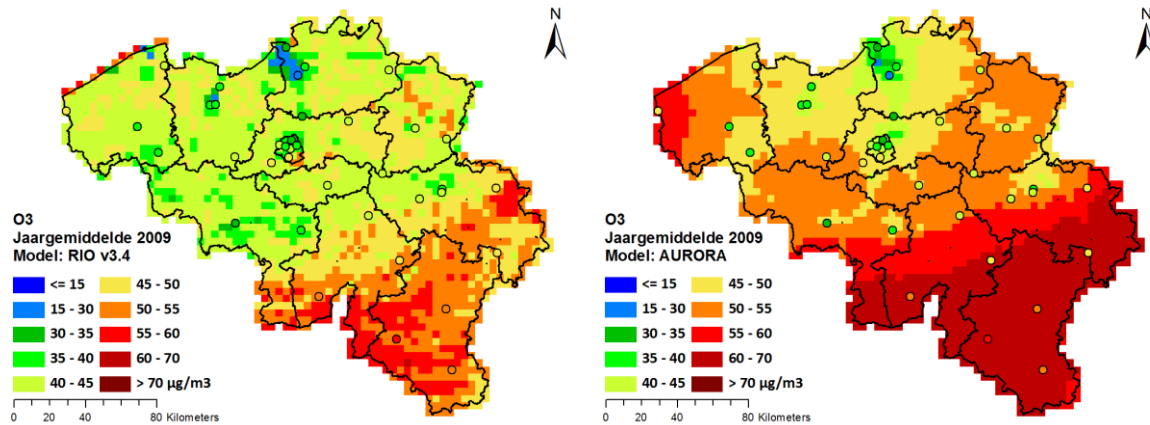


Figuur 10: Vergelijking tussen de verschillende VLOPS varianten voor NO₂. Bovenaan werden de originele VLOPS jaargemiddelde kaarten hernomen om vergelijking te vereenvoudigen. In de linker kolom staan de kaarten op basis van de VITO-NO_x relatie, rechts die op basis van de RIVM relatie. Ruwe VLOPS (bovenaan) wordt vergeleken met de BIAS methode (midden) en de orthogonale regressie (onderaan).

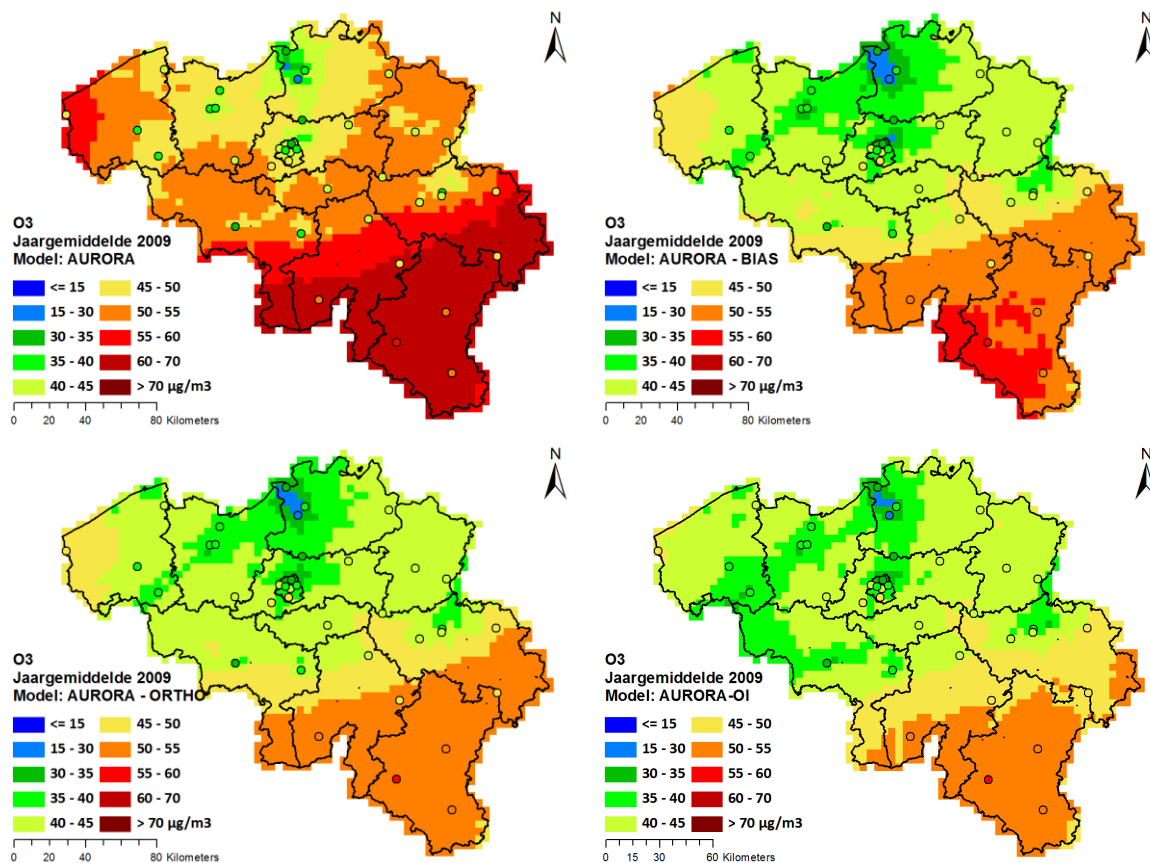
In Figuur 10 wordt een gelijkaardige vergelijking getoond, maar dan van de correctie en data assimilatie technieken toegepast op het ruwe VLOPS model. Ruwe VLOPS kaarten (bovenaan) worden vergeleken met de eenvoudige BIAS correctie methode (midden) en de orthogonale regressie methode (onderaan). Bovendien wordt onderscheid gemaakt tussen de verschillende NO_x → NO₂ conversies: links de VITO relatie, rechts die van RIVM. Uit deze figuur valt op dat er zowel tussen de verschillende NO_x → NO₂ parametrisaties als tussen de verschillende correctie technieken weinig systematische verschillen in ruimtelijke patronen waar te nemen zijn.

Kaartmateriaal voor O₃

Voor ozon beperkt de vergelijking zich tot het RIO en het AURORA model. In Figuur 11 worden de grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, en AURORA (zonder correcties) voor O₃ getoond. Hierin zijn enkele opvallende verschillen op te merken. Het ruwe AURORA model genereert systematisch hogere concentraties in de Ardennen, Limburg, de Westhoek en de Vlaamse Ardennen en delen van Henegouwen, alle sterk rurale gebieden. Net als bij NO₂, is de ruimtelijke variabiliteit in het RIO model hoger. Dit wordt trouwens door het onderliggend landgebruikspatroon (β - parameter) bepaald. In Antwerpen genereert het RIO model iets lagere gemiddelde O₃ concentraties, maar algemeen kan gesteld worden dat met concentraties > 70 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ in de Ardennen, de NW-ZO gradiënt in de ruwe AURORA resultaten sterker is.



Figuur 11: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO en AURORA voor O₃. (Met VLOPS kunnen geen O₃ concentraties berekend worden).

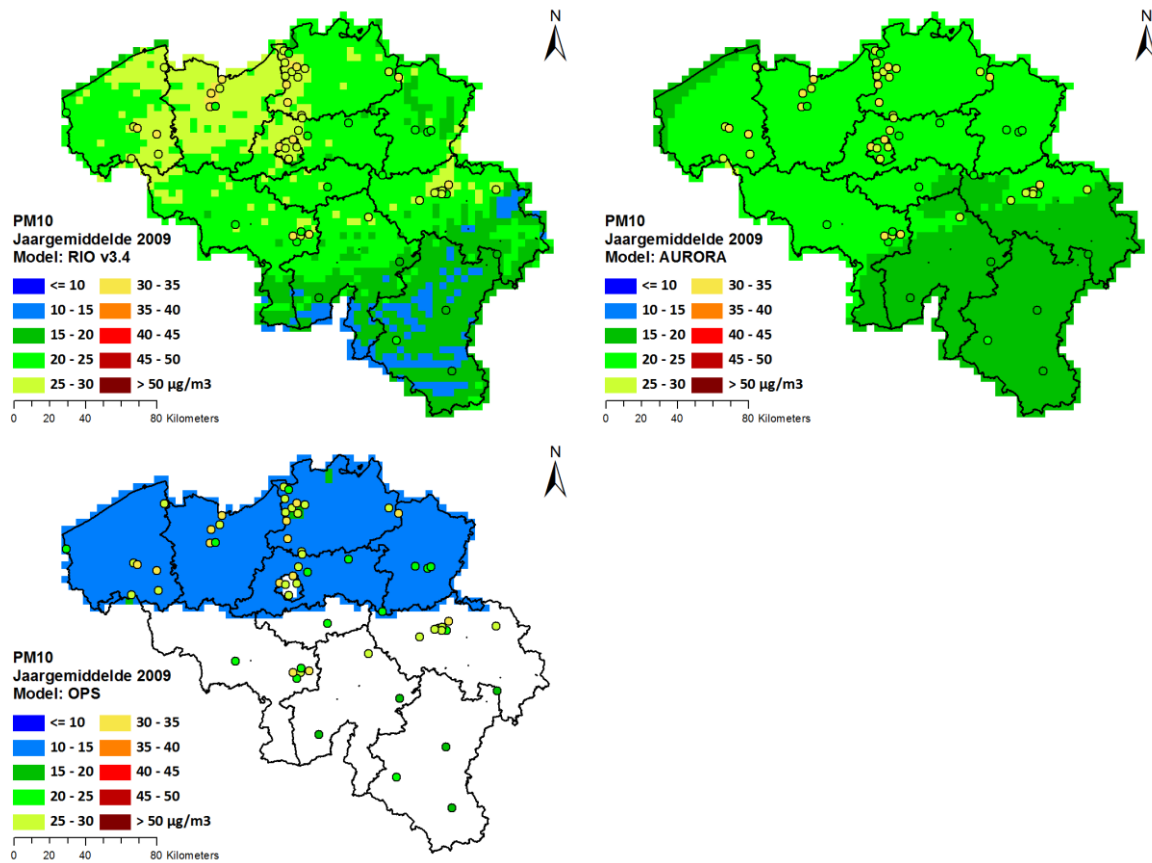


Figuur 12: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor O₃. Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen voor de eenvoud.

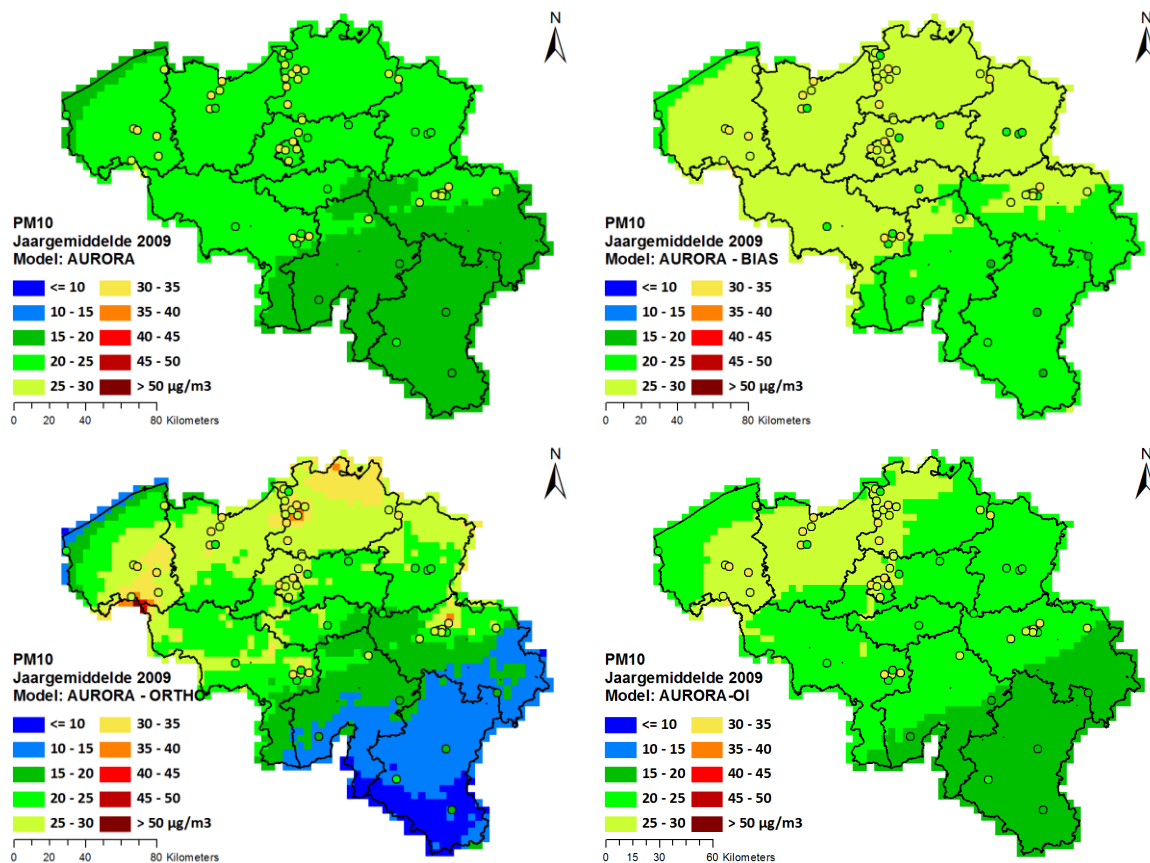
In Figuur 12 wordt een vergelijking getoond van de verschillende correctie en data assimilatie technieken toegepast op het ruwe AURORA model. Uit deze figuur blijkt duidelijk dat de verschillende correctie en data assimilatie technieken de resultaten voor O₃ zoals berekend met het ruwe AURORA model sterk beïnvloeden. Zowel de BIAS correctie, de orthogonale regressie als de Optimal Interpolation techniek reduceren de hoge O₃ concentraties in de Ardennen, maar ook in de Westhoek, Limburg en Henegouwen aanzienlijk (grovweg zo'n 10 µg/m³). Ook in Antwerpen worden lagere O₃ concentraties waargenomen in de gecorrigeerde kaarten. Verder kan opgemerkt worden dat de orthogonale regressie en de Optimal Interpolation technieken een iets minder scherpe ruimtelijke NW-ZO gradiënt opleveren.

Kaartmateriaal voor PM₁₀

In Figuur 13 worden de grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, en AURORA (zonder correcties) voor PM₁₀ getoond. Net als voor NO₂ en O₃ is de ruimtelijke variabiliteit voor het RIO model het hoogst. De ruimtelijke verdeling van de AURORA en VLOPS jaargemiddelde concentraties is heel homogeen. Verder kan ook vastgesteld worden dat zowel de ruwe AURORA als de ruwe VLOPS resultaten de gemeten jaargemiddelde concentraties drastisch onderschatten. Vooral voor VLOPS is deze onderschatting erg significant, in de Ardennen lijkt dit voor AURORA nog mee te vallen.



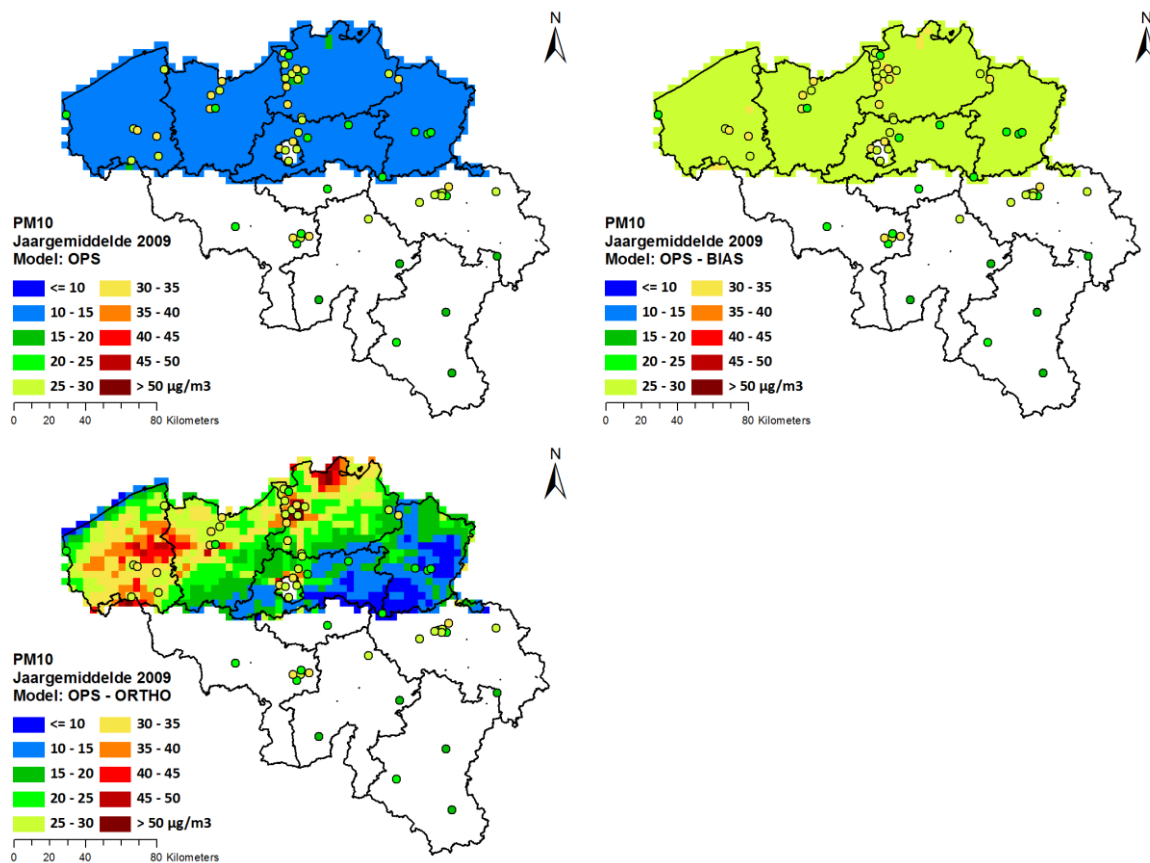
Figuur 13: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, AURORA en OPS voor PM_{10} .



Figuur 14: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor PM₁₀. Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen.

In Figuur 14 wordt een vergelijking getoond van de verschillende correctie en data assimilatie technieken toegepast op het ruwe AURORA model. Het valt op dat de verschillende technieken de onderschattingen en het gebrek aan ruimtelijke variabiliteit gedeeltelijk corrigeren. Wel moet opgemerkt worden dat in de orthogonale regressie techniek de correctie heel erg uitgesproken is, waardoor de concentraties in de Ardennen waarschijnlijk te sterk dalen terwijl de concentraties in andere zones (Noorderkempen, Kortrijk, Antwerpen) hoogstwaarschijnlijk te sterk stijgen. De onderliggende reden voor deze te grote correctie is het feit dat de helling van de orthogonale regressierechte (modelresultaten versus metingen) relatief klein is, waardoor na toepassing van de inverse⁴ relatie tussen model en metingen, grote correcties worden toegepast. Verder kan waargenomen worden dat de AURORA plus Optimal Interpolation techniek op basis van deze kaarten het best aansluit bij de metingen, hoewel er waarschijnlijk een aantal onderschattingen zijn op de as Luik – Charleroi, waar de jaargemiddelde metingen toch iets hogere concentraties lijken te suggereren dan dewelke het modelresultaat aangeeft.

⁴ Algemeen: Indien de correctierechte gegeven wordt door $m = a.o+b$, met m = model, o = observatie, dan wordt een correctie toegepast op basis van de omgekeerde relatie: $m' = (m-b)/a$. Kleine hellingen a geven dus aanleiding tot grote correcties!

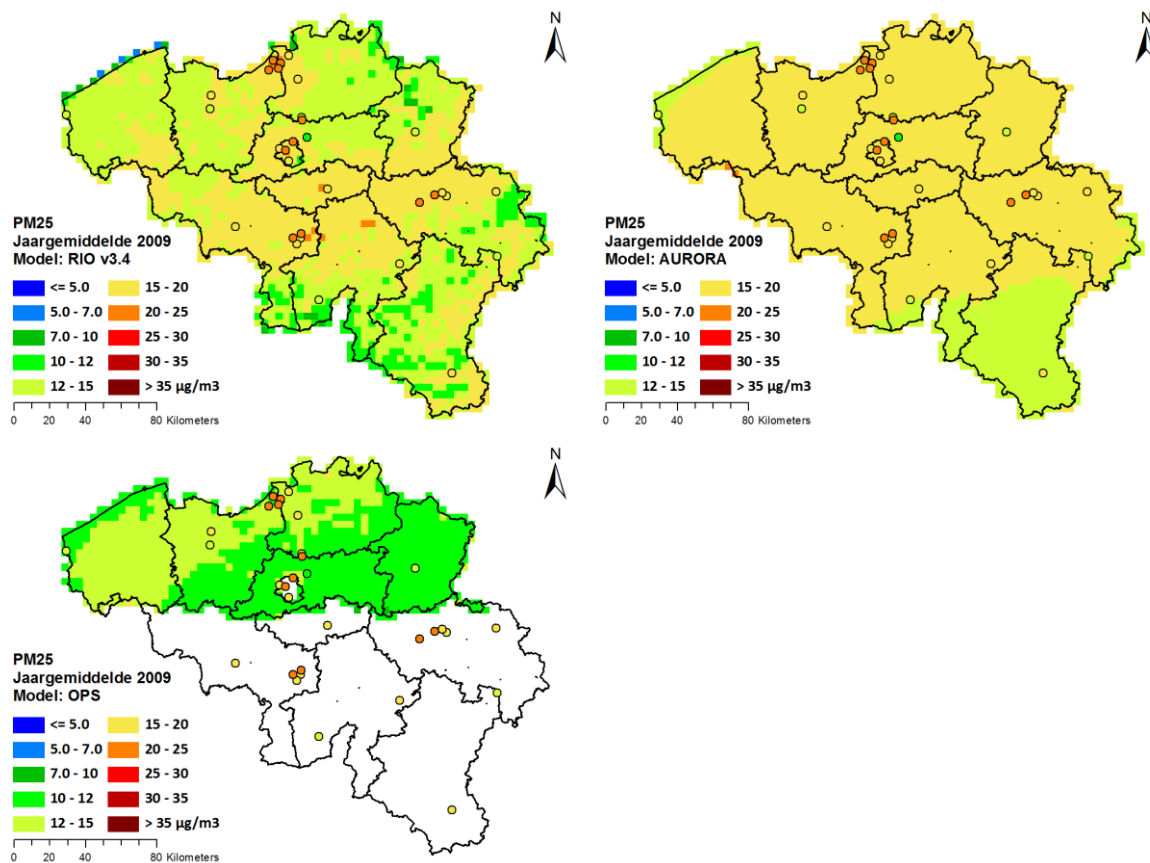


Figuur 15: Vergelijking tussen de verschillende OPS varianten voor PM10. Bovenaan links werd de originele OPS jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen.

In Figuur 15 wordt een gelijkaardige vergelijking getoond, maar dan van de correctie en data assimilatie technieken toegepast op het ruwe VLOPS model. De conclusies liggen in dezelfde lijn als voor het AURORA model. De eenvoudige BIAS correctie trekt de gemiddelde concentraties goed, waardoor de onderschatting weggewerkt wordt. Al bij al lijkt de ruimtelijke variabiliteit in Vlaanderen toch iets te gering. Anderzijds lijkt de orthogonale regressie techniek hier volledig de mist in te gaan, met jaargemiddelde concentraties boven de 50 µg/m³ in de noorderkempen en onder de 10 µg/m³ in Limburg. De reden hiervoor is opnieuw een te kleine helling van de orthogonale regressierechte.

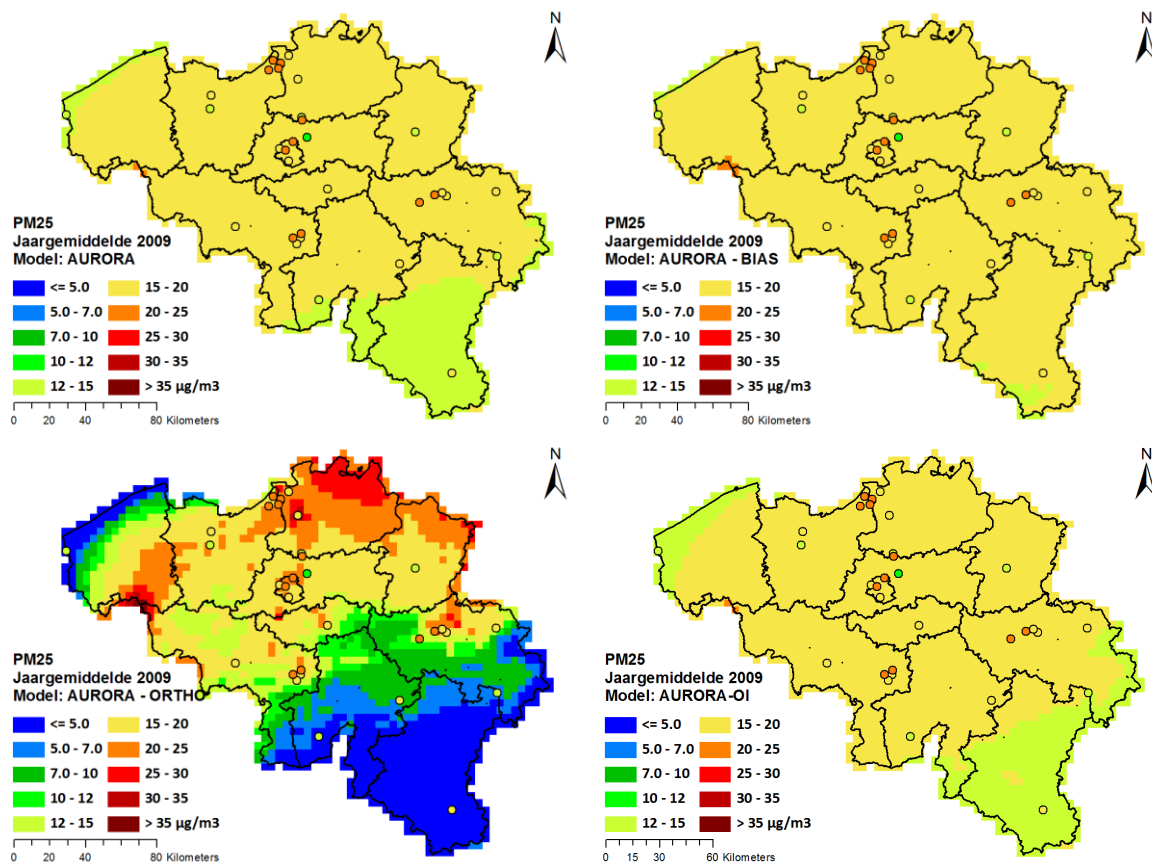
Kaartmateriaal voor PM_{2.5}

In Figuur 16 worden de grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten (2009) voor de basis modellen RIO, en AURORA (zonder correcties) voor PM_{2.5} getoond. De conclusies zijn gelijkaardig aan die voor PM₁₀. De ruimtelijke variabiliteit lijkt het grootst voor het RIO model, en voor de andere modellen er zijn matige (AURORA) tot sterke (VLOPS) onderschattingen van de gemiddelde PM_{2.5} concentraties in de ruwe modelresultaten.

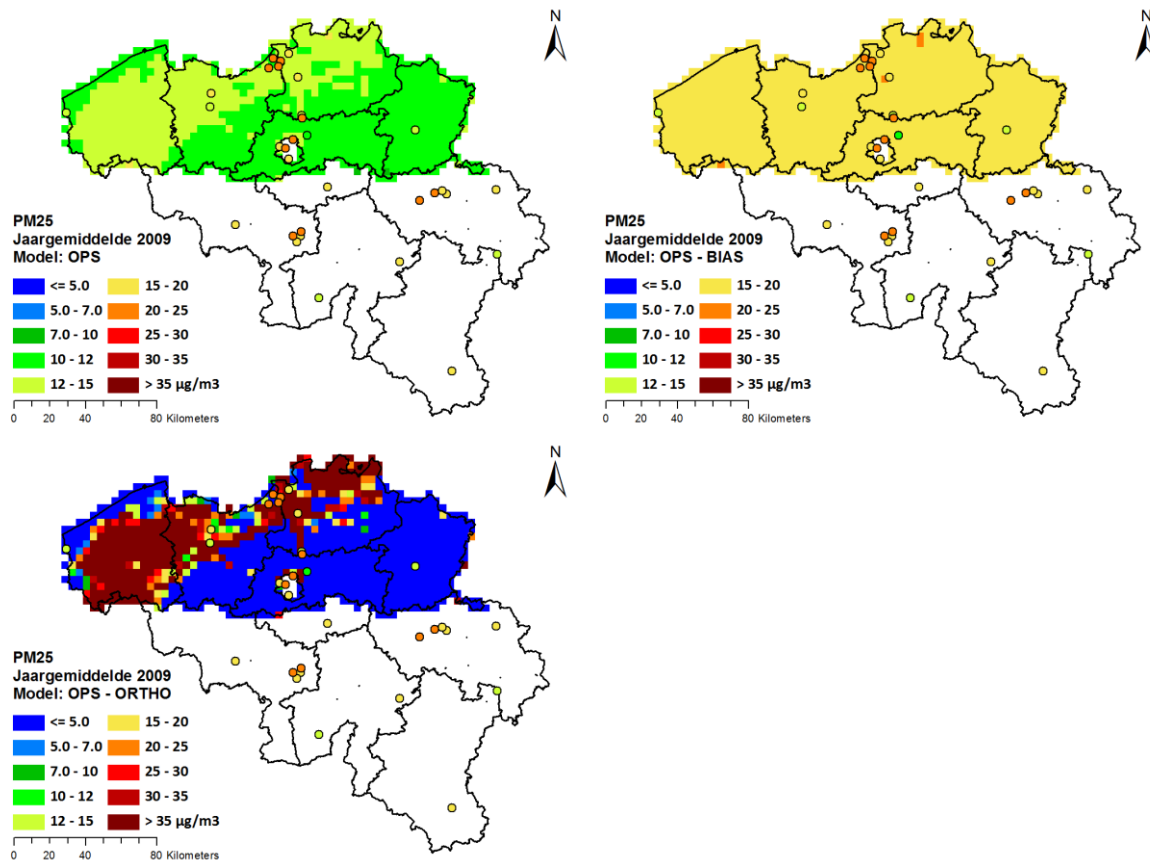


Figuur 16: Grootschalige jaargemiddelde concentratiekaarten voor de basis modellen RIO, AURORA en VLOPS voor PM_{2.5}.

Ook voor de gecorrigeerde AURORA (Figuur 17) en VLOPS (Figuur 18) resultaten zijn de conclusies analoog aan PM₁₀: de BIAS correcties corrigeren voor de gemiddelde onderschatting, maar met orthogonale regressie gebeurt een sterke overcorrectie, die vooral bij VLOPS erg drastisch is.



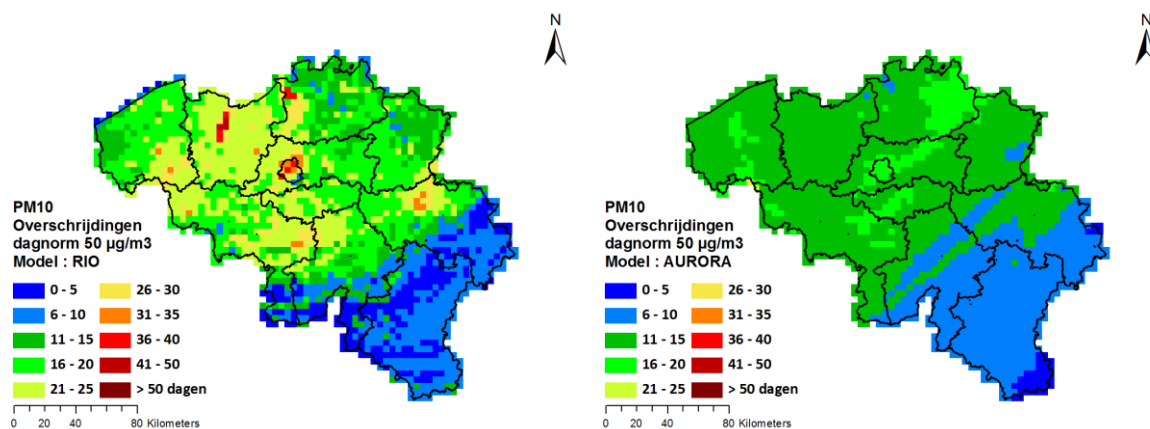
Figuur 17: Vergelijking tussen de verschillende AURORA varianten voor PM_{2.5}. Linksboven werd de originele AURORA jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen.

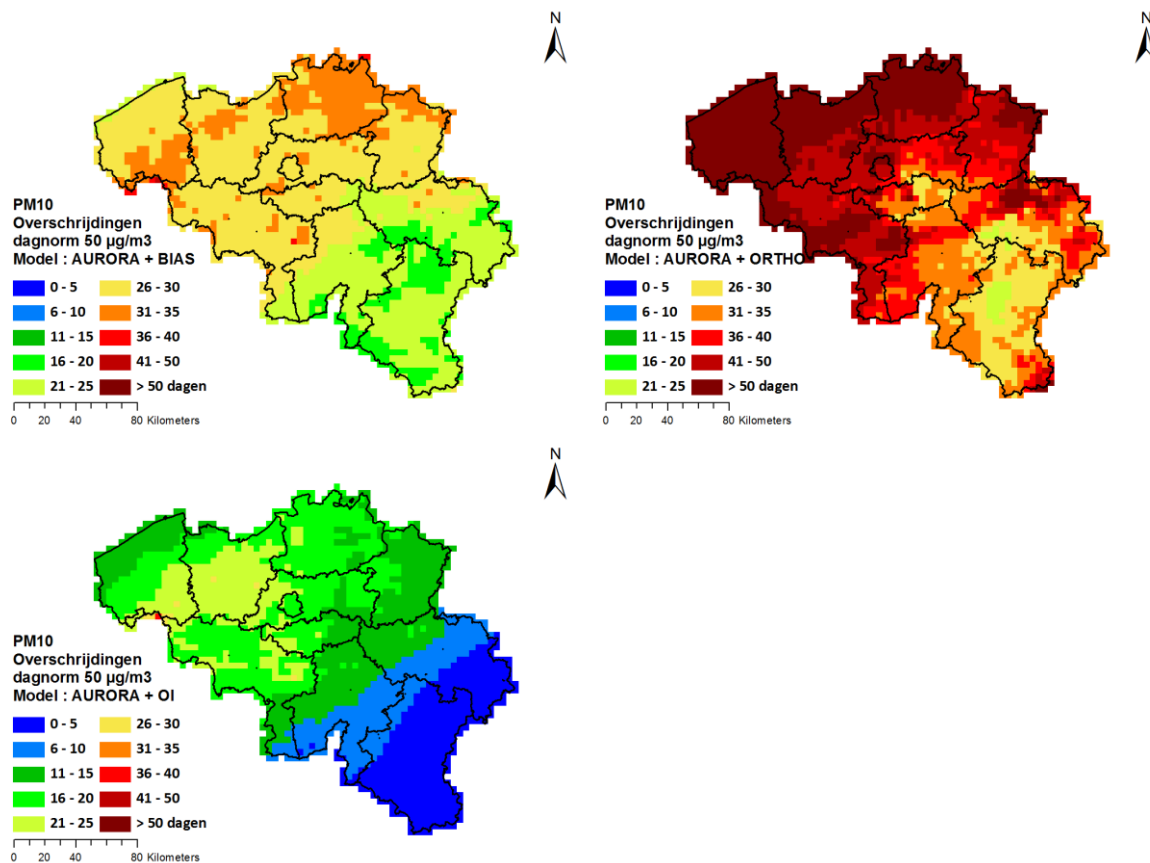


Figuur 18: Vergelijking tussen de verschillende VLOPS varianten voor $PM_{2.5}$. Bovenaan links werd de originele VLOPS jaargemiddelde kaart hernomen om vergelijking te vereenvoudigen.

