

**TEKST NR 347**

**1998**

**Verificering af Matematiske Modeller  
- en analyse af Den Danske Eulerske Model**

**Jonas Blomqvist**

**Tom Pedersen**

**Karen Timmermann**

**Lisbet Øhlenschläger**

**Vejledt af: Bernhelm Booss Bavnbeek**

**TEKSTER fra**

**IMFUFA** **ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER**  
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES  
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postboks 260, DK-4000 Roskilde, Danmark

Verificering af Matematiske Modeller  
- en analyse af Den Danske Eulerske Model

af: Jonas Blomqvist, Tom Pedersen, Karen Timmermann, Lisbet Øhlenschlæger  
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek

IMFUFA-tekst nr. 347/98      97 sider

ISSN 0106-6242

---

## Abstract

I dette projekt undersøges hvordan *Den Danske Eulerske Model* (DEM) er verificeret. DEM er en kompleks partiel differentiaalligningsmodel, der beskriver, hvordan kemiske stoffer (luftforurening) transporteres og omsættes i atmosfæren over Europa og dele af Asien og Afrika. Vi gennemgår først, hvordan modellen er opbygget.

Dernæst opstilles en generel verificeringsprocedure hvormed computerbase-rede matematiske modeller kan verificeres. Denne procedure indeholder en konceptuel verificering, en verificering af data, en numerisk- og computer ver-ificering samt en empirisk verificering. Det diskuteres om en sådan generel procedure har en berettigelse, og hvordan den kan anvendes. Den generelle verificeringsprocedure benyttes til at analysere, hvordan DEM er blevet ve-rificeret. I analysen fokuseres på de redskaber og argumenter, som er blevet benyttet til at verificere DEM.

Det konkluderes at den generelle verificeringsprocedure kan benyttes til at undersøge hvordan DEM er verificeret indenfor de fire verificeringsgrupper og at modellen kvalitativt, men ikke kvantitativt, kan beskrive transport og omsætning af luftforurening.

## Forord

Denne projektrapport beskriver en matematisk model samt nogle tanker omkring generel vurdering/verificering af matematiske modeller. Projektet indgår som en del af overbygningsuddannelsen i matematik ved IMFUFA, RUC.

Vi vil i den forbindelse takke vores vejleder, lektor dr.rer.nat Bernhelm Booß-Bavnbek, for mange inspirerende diskussioner. Desuden vil vi gerne takke seniorforsker Zahari Zlatev, Danmarks Miljøundersøgelser (DMU), som er hovedkraften bag udviklingen af *Den Danske Eulerske Model*, DEM. Zahari Zlatev har været meget imødekommende, og har tålmodigt besvaret vores spørgsmål. Han har bl.a. været behjælpelig med at finde relevant litteratur og med at forstå den matematiske beskrivelse af de fysiske og kemiske processer som indgår i DEM.

Roskilde den 23. december 1997.

Jonas Blomqvist

Tom Pedersen

Karen Timmermann

Lisbet Øhlenschläger



# Indhold

<b>1</b>	<b>Indledning</b>	<b>7</b>
1.1	Problemformulering . . . . .	8
1.2	Metode . . . . .	9
1.3	Projektets opbygning . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Den Danske Eulerske Model</b>	<b>11</b>
2.1	Formålet med DEM . . . . .	11
2.2	Transportligningerne . . . . .	15
2.2.1	Advektion . . . . .	16
2.2.2	Diffusion . . . . .	17
2.3	Omsætningsligningerne . . . . .	19
2.3.1	Deposition . . . . .	20
2.3.2	Emission . . . . .	21
2.3.3	Kemiske reaktioner . . . . .	22
	Kemiske reaktioners orden . . . . .	22
	Fotokemiske reaktioner . . . . .	26
2.4	Inputdata . . . . .	27
2.4.1	Meteorologiske data . . . . .	28
2.4.2	Emissionsdata . . . . .	29
2.4.3	Begyndelses- og randbetingelser . . . . .	30
	Begyndelsesbetingelsen . . . . .	31
	Randbetingelser . . . . .	31