Overschrijdingskaarten voor PM_{10}

Naast de concentratiekaarten werden ook de overschrijdingskaarten van de PM_{10} dagnorm gemodelleerd met de verschillende modeltechnieken. De resulterende kaarten worden getoond in Figuur 19. Iedere pixel geeft het gemodelleerd aantal dagen met een daggemiddelde concentratie groter dan $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ in 2009. Gezien volledige tijdsreeksen nodig zijn om het aantal overschrijdingsdagen te kunnen bepalen, werden de overschrijdingskaarten enkel met het RIO model en de AURORA varianten berekend.





Figuur 19: Gemodelleerde aantal overschrijdingen van de PM₁₀ dagnorm van 50 µg/m³ in 2009. Van boven naar onder en links naar rechts hebben we de resultaten van het RIO model, de ruwe AURORA resultaten, AURORA + BIAS correctie, AURORA + orthogonale regressie en de Optimal Interpolation techniek.

Uit Figuur 19 wordt duidelijk dat er relatief grote verschillen zijn tussen de overschrijdingskaarten berekend met de verschillende modeltechnieken. Er dient echter opgemerkt te worden dat het aantal overschrijdingen een extreem gevoelige grootheid is en het dus niet eenvoudig is om de modellen op basis van deze grootheid met elkaar te vergelijken.

Duidelijk is wel dat de orthogonale regressie techniek het aantal overschrijdingen sterk overschat. Aan de hand van deze techniek loopt het aantal overschrijdingsdagen op tot ongeveer 200 dagen. Verder valt op dat het aantal overschrijdingen systematisch lager is dan wat gevonden wordt in de meetpunten. In 2009 werden voor een aantal stations meer overschrijdingen dan de maximaal toegelaten 35 dagen gemeten, met name in de omgeving van Gent, Antwerpen, Brussel, Luik en Zwevegem-Roeselare (bron: site IRCEL). Hoewel het model niet voor alle zones effectief overschrijdingen modelleert, lijkt het RIO model deze zones het best weer te geven. Voor de andere modeltechnieken is de interpretatie van de ruimtelijke patronen iets minder voor de hand liggend. Op basis van statistieken als de *Relative Percentile Error* (RPE), *Fraction of Correct Forecasts* (FCF) en *Fraction of False Alarms* (FFA), (zie verder), is een meer onderbouwde uitspraak over de kwaliteit van de verschillende modeltechnieken voor wat betreft het correct reproduceren van het aantal overschrijdingen mogelijk.

Temporele Validatie

Inleiding, statistische indicatoren en grafische voorstellingen

In deze paragraaf wordt de temporele validatie besproken. Zoals hoger reeds vermeld werd, is een temporele validatie oefening enkel mogelijk wanneer uurlijkse concentraties voorhanden zijn. Bijgevolg werden enkel voor RIO en AURORA (inclusief varianten) de temporele aspecten van de model validatie bekeken. Het is belangrijk op te merken dat de correcties en data assimilatie technieken (de bias correctie, de orthogonale regressie, de Optimal Interpolation techniek en de Kalman Filter) in deze validatie voor ieder uur werden toegepast.

In de temporele validatie worden een aantal standaard statistische indicatoren zoals de BIAS (gemiddeld verschil tussen model en observatie), de RMSE (gemiddeld kwadratisch verschil tussen model en observatie) en de R^2 (de door het model verklaarde variantie van de metingen) bestudeerd. Daarnaast wordt ook een analyse gemaakt van de zogehete *target* en *quantiel plots*. Beide plots worden hieronder geïntroduceerd. Ook de interpretatie van de plots wordt toegelicht.

Voor PM10 worden verder een aantal indicatoren bekeken die specifiek te maken hebben met het aantal overschrijdingen van de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ dagnorm. Een eerste indicator is de RPE (Relative Percentile Error). De RPE geeft de relatieve fout tussen model en observatie op de percentiel waarde die overeenkomt met het maximum aantal overschrijdingen van de dagnorm, i.e. voor maximum 35 dagen komt dit overeen met percentiel 90.4. Daarnaast worden ook de indicatoren FCF (Fraction of Correct Forecasts) en FFA (Fraction of False Alerts). Deze indicatoren geven het volgende aan:

- FCF: het procentueel aantal keer dat de modelwaarde voor het PM_{10} daggemiddelde boven de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zit wanneer de observatie boven de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zit.
- FFA: het procentueel aantal keer dat de modelwaarde voor het PM_{10} daggemiddelde boven de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zit, wanneer de observatie niet boven de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zit.

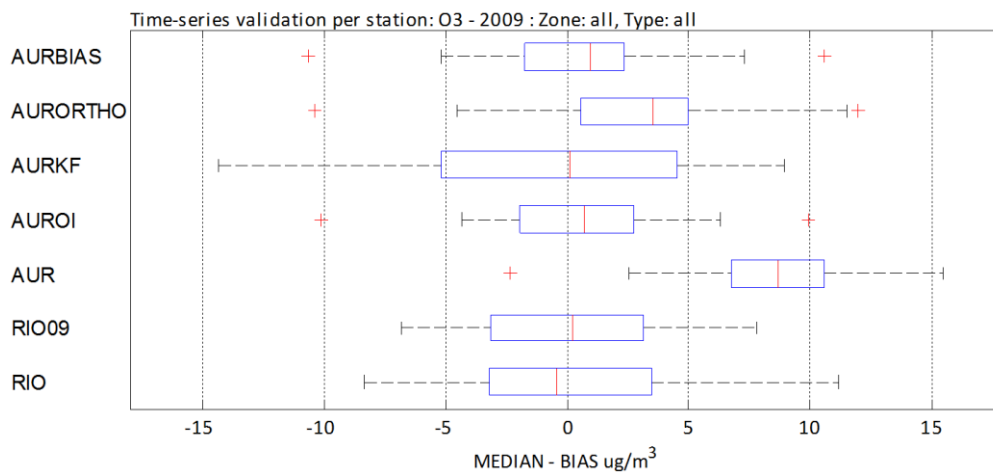
Uit deze definitie volgt dat de FCF best zo hoog mogelijk en de FFA best zo laag mogelijk is. Merk tenslotte ook op dat deze laatste indicatoren weldegelijk rekening houden met de coïncidentie tussen modelwaarde en observatie, in tegenstelling tot de RPE en de QQ-plot.

Gezien de temporele validatie per pollutant op ieder station werd toegepast, telkens door *cross- of leaving-one-out* validatie, werden per validatie indicator N statistieken per model en per pollutant (met N het aantal stations) bepaald. Om dit naar interpretatie toe hanteerbaar te maken, werd gebruik gemaakt van zogehete *boxplots*. Het volstaat ons inziens immers niet om een eenvoudig gemiddelde van de validatie indicatoren overheen de stations te berekenen om een consistente en vooral objectieve vergelijking te kunnen maken. Inderdaad, het kan bijvoorbeeld zijn dat een aantal *outlier* stations de gemiddelde BIAS of gemiddelde RMSE overheen de stations sterk doen toenemen terwijl de meeste stations wel een relatief goede BIAS of RMSE hebben. Deze informatie zou verloren gaan door het herleiden naar een simpel gemiddelde van de indicatoren over de stations. De *boxplots* bieden hiervoor een oplossing. *Boxplots* geven een zeer aanschouwelijke voorstelling van de verdeling van de validatie statistiek overheen de stations.

Vooraleer de resultaten van de temporele validatie in detail te bespreken, wordt in hetgeen volgt wordt dieper ingegaan op de *boxplot*, de *target plot* en de *quantiel plot*. Zowel de plot op zich als de interpretatie ervan worden toegelicht.

Interpretatie validatie boxplots

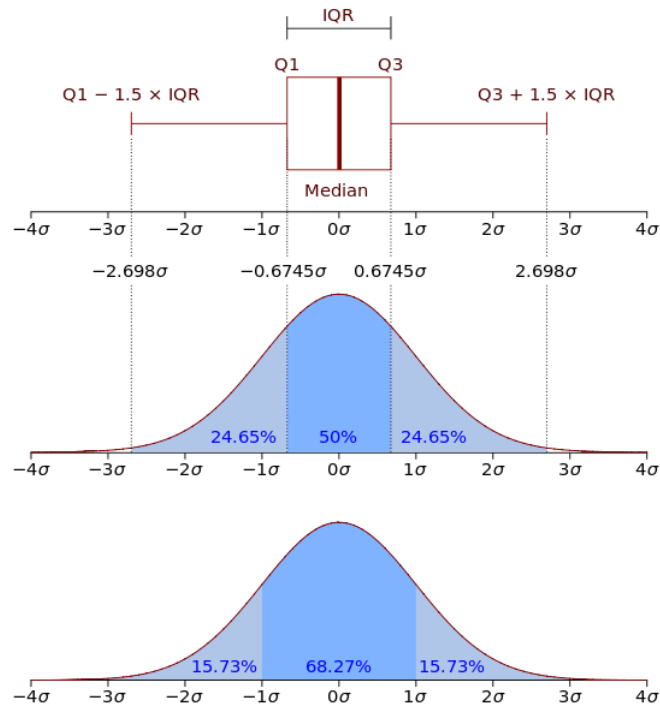
De resultaten van de temporele validatie zullen gedeeltelijk gebeuren op basis van *boxplots*. Hieronder wordt de *boxplot* in meer detail besproken.



Figuur 20: Voorbeeld van een typische boxplot.

In Figuur 20 wordt een typisch voorbeeld van een *boxplot* voor de BIAS getoond. Op de horizontale as wordt de BIAS voor de stations uitgezet. Op de verticale as wordt per model één 1 boxplot weergegeven. Dergelijke boxplot bevat alle informatie over de verdeling van de BIAS overheen de stations. Om deze informatie uit de plot te kunnen halen, is het essentieel te weten uit welke componenten hij is opgebouwd. Allereerst is er de rode lijn in het blauw hokje. Die rode lijn geeft de mediaan van de verdeling weer. In dit voorbeeld (boxplot voor BIAS) is dit de mediaan van de BIAS over alle stations. De grootte (op de horizontale-as) van de blauwe rechthoek geeft de zogehete interquartiel afstand weer. Dit is de range tussen het 25^{ste} (Q1) en het 75^{ste} (Q3) percentiel van de verdeling van de BIAS, hetgeen betekent dat de helft van alle BIAS validatie waarden over alle stations binnen de blauwe rechthoek gelegen is. De rechthoek is met andere woorden min of meer een aanduiding voor de spreiding op de BIAS over alle stations. Merk op dat dit voor een normale verdeling overeenkomt met $\pm 0.67 \sigma$. De zwarte "errorbars" tenslotte, tonen de meest extreme datapunten, die niet als een outlier worden gecatalogeerd. Hierbij worden outliers gedefinieerd als waarden hoger dan $Q3+1.5(Q3-Q1)$ of lager dan $Q1-1.5(Q3-Q1)$. Dit is grafisch weergegeven in Figuur 21. In Figuur 20 worden de outliers weergegeven door de rode kruisjes.

Het is duidelijk dat boxplots meer informatie bevatten dan eenvoudige barplots, die slechts 1 enkele waarde weergeven (bvb de gemiddelde BIAS over alle stations). Een ander groot voordeel is dat de waarden die men uit de boxplots kan afleiden (mediaan, interquartiel afstand) iets robuuster zijn dan het rekenkundig gemiddelde en de standaardafwijking om bvb de gemiddelde BIAS of de spreiding van de BIAS over de stations te kunnen weergeven.



Figuur 21: Interpretatie van een boxplot t.a.v. een normale (Gaussische) verdeling. De interkwartiel range komt voor een normale verdeling overeen met $\pm 0.67\sigma$, de extremen met $\pm 2.7\sigma$. De IQR staat voor Inter Quartile Range. Bron: Wikipedia

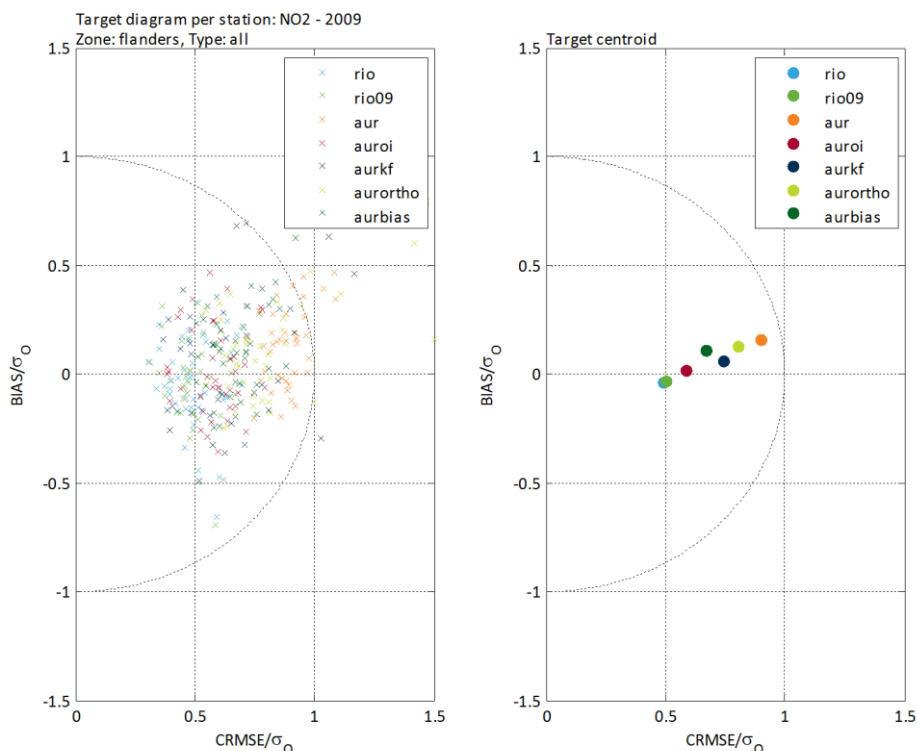
Interpretatie target plots

De resultaten van de temporele validatie zullen ook gedeeltelijk gebeuren op basis van target plots. Hieronder wordt de target plot in meer detail besproken.

In Figuur 22 wordt een typisch voorbeeld van een *target plot* getoond. Uit de figuur is duidelijk dat een target plot een XY diagram is waarin 2 statistische indicatoren tegenover elkaar uitgezet worden. De eerste (op de horizontale as) is de zogehete "Centered RMSE (CRMSE)", de tweede (op de verticale as) is de BIAS. Beide grootheden zijn echter genormaliseerd t.o.v. de standaardafwijking van de observaties. Mathematische is dit:

$$\text{x-as : CRMSE}/\sigma_O = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [(M_i - \bar{M}) - (O_i - \bar{O})]^2}}{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}}$$

$$\text{y-as : BIAS}/\sigma_O = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (M_i - O_i)}{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}}$$



Figuur 22: Typisch voorbeeld van een target plot. Links staan de target x,y paren per station, rechts is per model het middelpunt van alle target waarden over de stations berekend.

Deze coördinaten worden per station berekend en worden in het target diagram uitgezet. In Figuur 22 (linkerpaneel) gebeurde dit voor de verschillende modellen (verschillende kleur per model). Om deze target plot wat aanschouwelijker te maken, werd telkens ook het middelpunt over alle stations per model berekend en in het rechterpaneel uitgezet. Op die manier worden de modellen iets beter onderling vergelijkbaar.

Op de target plots is ook telkens een cirkel met straal 1 weergegeven (stippellijn). Voor punten die binnen deze cirkel vallen kan gesteld worden dat de modelberekening een betere predictor is voor de data dan het gemiddelde van de data zelf (Stow et al, 2009; Thunis et al, 2011) en verder dat model en observaties positief met elkaar gecorreleerd zijn. Het is verder zo dat de afstand van een punt in een target diagram, de zogeheten *target indicator*, of *target* zelf, in feite niets anders is dan de RMSE genormaliseerd met de standaardafwijking van de observaties.

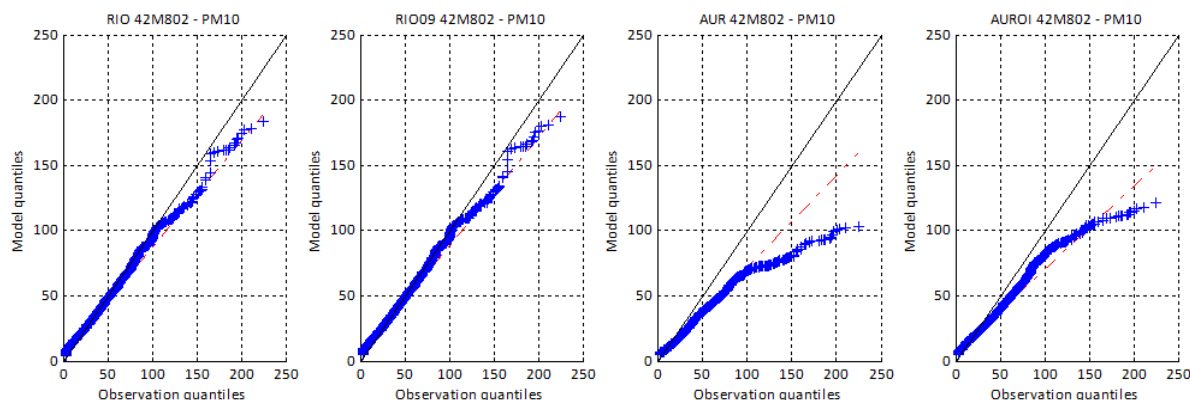
Tenslotte wensen we op te merken dat voor de target plots die in de validatie analyse gebruikt worden, licht wordt afgeweken van de discussies die binnen FAIRMODE aan de gang zijn rond het opstellen van een generieke benchmarking en validatie toolkit. De afwijking ligt in het feit dat we ons beperkten tot het weergegeven van de target plots volgens de eerste versie van de delta tool (Thunis et al, 2011). In deze versie van de JRC delta tool werd gebruik gemaakt van een gelijkaardige normalisatie op basis van de standaardafwijking van de observaties. In latere versies werd deze echter vervangen door een normalisatie die rekening probeert te houden met de onzekerheid op de meetwaarden. Gezien dit op het moment van schrijven nog altijd work-in-progress is en er geen finale officiële bug-vrije versie beschikbaar is, werd gekozen voor het opstellen van eigen target diagrammen. Verder is het zo dat we in de target plots geen onderscheid maken tussen systematische en onsystematische RMSE, zoals in Thunis et al, (2011) wel gebeurt. Dit impliceert dat de target diagrammen in dit rapport enkel positieve waarden op de horizontale as zullen bevatten.

Interpretatie quantiel plots

Naast *box* en *target plots* zullen de resultaten van de temporele validatie ook gedeeltelijk gebeuren op basis van *quantiel plots*. Hieronder wordt de *quantiel plot* (of QQ plot) dan ook in meer detail besproken.

Quantiel plots hebben als doel het gedrag van de modelberekeningen in de extremen van de distributie te bekijken. Met andere woorden, aan de hand van QQ-plots kan informatie over hoe goed de modellen er in slagen de extreme waarden van de distributie van concentraties te reproduceren, afgeleid worden. Uiteraard is dit belangrijk voor het zo correct mogelijk reproduceren van de overschrijdingsnormen, bijvoorbeeld voor de PM_{10} dagnorm van $50 \mu g/m^3$.

In Figuur 23 worden een aantal typische voorbeelden van QQ plots getoond. Om tot dergelijke QQ-plots te komen, worden in eerste instantie de concentraties van klein naar groot gerangschikt, en dit voor zowel modelwaarden als observaties. Belangrijk hierbij op te merken is dat dit onafhankelijk van elkaar gebeurt. De koppels (kleinste meting, kleinste modelwaarde), (2^e kleinste meting, 2^e kleinste modelwaarde), enz. ... die zo gecreëerd worden, hoeven met andere woorden niet noodzakelijk op hetzelfde tijdstip te vallen. Het chronologisch verband tussen model en observaties gaat bijgevolg verloren in de QQ plot. Het is dan ook belangrijk te beseffen dat deze plot iets zegt over de *distributie* van de modelwaarden vs. de *distributie*⁵ van de observaties. De QQ plot zelf is uiteindelijk niet meer dan het uitzetten dan de hoger geïntroduceerde (meting, modelwaarde) koppels volgens rang.



Figuur 23: Enkele typische voorbeelden van QQ-plots.

Op de plots is telkens een zwarte lijn aangegeven die de $x=y$ lijn voorstelt. Indien de QQ-plot (blauwe markers) op die lijn ligt, dan volgen de distributie van modelwaarden en observaties elkaar perfect. Indien de QQ plot mooi op een lijn ligt, die eventueel wel afwijkt van de $x=y$ lijn, dan staan de distributies van model en observaties lineair met elkaar in verband. Op de plots is telkens ook indicatief de interkwartiel-lijn (rode onderbroken lijn) aangegeven. Deze verbindt de 25^{ste} en 75^{ste} percentiel (meting,modelwaarde)-koppels en geeft bijgevolg aan hoe het gros van de distributie van modelwaarden zich gedraagt t.o.v. de distributie van metingen. Wat in deze context echter belangrijker is, is het gedrag van de QQ plot bij hogere quantielen. Indien de QQ-plot afvlakt (zoals duidelijk zichtbaar in het 3^e en 4^e paneel van Figuur 23), heeft de waarschijnlijkheidsverdeling van observaties een “langere staart” dan de verdeling van modelwaarden. Met andere woorden, het model slaagt er niet in de extremen van de verdeling te reproduceren⁶.

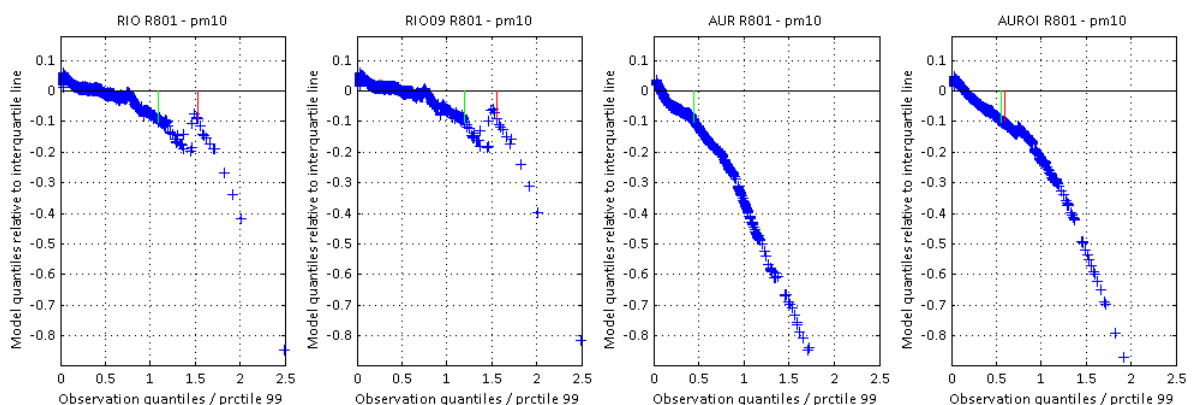
⁵ Of waarschijnlijkheidsverdeling (probability density function).

⁶ Opnieuw in het achterhoofd houdende dat er geen coincidentie dient te zijn tussen model en observaties.

Om in de context van dit project de QQ-plots van de verschillende modellen met elkaar te vergelijken, werd een QQ-indicator ingevoerd. Deze indicator gaat na tot welk concentratieniveau de QQ-plot de $x=y$ lijn blijft volgen. Hieronder wordt de QQ-indicator verder toegelicht. Het dient echter duidelijk gesteld te worden dat dit een ad-hoc ingevoerde grootheid is om binnen dit project informatie uit dergelijke quantiel-analyse mee te nemen in de validatie. Binnen het kader van dit project was het niet mogelijk om een meer rigoureuze behandeling, bijvoorbeeld gebaseerd op extreme waarden statistiek, mee te nemen in de validatie.

Uit bovenstaande is duidelijk dat we met de uit de QQ-plot afgeleide QQ-indicator willen nagaan tot welke concentraties de distributie van de modelwaarden en de gemeten concentraties overeenkomen. Hoe hoger die index, hoe beter een model de staart van de gemeten distributies weergeeft, en hoe beter ook het aantal normoverschrijdingen gereproduceerd zal kunnen worden. Deze achterliggende filosofie werd als volgt wiskundig vertaald in de QQ-indicator:

- In eerste instantie worden de residus van de QQ-plot t.o.v. de $x=y$ lijn genomen. Deze zijn weergegeven in Figuur 24. De $x=y$ lijn is nu de 0 lijn.
- Vervolgens worden de model quantielen en de observatie quantielen genormaliseerd. Dit is nodig omdat voor verschillende stations en verschillende polluenten de distributies (en dus ook de extreme waarden) anders zullen zijn, en de quantielen zelf bijgevolg niet onderling vergelijkbaar. De normalisatie gebeurt door zowel de observatie als de model quantielen te delen door de 99^{ste} percentielwaarde van de observaties. In de onderstaande plots komt de waarde 1 op de horizontale as dus telkens overeen met het 99^{ste} percentiel van de observaties.
- Tenslotte wordt een niveau van maximale afwijking van 0 voor de genormaliseerde quantiel-plot residus gedefinieerd. Ad-hoc wordt 10 % van het 99^{ste} percentiel van de observaties genomen. Dit wil zeggen dat we in Figuur 24 willen weten wanneer de blauwe kruisjes boven 0.1 of onder -0.1 duiken. De waarde op de horizontale as die hiermee overeenkomt geeft aan tot welke fractie van het 99^{ste} percentiel de QQ-plot uit Figuur 23 tussen model en observatie voor een welbepaald station nog goed de $x=y$ lijn blijft volgen.
- Tenslotte is het zo dat voor de extreme waarden QQ plots, en zeker de residus, nogal rare bokkesprongen kunnen vertonen. Om de hier gedefinieerde QQ-indicator robuuster te maken werd éénmaal, vertrekkende vanaf lage waarden op de horizontale as de eerste waarde waar we buiten het $[-0.1; 0.1]$ interval op de verticale as gaan, gezocht. Hetzelfde gebeurde, vertrekkende vanaf hoge waarden naar lage waarden (maar dan waar we binnen het $[-0.1; 0.1]$ interval op de verticale as duiken). Dit wordt in Figuur 24 aangegeven door de groene en rode lijntjes. Wanneer de QQ-plot een verloop kent zonder al te veel bokkesprongen, zullen deze waarden nagenoeg gelijk zijn (zie paneel 3 en 4 van Figuur 24), wanneer er echter wat meer variabiliteit aanwezig is, kunnen die waarden toch danig verschillen (paneel 1 en 2). De QQ-indicator wordt gedefinieerd als het minimum van beide waarden.



Figuur 24: Illustratie van de afleiding van de QQ-indicator.

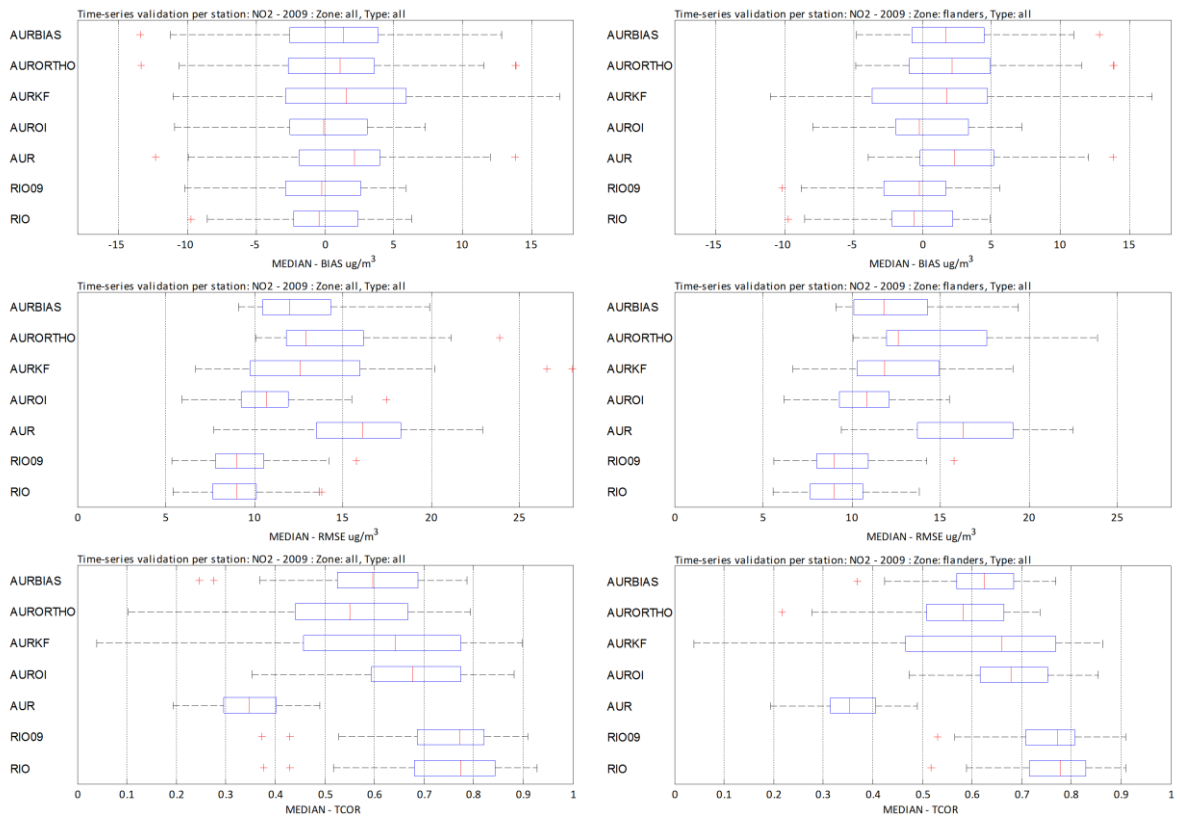
We dienen er nogmaals op te drukken dat de QQ-indicator een ad-hoc ingevoerde grootte is binnen het kader van deze studie. Het is geen generiek ingeburgerde grootte zoals bijvoorbeeld de RMSE of BIAS dat zijn. We vonden het echter opportuun om in deze uitgebreide modelvergelijking toch ook aandacht te hebben voor de extremen van de concentraties en een manier te bepalen om af te leiden hoe goed de modellen de extreme waarden van de verdelingen van observaties kunnen reproduceren. Dit is belangrijk in het afwegen van hoe goed de modellen normoverschrijdingen kunnen reproduceren. De hierboven gedefinieerde QQ-indicator geeft ons inziens hiertoe dus een relatief eenvoudige insteek, maar het is ongetwijfeld mogelijk dit nog verder uit te diepen. We dienen hier verder ook op te merken dat specifiek voor de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ norm voor PM_{10} ook de RPE indicator wordt meegenomen in de analyse. Ook deze indicator geeft een idee over de kwaliteit van het model t.a.v. normoverschrijdingen.

In hetgeen volgt wordt per pollutant de temporele validatie besproken voor de RIO en AURORA model varianten. Voor iedere pollutant worden eerst de traditionele statistische indicatoren besproken: BIAS, RMSE en R^2 , gevolgd door een bespreking van de target indicatoren en de QQ plots.

Temporele Validatie NO_2

Bias, RMSE, R^2

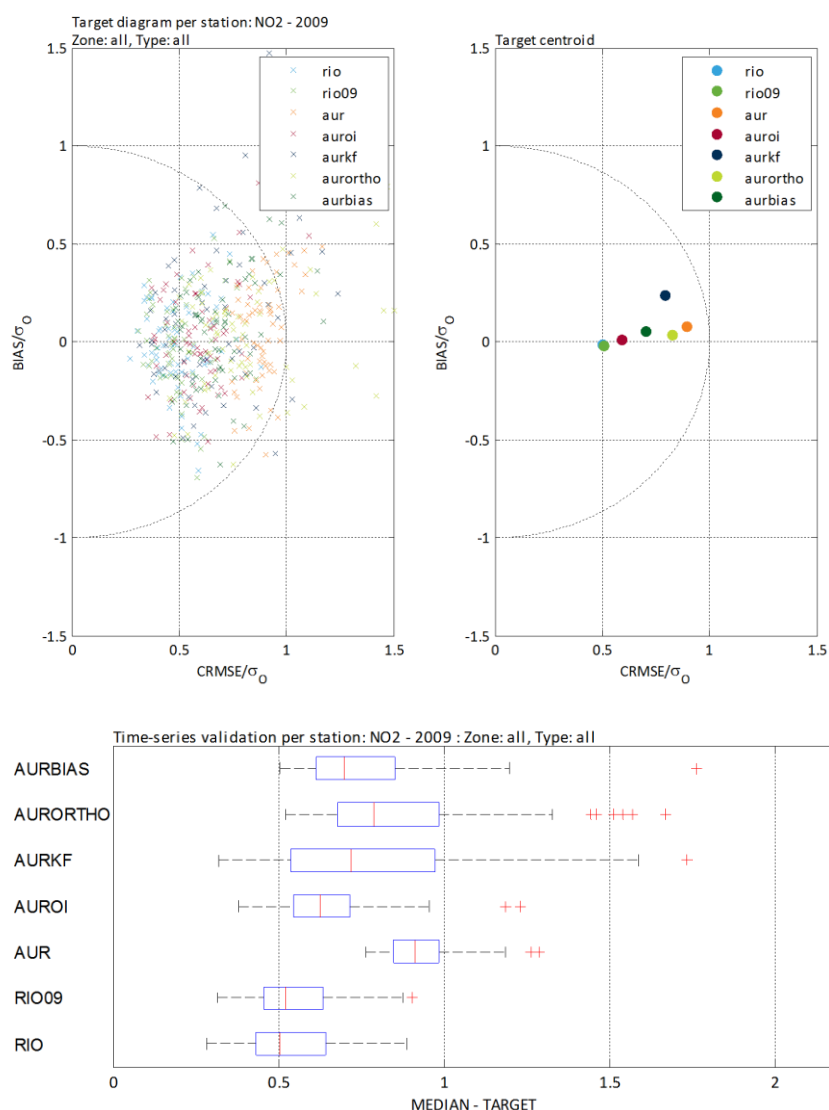
Voor NO_2 worden de laagste BIAS en RMSE en de hoogste temporele correlatie (R^2) met het RIO model bekomen (met relatief weinig onderscheid tussen RIO en RIO 09). Naast de beste mediaan waarden voor die indicatoren is ook de spreiding van deze indicatoren over de verschillende stations bij RIO en RIO09 het laagst, wat duidt op consistent betere modelwaarden. Voor RIO is de mediaan BIAS over de verschillende stations nagenoeg 0, de mediaan RMSE ongeveer $8\text{-}9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en de temporele R^2 tussen de 0.75 en 0.80. Het ruwe AURORA model scoort duidelijk het slechtst. Zo is de RMSE groter dan $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en is de temporele R^2 kleiner dan 0.4. Van de AURORA varianten lijkt de Optimal Interpolation techniek volgens deze indicatoren het best te presteren, met een mediaan BIAS die nagenoeg 0 is, de kleinste spreiding op de indicatoren overheen de stations en ook de hoogste temporele correlatie. Merk tenslotte op dat de techniek met correctie op basis van Kalman Filter een relatief grote spreiding vertoont in de boxplots. Dit duidt erop dat deze correctie methode het soms goed doet, maar soms ook volledig de mist in gaat. Dit is te wijten aan het experimentele karakter van de techniek. Verder onderzoek is nodig om deze correctiemethode te verfijnen. Bovenstaande bespreking geldt zowel op Belgisch als op Vlaams niveau.



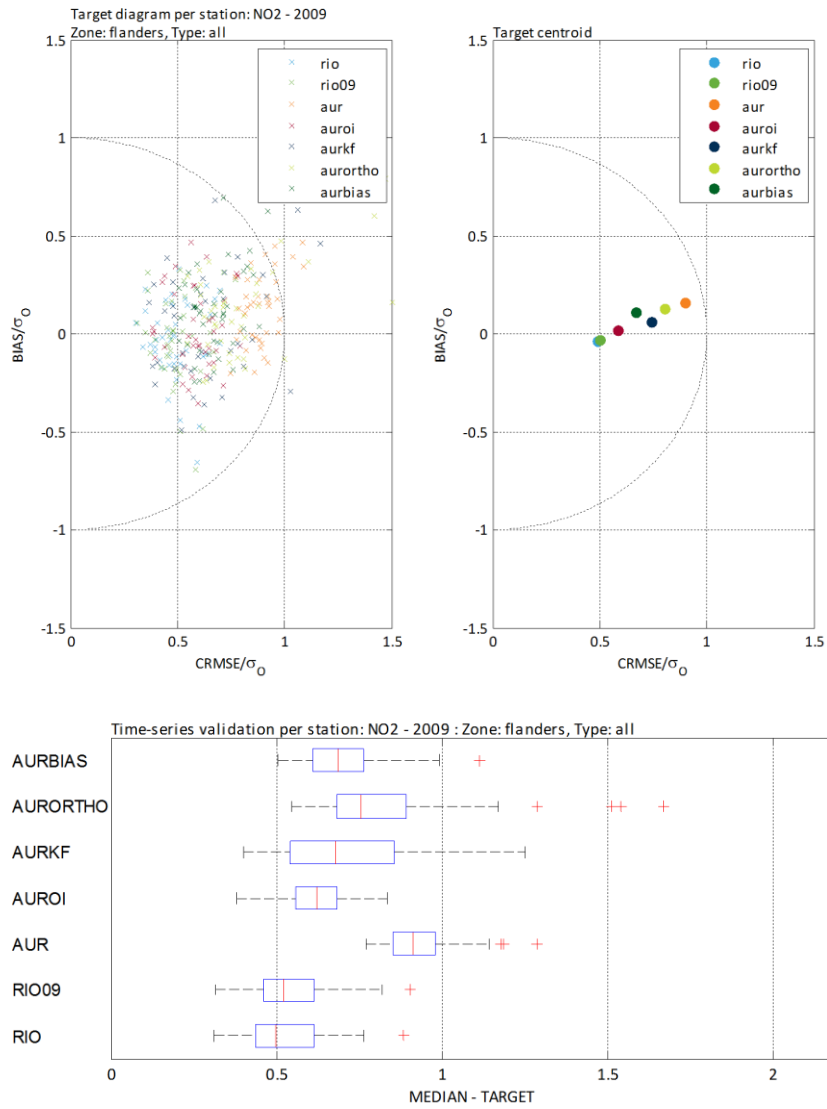
Figuur 25: Temporele validatie voor NO_2 : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R^2 . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse.

Target indicator

Op basis van de target indicator, die in essentie een combinatie is van de RMSE en de BIAS, krijgen we een gelijkaardig besluit als op basis van de standaard indicatoren, met beide RIO varianten die het best scoren (kleinste target waarde). Het is ook duidelijk dat onder de AURORA varianten de Optimal Interpolation correctie methode de grootste meerwaarde biedt. Deze methode geeft consistent de grootste verbetering overheen de stations. Dit is af te leiden uit de box plot getoond in Figuur 26, waarin duidelijk wordt dat voor de andere correctie methoden relatief gezien meer spreiding t.o.v. de ruwe AURORA resultaten geïntroduceerd wordt. Voor bepaalde stations doen de andere correctie methoden (*aurbias*, *aurortho* en *aurkf*) het goed, maar voor een aantal stations relatief gezien iets minder goed, waardoor de boxplots breder worden. Daarnaast lijkt de orthogonale regressie techniek ook de meeste outliers te genereren. Hierop wordt later terug gekomen. Verder kan worden opgemerkt dat alle modellen en hun varianten gemiddeld gesproken binnen de cirkel met straal 1 liggen, wat erop duidt dat ze een meerwaarde bieden t.o.v. een eenvoudig gemiddelde. Opnieuw zijn de conclusies onafhankelijk van het feit of we alle Belgische stations selecteren (Figuur 26) of enkel de Vlaamse (Figuur 27).



Figuur 26: Temporele validatie NO₂: Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

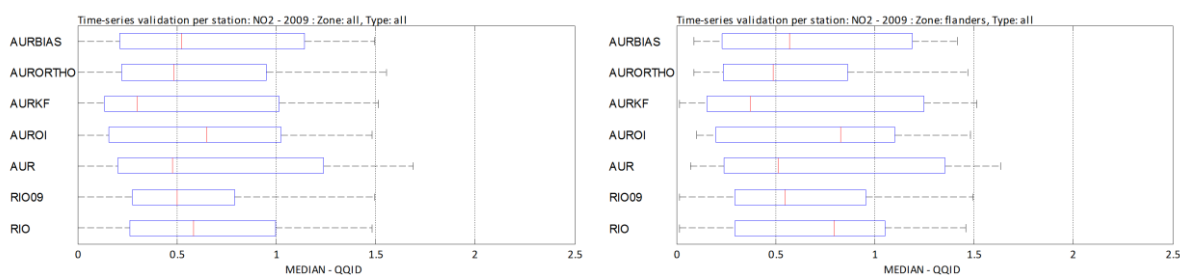


Figuur 27: Temporele validatie NO₂: Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

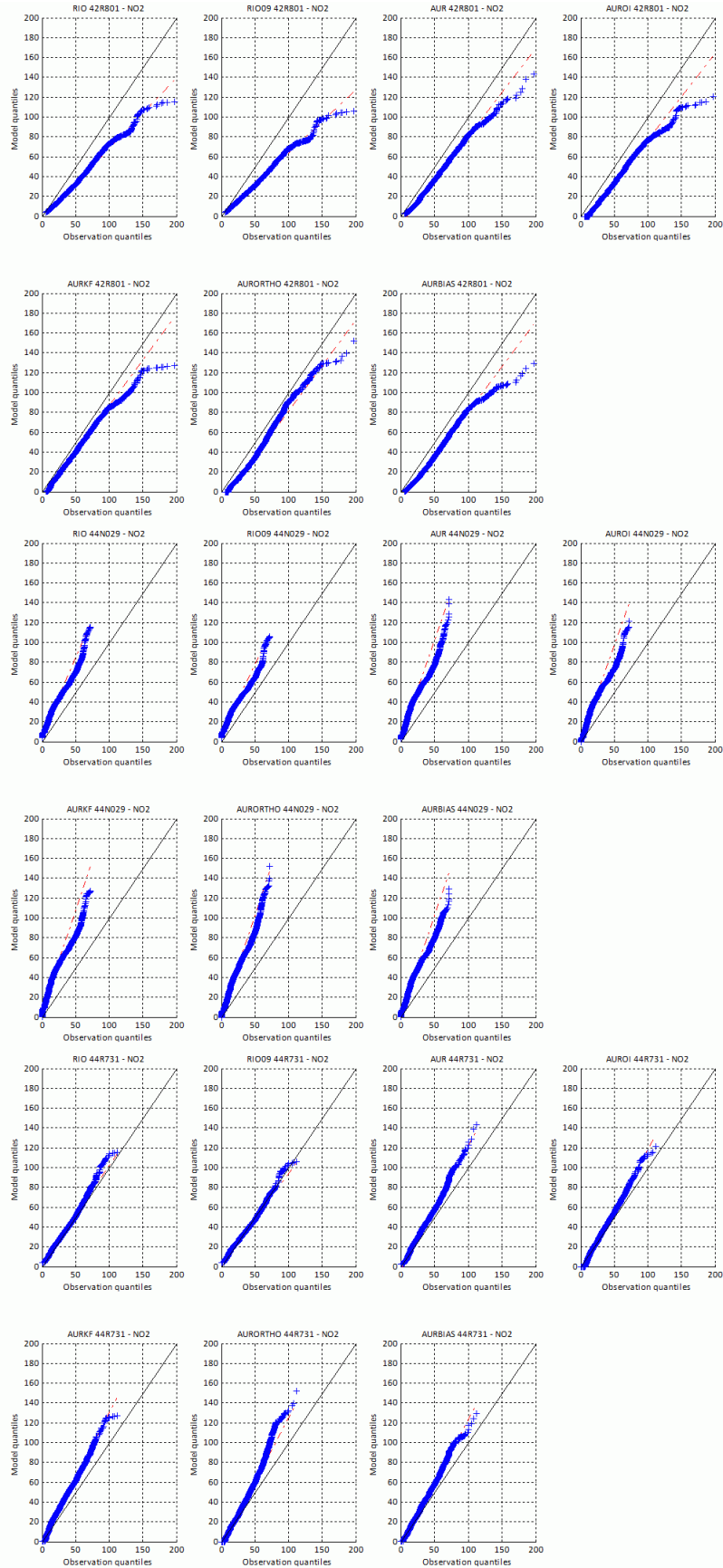
QQ Plot en QQ-indicator

Omdat het niet mogelijk is om voor ieder station de QQ plot op te nemen, worden enkel een aantal voorbeelden getoond, zie Figuur 29. Volgende stations worden hiervoor geselecteerd: Borgerhout (42R801) als typisch stedelijk station, Houtem (44N029) als ruraal station aan de kust en Evergem (44R731) in de Gentse haven als industrieel station. Deze plots kunnen niet veralgemeend worden, maar op zich geven de QQ plots van deze 3 verschillende stations toch reeds aan dat het voor wat betreft NO₂ niet mogelijk is een eenduidige lijn tussen de modellen te vinden. Dit wordt verder gestaafd door de boxplots van de QQ indicator (Figuur 28), die een relatief brede range bestrijken. Er kan gesteld worden dat de mediaan van de QQ indicator voor AURORA met Optimal Interpolation en RIO het hoogst is, wat er op wijst dat deze modellen relatief gezien de staart van de distributie van de observaties beter kunnen reproduceren. De significantie van deze uitspraak is echter relatief beperkt.

Ook valt op dat de QQ plots alle richtingen kunnen uitgaan. Voor Borgerhout (stedelijk station) is voor alle modellen de distributie van de modelwaarden minder uitgesproken naar hogere concentraties toe, wat duidt op het ontbreken van gemeten lokale effecten in de 4x4 km² modellering. Voor Houtem is dit net andersom en gaan de modellen meer hogere concentraties genereren, terwijl in de observaties iets minder “extreme” waarden gaan voorkomen. Voor Evergem lijkt het RIO model nagenoeg perfect de distributie van de gemeten NO₂ concentraties te kunnen reproduceren.



Figuur 28: Temporele validatie voor NO₂: QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts).

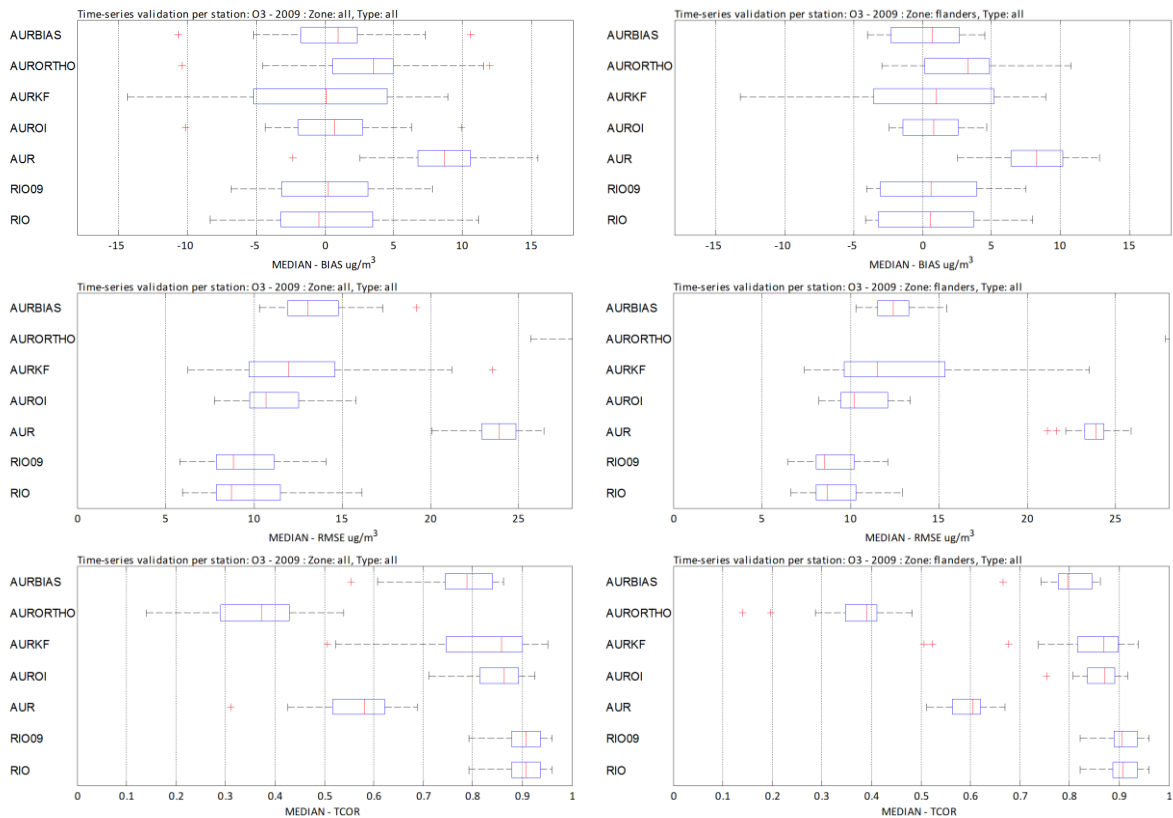


Figur 29: Voorbeeld NO₂ QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Evergem (onder).

Temporele Validatie O₃

Bias, RMSE, R²

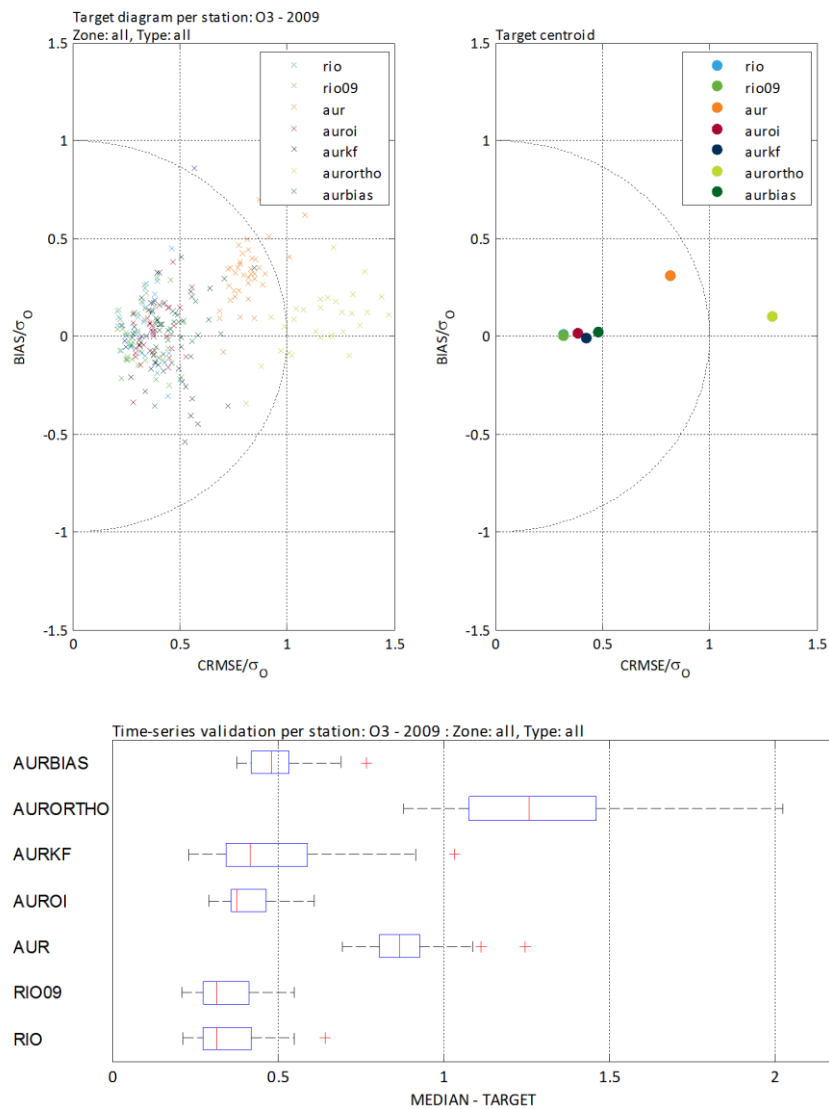
De validatie voor O₃ geeft gelijkaardige resultaten als de validatie voor NO₂ die hierboven besproken werd. Het RIO model komt er op basis van de standaard indicatoren opnieuw als beste uit, met een mediaan BIAS van ongeveer 0, en een mediaan RMSE van ongeveer 8 µg/m³. De mediaan over de stations van de temporele correlatie coëfficiënt (R²) is voor RIO boven de 0.9, met een relatief kleine spreiding. Voor O₃ gaat de orthogonale regressie toegepast op de ruwe AURORA volledig de mist in, met resultaten die consistent slechter zijn dan de ruwe AURORA resultaten zelf. De conclusies zijn opnieuw consistent voor België en Vlaanderen.



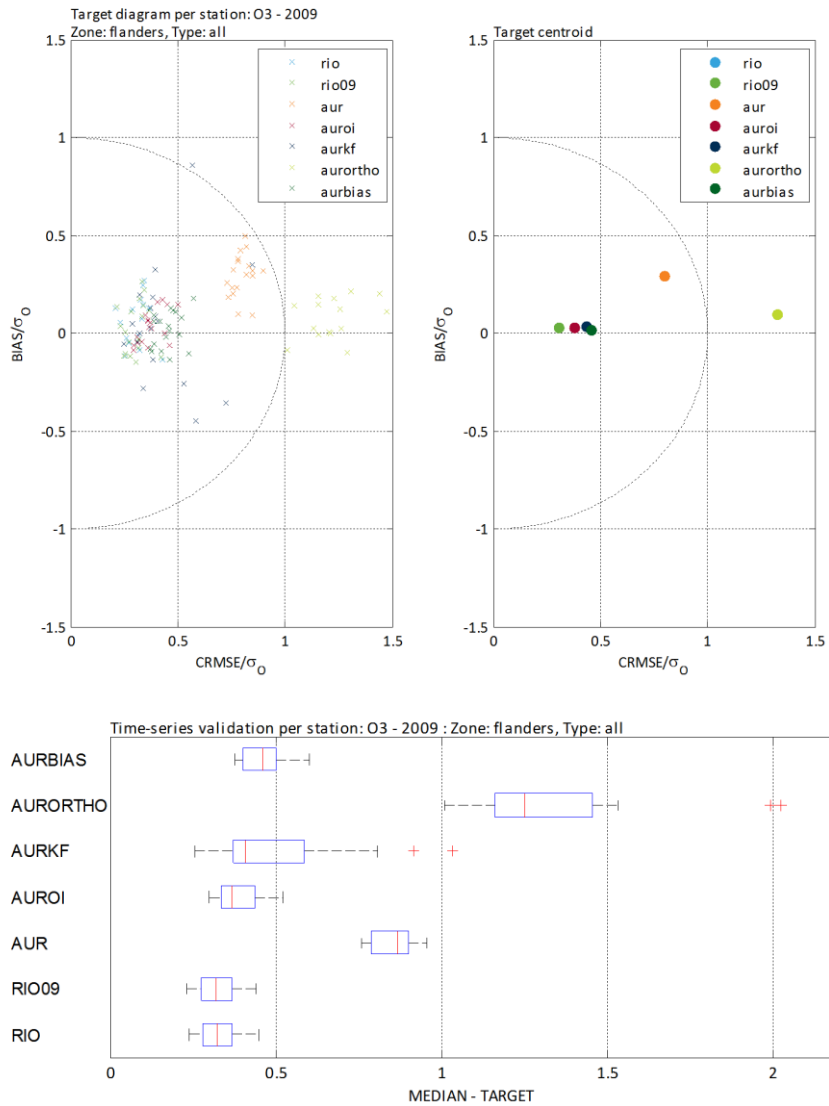
Figuur 30: Temporele validatie voor O₃: van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R². In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse.

Target indicator

De target plots getoond in Figuur 31 en Figuur 32 bevestigen bovenstaande conclusies voor O_3 . Opvallend is dat voor het AURORA model gecorrigeerd met de orthogonale regressie techniek het 'gemiddelde punt' buiten de cirkel ligt. Hieruit kan besloten worden dat deze techniek geenszins mag toegepast worden voor O_3 . Van de overige modellen, die wel allemaal binnen de cirkel liggen, scoren de ruwe AURORA resultaten het slechtst, zowel op basis van genormaliseerde BIAS als op basis van CRMSE. Voor de gecorrigeerde modellen is het voornamelijk de CRMSE die voor de verschillen zorgt. De situatie is verder ook relatief gelijkaardig op Belgische en Vlaamse niveau.



Figuur 31: Temporele validatie O_3 : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

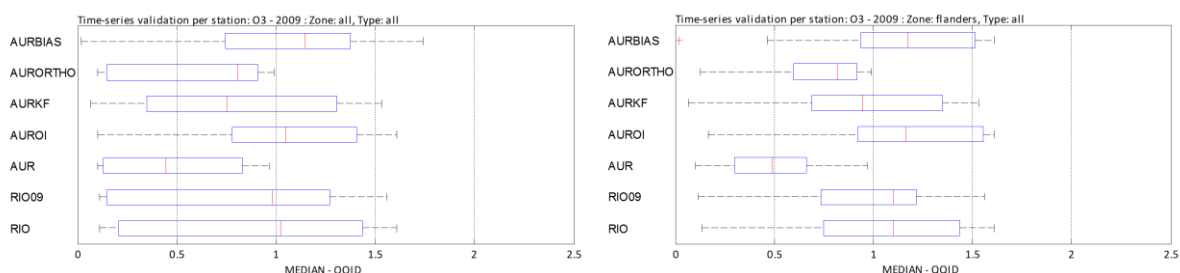


Figuur 32: Temporele validatie O₃: Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

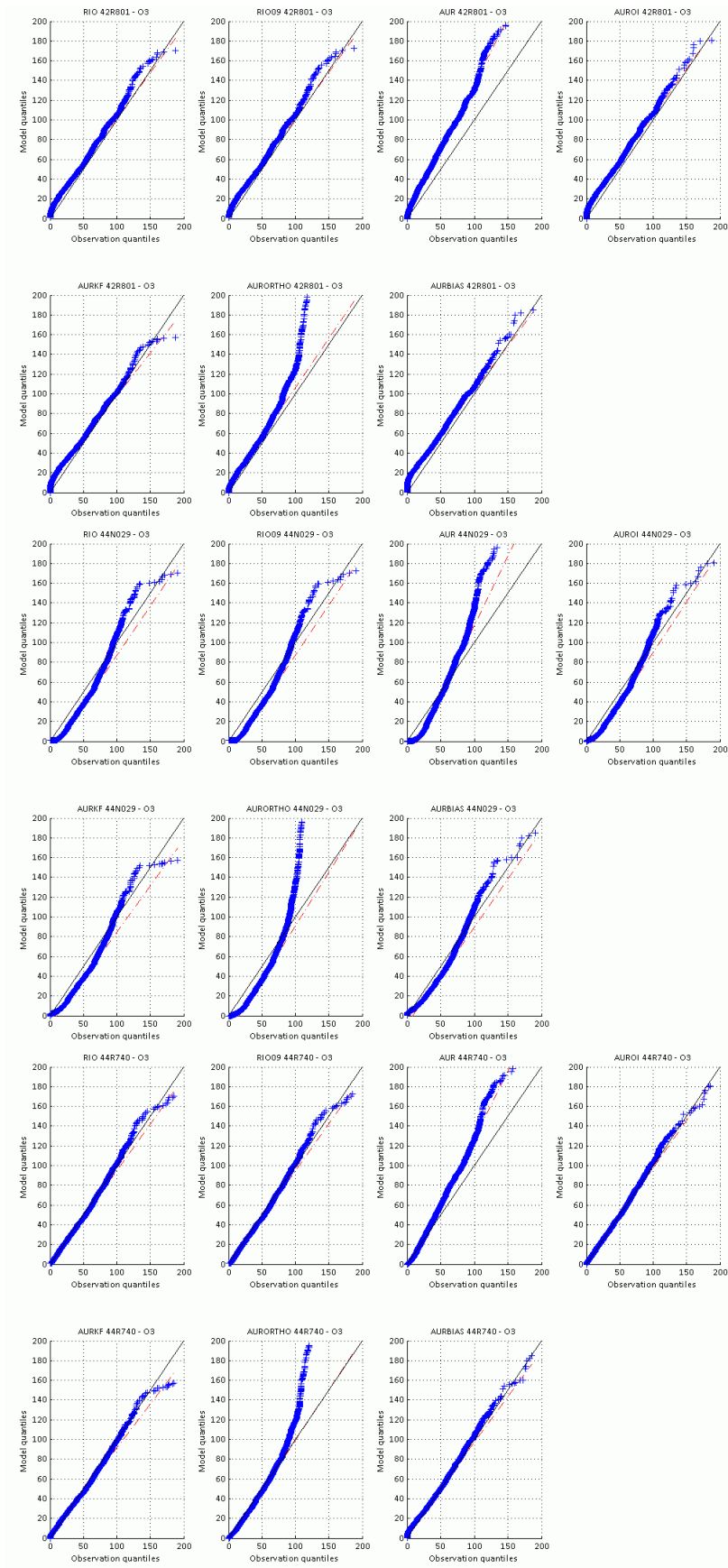
QQ Plot en QQ-indicator

Net als voor NO_2 , worden enkel een aantal voorbeelden van QQ plots getoond, zie Figuur 34. Voor O_3 werden volgende stations geselecteerd: Borgerhout, Houtem en Sint-Kruiswinkel (geen O_3 in Evergem). In Figuur 33 worden de boxplots van de QQ-indicator getoond.

Opnieuw is zowel uit de QQ plots zelf als uit de boxplots van de QQ indicator overheen de verschillende stations geen echt duidelijke lijn te trekken. De mediaan van de QQ indicator is voor RIO, AURORA gecorrigeerd met de Optimal Interpolation en AURORA gecorrigeerd met eenvoudige BIAS correctie het hoogst, wat erop wijst dat deze modellen de extremen goed gereproduceerd krijgen. Voor de RIO modellen valt in de boxplot voor alle Belgische stations wel de grote interkwartiel afstand, en dus variatie in de QQ index voor de verschillende stations onderling op. Op Vlaams niveau is dit veel minder het geval. Verder onderzoek zou hier de achterliggende redenen voor kunnen achterhalen, maar valt buiten het kader van dit project.



Figuur 33: Temporele validatie voor O_3 : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts).

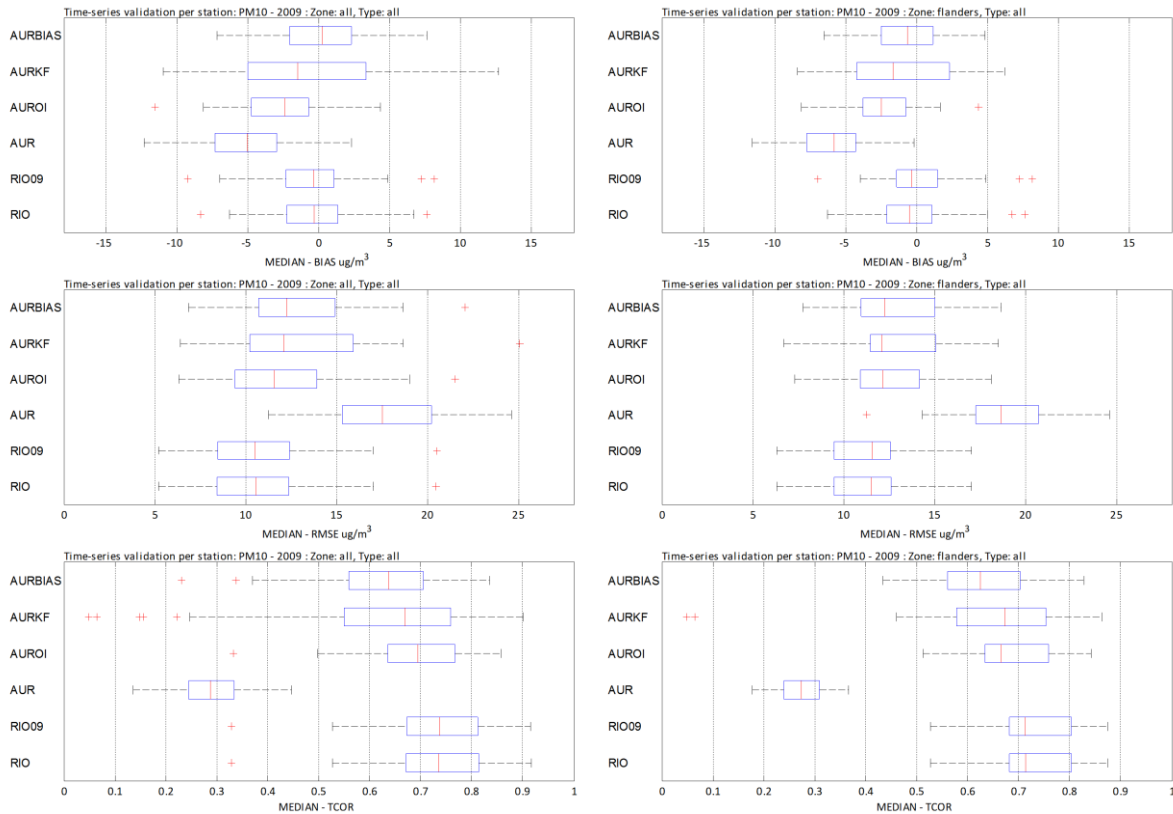


Figur 34: Voorbeeld O₃ QQ plots voor Borgerhout (boven), Houtem (midden) en Sint-Kruiswinkel (onder).

Temporele Validatie PM_{10}

Bias, RMSE, R^2

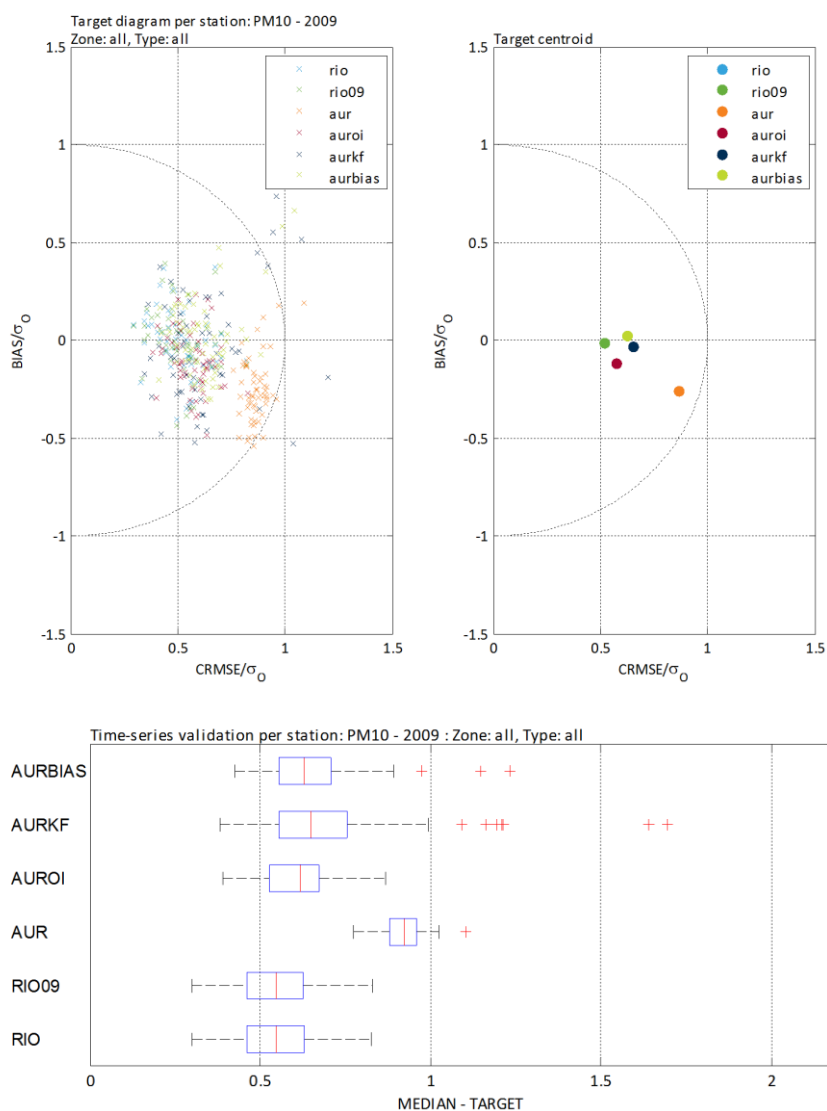
De validatie voor PM_{10} geeft gelijkaardige resultaten als de validatie voor NO_2 en O_3 die hierboven besproken werd. Het RIO model komt er op basis van de standaard indicatoren opnieuw als beste uit, gevolgd door het AURORA model gecorrigeerd met eenvoudige biascorrectie en met 'Optimal Interpolation'. Voor de BIAS blijkt een eenvoudige biascorrectie net iets beter te presteren dan de 'Optimal Interpolation', die dan weer beter presteert op basis van RMSE en temporele R^2 . De RMSE is voor alle modellen wel consistent hoger dan $10 \mu g/m^3$ en enkel RIO slaagt er gemiddeld gezien in om meer dan 70 % van de temporele variabiliteit te verklaren.



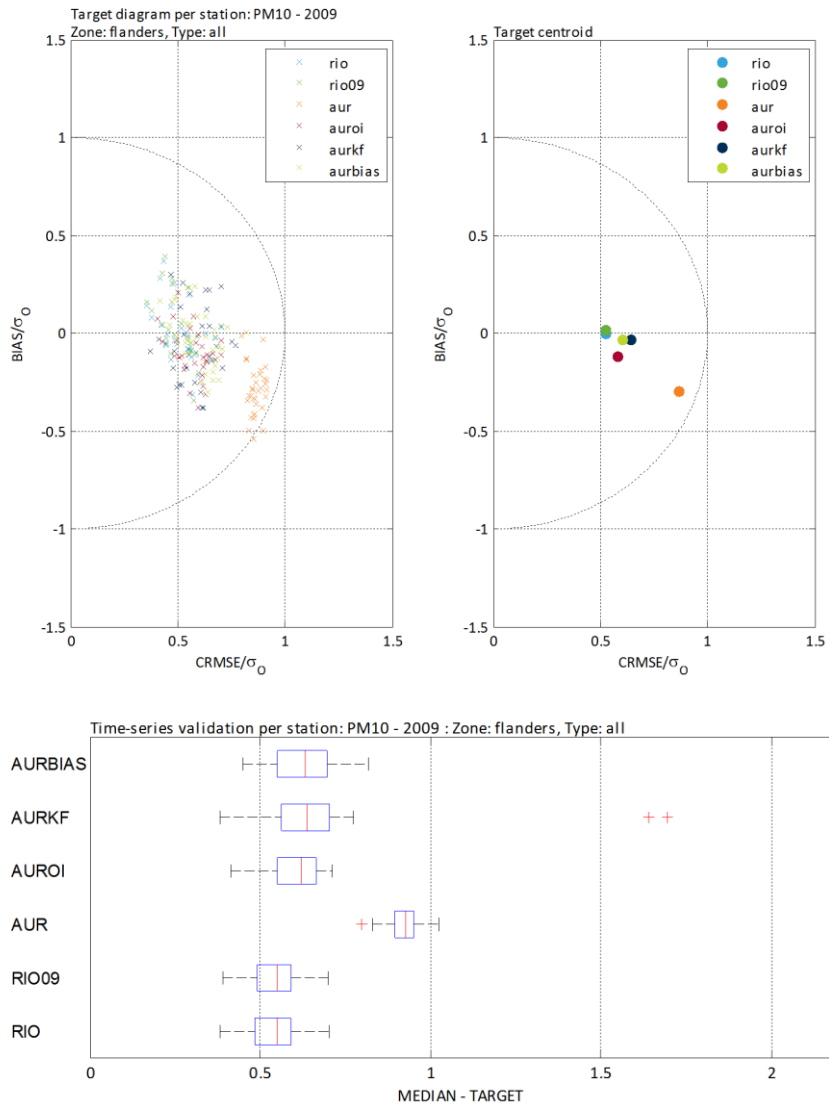
Figuur 35: Temporele validatie voor PM_{10} : van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R^2 . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse.