2.5	Numerisk behandling af DEM . . . . .	33
2.5.1	Diskretisering . . . . .	33
2.5.2	Opdeling i submodeller . . . . .	34
2.5.3	Transformerung af PDE til ODE . . . . .	35
2.5.4	Sammenkobling af submodellerne . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller</b>	<b>41</b>
3.1	Verificeringsprocedure . . . . .	44
3.1.1	Konceptuel verificering . . . . .	45
3.1.2	Dataverificering . . . . .	46
3.1.3	Verificering af numeriske algoritmer og computerprogram	46
3.1.4	Empirisk verificering . . . . .	47
3.2	Generelle valideringskrav . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Verificering af den Danske Eulerske model</b>	<b>51</b>
4.1	Konceptuel verificering af DEM . . . . .	51
4.1.1	Simple og detaljerede modeller . . . . .	52
4.1.2	Advektionsligningen . . . . .	53
4.1.3	Diffusionsligningen . . . . .	54
4.1.4	Depositionsligningen . . . . .	55
4.1.5	Emissionsligningen . . . . .	56
4.1.6	De kemiske reaktioner . . . . .	57
4.1.7	Opsamling . . . . .	58
4.2	Data verificering i DEM . . . . .	58
4.2.1	Verificering af inputdata . . . . .	59
4.2.2	Verificering af data benyttet til empirisk verificering . .	60
4.3	Verificering af numeriske algoritmer i DEM . . . . .	61
4.3.1	Test af advektion . . . . .	62
4.3.2	Test af numeriske algoritmer til advektion og kemi . . .	66

---

4.3.3	Andre testmetoder . . . . .	68
4.3.4	Opsamling . . . . .	70
4.4	Empirisk verificering af DEM . . . . .	71
4.4.1	Grafiske repræsentationer . . . . .	73
4.4.2	Statistiske beregninger . . . . .	76
4.4.3	Test under forskellige forhold . . . . .	78
4.5	Validering af DEM med INERIS som aftager . . . . .	79
<b>5</b>	<b>Diskussion</b>	<b>81</b>
5.1	Generel verificering . . . . .	81
5.1.1	Berettigelsen af en generel verificeringsprocedure . . . . .	81
5.1.2	Indhold og anvendelse af en generel verificeringsprocedure . . . . .	83
5.2	Verificering af DEM . . . . .	84
5.2.1	Konceptuel verificering . . . . .	85
5.2.2	Dataverificering . . . . .	87
5.2.3	Verificering af computerprogram og numeriske algoritmer . . . . .	88
5.2.4	Empirisk verificering . . . . .	89
5.3	Konklusion . . . . .	90
<b>A</b>	<b>Verificeringsredskaber</b>	<b>91</b>
	<b>Litteratur</b>	<b>95</b>

# Kapitel 1

## Indledning

Matematiske modeller bruges i dag indenfor mange områder og med forskellige formål. Det er matematiske modeller, der skaber næste uges vejrprognose, beskriver omsætningen af næringsstof i havet, beregner den mulige befolkningstilvækst, forudsiger konsekvenser af en skattnedsættelse og beregner satellitbaner. Matematiske modeller benyttes også til f.eks. fortolkning af måleresultater, til regnskabsføring og lagerstyring. Det kan også være en kemisk model, hvor man f.eks. ud fra målte ozonkoncentrationer (ved laboratorieforsøg) opstiller en matematisk model for, hvor hurtigt ozon nedbrydes eller en makroøkonomisk model, som bruges som grundlag for politiske beslutninger.

I de seneste 20 år er der fremkommet en type modeller, som prøver at modellere hvordan luftforurening transporteres over store områder. Disse modeller benævnes ofte **LRTAP**, hvilket er en forkortelse for Long Range Transport of Air Pollution. En af disse LRTAP modeller er *Den Danske Eulerske Model* (DEM), som beskriver transport og omsætning af luftforurening i Europa. Et af formålene med DEM er at finde ud af, hvor meget en given forureningskilde bidrager til luftforureningen i andre lande i Europa, dvs. en slags regnskab mellem lande. Men modellen skal også kunne forudsige konsekvenserne af en forøgelse eller reduktion af forureningskilder. Ved hjælp af modellen skal det således være muligt dels at skabe et beslutningsgrundlag vha. miljøscenarier og dels at skabe grundlag for økonomisk kompensation til de lande som modtager forurening. Men hvordan sikrer man sig at en model som f.eks. DEM er troværdig? Hvordan opbygges tillid til, at modellen faktisk kan benyttes til at belyse modellens problemstilling?