Target indicator

De target plots getoond in Figuur 36 en Figuur 37 bevestigen bovenstaande conclusies voor PM_{10} : op basis van de combinatie van genormaliseerde BIAS en CRMSE (cfr. definitie target plot) presteert RIO het best en presteren AURORA gecorrigeerd met 'Optimal Interpolation' en met eenvoudige biascorrectie equivalent. Dit is een interessante observatie om even bij stil te staan. Uit de duidelijk negatieve BIAS waarde van de ruwe AURORA resultaten volgt dat het AURORA model de PM_{10} concentraties onderschat. Een eenvoudige biascorrectie telt uur per uur de gemiddelde fout t.o.v. de metingen op bij het modelresultaat en dit op een ruimtelijk uniforme manier. Het 'Optimal Interpolation' schema daarentegen probeert een zekere ruimtelijke afhankelijkheid in de correctie te introduceren, door rekening te houden met de afstand tot de meetstations op basis waarvan de correctie berekend wordt. Het feit dat dit slechts gelijkaardige resultaten oplevert t.o.v. de eenvoudige BIAS correctie wijst erop dat er niet veel ruimtelijke afhankelijkheid aanwezig is in de residu's voor PM_{10} . Met andere woorden, het is niet omdat een model de concentratie in één station onderschat, dat ook de concentraties in de naburige stations onderschat zullen worden. Hierover kan a priori geen uitspraak gedaan worden. Het ontbreken van ruimtelijke structuur in de residu's, kan een aanwijzing zijn voor ontbrekende, lokale informatie (emissies, resuspensie) in de oorspronkelijke ruwe AURORA runs. Opnieuw is de situatie gelijkaardig voor de Vlaamse als Belgische stations.



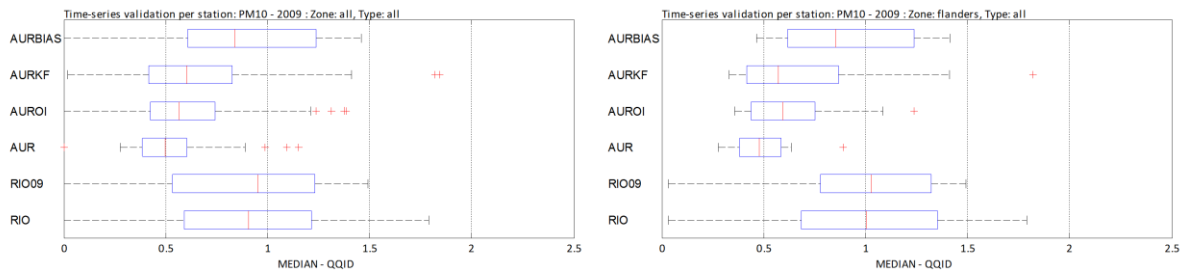
Figuur 36: Temporele validatie PM_{10} : Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.



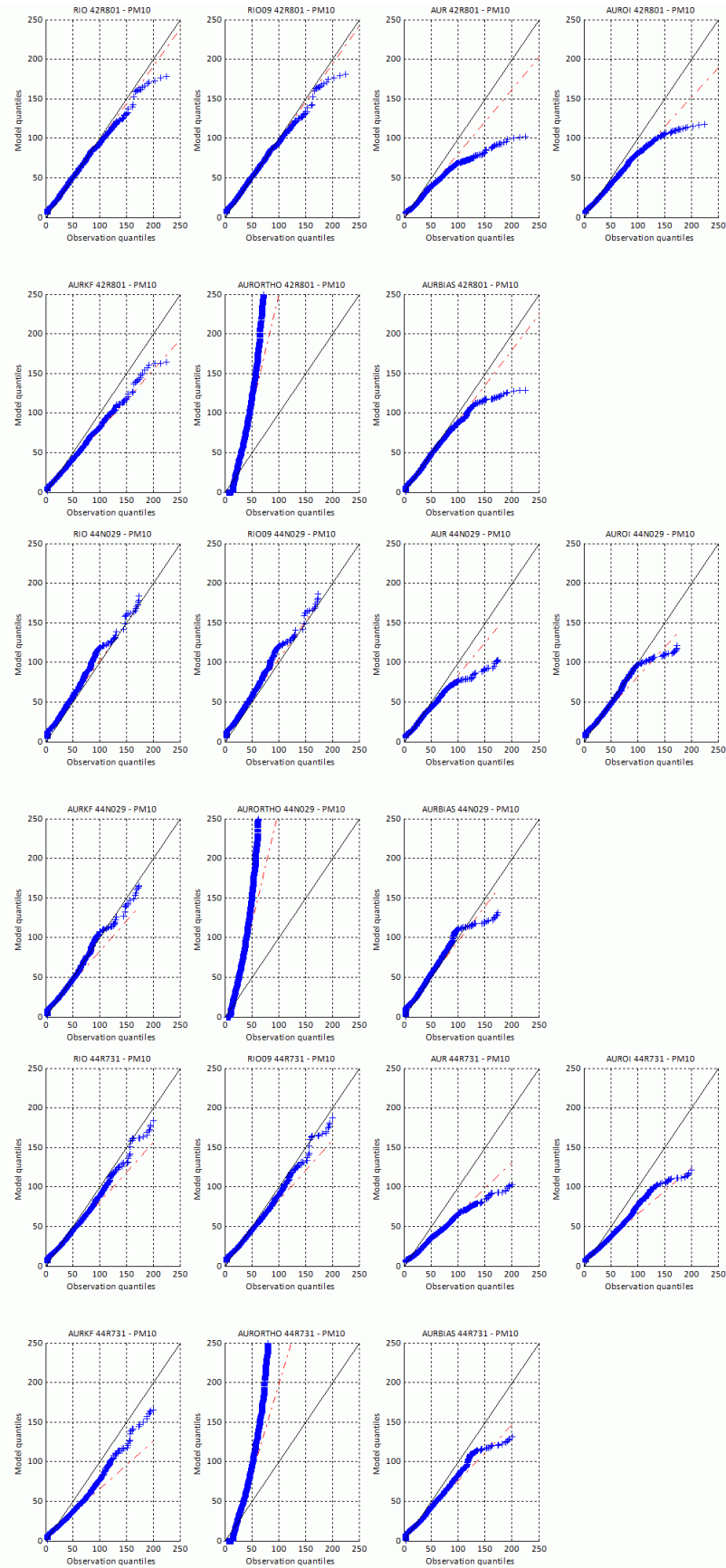
Figuur 37: Temporele validatie PM_{10} : Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

QQ Plot en QQ-indicator

Voor PM_{10} worden net als voor NO_2 de QQ plots voor Bergerhout, Houtem en Evergem getoond (zie Figuur 39). In deze plots valt op dat de QQ plots voor RIO beter lijken dan voor de andere modellen. Uiteraard is deze uitspraak enkel gebaseerd op de 3 afgebeelde stations. Voor beide RIO varianten volgen de QQ plots de $x=y$ lijn relatief goed tot hoge concentraties. Voor de AURORA modellen en hun varianten is een duidelijk afvlakking bij hogere concentraties waarneembaar. Dit wijst erop dat deze modellen er minder goed in slagen de staart van de concentratie distributie voor de stations te reproduceren. De QQ-indicator getoond in (Figuur 38).



Figuur 38: Temporele validatie voor PM_{10} : QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts).

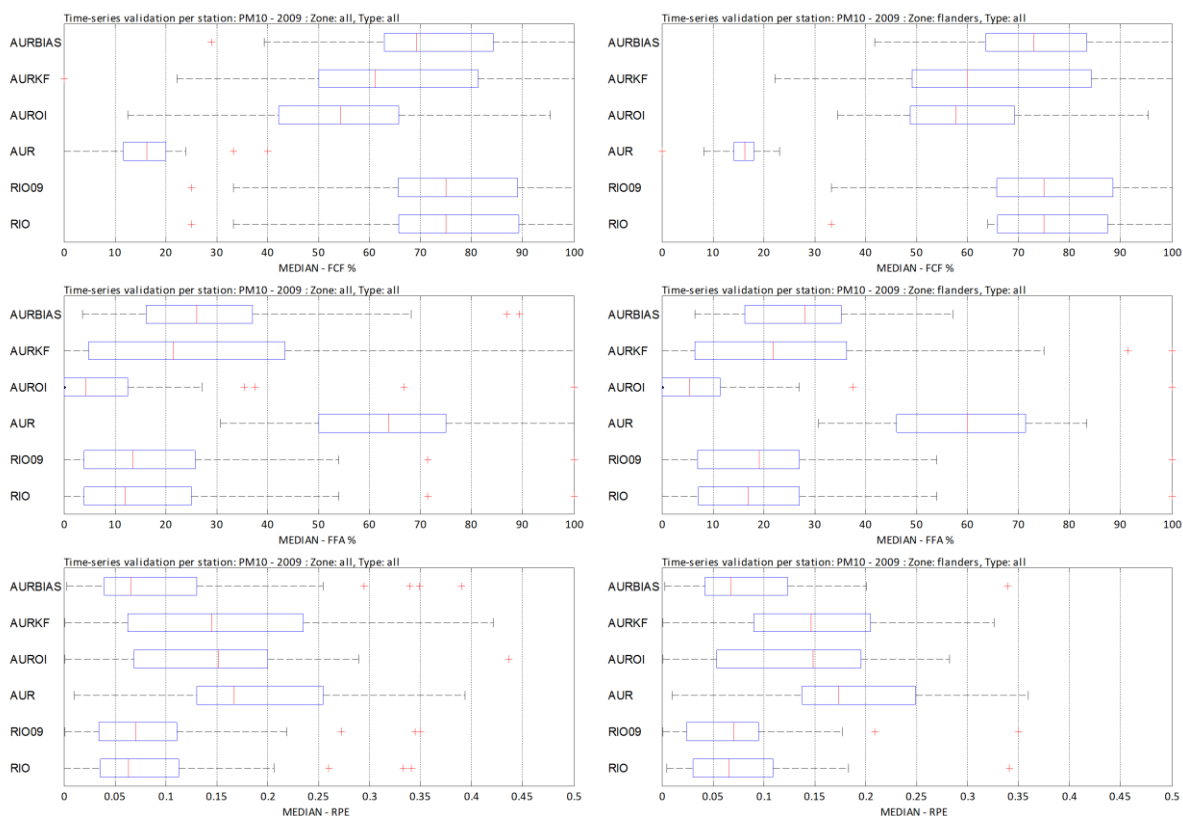


Figuur 39: Voorbeeld PM_{10} QQ plots voor *Borgerhout* (boven), *Houtem* (midden) en *Evergem* (onder).

Overschrijdingsindicatoren: RPE, FFA en FCF

Anders dan voor NO_2 en O_3 (en ook $\text{PM}_{2.5}$) kunnen de QQ plots en bijhorende indicator voor PM_{10} ook geïnterpreteerd worden op basis van enkele overschrijdingsindicatoren die te maken hebben met de PM_{10} dagnorm van $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Dit wordt hieronder besproken.

In Figuur 40 worden voor PM_{10} nu de relative percentile error (RPE), de fraction of false alerts (FFA) en de fraction of correct forecasts (FCF) overeenkomstig met de dagnorm van $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ getoond. Uit de analyse van de QQ plots en indicator van vorige paragraaf bleek RIO het best de extreme waarden van de distributie te reproduceren. Dit vertaalt zich duidelijk in onderstaande indicatoren.



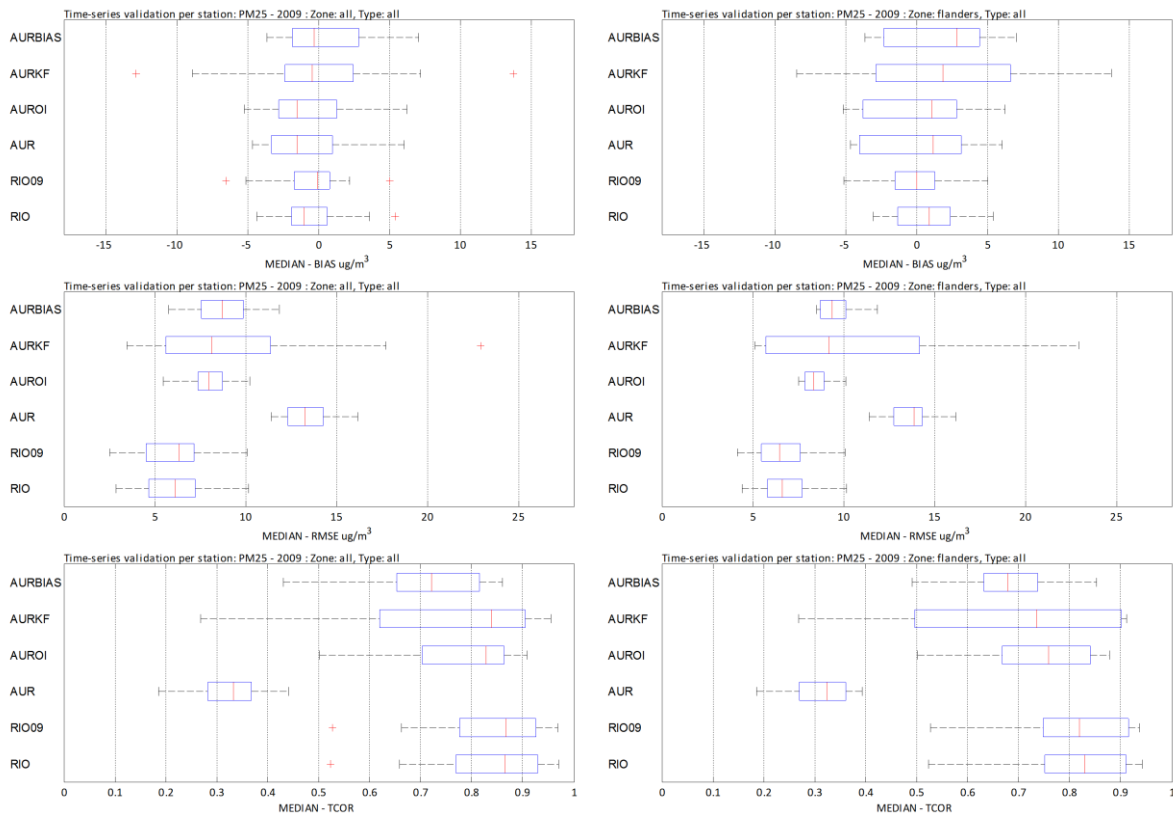
Figuur 40: Temporele validatie PM_{10} : statistische indicatoren relevant voor het aantal overschrijdingen van de dagnorm PM_{10} van $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$, links opnieuw de boxplots voor alle stations in België, rechts enkel voor de Vlaamse stations. Van boven naar onder hebben we de FCF, FFA en de RPE.

Zowel over de Vlaamse als over de Belgische stations slaagt RIO erin meer dan 70 % van de overschrijdingen te reproduceren (coincident) en gemiddeld gesproken in slechts iets meer dan 10 % van de gevallen zal RIO een overschrijding genereren indien er geen overschrijding gemeten wordt (FFA). Ook de RPE is het kleinst voor het RIO model (mediaan 6-7%). Wanneer de AURORA varianten onderling vergeleken worden, valt op dat de 'Optimal Interpolation' techniek iets "smoother" tijdsreeksen genereert. Dit uit zich in het feit dat zowel de FFA als de FCF laag zijn (lager dan RIO). Dit is zeker opvallend t.a.v. de AURORA met biascorrectie variant die een iets hogere FFA en ook een hogere FCF.

Temporele Validatie $PM_{2.5}$

Bias, RMSE, R^2

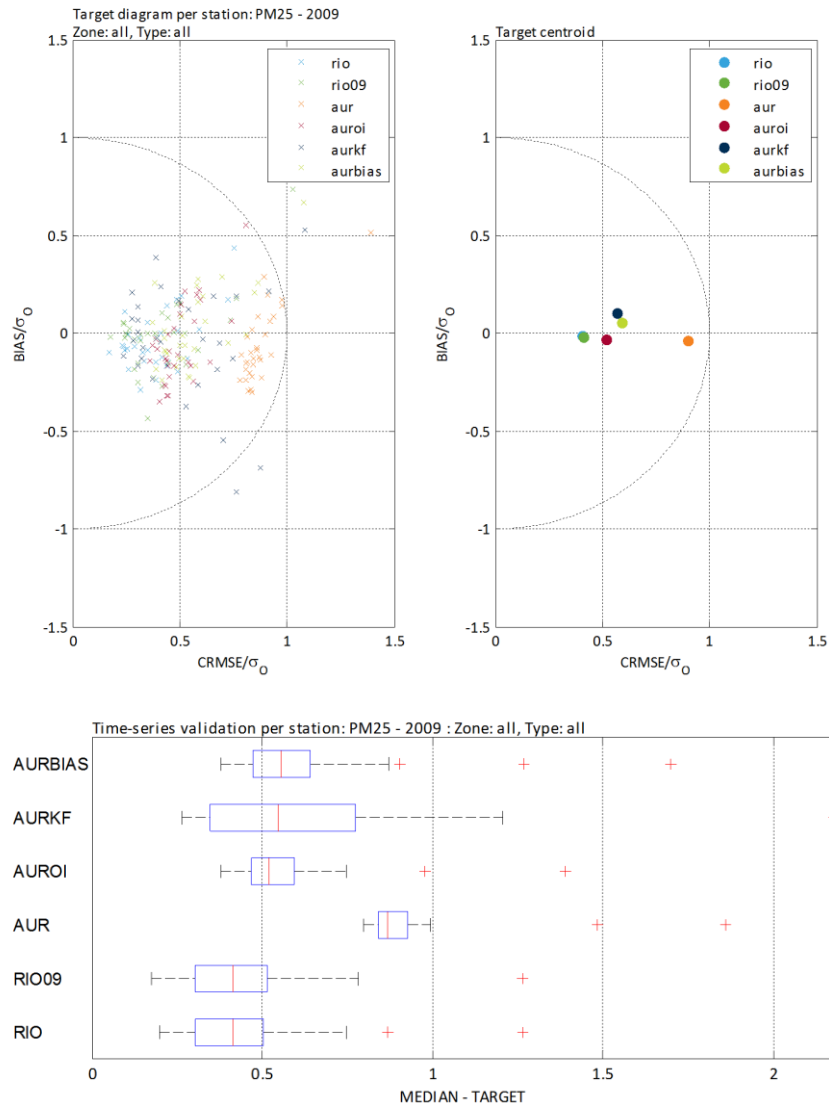
Voor $PM_{2.5}$ gelden analoge besluiten als voor PM_{10} . Voor de traditionele indicatoren scoort het RIO model ook hier het best, met een lage mediaan voor de BIAS ($\sim 0 \mu\text{g}/\text{m}^3$), een lage mediaan RMSE ($\sim 6 \mu\text{g}/\text{m}^3$) en een relatief hoge verklaarde temporele R^2 (boven de 80 %). Het ruwe AURORA model presteert het slechtst. Vergelijking van de AURORA varianten geeft aan dat de 'Optimal Interpolation' correctie methode misschien net iets beter lijkt te doen dan de eenvoudige bias correctie.



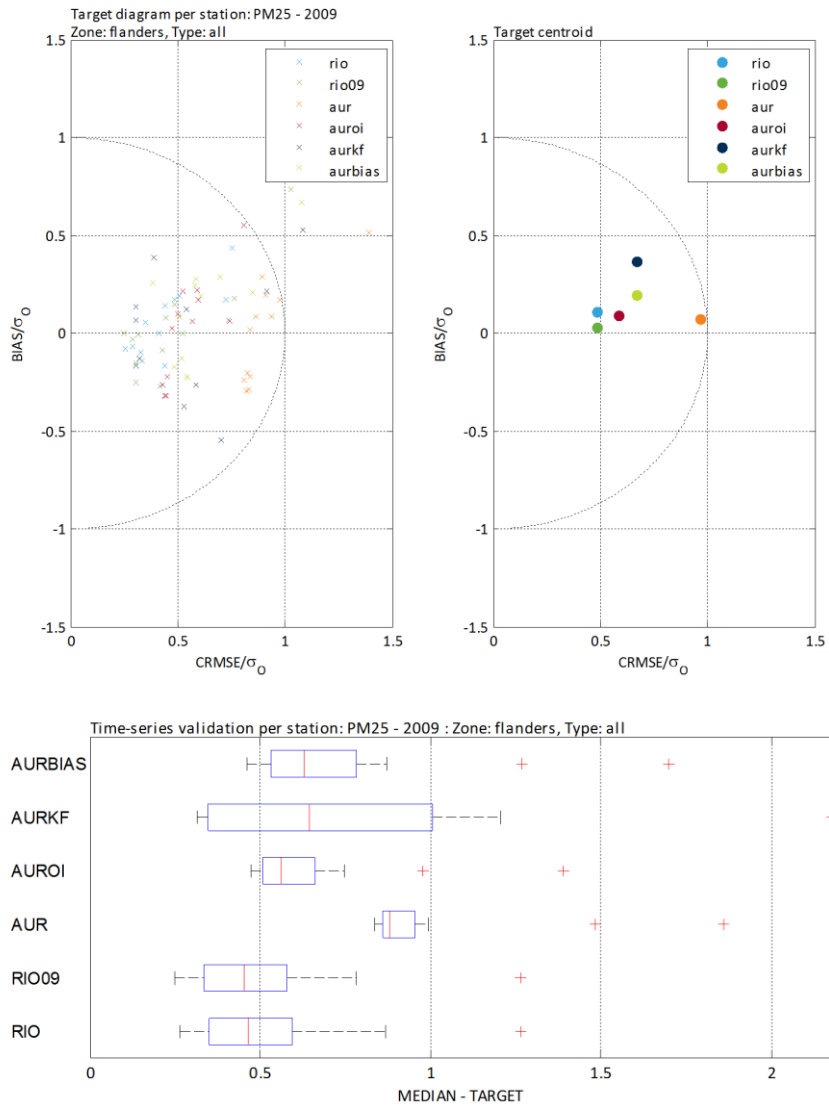
Figuur 41: Temporele validatie voor $PM_{2.5}$: van boven naar onder: BIAS, RMSE en temporele R^2 . In de linker kolom zijn de boxplots voor alle Belgische stations opgenomen, rechts enkel voor de Vlaamse.

Target indicatoren

De target plots getoond in Figuur 42 en Figuur 43 bevestigen bovenstaande conclusies voor $PM_{2.5}$: op basis van de combinatie van genormaliseerde BIAS en CRMSE (cfr. definitie target plot) presteert RIO het best en presteren AURORA gecorrigeerd met 'Optimal Interpolation' en met eenvoudige biascorrectie equivalent. Gemiddeld gesproken vallen alle model terug binnen de cirkel.



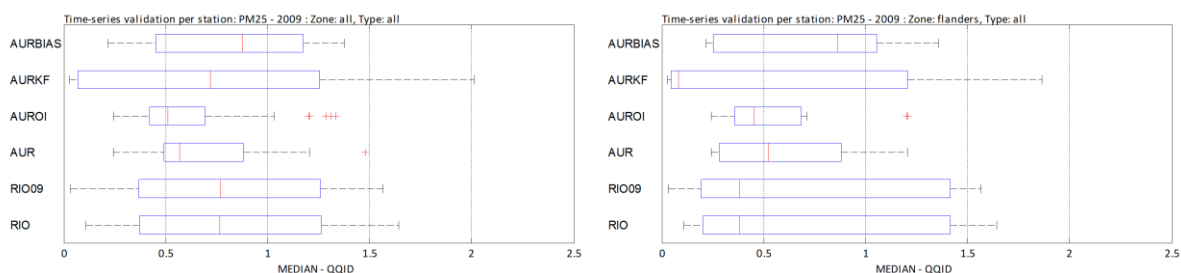
Figuur 42: Temporele validatie $PM_{2.5}$: Target plot voor alle Belgische stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.



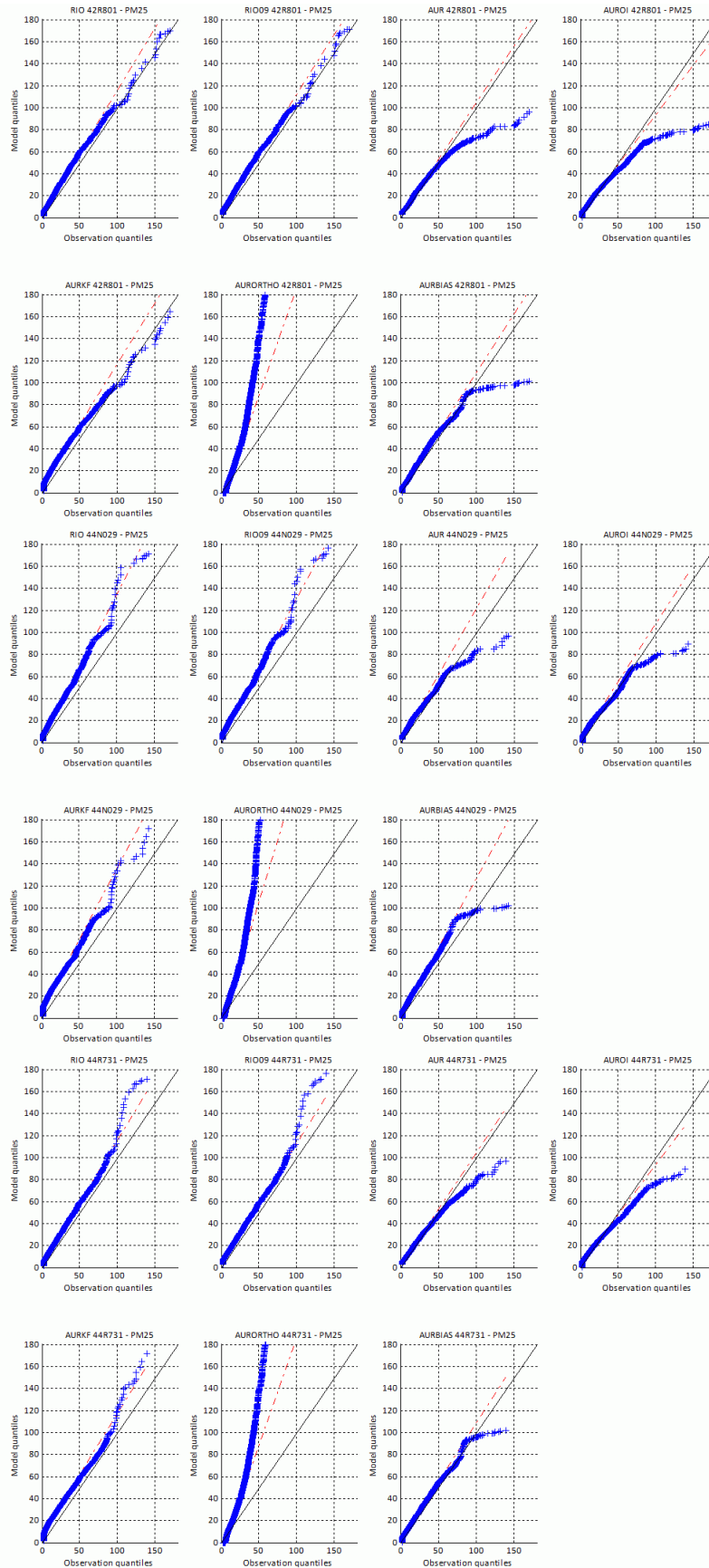
Figuur 43: Temporele validatie PM_{2.5}: Target plot enkel voor alle Vlaamse stations, zowel per station (links), als uitgemiddeld over alle stations per model (rechts). Onderaan is de target indicator zelf per model afgebeeld.

QQ Plot en QQ-indicator

In Figuur 45 worden opnieuw de QQ-plots voor de stations Bergerhout, Houtem en Evergem getoond. Opvallend is dat de QQ lijn voor de RIO modellen goed lineair blijft t.o.v. de $x=y$ lijn, maar dat ze systematisch een weinig verschoven is naar hogere modelquantielen, dit in tegenstelling tot AURORA en AURORA plus 'Optimal Interpolation' waar de QQ lijn wel vanaf de oorsprong de $x=y$ lijn volgt, maar dan wel afvlakt naar hogere gemeten concentraties toe. Het interessant kunnen zijn dit fenomeen verder te bestuderen ter verbetering van het RIO- $PM_{2.5}$ model. Dit is meteen ook de verklaring waarom de QQ indicator, getoond in Figuur 44 een relatief brede interkwartiel afstand vertoont t.o.v. de AURORA plus 'Optimal Interpolation' techniek.



Figuur 44: Temporele validatie voor $PM_{2.5}$: QQ-indicator, boxplot over alle Belgische stations (links), en enkel de Vlaamse stations (rechts).



Figur 45: Voorbeeld $PM_{2.5}$ QQ plots voor Bergerhout (boven), Houtem (midden) en Evergem (onder).

Kwantitatieve vergelijking temporele validatie: scoretabel

Om een overzicht te bekomen van welk model per pollutant het best/slechtst presteert in de temporele validatie (over alle indicatoren heen) moet op één of andere manier een score toegekend worden aan de individuele statistische indicatoren. Dit kan op verschillende manieren gebeuren, waarbij elke manier zijn voor- en nadelen heeft.

Een eerste, eerder naïeve insteek, zou kunnen zijn dat men per indicator de modellen in eerste instantie rangschikt volgens de validatie-waarden voor die indicator, waarbij per model de mediaan over de verschillende stations als representatieve validatie-waarde wordt genomen. Vervolgens kent men aan ieder model een score toe: het beste model bvb een 5, het tweede beste een 4 Tot slot sommeert men per model de scores over de verschillende statistische indicatoren en rangschikt men de modellen opnieuw, deze keer op basis van de 'som-indicator'. Het hoogst gerangschikte model zou op die manier overeenkomen met het best presterende model.

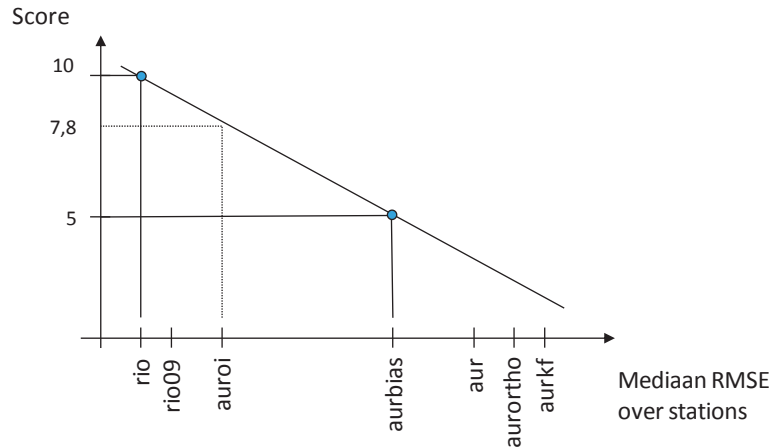
Door op deze wijze de temporele validatie te synthetiseren gaan echter een aantal nuances verloren. Zo zullen twee modellen die relatief gelijkaardig scoren op dezelfde manier ten opzichte van elkaar worden afgewogen als twee modellen waarvoor de verschillen veel groter zijn. Om dit te verhelpen moeten de scores op één of andere manier geschaald worden met de validatie-waarden van de statistische indicatoren zelf. Dit zou immers impliceren dat modellen en technieken waarvan de statistische indicatoren relatief dicht bij elkaar liggen, relatief gelijkaardige scores toegekend krijgen.

Op zich kunnen de scores bepaald worden op basis van de statistische indicatoren, die geschaald worden tussen de beste en slechtste waarde, die dan bvb 10 en 0 krijgen. Ook deze methode kan echter een vertekend beeld geven, bijvoorbeeld in het geval van 'geclusterde' statistische indicatoren met een model dat er bovenuit springt of aan de staart bengelt.

Na wat 'trial-and-error' werd volgende systematiek ontwikkeld:

- Scores worden per model en per statistische indicator gebaseerd op de **mediaan** over de statistische indicatoren per station.
- Per indicator worden aan het **best scorende model 10 punten** toegekend. Voor de BIAS, RMSE, Target ... betekent dit dat de 10 punten worden toegekend aan het model met de laagste mediaanwaarde; voor bijvoorbeeld de temporele R^2 of de QQ-indicator aan het model met de hoogste mediaanwaarde. Merk op dat voor de BIAS de absolute waarde van de BIAS genomen wordt.
- Per indicator worden aan de **mediaan** van de indicatoren **over de modellen 5 punten** toegekend. Dit kan gelijk zijn aan een welbepaalde waarde voor een model indicator, waardoor een model effectief de score 5 krijgt, of gelijk aan het gemiddelde van 5 waarden (even aantal modellen), waardoor geen enkel model effectief de score 5 toegekend krijgt.
- Tot slot worden **de statistische indicatoren per model herschaald tussen 0 en 10** op basis van het lineair verband tussen het model met score 5 en 10. Scores die lager dan 10 uitvallen worden op 0 gezet.

Bovenstaande systematiek wordt geïllustreerd in de grafiek getoond in Figuur 46.



Figuur 46: Grafiek ter illustratie van de systematiek die gebruikt wordt voor het opstellen van scoretabellen. De modellen worden op een horizontale as gerangschikt volgens de mediaan over een statistische indicator (RMSE in dit voorbeeld). Een score 10 wordt toegekend aan het beste model en een score 5 aan de mediaan over de modellen. In dit geval, gezien het oneven aantal modellen, komt dit overeen met de waarde van de aurbias techniek. Beide scores en RMSE waarden bepalen een rechte, die de scores voor de andere modellen vastlegt.

Bij bovenstaande score systematiek dienen enkele belangrijke opmerkingen gemaakt te worden.

De belangrijkste opmerking is dat de beschreven systematiek slechts een eerste insteek is en de manier van toekennen van scores allicht voor verbetering vatbaar is. Zo kan het volgens de huidige systematiek bijvoorbeeld zijn dat modellen een score 0 toegekend krijgen, terwijl deze modellen weldegelijk kwalitatieve informatie kunnen aanreiken. Het dient dan ook duidelijk gezegd dat deze manier van toekennen van scores een methode is om een 'ranking' tussen de modellen op te stellen en niet om een individueel model op z'n waarde te beoordelen.

Een alternatieve systematiek zou kunnen om een absolute score toe te kennen, gebaseerd op een mapping per statistische indicator, bijvoorbeeld: RMSE tussen 0 en 2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ krijgt 5 punten, tussen 2 en 4: 4 punten, tussen 4 en 6: 3 punten, tussen 6 en 8: 2 punten, tussen 10 en 15: 1 punt en hoger dan 15 $\mu\text{g}/\text{m}^3$: 0 punten; analoog voor R^2 bijvoorbeeld, waar dan een waarde tussen 0.9 en 1.0 een 5 krijgt, tussen 0.8 en 0.9 een 4 enz. Het voordeel hiervan zou zijn dat elk model dan op z'n effectieve waarde beoordeeld wordt. Een nadeel is dan weer dat de 'ranking' opnieuw afhankelijk wordt van subjectief gekozen intervallen die per statistische indicator worden toegekend. Er is immers geen objectief criterium om in te schatten hoeveel een RMSE meer "waard" is dan een R^2 of een overschrijdingsindicator. Dit hangt af van de context en de toepassing van het model.

Verder moet opgemerkt worden dat we bij deze systematiek enkel rekening gehouden wordt met de mediaan van elke statistische indicator over de stations. Op zich bevatten de boxplots veel meer informatie dan dit en zou het bijvoorbeeld lonen om in een score-analyse ook informatie over de interquartiel afstand van elke statistische indicator mee te nemen. Dit heeft dan weer het nadeel dat het ons wat ver zou leiden om tot een conclusie te komen van de temporele validatie die in feite relatief duidelijk is. In deze studie werd daarom de hierboven besproken systematiek voor het toekennen van scores gehanteerd.

In onderstaande tabellen worden de scores die per model werden afgeleid opgelijst. Voor NO_2 en O_3 worden alle technieken (rio, rio09, aur, auroi, aurkf, aurortho, aurbias) vergeleken, voor de fijn stof fracties werd de AURORA met orthogonale regressie achterwege gelaten wegens de overduidelijk slechte prestaties van deze techniek. Als statistische indicatoren worden telkens de BIAS, RMSE, temporele R^2 , de target waarde en de QQ indicator meegenomen.

Tabel 8: Scoretabel voor de temporele validatie voor NO₂

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auoi | aurkf | aurortho | aurbias |
|---------------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| NO2_MEDIAN_STATION_BIAS | 0 | 8.36 | 9.29 | 0.02 | 10.00 | 2.75 | 5.00 | 3.74 |
| NO2_MEDIAN_STATION_RMSE | 0 | 10.00 | 10.00 | 0.00 | 7.25 | 4.08 | 3.47 | 5.00 |
| NO2_MEDIAN_STATION_TCOR | 0 | 10.00 | 9.90 | 0.00 | 6.33 | 5.00 | 1.54 | 3.27 |
| NO2_MEDIAN_STATION_TARGET | 0 | 10.00 | 9.54 | 0.00 | 6.87 | 4.50 | 2.71 | 5.00 |
| NO2_MEDIAN_STATION_QQID | 0 | 7.78 | 5.00 | 4.23 | 10.00 | 0.00 | 4.37 | 5.82 |
| SCORE : | | 46.13 | 43.73 | 4.25 | 40.44 | 16.33 | 17.09 | 22.83 |

Tabel 9: Scoretabel voor de temporele validatie voor O₃

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auoi | aurkf | aurortho | aurbias |
|--------------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|
| O3_MEDIAN_STATION_BIAS | 0 | 7.28 | 8.83 | 0.00 | 5.00 | 10.00 | 0.00 | 2.74 |
| O3_MEDIAN_STATION_RMSE | 0 | 10.00 | 9.86 | 0.00 | 6.98 | 5.00 | 0.00 | 3.33 |
| O3_MEDIAN_STATION_TCOR | 0 | 9.98 | 10.00 | 0.00 | 5.61 | 5.00 | 0.00 | 0.00 |
| O3_MEDIAN_STATION_TARGET | 0 | 10.00 | 9.85 | 0.00 | 6.85 | 5.00 | 0.00 | 1.68 |
| O3_MEDIAN_STATION_QQID | 0 | 6.32 | 5.00 | 0.00 | 7.06 | 0.00 | 0.00 | 10.00 |
| SCORE : | | 43.58 | 43.54 | 0.00 | 31.51 | 25.00 | 0.00 | 17.75 |

Tabel 10: Scoretabel voor de temporele validatie van PM₁₀ (traditionele indicatoren)

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auoi | aurkf | aurbias |
|----------------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|
| PM10_MEDIAN_STATION_BIAS | 0 | 9.28 | 8.94 | 0.00 | 0.00 | 1.06 | 10.00 |
| PM10_MEDIAN_STATION_RMSE | 0 | 9.79 | 10.00 | 0.00 | 5.98 | 4.02 | 3.38 |
| PM10_MEDIAN_STATION_TCOR | 0 | 9.84 | 10.00 | 0.00 | 6.11 | 3.89 | 0.87 |
| PM10_MEDIAN_STATION_TARGET | 0 | 10.00 | 9.92 | 0.00 | 5.32 | 3.43 | 4.68 |
| PM10_MEDIAN_STATION_QQID | 0 | 9.02 | 10.00 | 0.11 | 1.58 | 2.40 | 7.60 |
| SCORE : | | 47.93 | 48.86 | 0.11 | 18.99 | 14.79 | 26.54 |

Tabel 11: Scoretabel voor de temporele validatie van PM₁₀ (overschrijdingsindicatoren)

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auoi | aurkf | aurbias |
|--------------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|-------------|--------------|
| PM10_MEDIAN_STATION_FFA | 0 | 7.10 | 6.46 | 0.00 | 10.00 | 3.54 | 1.78 |
| PM10_MEDIAN_STATION_FCF | 0 | 10.00 | 10.00 | 0.00 | 0.00 | 2.93 | 7.07 |
| PM10_MEDIAN_STATION_QQID | 0 | 9.02 | 10.00 | 0.11 | 1.58 | 2.40 | 7.60 |
| PM10_MEDIAN_STATION_RPE | 0 | 10.00 | 9.22 | 0.00 | 0.00 | 0.78 | 9.73 |
| SCORE : | | 36.12 | 35.67 | 0.11 | 11.58 | 9.66 | 26.18 |

Tabel 12: Scoretabel voor de temporele validatie van PM_{2.5}

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auoi | aurkf | aurbias |
|----------------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|
| PM25_MEDIAN_STATION_BIAS | 0 | 2.63 | 10.00 | 0.00 | 0.00 | 7.37 | 8.29 |
| PM25_MEDIAN_STATION_RMSE | 0 | 10.00 | 9.51 | 0.00 | 5.15 | 4.85 | 3.22 |
| PM25_MEDIAN_STATION_TCOR | 0 | 9.84 | 10.00 | 0.00 | 4.21 | 5.79 | 0.00 |
| PM25_MEDIAN_STATION_TARGET | 0 | 9.94 | 10.00 | 0.00 | 5.59 | 4.41 | 4.18 |
| PM25_MEDIAN_STATION_QQID | 0 | 5.84 | 5.90 | 0.00 | 0.00 | 4.16 | 10.00 |
| SCORE : | | 38.25 | 45.41 | 0.00 | 14.95 | 26.58 | 25.68 |

Uit bovenstaande tabellen blijkt overduidelijk dat, wat de temporele kwaliteiten van de modellen betreft, RIO als beste model naar voor komt, en dit zowel voor wat betreft de gewone indicatoren als voor de overschrijdings-gerelateerde indicatoren voor PM_{10} . Bovendien is er opvallend weinig verschil tussen RIO en de RIO 09 variant, wat erop duidt dat de trendfuncties die vastgelegd zijn op basis van lange termijngemiddelden relatief robuust zijn. Er zit bijgevolg weinig meerwaarde in het jaarlijks bijwerken van trendfuncties. Verder blijkt ook dat het ruwe AURORA model als slechtste model uit de analyse komt. Er kan dan ook gesteld worden dat een correctie of data-assimilatie techniek (hetzij 'Optimal Interpolation', bias correcties, Kalman Filter) nodig is met het AURORA model in de temporele validatie tot bevredigende resultaten te komen. Wanneer de verschillende correctie en data-assimilatie technieken voor AURORA vergeleken worden, dan wordt duidelijk dat het niet eenvoudig is om éénduidig, over de verschillende polluenten heen, een optimale techniek naar voor te schuiven, hoewel in de analyse van de boxplots toch veelal de 'Optimal Interpolation' techniek er als beste leek uit te komen.

Ruimtelijke Validatie

In deze paragraaf worden de resultaten van de ruimtelijke validatie besproken. Hierbij worden de gemeten jaargemiddelde concentraties ten opzichte van de gemodelleerde jaargemiddelde concentraties bekeken. Deze laatste werden bepaald op basis van de 'leaving-one-out' techniek indien een vorm van data assimilatie in de modeltechniek aanwezig is.

Voor de ruimtelijke validatie wordt op een relatief gelijkaardige manier te werk gegaan als bij de temporele validatie, in die zin dat voor de ruimtelijke validatie hoofdzakelijk dezelfde statistische indicatoren gebruikt worden als voor de temporele validatie, maar dan berekend tussen de geobserveerde en gemodelleerde jaargemiddelden overheen de verschillende stations.

Een aantal kleine nuances dienen toch te worden vermeld.

Eerst en vooral wordt voor de ruimtelijke BIAS de temporele coïncidentie tussen de metingen en de observaties genegeerd. We spreken daarom van een ongepaarde BIAS. Concreet betekent dit het volgende: bij de gepaarde BIAS zal een modelwaarde (meetwaarde) niet worden meegenomen in de berekening indien de overeenkomstige meetwaarde (modelwaarde) niet beschikbaar is. Bij de ongepaarde BIAS wordt deze temporele coïncidentie genegeerd. De ruimtelijke BIAS moet normaal gesproken gelijk zijn aan de gemiddelde⁷ temporele BIAS over de stations. Ten gevolge van het verschil tussen gepaarde en ongepaarde BIAS is dit in deze studie echter niet altijd het geval.

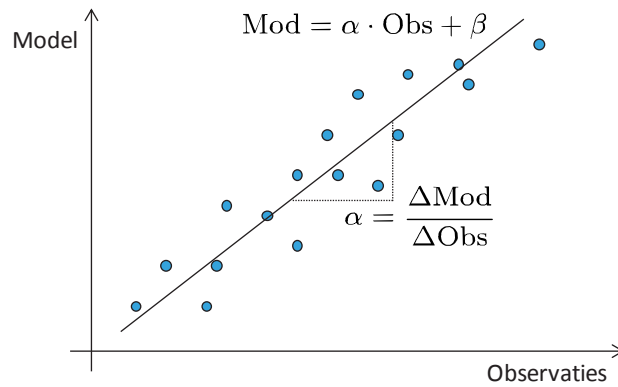
Een tweede opmerking betreft de target plots. Op zich wordt gewoon de definitie van de plot toegepast om een ruimtelijke target waarde te berekenen. Dit houdt in dat er genormaliseerd wordt met de standaard afwijking van de gemeten jaargemiddelde concentraties. Dit is niet onbelangrijk. Naar interpretatie van een dergelijke ruimtelijke target plot kan gesteld worden dat een uniforme kaart met de gemiddelde van de gemeten jaargemiddelde concentraties in de verschillende stations een "betere" kaart is dan de modelkaart indien het punt horende bij een model buiten de target cirkel ligt.

De belangrijkste verschillen met de temporele validatie zijn dat de validatie plots worden aangevuld met scatterplots van de gemodelleerde jaargemiddelden versus de gemeten jaargemiddelden. Deze scatterplots geven reeds een eerste visuele indruk van de modelkwaliteit. Verder worden ook eenvoudige boxplots van de verschillen tussen model en observatie over de verschillende stations heen bekeken, dit samen met enkele staafdiagrammen van de ongepaarde BIAS en de helling van de regressie rechte van de model vs. observatie fit. Wat de hellingsparameter α van de regressie rechte betreft, of liever $|1-\alpha|$, dit is de richtingscoëfficiënt van een eenvoudige least-squares lineaire regressie aan de scatter plot model versus observatie. Deze indicator werd berekend omdat de ruimtelijke correlatie coëfficiënt R^2 wel aangeeft welke fractie van de gemeten ruimtelijke variabiliteit het model verklaart, maar niet of model en observaties volgens de $x = y$ lijn (met richtingscoëfficiënt 1) met elkaar in verband staan. In wat volgt is de hellingsparameter gedefinieerd als de afwijking van 1 van de richtingscoëfficiënt (geïllustreerd in Figuur 47).

Gezien bij de ruimtelijke validatie ook VLOPS resultaten worden meegenomen worden de validatie voor Belgische en Vlaamse resultaten in aparte subsecties besproken.

Een belangrijke finale opmerking die bij de ruimtelijke validatie gemaakt dient te worden is het feit dat de correctie en data assimilatie technieken voor het ruwe AURORA model niet uur per uur maar rechtstreeks op de jaargemiddelde concentraties werden toegepast. Dit is noodzakelijk om de AURORA en VLOPS varianten op consistente wijze met elkaar te kunnen vergelijken.

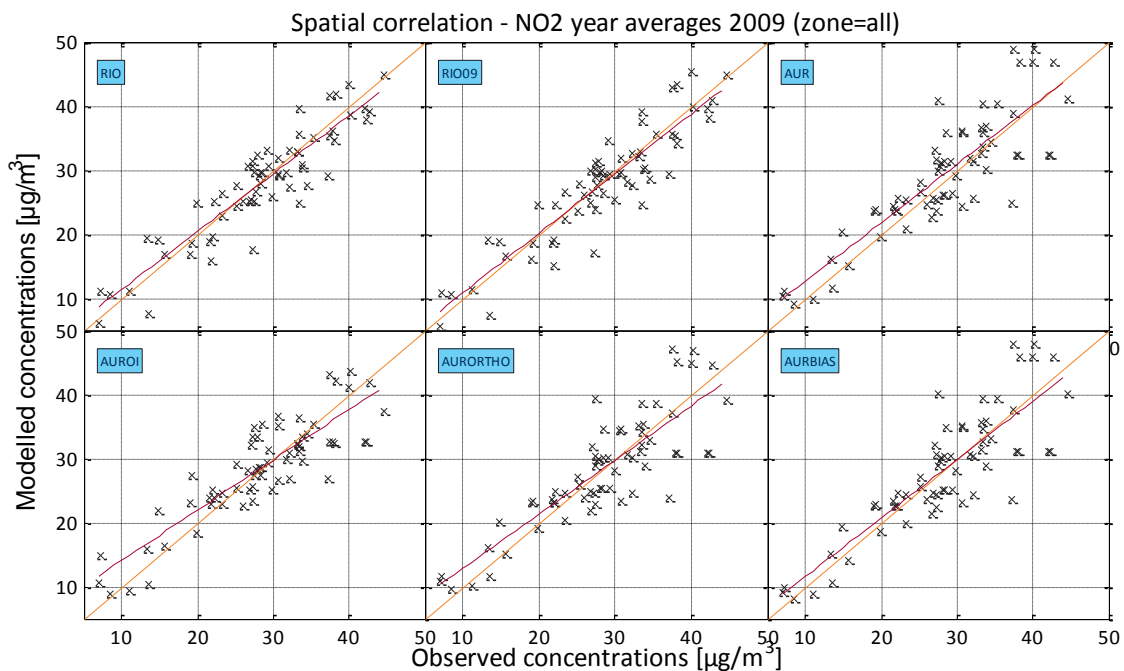
⁷ Merk ook op dat in de temporele validatie gebruik gemaakt werd van de mediaan van de BIAS en niet van het gemiddelde van de BIAS over de verschillende stations.



Figuur 47: Illustratie van de hellingsparameter [1- α], waarbij α de richtingscoëfficiënt van een Model versus Observatie lineaire regressie.

Ruimtelijke validatie NO₂ voor alle Belgische stations

In Figuur 48 worden eenvoudige scatterplots tussen de jaargemiddelde observaties (horizontale as) en de modelwaarden (verticale as) voor de verschillende modeltechnieken voor NO₂ getoond. Elke kruisje in de plots stelt een stationswaarde voor. Op de scatterplots is telkens ook de lineaire regressie lijn getoond (rode lijn). Van deze regressie lijn wordt de hellingsparameter als indicator in de validatie gebruikt. De oranje lijn stelt de ideale situatie voor, waarbij de modelwaarden gelijk zouden zijn aan de observaties. Uit de scatterplots kan afgeleid worden dat de geobserveerde NO₂ jaargemiddelen relatief goed worden weergegeven door alle model varianten.

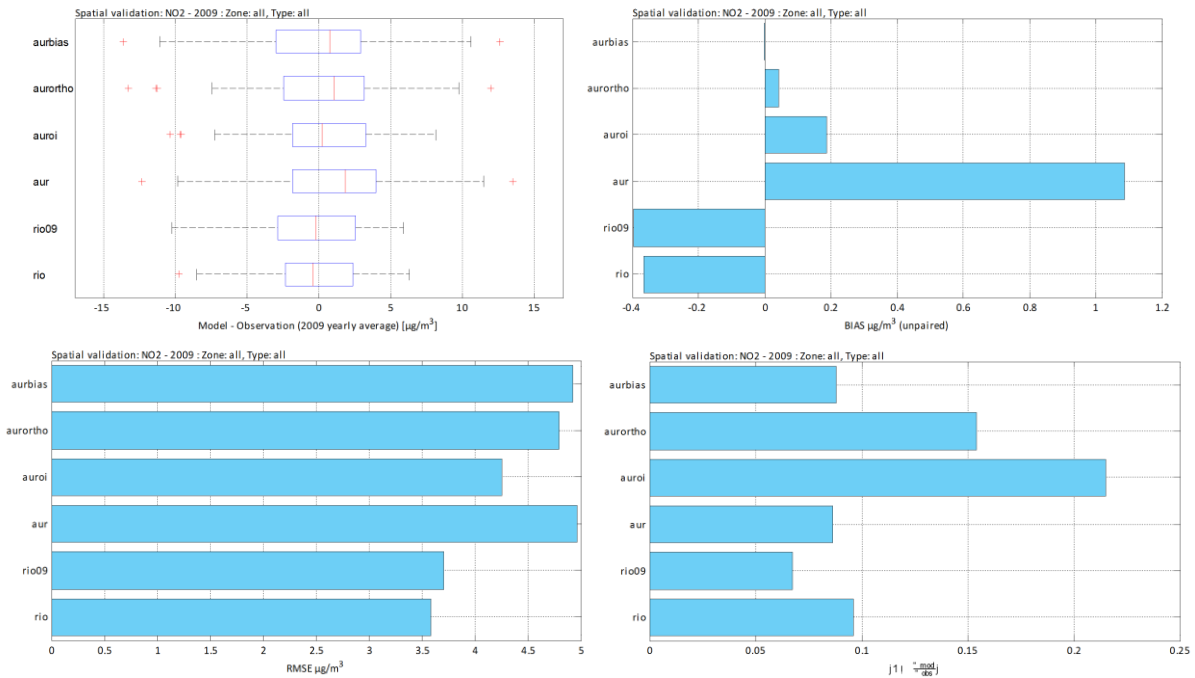


Figuur 48: Ruimtelijke validatie NO₂ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

In Figuur 49 worden enkele parameters in meer detail bekeken. Links boven wordt een boxplot van het verschil 'model – observatie' getoond. Daaruit blijkt dat voor de RIO modellen en de AURORA plus 'Optimal Interpolation' techniek de mediaan van 'model – observatie' het dichtst bij 0 gelegen is. Ook de interkwartiel afstand, en dus de spreiding van dat verschil, is voor deze modellen het kleinst. Dit uit zich ook in de barplots van de RMSE (links onder). Wanneer in plaats van naar het 'mediaan-verschil' gekeken wordt naar de BIAS (gemiddeld verschil, rechts boven), dan blijkt dat de waarden sowieso

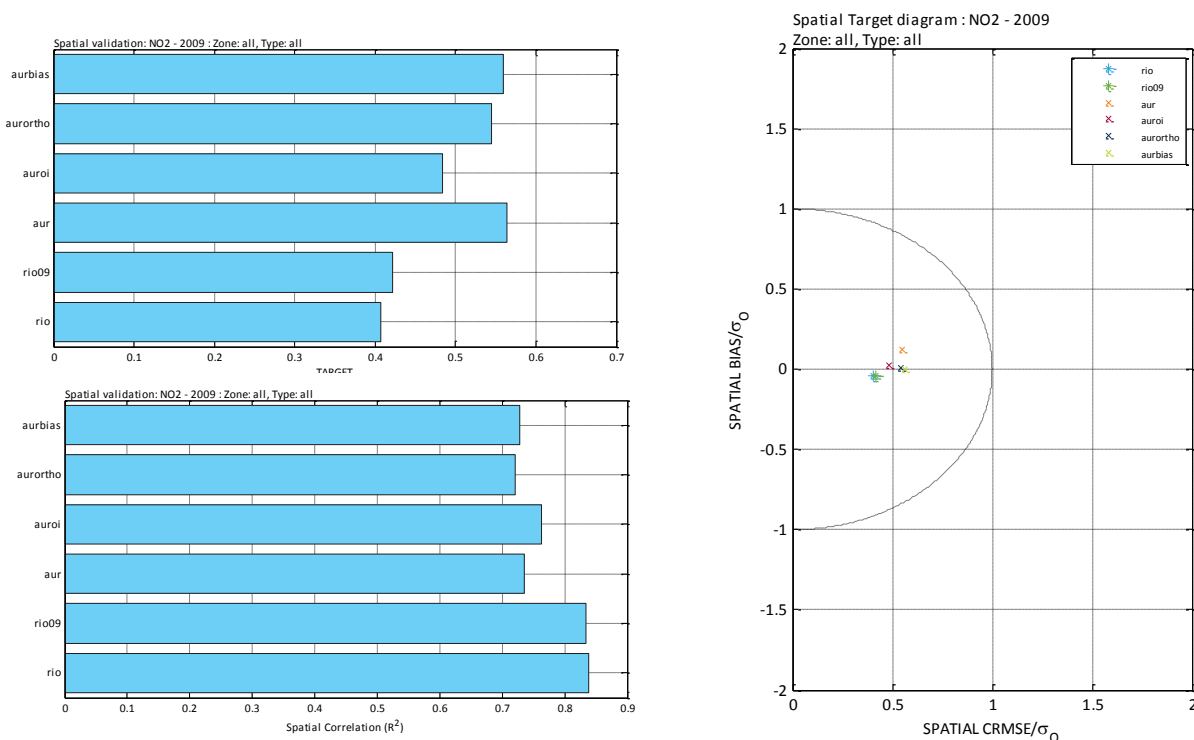
relatief klein zijn (voor alle modellen kleiner dan 0.5, behalve voor het ruwe AURORA model, dat rond $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zit.). Het dient echter gezegd te worden dat het 'mediaan-verschil' een iets robuustere weergave van de gemiddelde afwijking tussen model en observatie is.

Uit Figuur 50, waarin de target waarde, het target diagram en de ruimtelijke correlatie per model worden getoond, blijkt dat het RIO model de hoogste ruimtelijke correlatie (> 80 % verklaarde variantie) en de laagste target waarden vertoont. Zoals deels uit Figuur 48 reeds volgde, is de analyse van de hellingsparameter wat genuanceerder. Het RIO model doet het goed en sluit nauw aan bij de ideale '*model = observatie*' lijn, maar ook de ruwe AURORA en AURORA met biascorrectie techniek doen het wat dit betreft niet slecht. Het is wel duidelijk dat deze modellen voor hogere concentraties meer spreiding in de scatterplot vertonen, wat de hellingsparameter en ruimtelijke correlatie gevoeliger zal maken voor het eventueel weglaten van één of meerdere stations.



Figuur 49: Ruimtelijke validatie NO_2 voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.

Figuur 50: Ruimtelijke validatie NO₂ voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target

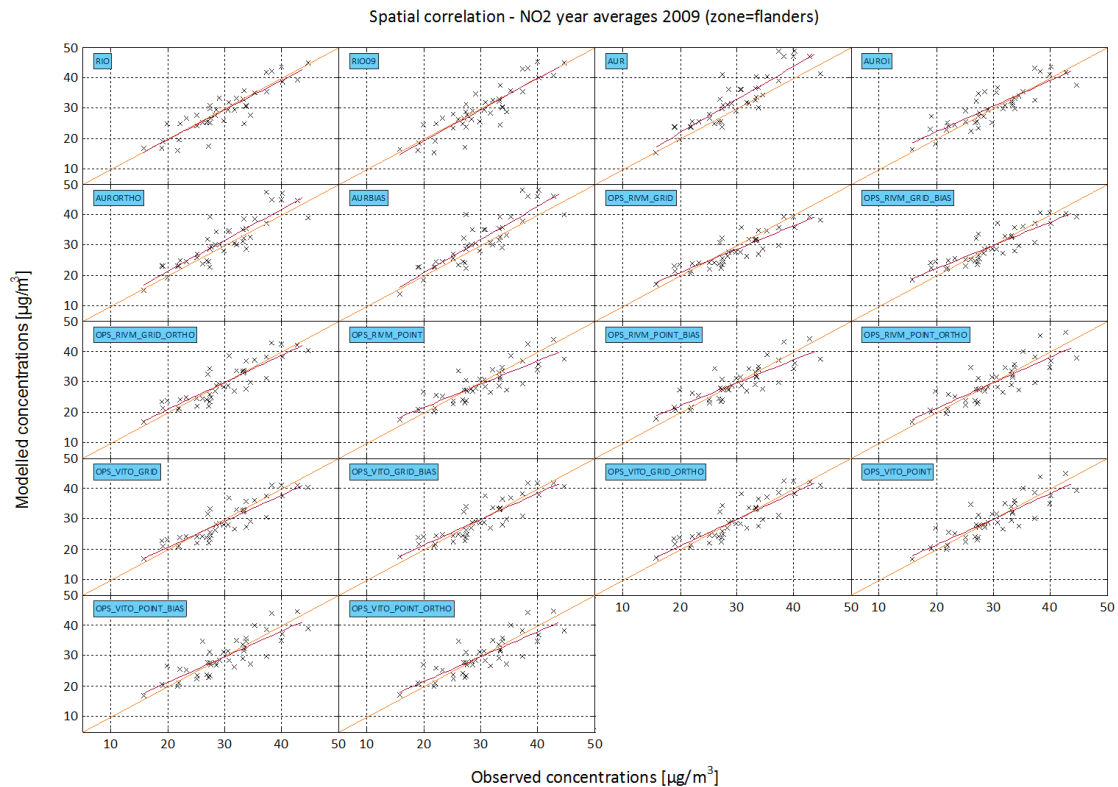


waarde en het target diagram, linksonder de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

Ruimtelijke validatie NO₂ voor enkel de Vlaamse stations

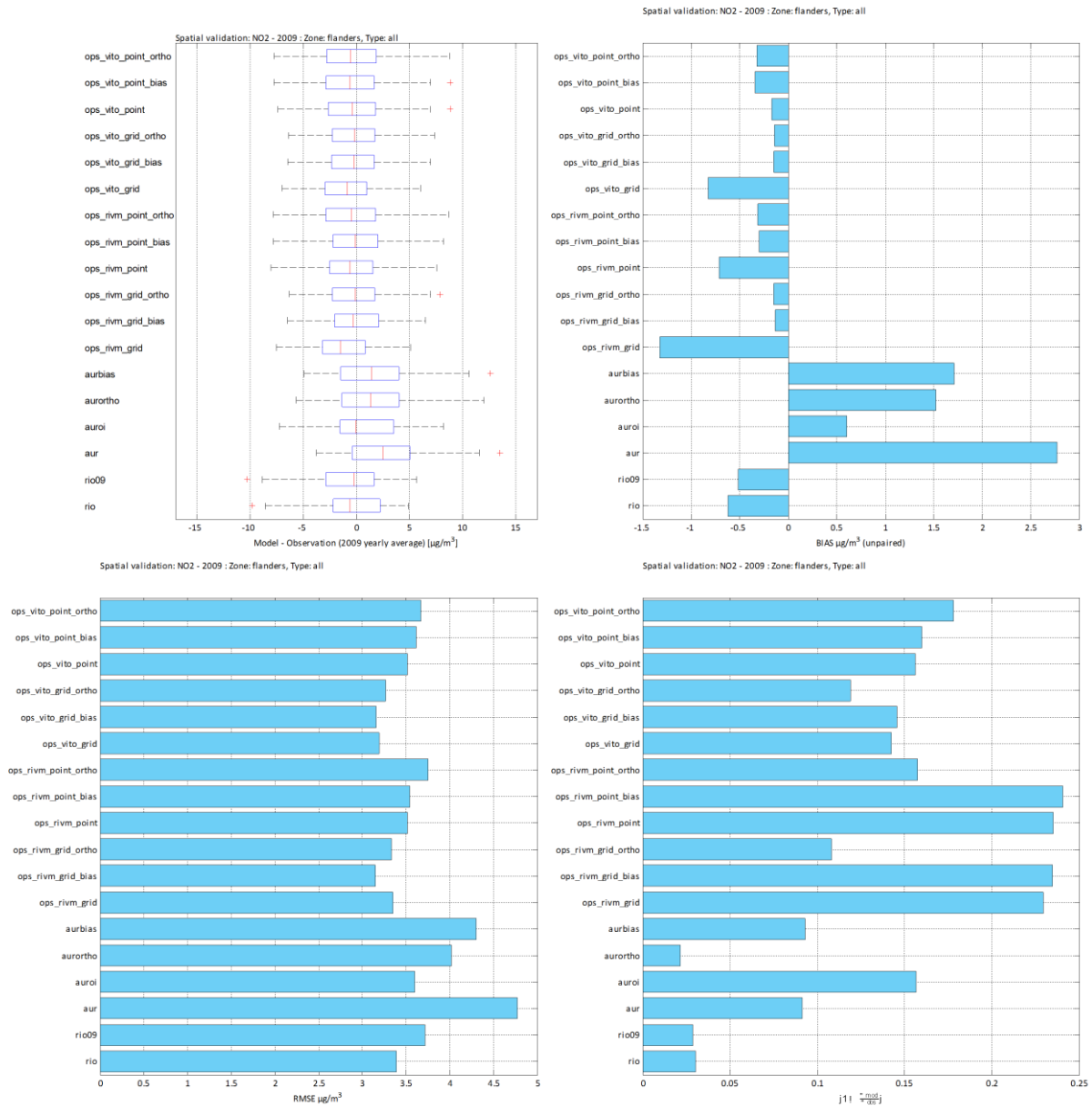
Voor de ruimtelijke validatie op Vlaams niveau worden uiteraard enkel de Vlaamse stations bekeken. In dit geval worden de beschouwde technieken aangevuld met VLOPS en de daarbij horende varianten. In totaal zijn er vier (2x2) varianten: twee afkomstig van de verschillende conversies voor NO_x → NO₂ (RIVM en VITO), en twee afkomstig van de 'resolutie', vergridde VLOPS resultaten enerzijds (1x1 km² grid geaggregeerd naar 4x4 km²) en resultaten op receptor niveau anderzijds.

In Figuur 51 worden eenvoudige scatterplots tussen de jaargemiddelde observaties (horizontale as) en de modelwaarden (verticale as) voor de verschillende modeltechnieken getoond. Op basis van deze scatterplots kan besloten worden dat ook voor het Vlaamse grondgebied de meeste modeltechnieken de ruimtelijke variabiliteit voor NO₂ kunnen vatten. De regressie hellingen sluiten voor de meeste technieken relatief goed aan bij de *Model = Observatie* lijn en de hoeveelheid scatter in de plot is relatief beperkt.



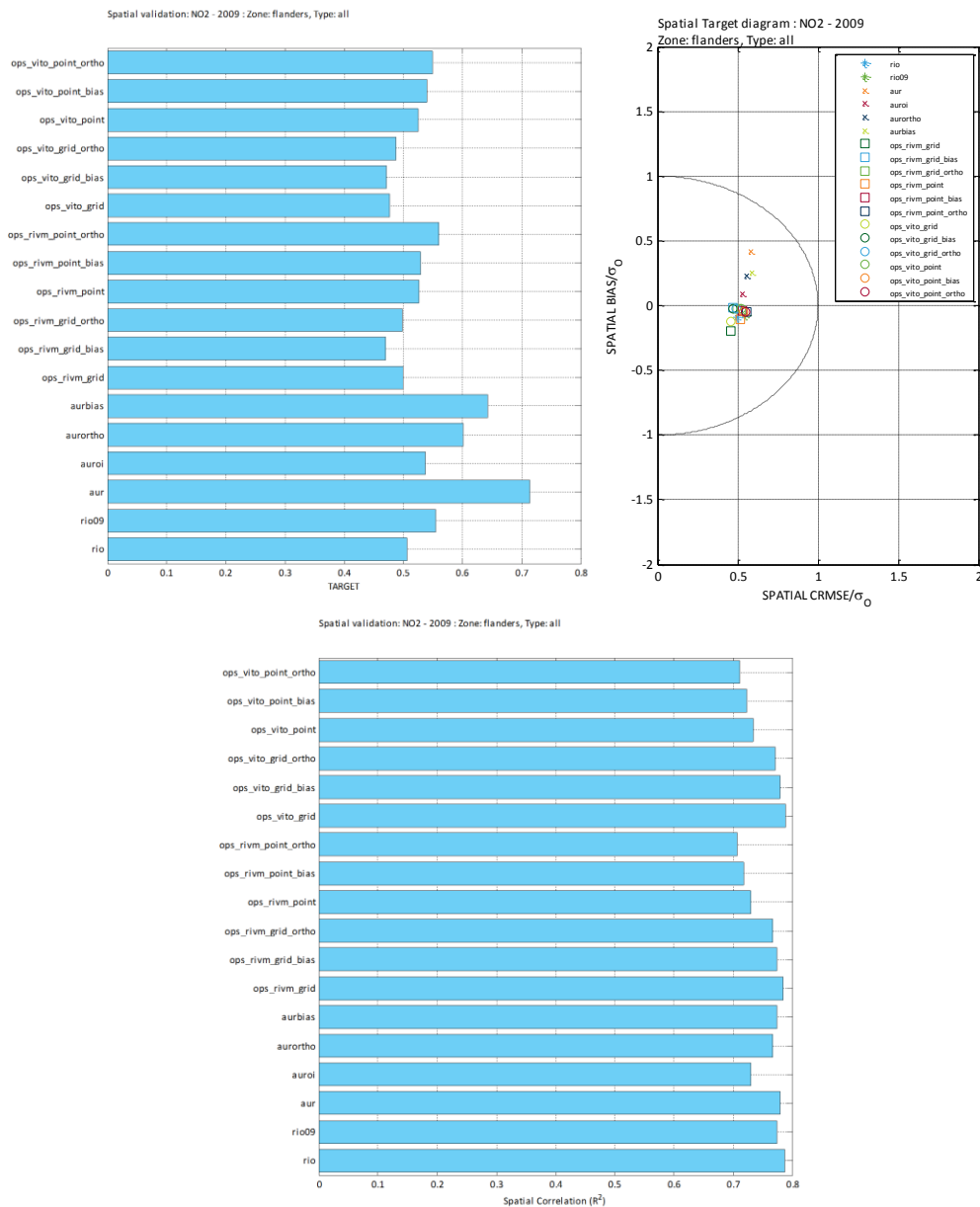
Figuur 51: Ruimtelijke validatie NO₂ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

In Figuur 52 worden opnieuw enkele parameters in meer detail bekeken. Het is onmiddellijk duidelijk dat het niet eenvoudig is om een duidelijke lijn te krijgen in de verschillende modellen. Wanneer de 'model-observatie' boxplots bekeken worden (links boven), kunnen we besluiten dat de modellen op basis van deze indicator heel vergelijkbaar zijn. De mediaan van 'model-observatie' is voor de RIO modellen, de AURORA plus 'Optimal Interpolation' techniek en de gecorrigeerde VLOPS modellen het kleinst. De interkwartiel afstand, of de spreiding van het verschil tussen model en observatie, is vergelijkbaar over de verschillende modellen, hoewel die voor de AURORA varianten iets groter lijkt te zijn. Dit vertaalt zich opnieuw ook in de barplots van de RMSE (links onder), waar het ruwe AURORA model en de AURORA plus bias (gewoon en orthogonale regressie) technieken de hoogste waarden geven. De laagste RMSE lijkt voor NO₂ over Vlaanderen door een aantal van de VLOPS varianten gegeven te worden, met name: OPS_RIVM_GRID_BIAS en OPS_VITO_GRID_BIAS, ook de ongecorrigeerde VLOPS op gridniveau met de VITO parametrisatie voor NO_x doet het wat betreft RMSE net iets beter, al dient wel gesteld te worden dat de verschillen heel miniem zijn. De meerderheid van de VLOPS modellen en het RIO model komen, op 0.5 µg/m³, na overeen wat betreft RMSE en zijn dus equivalent. Ook wat de ruimtelijke correlatie betreft, zitten de best scorende modellen binnen de 5 % verklaarde variantie van elkaar. Voorts zijn de laagste hellingsparameters te vinden bij het RIO model, hetgeen ook visueel vast te stellen was in Figuur 51, waar de lineaire regressie voor RIO nagenoeg perfect aansluit bij de model = observatie lijn.



Figuur 52: Ruimtelijke validatie NO₂ enkel voor de Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.