En model er en tilnærmelse til virkeligheden og der vil derfor altid være en større eller mindre afvigelse mellem model og virkelighed. Hvor meget kan man tolerere, at modellen afviger fra virkeligheden? Hvordan finder man



ud af, hvor meget modellen afviger fra virkeligheden? Svaret på det første spørgsmål vil være afhængigt af modellens formål, dvs. det afgørende er, hvad man er interesseret i at modellere. For at finde, hvor stor afvigelsen er, kan man bl.a. konfrontere modellen med empiriske data eller man kan lave teoretiske overvejelser. En modelbygger vil gerne være sikker på, at modellen beskriver virkeligheden på en tilfredsstillende måde mht. formålet. Denne proces vil vi kalde *verificering*.

Under modelbygningsfasen vil modelbyggeren løbende verificere sin model. Når modellen er verificeret, kan man på grundlag af verificeringen *validere* sin model, dvs. man kan gøre op, hvor modellen er brugbar, og hvor den ikke er, samt hvor nøjagtig den er. En evt. bruger, f.eks. en politiker, kan så, iddelt set, på grundlag af valideringen afgøre, hvorvidt modellen er troværdig eller ej. Et centralt spørgsmål vil så være, hvornår en matematisk model er verificeret. Er modellen ikke (tilstrækkeligt) verificeret vil modellens troværdighed falde, og det vil være usikkert, om den kan bruges som beslutningsgrundlag. Det vil i denne forbindelse være interessant at vide, om man kan opstille generelle verificeringskrav eller en generel verificeringsprocedure til en model. Kan man det, så vil man som modelbygger kunne bruge det som vejledning/inspiration til verificeringen. Som bruger af modellen vil man have et værktøj til vurdering af modellens validitet/troværdighed. I [Hermann and Niss 1982, s. 17] står der bl.a. om verificering og validering af matematiske modeller:

Vi har ingen mulighed for i denne sammenhæng at give en generel og systematisk udredning af disse og beslægtede spørgsmål. Det ville i øvrigt heller ikke give mening uden et arsenal af konkrete, detaljeret beskrevne eksempler til belysning af udredningen.

Vi mener dog ikke, det står så slemt til, og at man faktisk kan opstille en generel verificeringsprocedure, omend den skal bruges med omtanke.

Med udgangspunkt i en generel verificeringsprocedure undersøger vi, hvordan DEM er blevet verificeret.

## 1.1 Problemformulering

Med dette projekt ønsker vi at belyse følgende problemer:

- Hvordan kan en generel verificeringsprocedure se ud?
- Hvordan er DEM verificeret?

## 1.2 Metode

Det primære formål med projektet er at analysere og vurdere, hvordan DEM er blevet verificeret. Som grundlag for denne analyse og vurdering opstilles en generel verificeringsprocedure, der er vores forslag til en systematisk metode hvormed matematiske modeller evt. kunne verificeres.

I beskrivelsen og analysen af DEM har vi benyttet videnskabelige artikler, bøger samt interviews med modelbyggeren.

Opstillingen af den generelle verificeringsprocedure baserer vi på videnskabelige artikler, vi har imidlertid flere steder tilføjet egne kommentarer og tilpasset proceduren efter vores egen smag. Ideerne til verificering er primært hentet fra et andet modelområde (transport af radioaktive stoffer i undergrunden) og er brugt i analysen af DEM. Vi viser, at verificeringsproceduren virker på DEM, men det har ikke været under projektets ramme at afprøve proceduren på andre modeller. Diskussionen om generel verificering baserer sig derfor på en konkret model.

## 1.3 Projektets opbygning

Opbygningen af DEM er grundigt beskrevet i kapitel 2.

I kapitel 3 opstilles en generel verificeringsprocedure samt krav til validering.