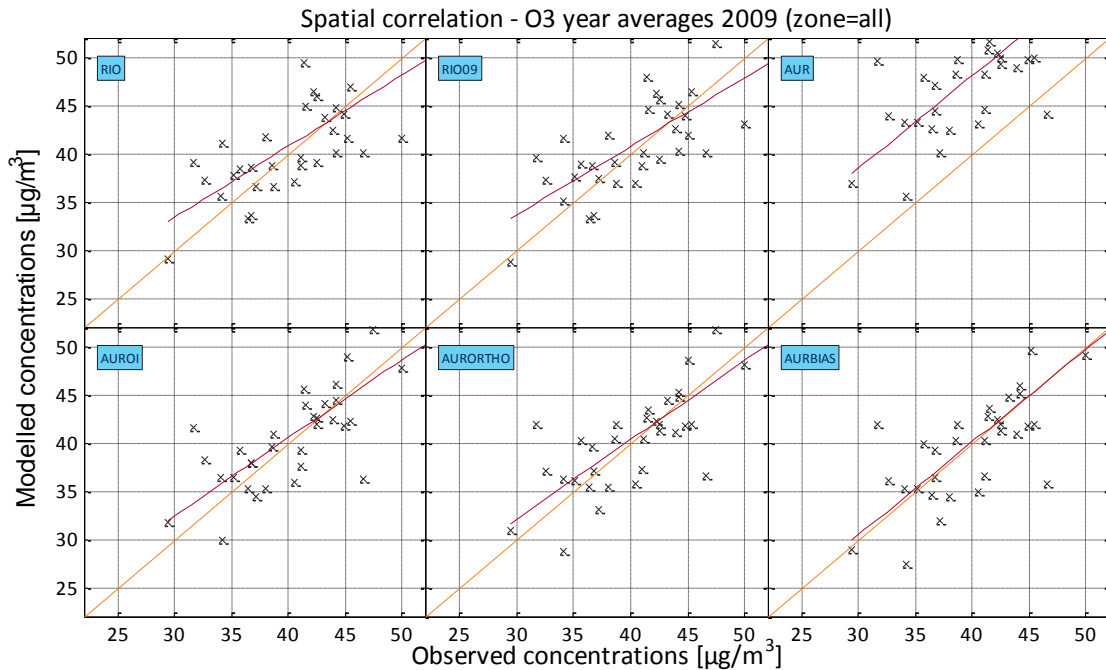
Uit Figuur 53, waarin de target waarde, het target diagram en de ruimtelijke correlatie per model worden getoond, is eveneens duidelijk dat de modellen relatief vergelijkbaar zijn. De OPS_RIVM_GRID_BIAS en OPS_VITO_GRID_BIAS varianten lijken net iets beter te presteren en de AURORA-gebaseerde technieken net iets minder voor wat betreft NO₂ in Vlaanderen.



Figuur 53: Ruimtelijke validatie NO₂ voor enkel de Vlaamse stations: rechtsboven en links de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

Ruimtelijke validatie O₃ voor alle Belgische stations

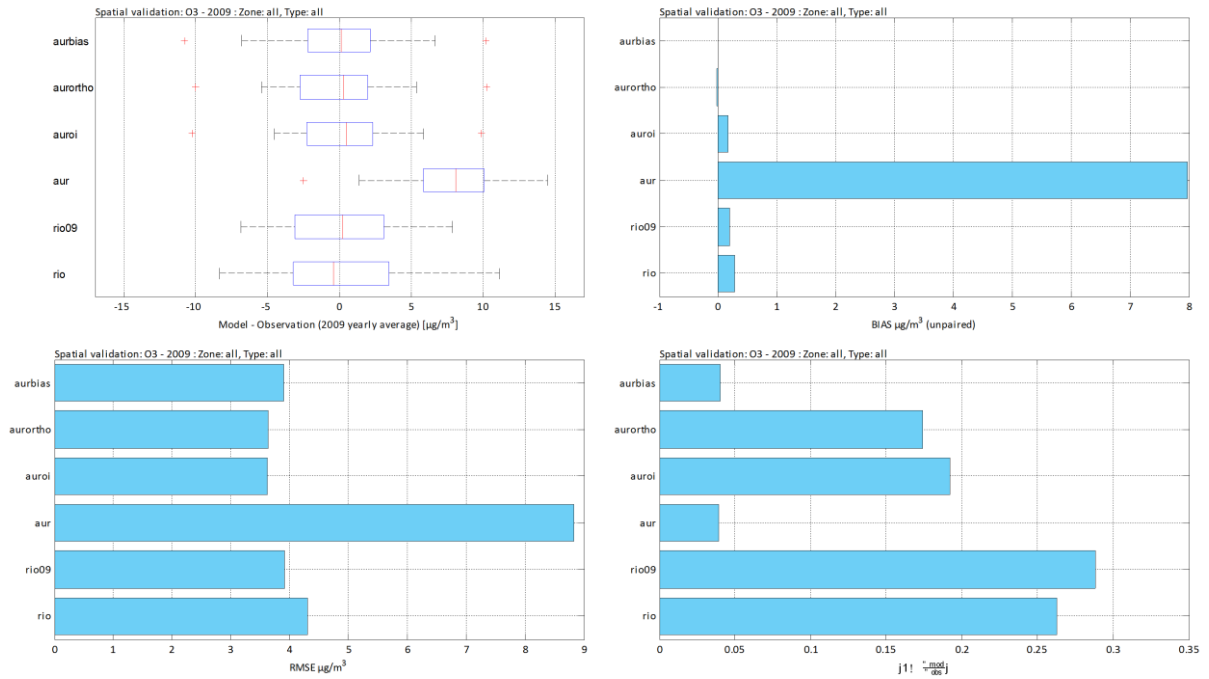
In Figuur 54 worden eenvoudige scatterplots tussen de jaargemiddelde observaties (horizontale as) en de modelwaarden (verticale as) voor de verschillende modeltechnieken voor O₃ getoond. Het is duidelijk dat de modellen er minder goed in slagen de geobserveerde jaargemiddelde concentraties te verklaren. Inderdaad, voor een aantal modellen volgt de regressie hellingen de *model = observatie* lijn niet goed, bovendien is een relatief hoge spreiding waarneembaar.



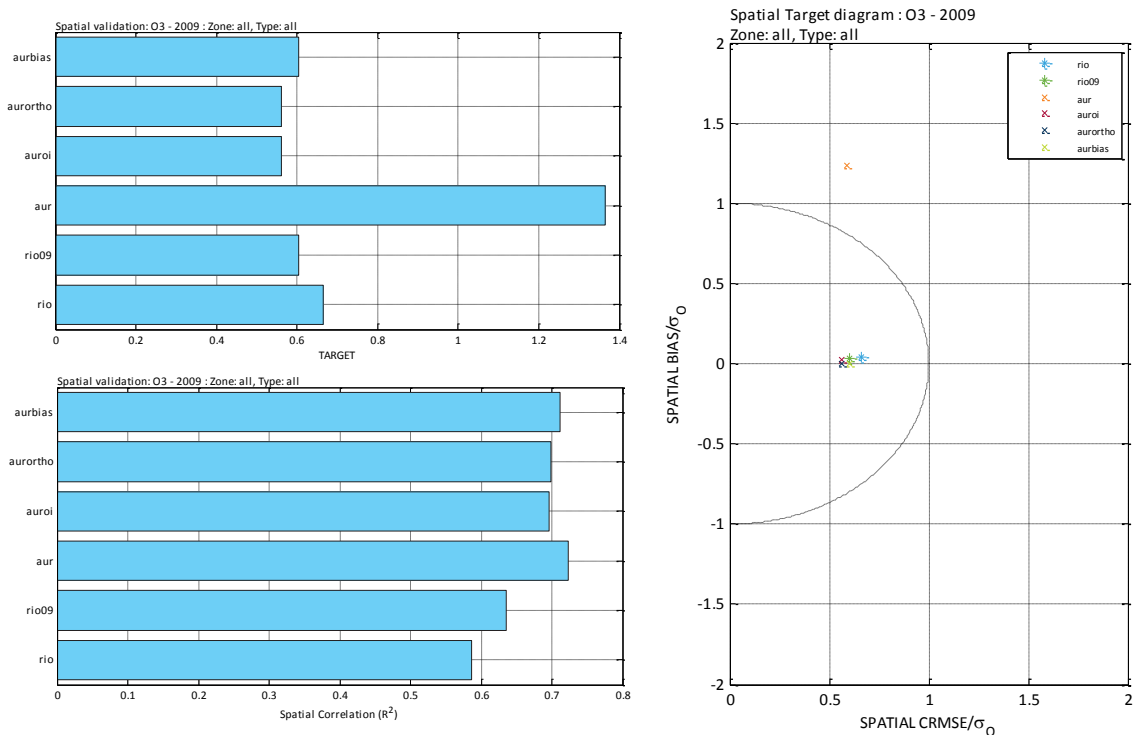
Figuur 54: Ruimtelijke validatie O₃ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

In Figuur 55 worden een aantal parameters in meer detail besproken. Uit deze figuur blijkt duidelijk dat het ruwe AURORA model het geobserveerde ruimtelijk patroon het minst goed weet te reproduceren, wat ook reeds duidelijk te zien was in Figuur 11 en het feit dat de ruwe AURORA kaarten significant wijzigen bij aanbrengen van de correctie technieken (zie Figuur 12). Opvallend is dat het RIO model in deze net iets slechter presteert dan de gecorrigeerde AURORA modellen. Hoewel de mediaan van het verschil tussen model en observatie voor de meeste technieken (behalve ruwe AURORA) heel klein is, is zowel uit de boxplot van het 'model-observatie' als uit de RMSE plot duidelijk dat RIO net iets slechter scoort. Ook voor wat betreft de hellingsparameter lijkt RIO de grootste afwijking te vertonen van een $x=y$ verband (uiteraard de BIAS buiten beschouwing gelaten). De hellingsparameter van de ruwe AURORA resultaten is welsiwaar het kleinst, maar dit kan op toeval berusten gezien er toch een relatieve grote scatter is in het model vs. observatie diagram (Figuur 54) wat zich in een grote RMSE vertaalt.

Ook voor wat de ruimtelijke correlatie en de target waarden betreft (Figuur 55) scoort het RIO model net iets minder goed dan de gecorrigeerde AURORA varianten.



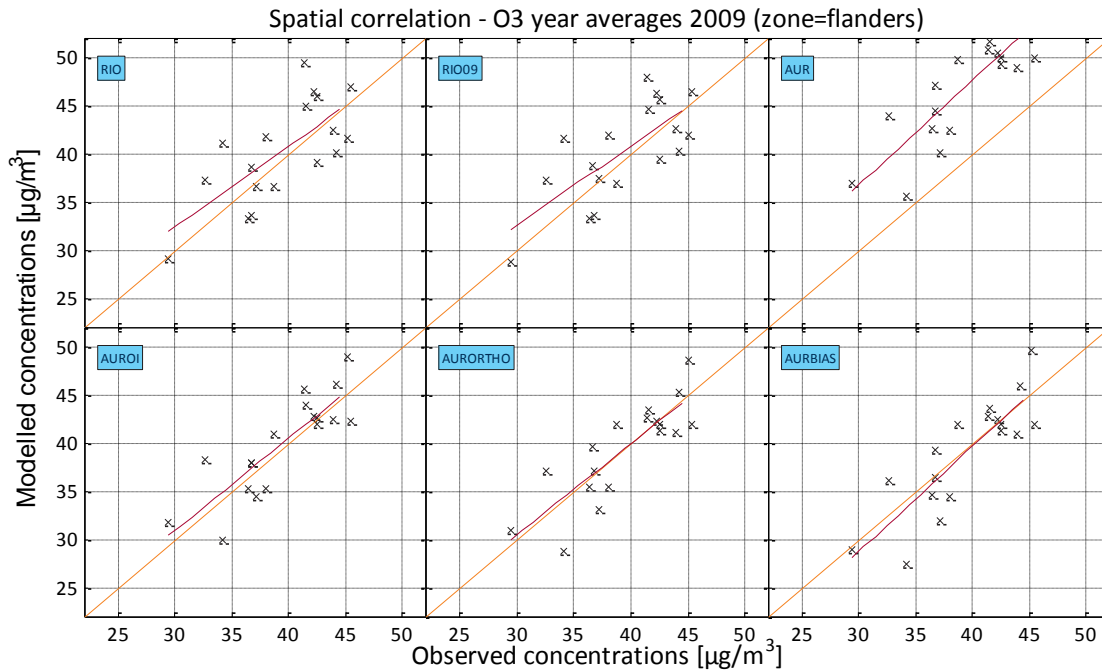
Figuur 55: Ruimtelijke validatie O_3 voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.



Figuur 56: Ruimtelijke validatie O_3 voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

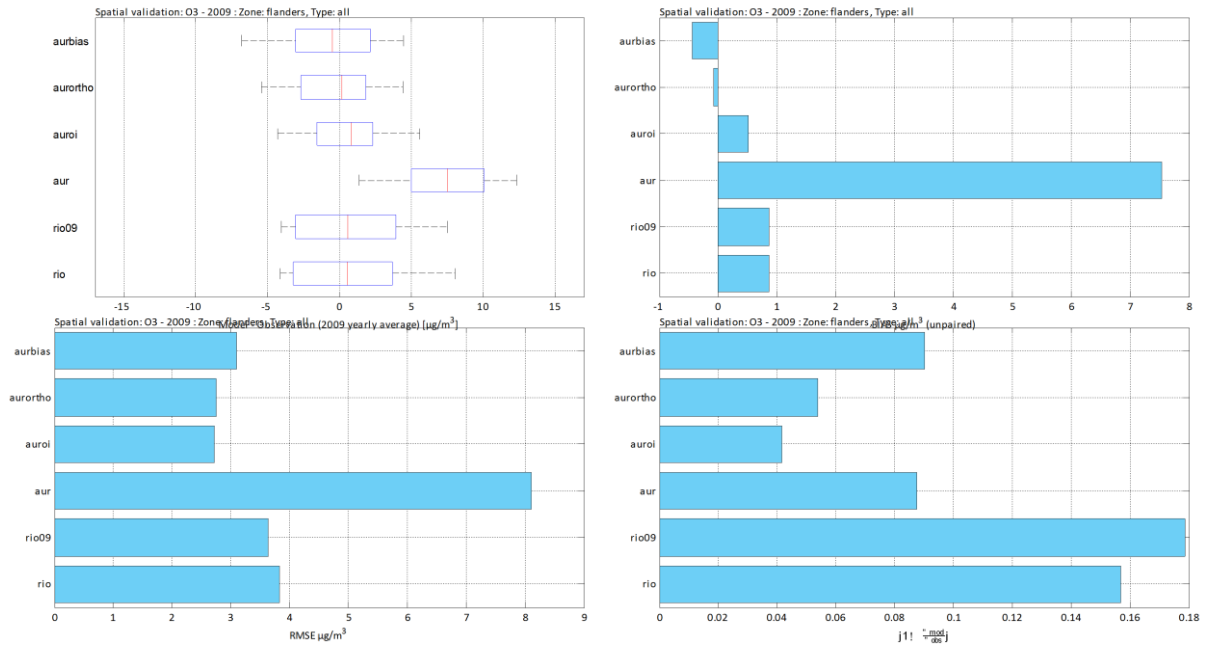
Ruimtelijke validatie O₃ voor enkel de Vlaamse stations

Voor het Vlaams grondgebied is het beeld volledig analoog aan wat we voor België vinden. Dit wordt duidelijk in onderstaande figuren.

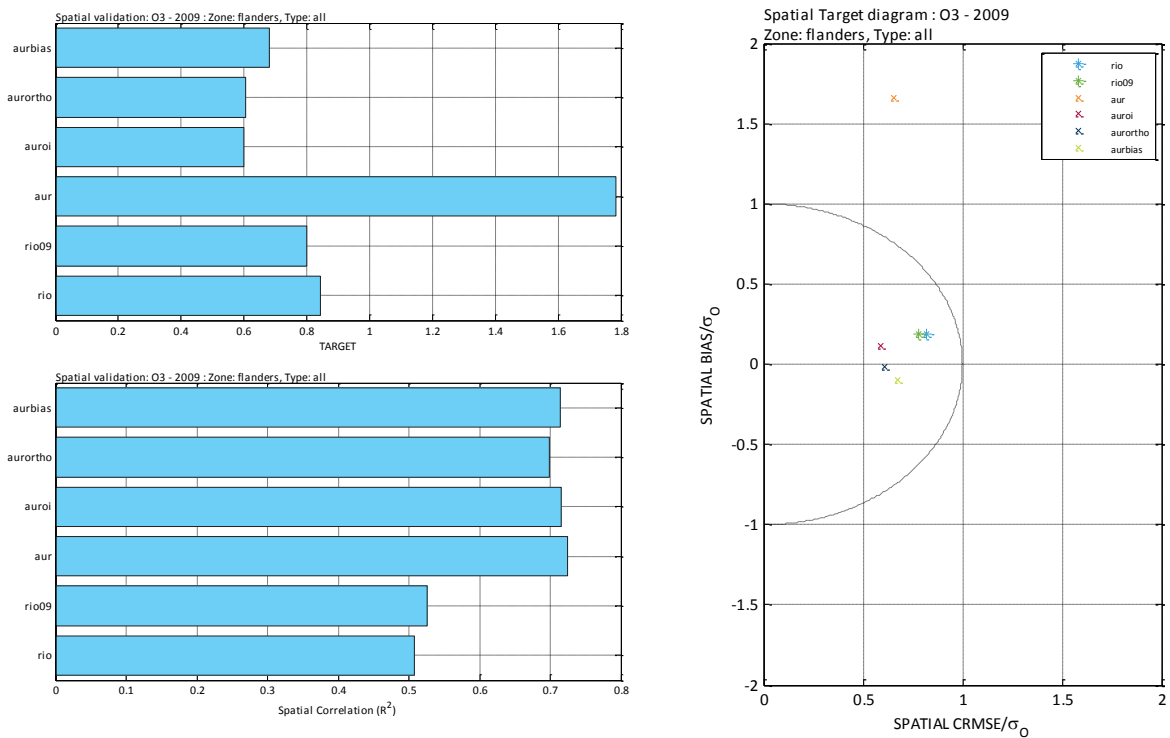


Figuur 57: Ruimtelijke validatie O₃ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

De ongecorrigeerde AURORA resultaten vertonen de grootste afwijkingen, hetgeen waarschijnlijk vooral een effect is van een sterk positieve BIAS in het ruwe AURORA model. Dit is zowel op te maken uit Figuur 57, waarin duidelijk wordt dat de lineaire regressielijn verschoven is naar hogere modelwaarden en in Figuur 58 (rechtsboven). Opnieuw zijn de 'mediaan-verschillen' van de andere technieken (zie boxplots in Figuur 58) relatief klein ($< 1 \mu\text{g}/\text{m}^3$), maar doen de gecorrigeerde AURORA modellen het net iets beter dan RIO voor wat betreft de interkwartiel afstand en dus ook de RMSE. RIO verklaart 'slechts' 50 % van de ruimtelijke variantie. Dit is op zich tegen de verwachtingen in en verdient nader onderzoek. Een eventuele analyse op basis van bevolkingsdichtheid (cfr. eerdere RIO versies) zou kunnen aangewend worden om te bepalen of de proxy op basis van landgebruik voor ozon meer of minder geschikt is.



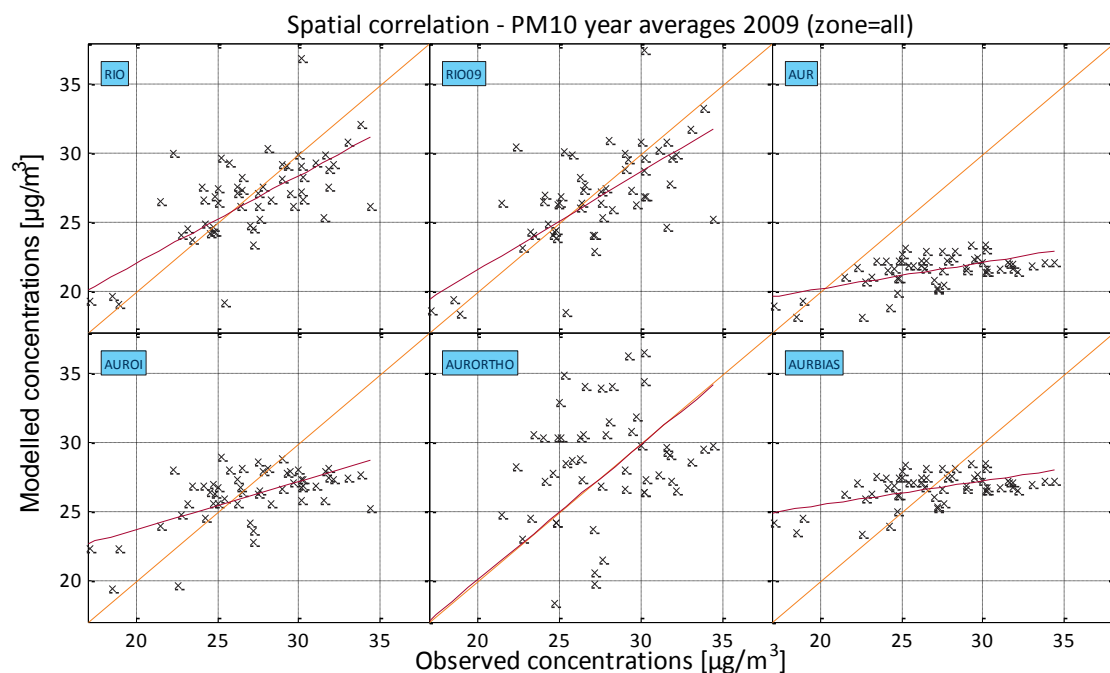
Figuur 58: Ruimtelijke validatie O_3 enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.



Figuur 59: Ruimtelijke validatie O_3 voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

Ruimtelijke validatie PM₁₀ voor alle Belgische stations

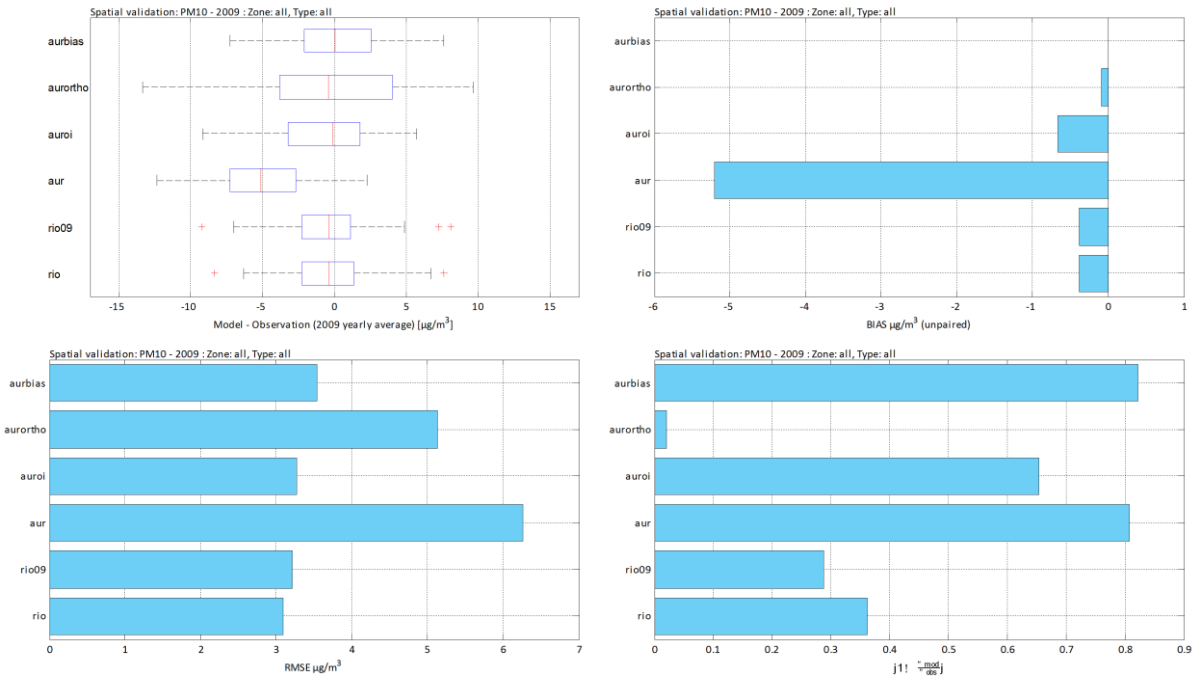
In Figuur 60 worden eenvoudige scatterplots tussen de jaargemiddelde observaties (horizontale as) en de modelwaarden (verticale as) voor de verschillende modeltechnieken voor alle Belgische stations voor PM₁₀ getoond. In deze scatterplots vallen onmiddellijk een aantal zaken op. Het is duidelijk dat de orthogonale regressie techniek een nagenoeg perfecte helling en lineaire regressie oplevert. Dit is ergens logisch, gezien dergelijke regressie juist aan de basis van de correctie ligt. Nu is het wel zo dat de geïntroduceerde, resulterende spreiding rond de *model = observatie* lijn voor de orthogonale regressie techniek significant is in vergelijking met de andere technieken. Voor de ruwe aurora en de bias-gecorrigeerde AURORA resultaten is de helling van de regressie lijn relatief vlak. Dit betekent dat die modellen slechts weinig ruimtelijke variabiliteit vertonen, terwijl er weldegelijk een significante variabiliteit geobserveerd wordt: de geobserveerde range van jaargemiddelde concentraties varieert ongeveer van 15 tot 35 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, terwijl voor die modellen de modelwaarden veelal tussen 18-23 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ liggen (ongecorrigeerde AURORA).



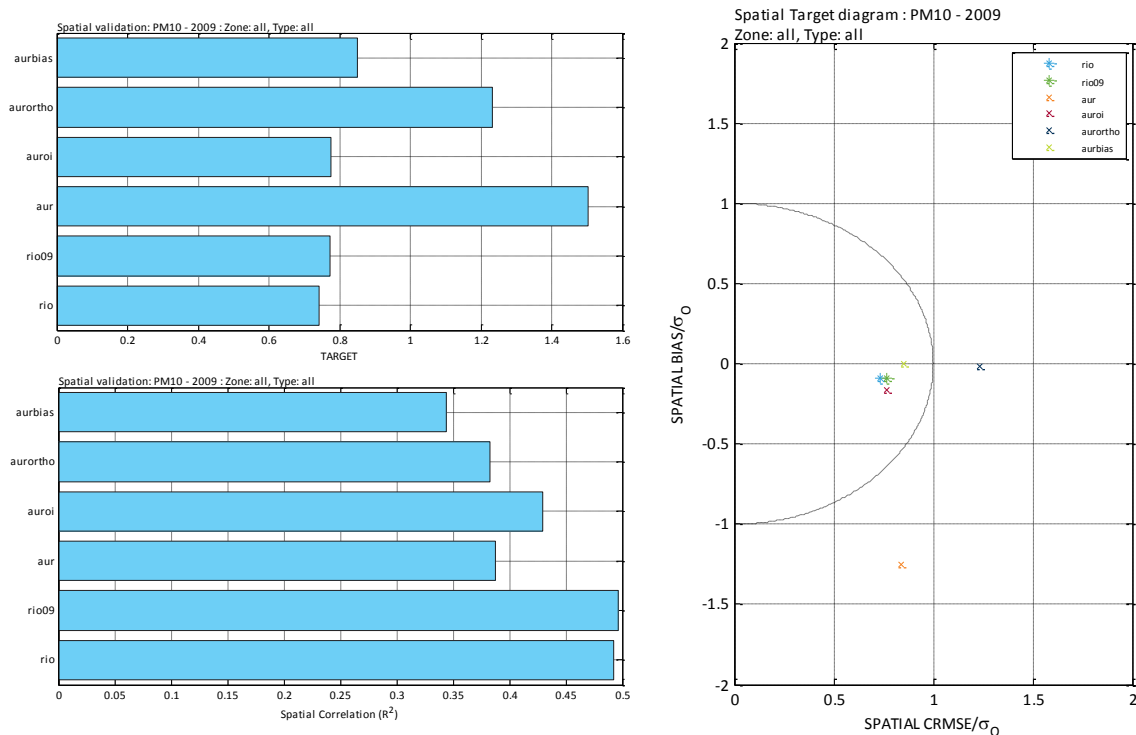
Figuur 60: Ruimtelijke validatie PM₁₀ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

Uit Figuur 61 en

Figuur 62 kan besloten worden dat het RIO model net iets beter lijkt te presteren dan AURORA met 'Optimal Interpolation' en biascorrectie. Voor de mediaan van het verschil tussen model en observatie, de RMSE en de target waarden is dat verschil relatief gering. Het is vooral voor wat betreft de ruimtelijke correlatie en de hellingsparameter dat RIO het iets beter lijkt te doen. De verklaarde variantie van RIO is net geen 50 %, terwijl de andere modellen rond de 40 % hangen. Voor de gecorrigeerde AURORA modellen lijkt de 'Optimal Interpolation' techniek het meest geschikt. Dit komt vooral tot uiting in de hogere ruimtelijke correlatie, maar ook in de andere indicatoren.



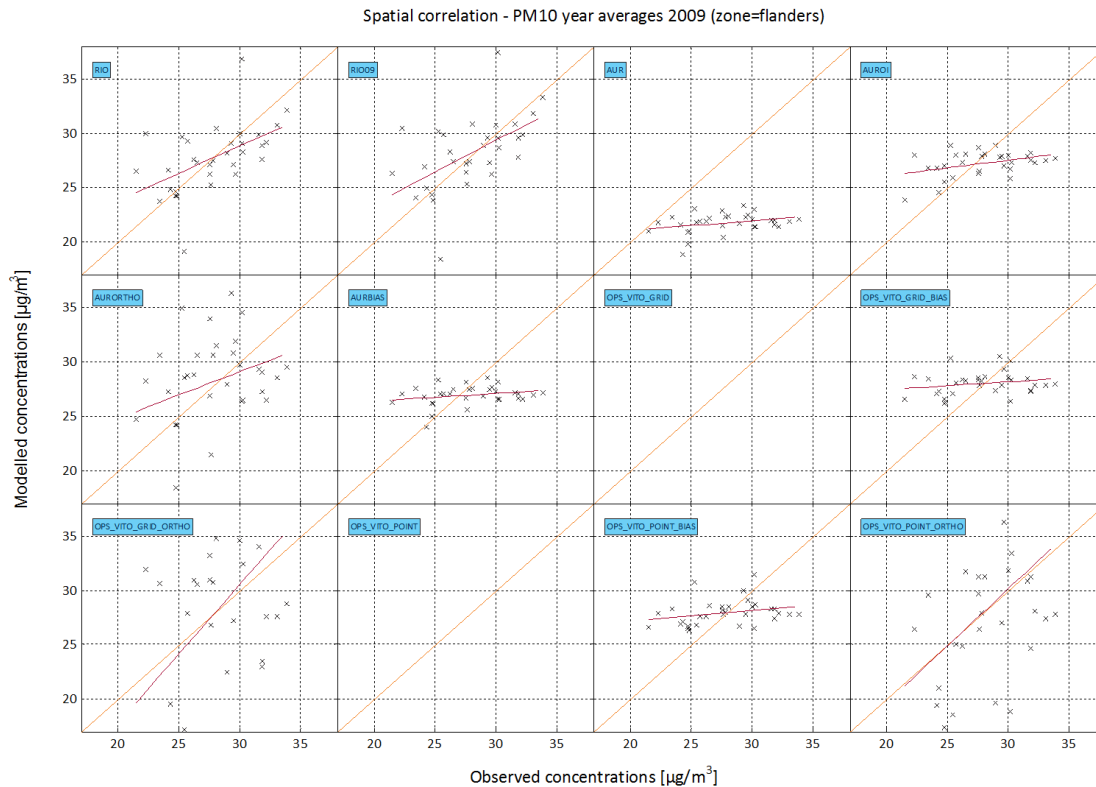
Figuur 61: Ruimtelijke validatie PM_{10} voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.



Figuur 62: Ruimtelijke validatie PM_{10} voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

Ruimtelijke validatie PM₁₀ voor enkel de Vlaamse stations

In Figuur 63 worden eenvoudige scatterplots tussen de jaargemiddelde observaties (horizontale as) en de modelwaarden (verticale as) voor de verschillende modeltechnieken voor de Vlaamse stations voor PM₁₀ getoond. Ten opzichte van de vorige paragraaf, werden de VLOPS resultaten toegevoegd. Merk op dat hoewel de labels in onderstaande figuren de naam “_VITO_” meedragen, dit attribuut hier geen betekenis heeft, gezien enkel voor NO₂ onderscheid gemaakt werd tussen de VITO methode en de RIVM methode. Merk verder ook op dat in onderstaande correlatie plot de ruwe VLOPS resultaten van de schaal vallen wegens een sterk negatieve BIAS.

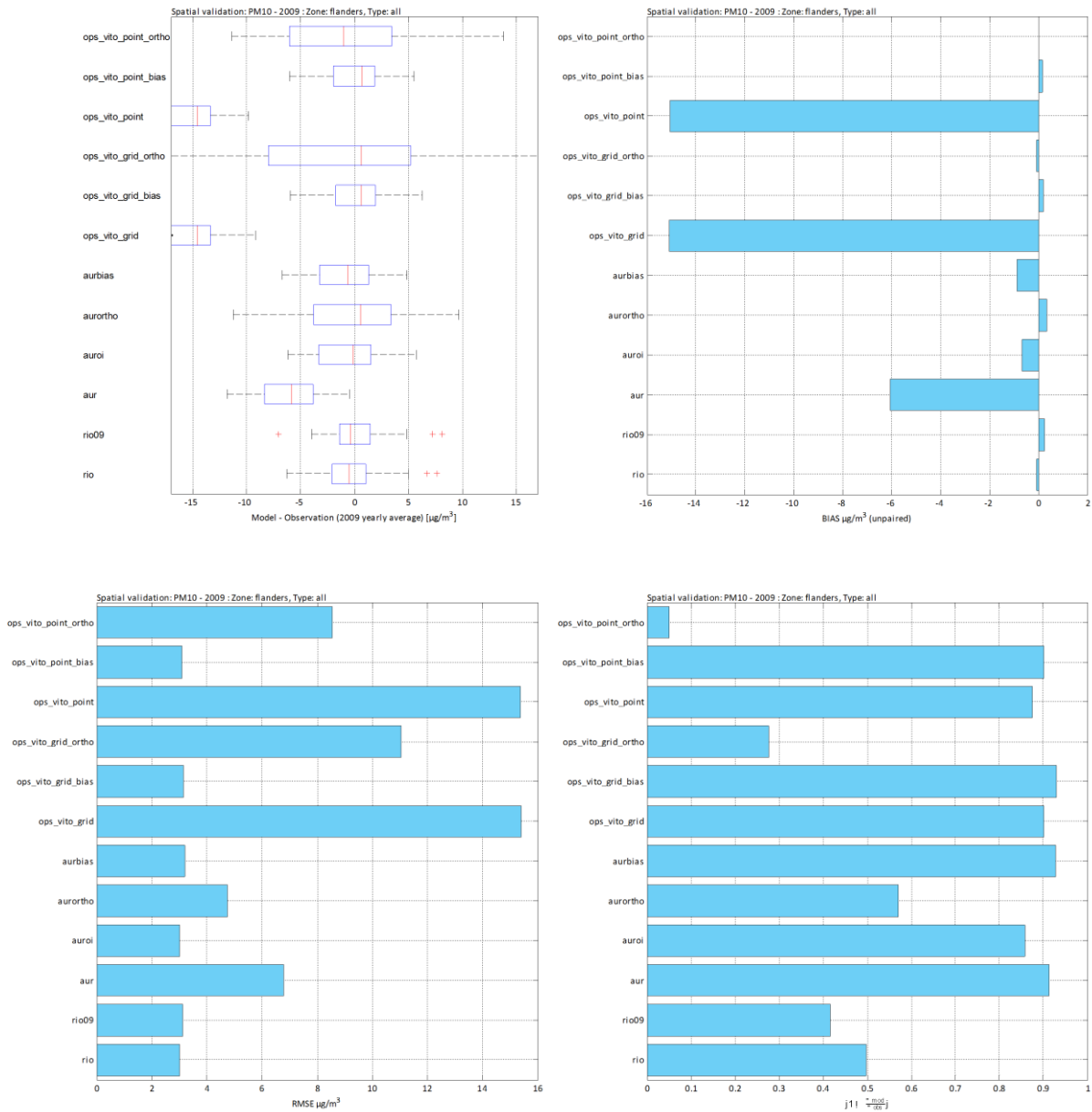


Figuur 63: Ruimtelijke validatie PM₁₀ enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde. Merk op dat de scatterplot voor OPS_VITO_GRID en OPS_VITO_POINT wel degelijk op de figuur staan, maar buiten de schaal vallen. Er is namelijk voor gekozen om alle plots op eenzelfde schaal af te beelden.

Het is opnieuw duidelijk dat voor de ongecorrigeerde modellen en de modellen die een simpele additieve, uniforme biascorrectie toepassen de ruimtelijke variabiliteit van de geobserveerde concentraties onvoldoende gecaptureerd wordt. De orthogonale regressies geven telkens de beste lineaire regressie rechten, maar introduceren zeer veel “scatter” in de model vs. observatie plot, wat zich in een hoge RMSE, interquartielafstand en target waarde vertaalt (zie Figuur 64 en Figuur 65).