I kapitel 4 bruger vi den opstillede procedure fra kapitel 3 til at undersøge, hvordan DEM er blevet verificeret. Desuden giver vi en forsmag på, hvordan en begyndende validering af DEM ser ud.

Endelig afsluttes projektet i kapitel 5 med en diskussion af dels generel verificering, dels en diskussion af verificeringen af DEM, hvor vi kommenterer måden at verificere DEM på. Kapitlet afsluttes med en konklusion.

## Kapitel 2

# Den Danske Eulerske Model

*Den Danske Eulerske model* (DEM) er udviklet gennem de sidste tyve år, den seneste tid på Danmarks Miljøundersøgelser. DEM er en computerbaseret LRTAP model, der beskriver sammenhængen mellem udledning (emission) af forurenende stoffer og koncentrationen af disse stoffer i atmosfæren. Når et stof udledes i atmosfæren vil det blive transporteret med vinden til andre områder, men det kan også blive omdannet gennem kemiske reaktioner eller deponeres på jordoverfladen. Disse faktorer (og mange flere) har betydning for koncentrationen af stoffet i atmosfæren. Fig 2.1 viser nogle af de overordnede forhold der påvirker emissionen og som dermed er afgørende for luftforureningen i et givet område.

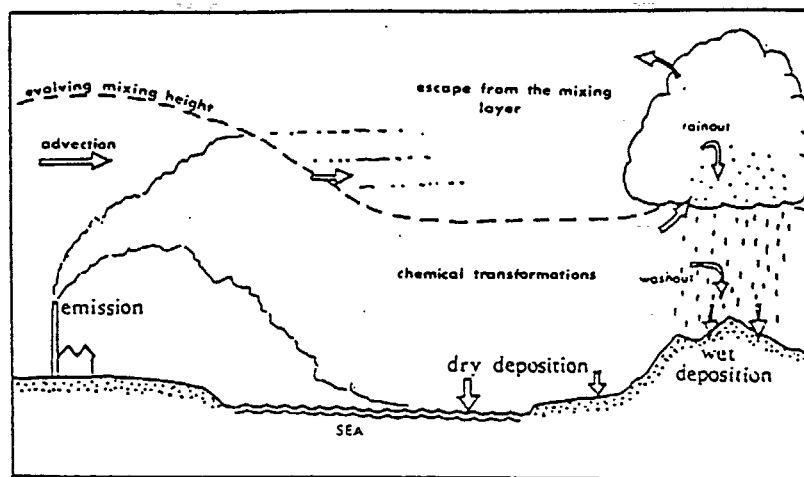
### 2.1 Formålet med DEM

Der er to hovedformål med modellen, nemlig at kunne besvare spørgsmålene:

- Hvor meget bidrager en given emissionskilde til luftforureningen i andre områder (f.eks. nabolande)?
- Hvilken effekt vil en reduktion af en given emissionskilde få for luftforureningen i andre områder?

Derudover kan vi se et tredje formål med modellen som omhandler udviklingen af numeriske metoder og computer arkitektur. En stor del af udviklingen og præsentationen af DEM er fokuseret på dette område [Zlatev 1995], [Zlatev et al. 1996], [Brandt et al. 1996], [Zlatev and Berkowicz 1988].

Et eksempel herpå ses i [Zlatev 1995]



**Figur 2.1** Figuren viser nogle af de processer der har betydning for transport og omsætning af stoffer i atmosfæren ([Pasquill and Smith 1983, s. 381]).

The main topics discussed in the book are numerical methods and high speed scientific computations.

I forenklet form kan DEM betragtes som en kasse (se fig 2.2), der får emissionerne af et givet stof som input. Modellen beregner, hvordan stoffet transporteres med vinden og hvordan det omdannes i løbet af transporten. Som output kommer luftkoncentrationerne af stoffet til givne tidspunkter.