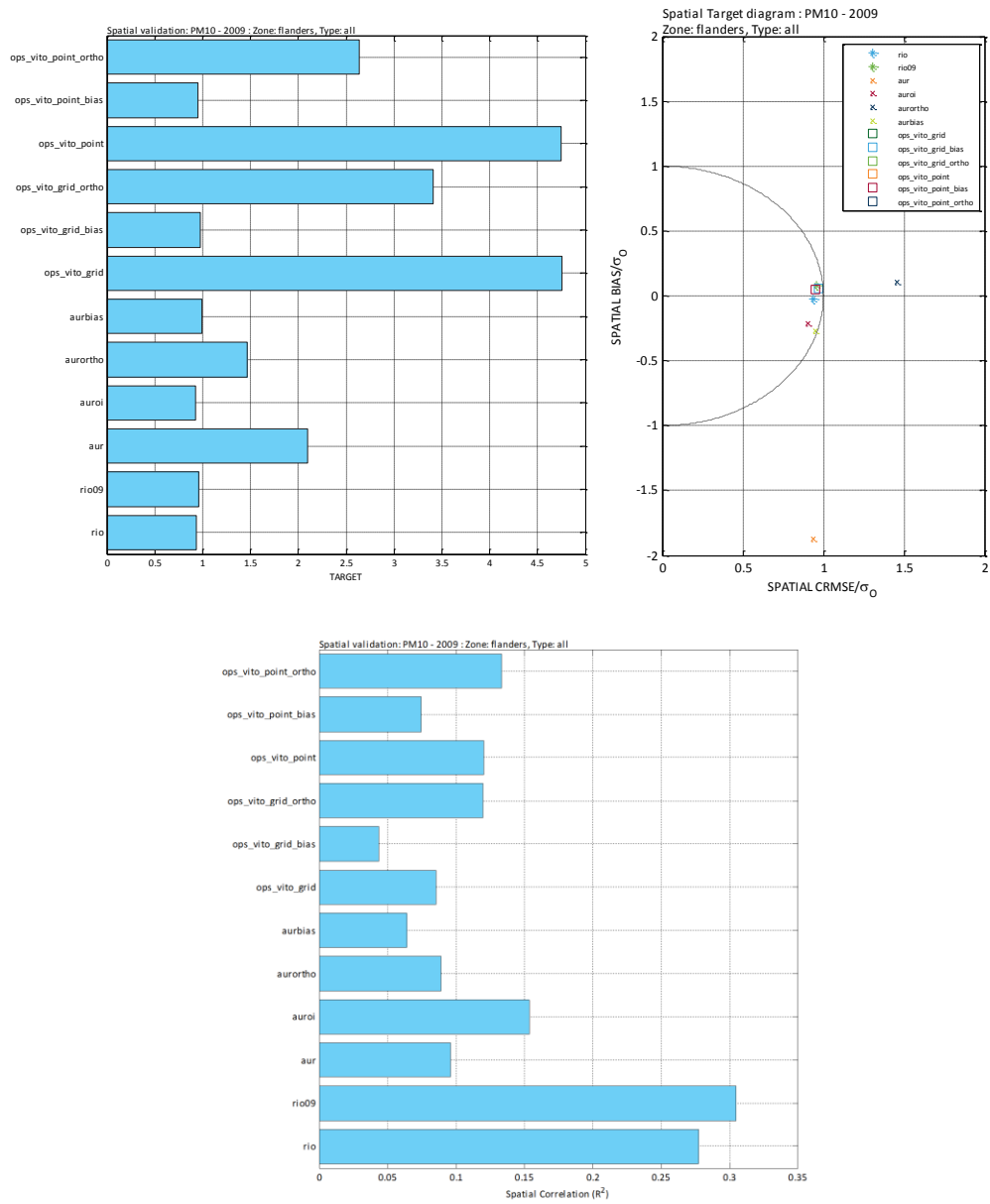
Verder is duidelijk dat een aantal modellen relatief gelijkaardig presteren, met name RIO, de AURORA plus ‘Optimal Interpolation’, AURORA met biascorrectie en de bias-gecorrigeerde VLOPS modellen. Alle hebben ze een RMSE rond de 3 µg/m³ met een relatief laag mediaan verschil tussen model en observatie jaargemiddelden. Dit zijn verder ook de enige modellen die in het target diagram binnen de eenheidskring liggen, zei het nipt. Uit deze validatie blijkt dat het modelleren van de PM₁₀ concentraties in Vlaanderen niet evident is, zelfs niet met geavanceerde correctie en data assimilatie technieken.

Uiteraard komt hier een belangrijk aspect bij kijken, zijnde de representativiteit van de meetstations, die in Vlaanderen voornamelijk in de verstedelijkte gebieden staan opgesteld, waardoor heel lokale effecten toch een belangrijke invloed kunnen hebben.



Figuur 64: Ruimtelijke validatie PM₁₀ enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.

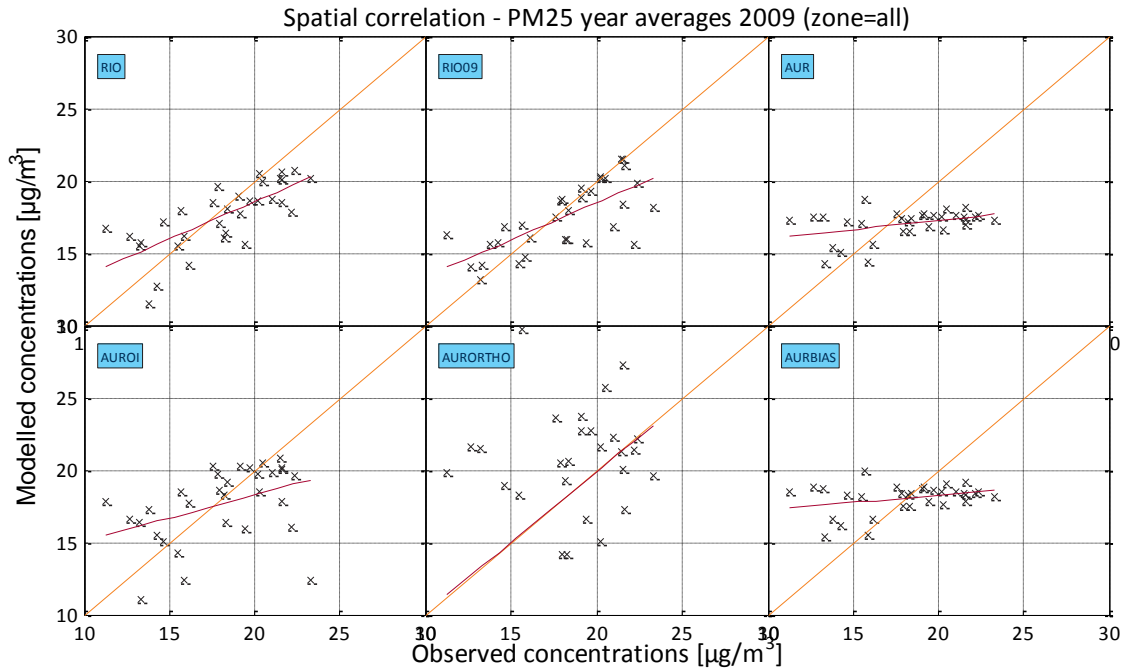
Wel is het dat voor het RIO model (los van de orthogonale regressie correcties, die dan weer andere problemen hebben) de afwijking van de model = observatie lijn, het geringst is en de ruimtelijke correlatie het hoogst. Daar waar alle andere modellen voor Vlaanderen minder dan 10 % AURORA plus 'Optimal Interpolation' uitgezonderd: 15 %) van de ruimtelijke variantie verklaren, slaagt RIO erin toch 25 – 30 % te verklaren (Figuur 65).



Figuur 65: Ruimtelijke validatie PM_{10} voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechtsboven de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

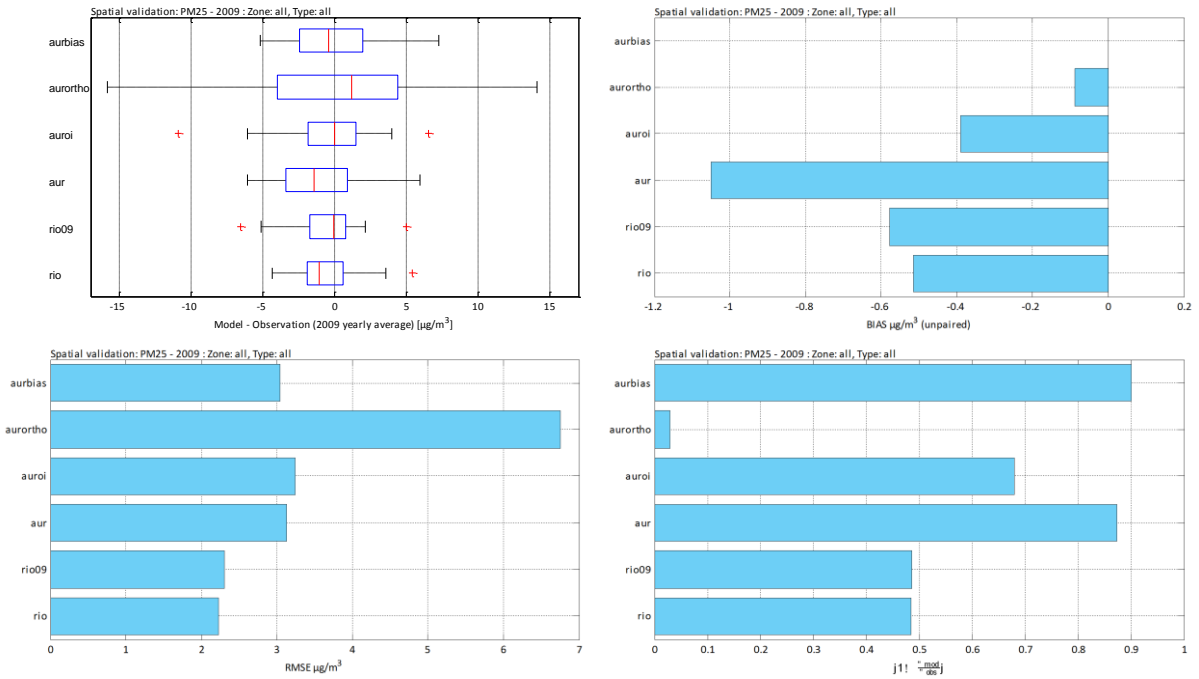
Ruimtelijke validatie $PM_{2.5}$ voor alle Belgische stations

Voor $PM_{2.5}$ geldt een heel gelijkaardig verhaal als voor PM_{10} . Uit onderstaande scatterplot blijkt opnieuw dat de ruimtelijke variabiliteit in AURORA (en bias gecorrigeerde AURORA) te gering is, en dat de orthogonale regressie weliswaar een “goede fit” oplevert, maar heel wat “noise” introduceert.

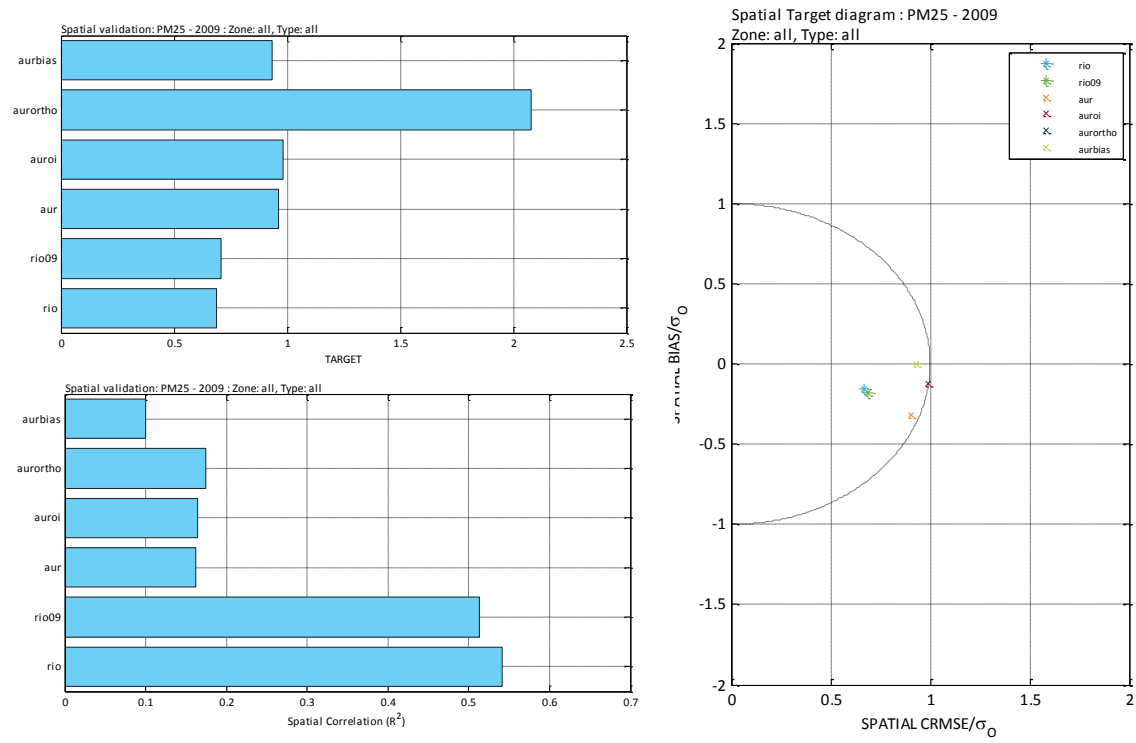


Figuur 66: Ruimtelijke validatie $PM_{2.5}$ voor alle Belgische stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

De kleinste RMSE, hellingsparameter en target waarde en de hoogste ruimtelijke correlatie wordt bekomen met bij het RIO model. De BIAS van het RIO model is dan weer net een fractie hoger dan die dan voor de AURORA varianten. Toch lijkt RIO duidelijk als beste model naar voor te komen. Daar waar andere modellen slechts 10-15% van de ruimtelijke variabiliteit verklaren, heeft RIO een R^2 van boven de 0.5.



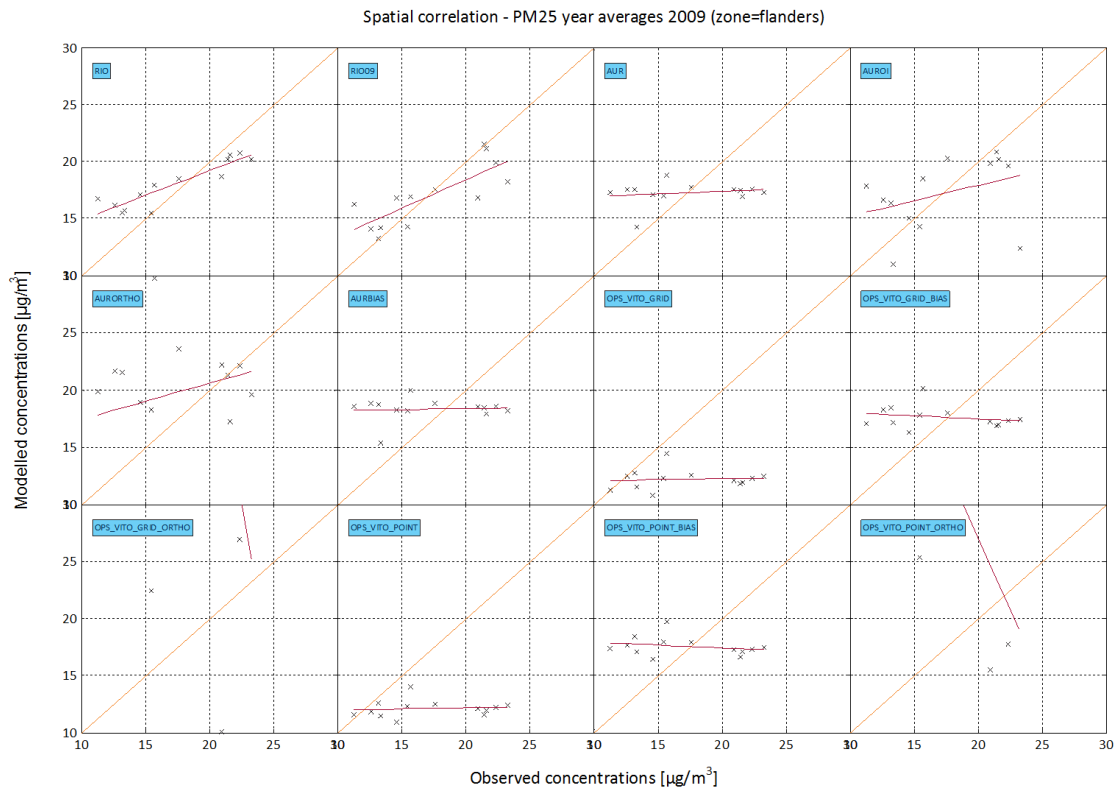
Figuur 67: Ruimtelijke validatie $\text{PM}_{2.5}$ voor alle Belgische stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.



Figuur 68: Ruimtelijke validatie $\text{PM}_{2.5}$ voor alle Belgische stations: linksboven en rechts de target waarde en het target diagram, linksonder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

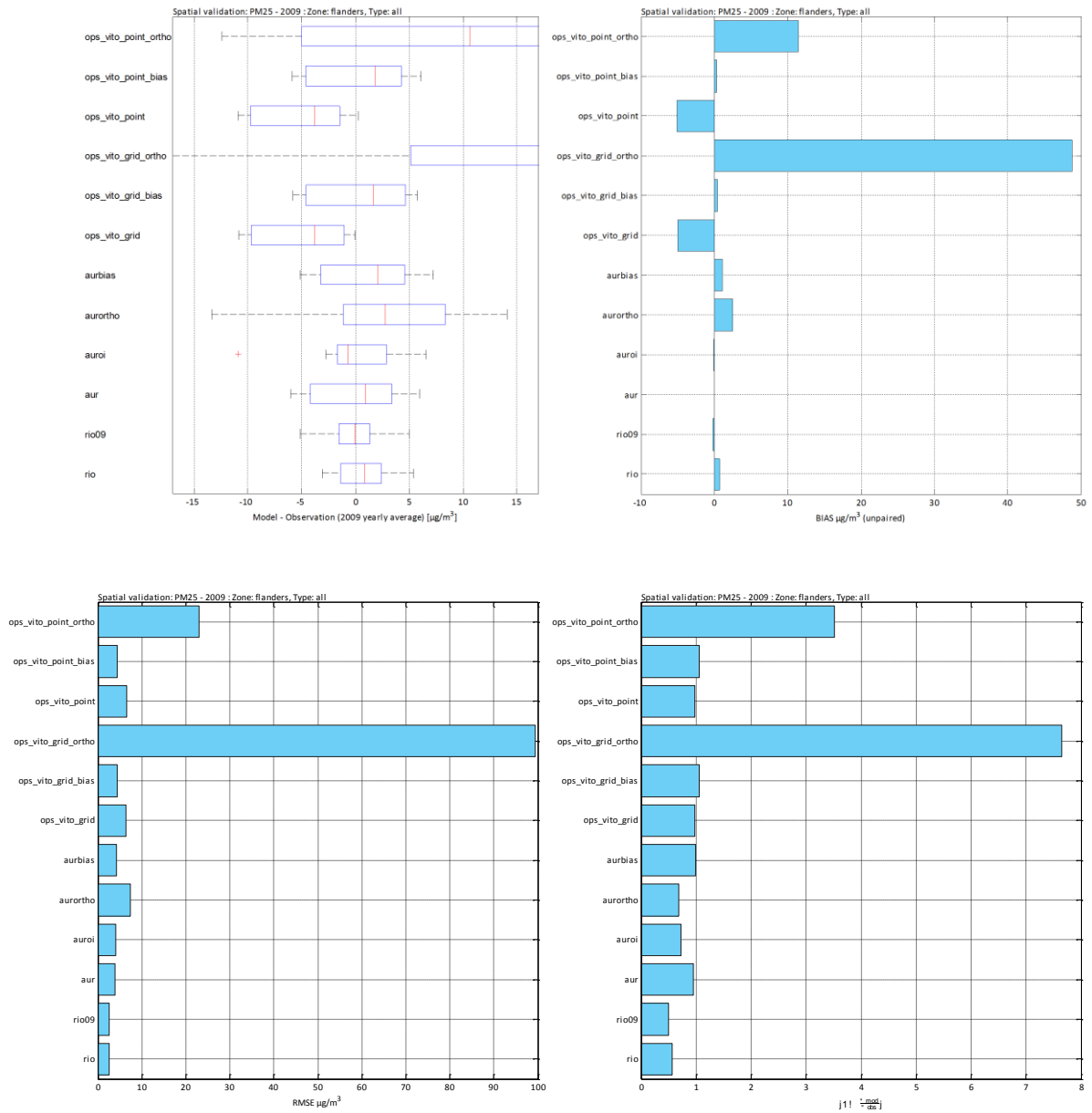
Ruimtelijke validatie PM_{2.5} voor enkel de Vlaamse stations

Voor de PM_{2.5} concentraties op Vlaams grondgebied komt RIO er, op basis van onderstaande plots, als beste model uit. De bespreking is analoog aan die voor PM_{2.5} voor heel België.

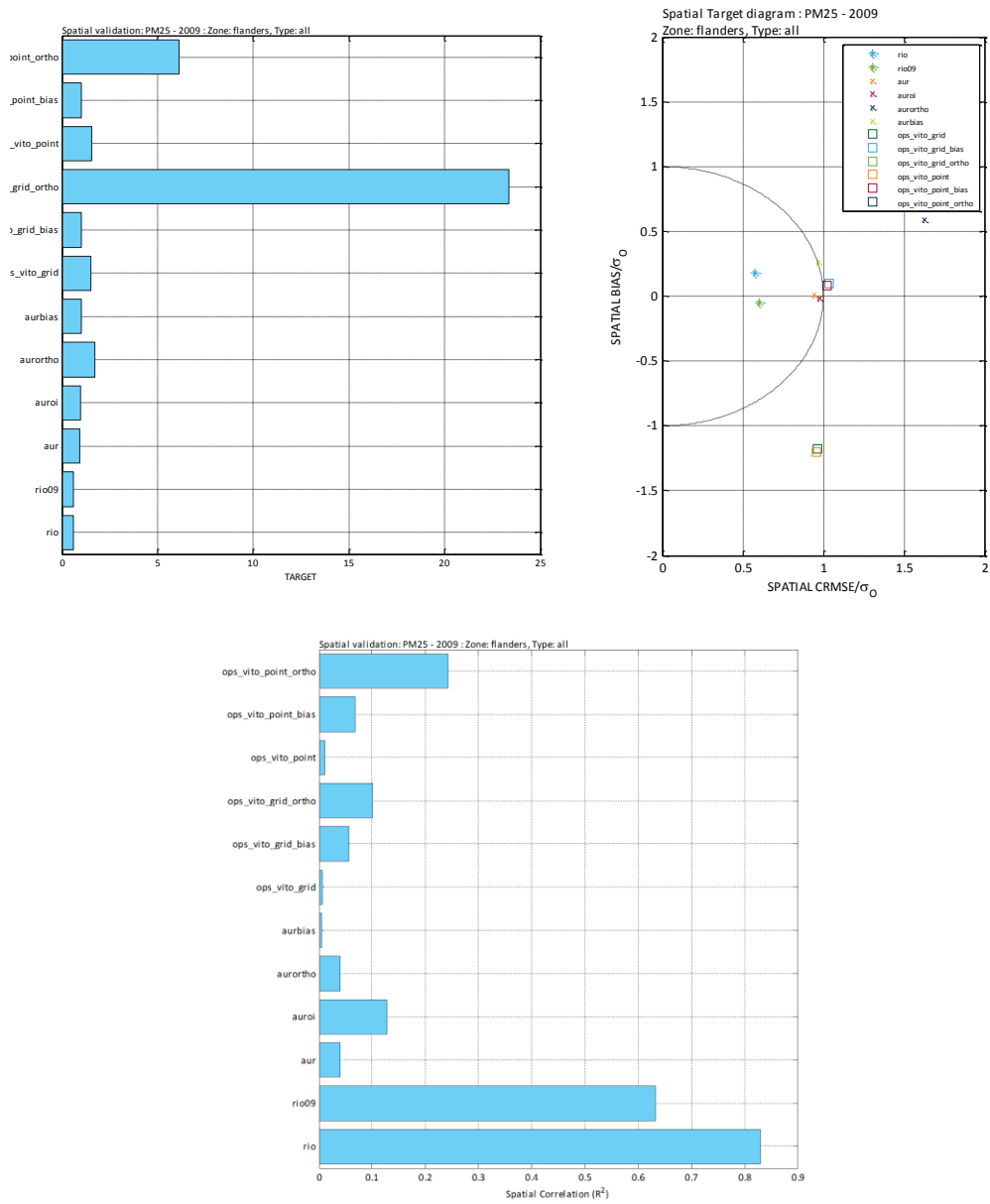


Figuur 69: Ruimtelijke validatie PM_{2.5} enkel voor de Vlaamse stations: scatterplot van het gemeten jaargemiddelde versus modelwaarde.

De ruimtelijke correlatie voor het RIO model bedraagt voor PM_{2.5} 60 – 80 %, terwijl de andere modellen en correctie methodes blijven steken onder de 10 %, enkele uitzonderingen niet te nagesproken. Ook in de target plot is het RIO model het enige model dat min of meer aanvaardbare waarden oplevert en binnen de eenheidskrinkel terecht komt. Eerlijkheidshalve dient wel vermeld te worden dat het aantal stations waarop deze ruimtelijke analyse gebeurd is voor PM_{2.5} iets beperkter is dan voor de overige pollutanten.



Figuur 70: Ruimtelijke validatie $PM_{2.5}$ enkel voor Vlaamse stations: bovenaan links een boxplot van het verschil 'model-observatie' over alle stations, bovenaan rechts de ongepaarde BIAS. Onderaan links de RMSE en onderaan rechts de hellingsparameter van de regressie lijn uit de scatterplot.



Figuur 71: Ruimtelijke validatie $PM_{2.5}$ voor enkel de Vlaamse stations: linksboven en rechtsboven de target waarde en het target diagram, onder is de ruimtelijke correlatie per model afgebeeld.

Kwantitatieve vergelijking ruimtelijke validatie: scoretabel

In onderstaande scoretabellen wordt voor het bepalen van het beste 'overall' model dezelfde methodiek toegepast zoals beschreven bij de temporele validatie.

De vergelijking is gebaseerd op de ruimtelijke correlatie coëfficiënt, de hellingsparameter, het mediaan verschil tussen model en meting en de ruimtelijke RMSE. Hieronder worden per pollutant de resultaten van de score-analyse weergegeven voor alle modellen die voor het Belgische grondgebied zijn opgezet.

Tabel 13: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor NO₂ voor gans België

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias |
|--------------------|------|-------------|-------------|-----------|-------------|-------------|-------------|
| NO2_SPATIAL_CORR | 0 | 10.00 | 9.72 | 4.21 | 5.79 | 3.39 | 3.83 |
| NO2_SPATIAL_DSLOPE | 0 | 4.18 | 10.00 | 6.10 | 0.00 | 0.00 | 5.82 |
| NO2_SPATIAL_MEDERR | 0 | 7.35 | 10.00 | 0.00 | 9.89 | 0.00 | 2.65 |
| NO2_SPATIAL_RMSE | 0 | 10.00 | 9.34 | 2.65 | 6.42 | 3.58 | 2.88 |
| SCORE : | | 31.5 | 39.1 | 13 | 22.1 | 6.97 | 15.2 |

Tabel 14: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor O₃ voor gans België

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias |
|-------------------|------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| O3_SPATIAL_CORR | 0 | 0.00 | 0.00 | 10.00 | 4.73 | 5.27 | 7.79 |
| O3_SPATIAL_DSLOPE | 0 | 2.25 | 1.36 | 10.00 | 4.68 | 5.32 | 9.96 |
| O3_SPATIAL_MEDERR | 0 | 4.10 | 8.32 | 0.00 | 2.35 | 5.90 | 10.00 |
| O3_SPATIAL_RMSE | 0 | 0.00 | 4.99 | 0.00 | 10.00 | 9.83 | 5.01 |
| SCORE : | | 6.34 | 14.67 | 20.00 | 21.76 | 26.33 | 32.76 |

Tabel 15: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM₁₀ voor gans België

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias |
|---------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|
| PM10_SPATIAL_CORR | 0 | 9.79 | 10.00 | 3.81 | 6.19 | 3.54 | 1.31 |
| PM10_SPATIAL_DSLOPE | 0 | 6.50 | 7.26 | 1.92 | 3.50 | 10.00 | 1.77 |
| PM10_SPATIAL_MEDERR | 0 | 5.40 | 4.60 | 0.00 | 9.14 | 3.92 | 10.00 |
| PM10_SPATIAL_RMSE | 0 | 10.00 | 8.00 | 0.00 | 7.14 | 0.00 | 2.86 |
| SCORE : | | 31.70 | 29.85 | 5.73 | 25.97 | 17.46 | 15.95 |

Tabel 16: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM_{2.5} voor gans België

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias |
|---------------------|------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| PM25_SPATIAL_CORR | 0 | 10.00 | 9.61 | 4.91 | 4.93 | 5.07 | 4.06 |
| PM25_SPATIAL_DSLOPE | 0 | 5.89 | 5.87 | 2.39 | 4.13 | 10.00 | 2.13 |
| PM25_SPATIAL_MEDERR | 0 | 2.68 | 9.56 | 0.00 | 10.00 | 1.67 | 7.32 |
| PM25_SPATIAL_RMSE | 0 | 10.00 | 9.55 | 4.75 | 4.04 | 0.00 | 5.25 |
| SCORE : | | 28.58 | 34.59 | 12.04 | 23.10 | 16.74 | 18.76 |

In volgende tabellen wordt dezelfde analyse samengevat, maar dan voor het Vlaams grondgebied.

Tabel 17: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor NO₂ voor de Vlaamse stations

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias | ops_rivm_grid | ops_rivm_grid_bias | ops_rivm_grid_ortho | ops_rivm_point | ops_rivm_point_bias | ops_rivm_point_ortho | ops_vito_grid | ops_vito_grid_bias | ops_vito_grid_ortho | ops_vito_point | ops_vito_point_bias | ops_vito_point_ortho |
|--------------------|------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|--------------------|---------------------|----------------|---------------------|----------------------|---------------|--------------------|---------------------|----------------|---------------------|----------------------|
| NO2_SPATIAL_CORR | 1 | 9.71 | 6.14 | 7.52 | 0.00 | 4.43 | 6.23 | 8.75 | 6.02 | 4.27 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 10.00 | 7.60 | 5.57 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| NO2_SPATIAL_DSLOPE | 1 | 9.67 | 9.74 | 7.30 | 4.78 | 10.00 | 7.25 | 1.96 | 1.75 | 6.66 | 1.75 | 1.53 | 4.74 | 5.34 | 5.21 | 6.24 | 4.79 | 4.65 | 3.96 |
| NO2_SPATIAL_MEDERR | 1 | 3.59 | 7.29 | 0.00 | 10.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 6.90 | 8.86 | 4.27 | 8.66 | 5.38 | 0.71 | 7.78 | 8.49 | 6.12 | 4.23 | 4.62 |
| NO2_SPATIAL_RMSE | 1 | 6.85 | 2.59 | 0.00 | 4.11 | 0.00 | 0.00 | 7.41 | 10.00 | 7.60 | 5.14 | 4.86 | 2.14 | 9.48 | 9.90 | 8.46 | 5.16 | 3.90 | 3.16 |
| SCORE : | | 29.8 | 25.8 | 14.8 | 18.9 | 14.4 | 13.5 | 18.1 | 24.7 | 27.4 | 11.2 | 15 | 12.3 | 25.5 | 30.5 | 28.8 | 16.1 | 12.8 | 11.7 |

Tabel 18: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor O₃ voor de Vlaamse stations

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | auroi | aurortho | aurbias |
|-------------------|------|-------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| O3_SPATIAL_CORR | 1 | 0.00 | 0.00 | 10.00 | 7.35 | 2.82 | 7.18 |
| O3_SPATIAL_DSLOPE | 1 | 0.00 | 0.00 | 5.13 | 10.00 | 8.70 | 4.87 |
| O3_SPATIAL_MEDERR | 1 | 5.48 | 4.52 | 0.00 | 1.96 | 10.00 | 6.35 |
| O3_SPATIAL_RMSE | 1 | 1.45 | 2.90 | 0.00 | 10.00 | 9.78 | 7.10 |
| SCORE : | | 6.92 | 7.43 | 15.13 | 29.31 | 31.30 | 25.50 |

Tabel 19: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM₁₀ voor de Vlaamse stations

| MODEL | ZONE | rio | rio09 | aur | aur01 | aurortho | aurbias | ops_vito_grid | ops_vito_grid_bias | ops_vito_grid_ortho | ops_vito_point | ops_vito_point_bias | ops_vito_point_ortho |
|---------------------|------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|---------------|--------------------|---------------------|----------------|---------------------|----------------------|
| PM10_SPATIAL_CORR | 1 | 9.31 | 10.00 | 4.69 | 6.15 | 4.52 | 3.88 | 4.43 | 3.37 | 5.31 | 5.31 | 4.14 | 5.64 |
| PM10_SPATIAL_DSLOPE | 1 | 7.26 | 7.76 | 4.72 | 5.05 | 6.81 | 4.62 | 4.78 | 4.61 | 8.62 | 4.95 | 4.79 | 10.00 |
| PM10_SPATIAL_MEDERR | 1 | 6.48 | 7.35 | 0.00 | 10.00 | 5.76 | 5.37 | 0.00 | 4.84 | 5.16 | 0.00 | 4.74 | 2.39 |
| PM10_SPATIAL_RMSE | 1 | 9.93 | 9.47 | 0.00 | 10.00 | 1.00 | 9.00 | 0.00 | 9.31 | 0.00 | 0.00 | 9.64 | 0.00 |
| SCORE : | | 32.98 | 34.58 | 9.41 | 31.20 | 18.09 | 22.87 | 9.21 | 22.13 | 19.08 | 10.26 | 23.32 | 18.02 |

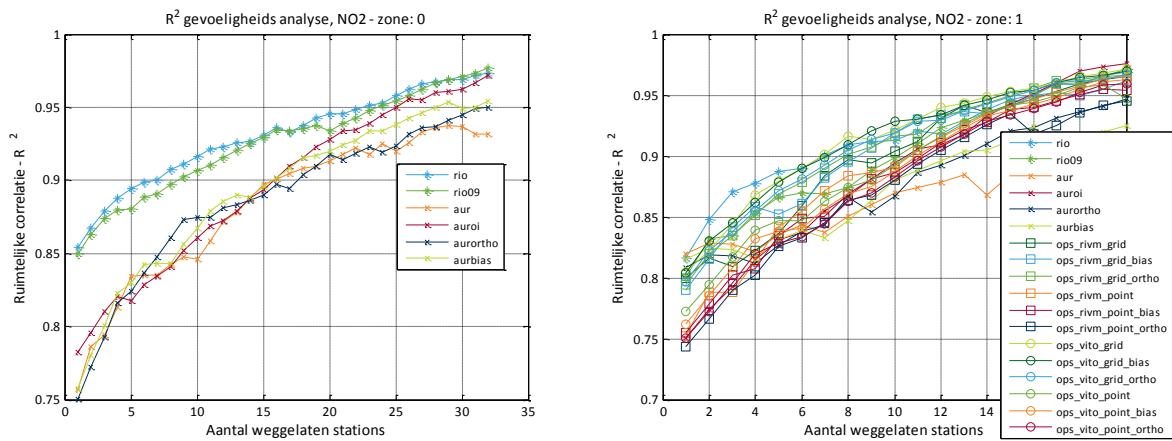
Tabel 20: Scoretabel voor de ruimtelijke validatie voor PM_{2,5} voor de Vlaamse stations

| | ZONE | rio | rio09 | aur | aur01 | aurortho | aurbias | ops_vito_grid | ops_vito_grid_bias | ops_vito_grid_ortho | ops_vito_point | ops_vito_point_bias | ops_vito_point_ortho |
|---------------------|------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|---------------|--------------------|---------------------|----------------|---------------------|----------------------|
| PM25_SPATIAL_CORR | 1 | 10.00 | 8.71 | 4.85 | 5.43 | 4.86 | 4.63 | 4.64 | 4.96 | 5.25 | 4.67 | 5.04 | 6.18 |
| PM25_SPATIAL_DSLOPE | 1 | 9.28 | 10.00 | 5.30 | 7.60 | 8.08 | 4.98 | 4.99 | 4.26 | 0.00 | 5.01 | 4.29 | 0.00 |
| PM25_SPATIAL_MEDERR | 1 | 7.76 | 10.00 | 7.60 | 8.28 | 2.85 | 4.65 | 0.05 | 5.60 | 0.00 | 0.17 | 5.35 | 0.00 |
| PM25_SPATIAL_RMSE | 1 | 10.00 | 9.98 | 6.06 | 5.69 | 0.00 | 5.30 | 0.00 | 4.95 | 0.00 | 0.00 | 5.05 | 0.00 |
| PM25_SPATIAL_TARGET | 1 | 10.00 | 9.98 | 6.06 | 5.69 | 0.00 | 5.30 | 0.00 | 4.95 | 0.00 | 0.00 | 5.05 | 0.00 |
| SCORE : | | 47.05 | 48.67 | 29.87 | 32.70 | 15.79 | 24.86 | 9.68 | 24.72 | 5.25 | 9.85 | 24.77 | 6.18 |

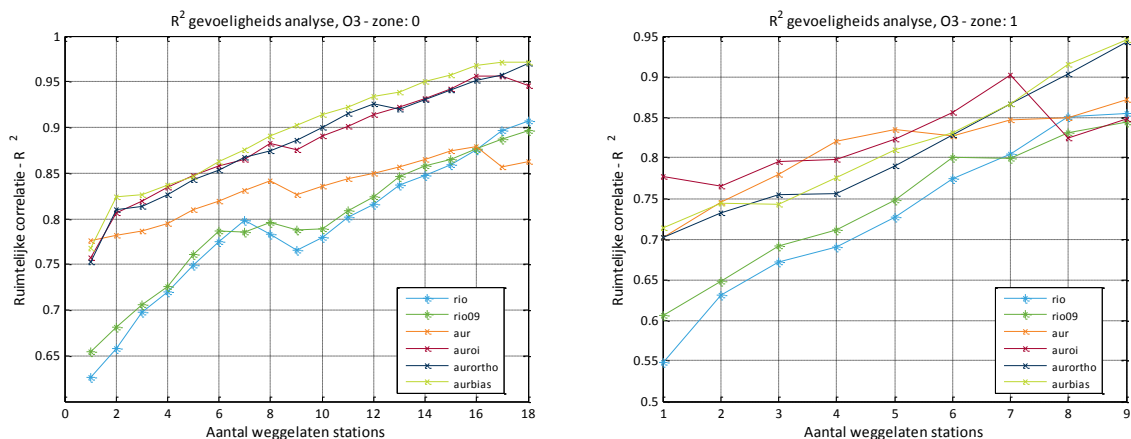
Robuustheid van de ruimtelijke correlatie

Anders dan bij de temporele validatie, waar een volledige tijdsreeks van uurlijkse waarden gedurende een volledige jaar beschikbaar is voor het afleiden van validatie statistieken, zijn er in geval van de ruimtelijke validatie analyse slechts een beperkt aantal stations. Een aantal parameters, en niet in het minst de ruimtelijke correlatie coëfficiënt, kunnen heel gevoelig zijn aan eventuele outliers in de data. Hierdoor zou een vertekend beeld gegenereerd kunnen worden, waardoor bepaalde modellen misschien onterecht een hoge/lage ruimtelijke correlatie coëfficiënt toebedeeld krijgen. Een zelfde argument geldt ook voor de hellingsparameter, terwijl de andere statistieken die besproken werden iets minder gevoelig zijn hiervoor.