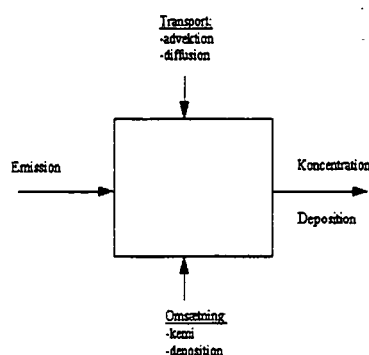
De processer der beskrives af DEM udgøres overordnet af:

**Transport processer** Stofferne transporteres i luften pga vinden. Denne transport er opdelt i:

- Advektion – en benævnelse for den transporttype der forårsages af vinden (på stor skala).
- Diffusion – beskriver den tilfældige spredning af stofferne grundet turbulent vind (på lille skala).

**Omsætnings processer** Stofferne omsættes i atmosfæren pga.

- Emission – udledning af (luftforurenende) stoffer
- Deposition – stoffer deponeres på jordoverfladen f.eks. når det regner og “forsvinder” dermed fra atmosfæren.
- Kemisk reaktion – stofferne omdannes fordi de reagerer.



Figur 2.2 Skemativering af DEM.

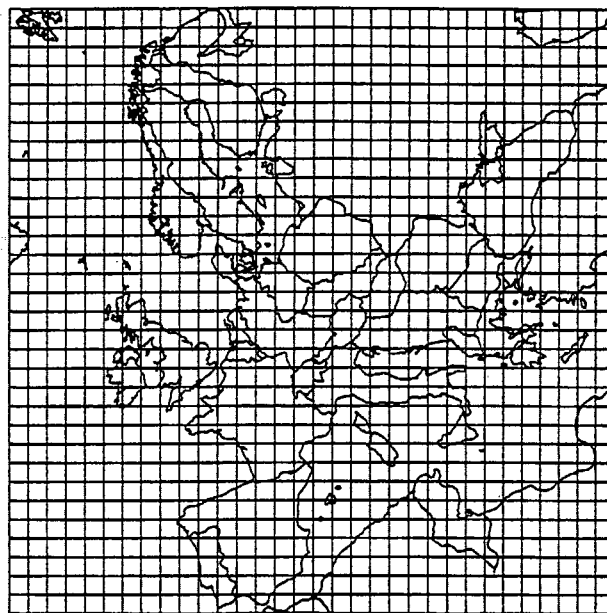
Der indgår ialt 35 stoffer i DEM. Disse stoffer kan hovedsageligt inddeles i fire store grupper: *Svovlforbindelser*, f.eks.  $\text{SO}_2$  (svovldioxid) og  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (svovlsyre), *nitrogenforbindelser*, f.eks.  $\text{NO}_2$  (nitrogendioxid) og  $\text{HNO}_3$  (salpetersyre), *oxygenforbindelser*, f.eks.  $\text{O}_3$  (ozon) og  $\text{H}_2\text{O}_2$  (hydrogenperoxid) samt *organiske forbindelser*, f.eks. VOC (de flygtige organiske forbindelser som  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$  (toluen),  $\text{HCHO}$  (formaldehyd) og  $\text{CH}_3\text{CHO}$  (acetaldehyd)) og  $\text{CH}_2\text{CH}_2$  (ethen).

Den matematiske grundstruktur i DEM udgøres af et sæt af partielle differentiaalligninger (PDE). Der er en PDE for hvert stof og hver PDE indeholder den matematiske beskrivelse af de 5 processer. For det  $s$ 'te stof er ligningen givet ved:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_s}{\partial t} = & -\frac{\partial(uc_s)}{\partial x} - \frac{\partial(vc_s)}{\partial y} - \frac{\partial(wc_s)}{\partial z} \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial c_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial c_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial c_s}{\partial z} \right) \\ & - (k_{s1} + k_{s2})c_s \\ & + E_s \\ & + Q_s(c_1, \dots, c_q) \end{aligned} \quad (2.1)$$

hvor  $s = 1, 2, \dots, q = 35$  er indeks for det kemiske stof. De to første led i (2.1) - advektion og (turbulent) diffusion - beskriver den mekaniske transport af luftforureningen (de kemiske stoffer). De tre sidste led i (2.1) - deposition, emission og kemiske reaktioner - beskriver omsætningen af de kemiske stoffer.