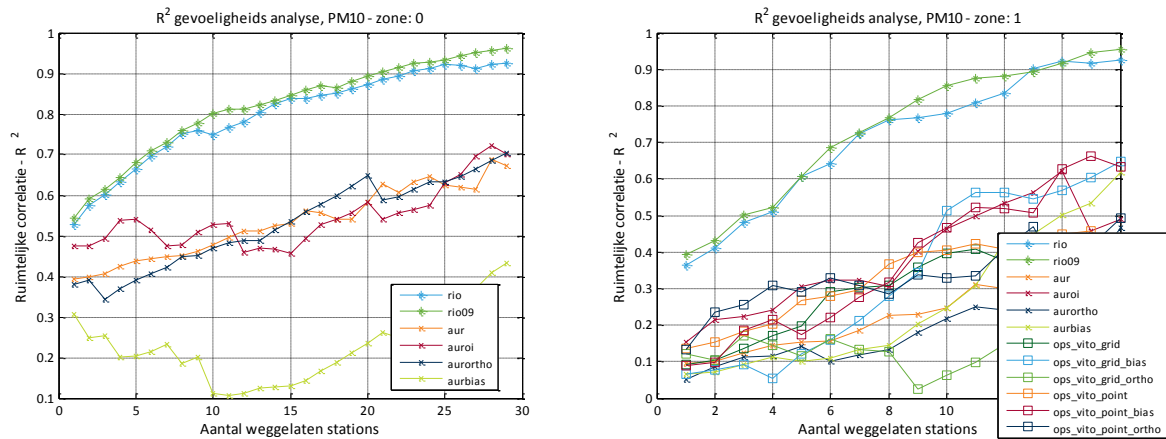
Om de robuustheid van de ruimtelijke correlatie coëfficiënt te testen werden op vraag van de opdrachtgever progressief de slechtste stations weggelaten en werd de ruimtelijke correlatie telkens opnieuw berekend. Dit houdt in dat de paren van model en observatie werden gerangschikt volgens absolute waarde van het verschil tussen beide en dat de ruimtelijke correlatie coëfficiënt progressief werd berekend door weglaten van de N modelobservatie koppels met het grootste verschil. Onderstaande figuren tonen telkens de ruimtelijke correlatie coëfficiënt die uiteraard progressief toeneemt als functie van het aantal weggelaten "slechte stations".



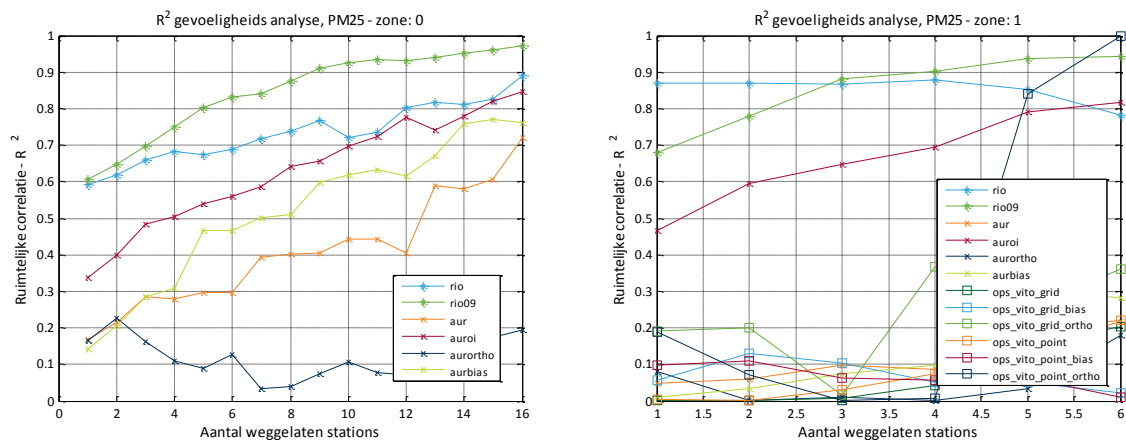
Figuur 72: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor NO₂ als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen.



Figuur 73: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor O₃ als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen.



Figuur 74: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor PM_{10} als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen.



Figuur 75: Gevoeligheidsanalyse voor de ruimtelijke correlatie coëfficiënt voor $PM_{2.5}$ als functie van het aantal weggelaten 'slechte' stations. Links voor gans België, rechts voor Vlaanderen.

Uit de figuren is duidelijk dat de conclusies van vorige sectie in grote lijnen bevestigd worden.

Op Belgisch niveau is voor NO_2 , PM_{10} en $PM_{2.5}$ de ruimtelijke correlatie het best voor het RIO model. Die analyse lijkt bovendien ook heel robuust te zijn als functie van het aantal weggelaten stations. Bovendien lijkt het ook te gelden voor PM_{10} en $PM_{2.5}$ op Vlaams niveau. Voor NO_2 op Vlaams niveau liggen de resultaten relatief dicht bij elkaar. RIO en VLOPS zijn aan elkaar gewaagd, met licht betere ruimtelijke correlatie in de OPS varianten. Voor O_3 scoort de gecorrigeerde AURORA iets beter dan het RIO model en dit zowel op Belgisch als op Vlaams niveau. De gekozen correctie techniek op zich lijkt niet erg veel uit te maken. De eenvoudige bias correctie lijkt op Belgisch niveau iets beter te presteren.

Er dient tenslotte wel opgemerkt te worden dat de correcties niet herberekend werden t.o.v. het aantal weggelaten stations, er werd uitgegaan van de correcties bepaald op alle stations. Deze robuustheids analyse zou in feite dus nog verfijnd kunnen worden door de verschillende modelcorrecties en de RIO interpolaties ook te doen met het weglaten van het slechtste station. Het is echter wel zo dat de rangschikking dan kan veranderen als functie van het aantal weggelaten stations.

Discussie en Besluit

Ter inleiding

In de vorige hoofdstukken werd getracht om op een wetenschappelijk onderbouwde manier een antwoord te geven op de vraag welke modelleringstechniek het best geschikt is om grootschalige concentratiekaarten aan te maken. Om hiervoor tot een evenwichtige besluitvorming te komen, dienen verschillende aspecten in overweging genomen te worden. Zo spelen naast kwantitatieve ook kwalitatieve aspecten een belangrijke rol. Inderdaad, hoewel in deze studie sterk de nadruk werd gelegd op een kwantitatieve, wetenschappelijk onderbouwde vergelijking tussen verschillende luchtkwaliteitsmodellen, waarbij de kwaliteit van de modellen mathematisch geanalyseerd werd op basis van een aantal standaard indicatoren, spelen ook kwalitatieve aspecten als toepassingsdomein, onderhoud, uniformiteit en continuïteit een belangrijke rol. In de besluitvorming dienen dan ook zowel de kwantitatieve als de kwalitatieve overwegingen meegenomen te worden. De initiële vraag 'Welke techniek is het meest geschikt voor het modelleren van generieke concentratiekaarten?' vraagt daarom om een genuanceerd antwoord.

Vanuit deze overwegingen proberen we in dit besluit toch een antwoord op de initiële vraag te formuleren. Hiertoe vatten we enkele algemene observaties uit voorliggend onderzoek samen, lijsten we enkele aandachtspunten bij het maken van specifieke keuzes op, en doen we een eerste suggestie voor een 'beste geïntegreerde systematiek' die ingezet kan worden voor alle pollutanten en die maximaal afgestemd is op de diverse toepassingen. Hierbij houden we zoveel mogelijk rekening met de feedback die we vanuit de stuurgroep ontvingen. Verder willen we benadrukken dat dit onderzoek en bijhorende conclusies slechts een eerste aanzet zijn om tot een definitief antwoord te komen en dat de verdere besluitvorming een dynamisch gegeven is.

Algemene observaties uit voorliggend onderzoek

Uit de temporele analyse werd duidelijk dat het RIO-model over de hele lijn als beste model naar voor komt, en dit zowel op basis van de standaard indicatoren als op basis van de overschrijdingsindicatoren. Het ongecorrigeerde, deterministische AURORA-model scoort het minst goed. Het AURORA-model gekalibreerd aan de hand van meetgegevens op basis van verschillende technieken (eenvoudige biascorrectie, bias correctie met orthogonale regressie, 'Optimal Interpolation') levert duidelijk betere resultaten dan het ruwe AURORA-model, maar de resultaten blijven systematisch ondergeschikt aan de resultaten bekomen met het RIO-model. Met VLOPS kunnen omwille van modeltechnische redenen geen tijdsreeksen gegenereerd worden. In de temporele analyse werd VLOPS dan ook niet meegenomen. Er kan dan ook besloten worden dat RIO het best beschikbare model is om de temporele aspecten van de luchtkwaliteit in Vlaanderen (en bij uitbreiding in België) voor de onderzochte pollutanten te beschrijven.

Uit de ruimtelijke analyse werd duidelijk dat onderscheid gemaakt dient te worden naargelang de beschouwde pollutant.

Voor de fijn stof fracties (PM₁₀ en PM_{2.5}) slaagt het RIO-model er het best in het ruimtelijk patroon van de geobserveerde jaargemiddelde concentraties te genereren. De deterministische modellen AURORA en VLOPS blijven voor fijn stof ver achter, zelfs wanneer ze met verschillende correctie- en data-assimilatie technieken gecorrigeerd worden.

Voor O₃ slaagt het met 'Optimal Interpolation' gecorrigeerde AURORA-model er het best in om het ruimtelijke O₃ patroon te reproduceren. Het is niet onmiddellijk duidelijk waarom het RIO-model specifiek voor O₃ matiger presteert, maar het succes van AURORA zou te wijten kunnen zijn aan de expliciete doorrekening van het transport en het fotochemisch evenwicht van de atmosferische componenten. Om hierover een meer gefundeerde uitspraak te kunnen doen, is verder onderzoek echter nodig. Met VLOPS kan geen O₃ worden doorgerekend.

Voor NO₂ dient onderscheid gemaakt te worden tussen modellering voor Vlaanderen of België. Op Belgisch niveau slaagt het RIO-model er het best in het ruimtelijk patroon van de geobserveerde jaargemiddelde NO₂ concentraties te verklaren. Op Vlaams niveau zijn het RIO- en het VLOPS- model met biascorrectie (eenvoudige biascorrectie of op basis van orthogonale regressie) aan elkaar gewaagd. De specifieke parametrisatie voor de omrekening van NO_x naar NO₂ die voor VLOPS berekeningen dient te gebeuren, heeft relatief weinig invloed op de verklarende kracht van het model.

Verder werd duidelijk dat de performantie van het huidige operationele RIO-model enerzijds en van het RIO-model dat enkel data van 2009 gebruikt (RIO 09) anderzijds erg vergelijkbaar is. Beide modelvarianten presteren nagenoeg equivalent. Dit is een niet onbelangrijke observatie vanuit overwegingen rond continuïteit. Inderdaad, zoals in deze studie voor 2009 werd gedaan, kan het RIO-model voor eender welk zichtjaar volledig consistent gemaakt worden. Hiermee wordt bedoeld dat het RIO-model voor een gewenst jaar kan aangepast worden zodanig dat het enkel data van dat specifieke jaar gebruikt (het onderliggend landgebruikspatroon blijft in eerste instantie voor ieder jaar hetzelfde). Deze aanpak lijkt op het eerste zicht de beste keuze, maar heeft implicaties voor continuïteit over verschillende jaren. Continuïteit kan enkel gegarandeerd worden indien over de jaren heen met eenzelfde set van meetstations gewerkt wordt. In het geval dat er meetstations bijkomen of verdwijnen, kunnen systematische biases in de buurt van die meetstations worden geïntroduceerd. Aangezien de performantie van RIO en RIO 09 vergelijkbaar is, lijkt het dan ook het best om toch te opteren voor het RIO-model dat gebaseerd is op langlopende gemiddelden. Zelfs al impliceert dat voor de configuratie van het model het gebruik van meetgegevens van andere jaren dan het zichtjaar waarvoor men wenst te modelleren.

Verdere overwegingen

Eén van de belangrijkste criteria bij het selecteren van een 'geïntegreerde systematiek' is het toepassingsgebied voor de resulterende grootschalige concentratiekaarten. In die zin is het belangrijk op te merken dat concentratiekaarten zowel voor rapportering als voor beleidsevaluatie gebruikt worden, en dit zowel op Vlaams als op Belgisch niveau. Deze toepassingsgebieden gaan van near real time mapping en korte termijn voorspellingen (IRCEL), over actuele (VMM-IRCEL-LNE) en prognose-toepassingen (LNE-MIRA) naar input voor beleidsinstrumenten (geoloket / luchttoets, IMPACT, IFDM-traffic, etc.). In de huidige context komt het voor dat, door verschillende modelkeuzes bij verschillende instanties, voor eenzelfde jaar en eenzelfde pollutant verschillende kaarten worden gepubliceerd. Dit werkt zeer verwarrend en kan leiden tot verschillen in de besluitvorming op het Vlaamse en het Belgische beleidsniveau. Om dit te vermijden, zouden in de toekomst bij voorkeur een zelfde model gebruikt moeten worden voor zowel rapportering als voor beleidsstudies. Continuïteit tussen een actueel jaar en een toekomstjaar is immers cruciaal voor het beleid. Dit heeft als gevolg dat een bepaald model, ondanks het feit dat het voor een specifieke toepassing als 'best beschikbare techniek' uit de bus komt, misschien beter niet gekozen kan worden indien het niet ook breder (vb. prognoses) inzetbaar is. Voorbeelden hiervan zijn bv: 'de best beschikbare techniek' is toepasbaar voor historische kaarten maar niet voor toekomstige prognoses, 'de best beschikbare techniek' voor toepassingen op Vlaams niveau is niet noodzakelijk (eenvoudig) uitbreidbaar naar België, 'de best beschikbare techniek' voor concentratiekaarten is niet noodzakelijk inzetbaar voor het berekenen van deposities en/of overschrijdingen, 'de best beschikbare techniek' voor een bepaalde toepassing kan niet voor alle gewenste temporele en ruimtelijke resoluties ingezet worden ...

Naast toepassingsgebied (assessment versus voorspellingen / concentraties versus deposities versus overschrijdingen), toepassingsdomein (Vlaanderen versus België) en temporele en ruimtelijke modelresolutie kunnen de overige criteria die een rol spelen bij het bepalen van een 'best beschikbare techniek' samengevat worden als (i) de vereiste model-input (emissies, meteo, randvoorwaarden, meetgegevens ...), (ii) de vereiste rekentijd en -kracht en (iii) de 'hanteerbaarheid' van de modellen (model wordt ontwikkeld, onderhouden en gerund door VITO (cfr. AURORA) versus model wordt ontwikkeld en onderhouden door VITO maar wordt ook door administraties gerund (cfr. RIO; IRCEL) en model wordt extern ontwikkeld, door VITO onderhouden en gerund door zowel VITO als administraties (cfr. VLOPS; VMM). Bij het laatste criterium dient opgemerkt te worden dat vanuit VITO de bereidheid bestaat om voor alle 'closed-source' modellen de huidige situatie te herbekijken. Dit houdt in dat op termijn modelcodes breder beschikbaar gesteld zouden kunnen worden, dat VITO in opleidingen zou kunnen voorzien en dat modelcode samen met de Vlaamse Overheid wordt ontwikkeld en onderhouden.

Verder is het belangrijk zich te realiseren dat, zoals reeds hoger aangegeven, voorliggend project een moment-opname beschrijft. Inderdaad, voor alle modellen werd de meest recente modelversie in de vergelijking opgenomen. Concreet betekent dit (i) dat niet alle modellen/modelketens die in het verleden in specifieke studies gebruikt werden (bijvoorbeeld IMMI-studie) in de vergelijking zijn opgenomen, (ii) dat modellen voortdurend evolueren en er voor alle modellen op termijn nog verbeteringen mogelijk zijn, en (iii) dat niet alle modellen even ver staan in hun ontwikkeling en ze bijgevolg niet alle even robuust zijn en/of een even grote groei-marge hebben. Daarbij komt dat alle modellen onderhevig zijn aan voortschrijdend wetenschappelijk inzicht. Modellen zijn geen statische entiteiten. Verbeterde parametrisaties, beschrijvingen van fysische processen, correctiemethodes kunnen in de toekomst worden ontwikkeld. Het is in deze context niet onbelangrijk een versiebeheer te voorzien voor het bewaren van grootschalige concentratiekaarten, voor de onderliggende modelversies en de gebruikte invoer gegevens (meetgegevens, emissies, meteorologische data, randvoorwaarden) van de modellen. Dit moet toelaten om op gezette tijdstippen de modelversies aan te passen aan het voortschrijdend wetenschappelijk inzicht en bestaande kaarten opnieuw te genereren op basis van verbeterde procedures. Op die manier wordt de continuïteit gegarandeerd, maar behoudt men de mogelijkheid het kaartenpatrimonium up-to-date te houden.

Bovenstaande beschouwingen rond verder onderzoek en voortschrijdend inzicht brengen ons tot het volgende aandachtspunt. Modelontwikkeling kost geld en, gegeven de economische context, speelt ook de kost om verschillende modellen met gelijkaardige performanties verder te ontwikkelen en te onderhouden een rol. In de nabije toekomst zou een weloverwogen keuze tussen de verschillende modellen die momenteel op regionale schaal worden ingezet (RIO/AURORA/VLOPS/BelEUROS ...) zich kunnen opdringen. Het mag echter duidelijk zijn dat het doel van deze studie was om verschillende modellen te valideren en op basis van de validatie-parameters op een objectieve manier te bepalen welke techniek de best mogelijke concentratiekaarten per pollutant kan berekenen. Een debat rond het modellenpatrimonium zou in de toekomst, rekening houdend met de resultaten uit voorliggend en gepland verder onderzoek, gevoerd kunnen worden.

Hieronder wordt een eerste suggestie gegeven voor een 'beste geïntegreerde systematiek'. Om deze suggestie ietwat te kaderen, worden eerst de belangrijkste noden per toepassingsgebied van luchtkwaliteitsmodellering kort opgelijst:

- **Near real time mapping:** Alle pollutanten zijn belangrijk. Een snelle doorrekening is van belang. De mogelijkheid om uurlijkse kaarten te genereren is een noodzaak.
- **Operationele voorspellingen:** Een snelle doorrekening is van cruciaal belang. De productie van kaarten op dagbasis (max 1h, gemiddelde) lijkt voldoende.
- **Historische assessments:** Alle pollutanten zijn belangrijk. Een nauwkeurige reconstructie van de geobserveerde waarden uit het verleden is essentieel. De snelheid van de berekening is minder belangrijk, zij het niet volledig irrelevant. Bijvoorbeeld, voor de jaarlijkse doorrekening van tijdseries voor verzurende en vermestende deposities is de snelheid van de berekening wel degelijk belangrijk.
- **Scenario's en lange termijn prognoses:** Er is nood aan een deterministisch model dat emissie-informatie, meteogegevens en randvoorwaarden kan verwerken tot concentraties. Bij voorkeur wordt hierbij rekening gehouden met de complexe chemische mechanismen in de atmosfeer. Er zijn geen metingen beschikbaar om de toekomstprognoses te kalibreren. Een kalibratieprocedure aan de hand van het referentiejaar lijkt noodzakelijk maar de beste procedure is nog niet eenduidig bepaald (o.a. voorwerp van discussie binnen FAIRMODE). Een snelle doorrekening biedt voordeel wanneer veel verschillende scenario's gevraagd zijn.
- **CAR (luchttoets) (basisjaar + toekomst):** Alle pollutanten zijn belangrijk (PM₁₀, PM_{2.5}, NO₂, O₃). Bovenop de achtergrond worden lokaal op straatniveau de pollutanten gemodelleerd, waarbij de O₃ concentratie nodig is voor de berekening van NO₂. Temporeel is voor O₃ enkel een jaarlijkse waarde nodig. De resolutie van de achtergrond is nu 3x3 km², maar voorkeur gaat uit naar een resolutie van 1x1 km². Dagoverschrijdingen van PM₁₀ worden afgeleid op basis van jaargemiddelde.
- **IFDM-traffic (basisjaar + toekomst):** Alle pollutanten zijn belangrijk (PM₁₀, PM_{2.5}, NO₂, O₃). Bovenop de achtergrond worden lokaal op straatniveau de pollutanten gemodelleerd waarbij O₃ (voor NO₂) belangrijk is. Temporeel is voor O₃ een uurlijkse variatie nodig. De resolutie van de achtergrond is nu 3x3 km² maar voorkeur gaat uit naar een resolutie van 1x1 km² omdat in kader van MER's er regelmatig kritiek is rond bruske overgangen. Dagoverschrijdingen van PM₁₀

worden gemodelleerd, temporeel is momenteel dus ook PM₁₀ dag per dag beschikbaar. IMPACT (opvolger IFDM industrie): cfr. IFDM-traffic.

- **Verzuring en vermisting:** Hiervoor dient de depositie van NH_y, NO_y en SO_x berekend te worden. Dit veronderstelt een deterministisch model om minstens de depositie-snelheid door te rekenen. Een correcte bepaling van de secundaire anorganische aerosol vorming voor sulfaat, nitraat en ammonium veronderstelt tevens een berekening van de chemische omzetting. Het gebruik van bias correctie of data assimilatie schema's voor concentraties heeft (momenteel) geen impact op de depositiewaarden. Hiervoor is verder onderzoek nodig. Belangrijk hierbij is zich te realiseren dat de droge verzurende depositie niet rechtstreeks gemeten wordt. Regionaal over Vlaanderen gespreide metingen van de droge depositiesnelheid zijn momenteel niet beschikbaar. Pas na een dergelijke (eenmalige) meetcampagne wordt grondige validatie van depositieberekeningen met de verschillende mogelijk.

Besluit

Afgaand op bovenstaande observaties en overwegingen en rekening houdend met de feedback die we van de stuurgroep ontvingen, formuleren we hieronder een eerste besluit. Deze eerste conclusie kan als leidraad dienen voor verdere discussie en kan ons in de toekomst helpen specifieke keuzes te maken om op termijn te komen tot een compact maar efficiënt modellenarsenaal, bestaande uit complementaire modellen die bovendien in kosten beheersbaar zijn.

Uit bovenstaande observaties is duidelijk dat de deterministische modellen (AURORA en VLOPS) gekalibreerd/geassimileerd moeten worden met meetgegevens om eenzelfde performantie te bekomen als het relatief eenvoudige RIO-interpolatiemodel, dat naast meetgegevens enkel een onderliggende proxy gebaseerd op landgebruik gebruikt. In die zin kan men zich de vraag stellen waarom ingewikkelde modellen, die zowel meteo- als emissie-input en randvoorwaarden nodig hebben, bovendien zeer veel CPU vereisen, en uiteindelijk nog gekalibreerd/geassimileerd moeten worden, gebruikt zouden moeten worden voor het bepalen van luchtkwaliteitskaarten van een voorbije periode (assessment). Het lijkt dan ook evident dat het RIO-model sowieso behouden moet blijven in het modellenarsenaal.

Het is echter duidelijk dat RIO alleen niet geschikt is om aan alle toepassingen te voldoen. Naast RIO moet minstens één deterministisch model worden weerhouden om bijvoorbeeld de impact van emissiescenario's op de luchtkwaliteit in te kunnen schatten en om luchtkwaliteit te kunnen voorspellen. Hierbij dienen een aantal belangrijke opmerkingen gemaakt te worden:

- Zowel AURORA als VLOPS presteren pas goed indien ze gekalibreerd/geassimileerd worden met meetgegevens. Voor de toekomst zijn deze meetgegevens echter niet beschikbaar.
- Vanuit beleidsstandpunt is continuïteit belangrijk: referentie en toekomstjaar moeten met eenzelfde model worden doorgerekend om conclusies te kunnen trekken op vlak van autonome evolutie van luchtkwaliteit en evolutie van luchtkwaliteit onder invloed van bijkomende maatregelen ihkv beleidsplannen.
- Voor een aantal toepassingsgebieden is de beschikbaarheid van uurlijkse concentratievelden noodzakelijk, zodat niet alleen bvb een chemisch evenwicht op uurlijkse basis kan worden opgelegd (bvb in een koppeling met IFDM/OSPM), maar bvb ook op consistente manier een aantal overschrijdingen van een EU norm gedurende het jaar bepaald kan worden.
- Tenslotte is de modelresolutie een belangrijke parameter. Deze situeert zich voor de hier beschouwde modellen tussen de 1 en de 4 km maar is in principe voor elk model nog aanpasbaar. Hierbij moeten we echter stellen dat zelfs op 1 km resolutie de modellen niet geschikt zijn om gradiënten op lokale schaal afdoende te modelleren. Hiervoor zijn bijkomende tools nodig zoals IFDM, OSPM of CAR die echter buiten het bestek van deze studie vallen. De tools voor de lokale schaal hebben allen echter nood aan input vanuit de regionale schaal en o.a. hiervoor dient dus de opmaak van de grootschalige concentratiekaarten.

Om de 'best beschikbare techniek' voor assessment studies (opzet van deze studie) te garanderen en tegelijkertijd te verzekeren dat continuïteit tussen assessment en eventuele prognoses bestaat, stellen we voor bovenstaand modellenarsenaal als volgt in te zetten:

- Voor assessments (actuele situatie): RIO, gecombineerd met IFDM indien hoge resolutie noodzakelijk is.
- Voor lange termijn prognoses: trendbepaling met gekozen deterministisch model toegepast op de RIO kaart voor de actuele situatie, gecombineerd met IFDM indien hoge resolutie noodzakelijk is.

Voorlopig laten we de keuze voor een deterministisch model in het midden. Dit voornamelijk omdat momenteel niet alle elementen voorhanden zijn om een gefundeerde keuze te kunnen maken. Criteria die ten opzichte van elkaar afgewogen moeten worden, werden hierboven reeds opgesteld. Mogelijk verder onderzoek om de keuze op een wetenschappelijk nog meer gefundeerde manier te kunnen maken, situeert zich op volgende vlakken:

- Hoe verhouden de performanties van AURORA en VLOPS zich nadat ze gekoppeld zijn met een hoge-resolutie model als IFDM en/of OSPM/CAR?
- Hoe verhouden de performanties van de modellen zich bij koppeling met het RIO interpolatiemodel? Of nog, kan de dynamische validatie die recent voor BeLEUROS werd bekeken, doorgetrokken worden naar AURORA en VLOPS en werkt het berekenen van trends en ze vervolgens toepassen op RIO even goed voor beide modellen?
- Hoe presteren AURORA en VLOPS voor het berekenen van deposities? In dit project zijn depositiewaarden buiten beschouwing gelaten. Daarbij komt dat depositieberekeningen moeilijk te valideren zijn wegens gebrek aan een volledige set metingen maar dat de vragen vanuit het beleid (o.a. in het kader van de Natura 2000 richtlijn) wel toenemen. Een adequate modelleringstrategie dringt zich hier dus ook op.

Deze en andere onderzoekspistes kunnen in het kader van ATMOSYS, Referentietask 2013, en/of in eventuele vervolgstudies worden opgenomen.

Referenties

- DuMouchel, W. H., and F. L. O'Brien. "Integrating a Robust Option into a Multiple Regression Computing Environment." *Computer Science and Statistics: Proceedings of the 21st Symposium on the Interface*. Alexandria, VA: American Statistical Association, 1989.
- Holland, P. W., and R. E. Welsch. "Robust Regression Using Iteratively Reweighted Least-Squares." *Communications in Statistics: Theory and Methods*, A6, 1977, pp. 813–827.
- Huber, P. J. *Robust Statistics*. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc., 1981.
- Street, J. O., R. J. Carroll, and D. Ruppert. "A Note on Computing Robust Regression Estimates via Iteratively Reweighted Least Squares." *The American Statistician*. Vol. 42, 1988, pp. 152–154.
- Janssen, L. en Janssen, S., *Optimalisatie OPS model, 2006*, VITO rapport IMS/R/2006/0405, pp. 82.
- Janssen, S.; Dumont, G.; Fierens, F.; Mensink, C. Spatial interpolation of air pollution measurements using CORINE land cover data. *Atmospheric Environment* 2008, 42, 4884–4903.
- Janssen, S.; Dumont, G.; Fierens, F.; Deutsch, F.; Maiheu, B.; Celis, D.; Trimpeneers, E.; Mensink, C. Land use to characterize spatial representativeness of air quality monitoring stations and its relevance for model validation. *Atmospheric Environment* 2012, 59, 492–500.
- Hollingsworth, A. and Lönnberg, P., 1986: The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data. Part I: The wind field. *Tellus*, 38A, 111-136.
- Hooyberghe, J.; Mensink, C.; Dumont, G.; Fierens, F. Spatial interpolation of ambient ozone concentrations from sparse monitoring points in Belgium. *Journal of environmental monitoring: JEM* 2006, 8, 1129–35.
- Kalnay, 2002. *Atmospheric modelling, data assimilation and predictability*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 341 pp.
- Maiheu B., *Analyse overschrijdingen RIO (2011a)*. Studie uitgevoerd in opdracht van LNE. VITO rapport 2011/RMA/R/39.
- Maiheu B., Lefebvre W., (2011b) *Ontwikkeling interpolatiemodel voor PM2.5 – Koppeling RIO-IFDM*. Studie in opdracht van IRCEL/CELINE. VITO rapport 2011/RMA/R/30.
- Matthijssen, J en Visser, H., *PM10 in Nederland. Rekenmethodiek, concentraties en onzekerheden, 2006*,. MNP rapport 500093005/2006.
- Stow, C. A.; Jolliff, J.; McGillicuddy, D. J.; Doney, S. C.; Allen, J. I.; Friedrichs, M. A. M.; Rose, K. A.; Wallhead, P. Skill assessment for coupled biological/physical models of marine systems. *Journal of Marine Systems* 2009, 76, 4–15.
- Thunis, P; Georgieva, E. and Pederzoli, A. *The DELTA tool and Benchmarking Report, Concepts and User's Guide*. Version 1 – 18 February 2011. Joint Research Centre, Ispra.
- van Jaarsveld *Description and validation of OPS-Pro 4.1, 2004*, RIVM report 500045001.
- Veldeman N., Peelaerts W. (2012a). *Documentatie E-MAP v2.0*, september 2012.
- Veldeman N., Janssen L., Viaene P., Deutsch F., Maiheu B., Lefebvre W., Vankekom J, Peelaerts W., Janssen S. *Rapport activiteiten in 2012 uitgevoerd in kader van de referentietask 12 "Kenniscentrum Luchtkwaliteitmodellering" (2012b)*. VITO rapport 2012/RMA/R/xxx (rapport in draft)
- Veldeman N., *Vlaamse emissiedataset E-MAP v2.0 (2012c)*, september 2012.
- Veldeman N., Peelaerts W., Deutsch F., *Opname EIL datawarehouse in E-MAP (2012d)*. Studie uitgevoerd in opdracht van de Vlaamse Milieumaatschappij, Afdeling Lucht, Milieu en Communicatie, Dienst Lucht. VITO rapport 2012/RMA/R/xxx (rapport in draft)
- Xue, M., K.K. Droegemeier, V. Wong, A. Shapiro and K. Brewster. *ARPS Version 4.0 User's Guide*, 1995, 380pp. [verkrijgbaar bij CAPS, University of Oklahoma, Norman OK 73072, USA.

Begrippen

| | |
|-------------------|--|
| NO ₂ | Stikstofdioxide |
| O ₃ | Ozon |
| PM ₁₀ | Fijn stof met diameter < 10 µm |
| PM _{2.5} | Fijn stof met diameter < 2.5 µm |
| | |
| R ² | Verklaarde variantie, soms ook correlatiecoëfficiënt genoemd |
| RMSE | Gemiddeld kwadratisch verschil tussen model en observatie |
| BIAS | Gemiddeld verschil tussen model en observatie |
| | |
| QQ Plot | Quantiel Plot |

Afkortingen

| | |
|---------|---|
| KF | Kalman Filter |
| OI | Optimal Interpolation |
| | |
| RMSE | Root Mean Squared Error |
| | |
| FFA | Fraction of False Alerts |
| FCF | Fraction of Correct Forecasts |
| RPE | Relative Percentile Error |
| | |
| QQ Plot | Quantiel Plot |
| | |
| VITO | Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek |
| IRCEL | Intergewestelijke Cel Leefmilieu |
| VMM | Vlaamse Milieumaatschappij |
| MIRA | Milieurapport Vlaanderen |
| EIL | Emissie Inventaris Lucht |
| LNE | Departement Leefmilieu, Natuur en Energie van de Vlaamse overheid |