Funktionerne  $c_s, u, v, w, K_x, K_y, K_z$  samt  $E$  er alle steds og tidsafhængige, dvs. funktioner af typen  $f : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbf{R}$  hvor  $\Omega \subset \mathbf{R}^3$  angiver det geografiske domæne og  $[0, T]$  tidsintervallet. I DEM er det horisontale plan (parallelt



**Figur 2.3** Figuren angiver domænet for DEM, med en diskretisering på  $150 \times 150$  km [Zlatev 1995, s. 24].

med jordoverfladen) angivet ved  $x, y$  planet og  $z$  angiver den vertikale retning (vinkelret på jordoverfladen).

Det geografiske domæne (virkeområde) for DEM er Europa og dele af Asien og Afrika og dækker et område på  $4800 \text{ km} \times 4800 \text{ km}$ . Tidsdomænet er ofte på en måned men kan være helt op til et år. For at kunne løse modellen er det, som vi senere vil beskrive, nødvendigt at diskretisere både det geografiske domæne og tids domænet. I DEM er tidsdiskretiseringen som regel på 15 minutter. Det geografiske domæne er inddelt i kvadrater på  $50 \times 50 \text{ km}$  hvilket giver  $96 \times 96$  gitterfelter (tidligere var diskretiseringen på  $32 \times 32$  gitterfelter). På fig 2.3 ses domænet for DEM (med den gamle diskretisering).

I de følgende afsnit vil vi beskrive hvorledes den matematiske DEM model (ligning (2.1)) er fremkommet. I denne beskrivelse splitter vi, for overskuelighedens skyld, (2.1) op i de 5 fysiske/kemiske processer og beskriver matematiskeringen af disse isolerede processer.

## 2.2 Transportligningerne

Transportligningerne, som udgøres af advektion og diffusion, adskiller sig fra omsætningsligningerne bl.a. ved ikke at være stofs specifikke. Dette betyder at transporten af alle de involverede kemiske stoffer kan beskrives ved samme advektions og diffusionsligning.

De to transportligninger beskriver hvordan en flux af stof bevæger sig – eller rettere, hvordan koncentrationen af et stof ændres på et givet sted som følge af stofflux. Et flux ( $J$ ) kan defineres som mængden af stof, der passerer et givet areal pr. tidsenhed, dvs.  $J_s = \frac{\Delta N_s}{A\Delta t}$ , hvor  $\Delta N_s$  angiver antallet af molekyler af stof  $s$ , der passerer arealet  $A$  i tidsrummet  $\Delta t$ .

For at kunne beskrive koncentrationsændringen som følge af en transportproces betragtes nu kun transport i en retning ( $x$ -retningen). Koncentrationsændringen pr. tidsenhed ( $\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{\Delta N}{V\Delta t}$ ) i en kasse defineret ved  $\Delta y\Delta z\Delta x$  kan beskrives som forskellen i flux ind,  $J(x_0, t_0)$  hhv. ud,  $J(x_0 + \Delta x, t_0)$ , af kassen divideret med kassens længde, dvs.

$$\frac{c(x, t_0 + \Delta t) - c(x, t_0)}{\Delta t} = \frac{-J(x_0 + \Delta x, t_0) + J(x_0, t_0)}{\Delta x} \quad (2.2)$$

Under forudsætningen om, at koncentrationen  $c$  og fluxen  $J$  er differentiable for hhv. alle  $t$  og  $x$  vil grænseværdien eksistere og

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{c(x, t_0 + \Delta t) - c(x, t_0)}{\Delta t} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{-J(x_0 + \Delta x, t_0) + J(x_0, t_0)}{\Delta x} \quad (2.3)$$

↓

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \left( \frac{\partial J}{\partial x} \right) \quad (2.4)$$

Heraf ses, at hvis  $\frac{\partial J}{\partial x} > 0$  er fluxen ud af kassen større end fluxen ind og koncentrationen i kassen falder, dvs.  $\frac{\partial c}{\partial t} < 0$ . Tilvarende hvis  $\frac{\partial J}{\partial x} < 0$  så vil koncentrationen stige, dvs.  $\frac{\partial c}{\partial t} > 0$ . I tre dimensioner er fluxen givet ved en vektorfunktion  $\mathbf{J} : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbf{R}^3$  hvor  $\Omega$  angiver det geografiske domæne og  $[0, T]$  angiver tidsintervallet, som skal simuleres. Vektorfunktionen kan således defineres som  $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$  og koncentrationsændringen som følge af dette flux er givet ved

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} = - \left( \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \right) \quad (2.5)$$

$$\text{idet } \nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Ligning (2.5), en form af *kontinuitetsligningen*, er generel for alle transporttyper (med massebevarelse) inklusiv advektion og diffusion [Alberty 1987].

### 2.2.1 Advektion

Fluxe, som bevæges langs en hovedstrøm/hastighedsfelt, benævnes advektion. I DEM skabes dette hastighedsfelt af vinden. De kemiske stoffer antages at følge både vindretningen og vindhastigheden. "Vindfeltet" angives med en vektorfunktion af typen  $\mathbf{V} : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbf{R}^3$ , som er defineret ved  $\mathbf{V} = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t))$ , hvor  $u$  angiver vindhastigheden i  $x$ -retningen,  $v$  angiver hastigheden i  $y$ -retningen og  $w$  angiver hastigheden i  $z$ -retningen (altså vertikalt). Det advektive flux  $\mathbf{J}_{\text{ad}}$  vil følge denne vektorfunktion og ved antagelsen om at  $\mathbf{V}$  er kendt for alle punkter  $(x, y, z) \in \Omega$  og til alle tidspunkter  $t \in [0, T]$  kan fluxet ifølge [Ghez 1988] matematisk beskrives ved

$$\mathbf{J}_{\text{ad}} = \mathbf{V}c \quad (2.6)$$

hvor  $c$  (dimension: antal molekyler per volumen) angiver den stofkoncentration, som flyttes langs vindfeltet  $\mathbf{V}$  (dimension: længde per tid). Et udtryk for hvordan stofkoncentrationen ændres som følge af den advektive transport fås ved indsættelse af ligning (2.6) i ligning (2.5):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{ad}} = -\nabla \cdot (\mathbf{V}c) \\ &= -\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \cdot (u, v, w)c \\ &= -\frac{\partial(uc)}{\partial x} - \frac{\partial(vc)}{\partial y} - \frac{\partial(wc)}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Denne ligning udgør advektionsleddet i DEM. Ved at benytte produktreglen på (2.7) kan advektionsligningen skrives som

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\left(\frac{\partial u}{\partial x}c + u\frac{\partial c}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial v}{\partial y}c + v\frac{\partial c}{\partial y}\right) - \left(\frac{\partial w}{\partial z}c + w\frac{\partial c}{\partial z}\right) \quad (2.8)$$

Ligning (2.7) og dermed (2.8) benyttes dog ikke i den numeriske løsning i DEM. For at simplificere udtrykket antages det at trykket er konstant (dvs. at luften er et usammentrykkeligt/inkompressibelt medie). Denne antagelse er matematisk givet ved

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.9)$$



[Chorin and Marsden 1993] Hvis der laves passende ombytninger på leddene i (2.8) ses det, at advektionsligningen via antagelsen kan reduceres til

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} \quad (2.10)$$

Hvis man skal forsimpler dette til to dimensioner, så antages det yderligere at  $\frac{\partial c}{\partial z} = 0$ , dvs. man antager, at der ikke er koncentrationsforskelle i vertikal retning. Herved reduceres modellen til 2 dimensioner (det horisontale plan) og højden indgår som en parameter i den 2-dimensionale model.

### 2.2.2 Diffusion

Der findes to hovedtyper af diffusion, som begge beskriver spredningen af stof – den molekylære diffusion og den makroskopiske diffusion.

*Den molekylære diffusion* beskriver spredningen af stof forårsaget af molekylernes termiske bevægelse. Grundideen bag den molekylære diffusion er, at molekylerne bevæger sig tilfældigt, og netop derfor vil der være en nettotransport af stof fra områder med høj koncentration (dvs. mange molekyler af pågældende stof) til områder med lav koncentration. Diffusionsprocessen er således afhængig af de koncentrationsforskelle (koncentrationsgradienter,  $\nabla c$ ), som findes i systemet og sammenhængen mellem stoftransporten (fluxen) over et plan og koncentrationsgradienten er proportional. Da gradienter altid peger i den retning hvor funktionen (her koncentrationen) vokser mest, vil et diffusivt flux altid forløbe i modsat retning af gradienten. I en dimension (transport i  $x$ -retningen) kan dette formuleres som:

$$J_{\text{dif}} = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.11)$$

hvor  $D$  er den molekylære diffusionskoefficient som har en størrelsesorden på  $10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  [Lide 1993-1995]. Denne ligning er også kendt som Ficks 1. lov [Alberty 1987]. I tre dimensioner er den tilsvarende ligning givet ved

$$\mathbf{J}_{\text{dif}} = -D \nabla c = \left( -D \frac{\partial c}{\partial x}, -D \frac{\partial c}{\partial y}, -D \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (2.12)$$

Den molekylære diffusionskoefficient afhænger af det specifikke stof og typen af det medie hvori diffusionen forløber samt temperaturen. En matematisk beskrivelse af denne transport vil derfor kræve et antal diffusionsligninger svarende til antallet af kemiske stoffer. I DEM ses der imidlertid bort fra

den molekylære diffusion, idet denne transportform er uden betydning for stoftransporten over de store afstande som behandles i modellen, se nedenfor.

Den makroskopiske diffusion er relateret til de turbulensstrukturer, der ofte dannes i strømmende medier. Årsagen til det makroskopiske diffusive led er at det "sande" vindfelt ikke er beskrevet i "vindfunktionen"  $\mathbf{V}$ . Den sande vind,  $\mathbf{V}_s$ , kan betragtes som værende sammensat af to dele, nemlig en gennemsnitlig vindhastighed  $\bar{\mathbf{V}}$  samt et led der beskriver hvorledes vinden afviger fra denne gennemsnitlige værdi  $\mathbf{V}_{ur}$ . Denne afvigelse, er afhængig af domænets diskretisering idet den øges ved grovere diskretisering. "Fejlen" betragtes som en tilfældig spredning om middelværdien og beskrives ofte som et diffusivt bidrag til den gennemsnitlige vindhastighed [Pasquill and Smith 1983]. I DEM kendes den gennemsnitlige vindhastighed imidlertid ikke og istedet benyttes målte vinddata. Den fejl der herved opstår modelleres analogt til diffusion. Det antages altså at  $\mathbf{V}_s = \mathbf{V}_{ad} + \mathbf{V}_{dif}$ , hvor  $\mathbf{V}_{ad}$  angiver de målte vindhastigheder, som indgår i ligning 2.10 og  $\mathbf{V}_{dif}$  approximeres med et diffusions led. Denne makroskopiske diffusionskoefficient benævnes  $\mathbf{K} = (K_x(x, y, z, t), K_y(x, y, z, t), K_z(x, y, z, t))$ , hvor  $K_x$  angiver koefficienten i  $x$ -retningen,  $K_y$  i  $y$ -retningen og  $K_z$  i  $z$ -retningen.  $\mathbf{K}$  har størrelsesorden  $10^4$ - $10^5$   $\text{m}^2/\text{s}$  og er derfor meget større end den molekylære diffusionskoefficient  $D$  (størrelsesorden  $10^{-4}$   $\text{m}^2/\text{s}$ ), som der derfor kan ses bort fra.

Den makroskopiske diffusion beskrives analogt til den molekylære (ligning (2.12)) og er således givet ved:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{dif} &= -\mathbf{K}\nabla c \\ &= \left( -K_x \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right), -K_y \left( \frac{\partial c}{\partial y} \right), -K_z \left( \frac{\partial c}{\partial z} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Et udtryk for hvordan koncentrationen ændres som følge af den makroskopiske diffusion fås ved indsættelse af diffusionsfluxet, (2.13), i ligning (2.5):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= -\nabla \mathbf{J}_{dif} \\ &= -\nabla \left( -K_x \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right), -K_y \left( \frac{\partial c}{\partial y} \right), -K_z \left( \frac{\partial c}{\partial z} \right) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \\ &= \left( \frac{\partial K_x}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + \left( \frac{\partial K_y}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial y} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + \left( \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Den makroskopiske diffusionskoefficient adskiller sig fra den molekylære ved, som nævnt, at være flere størrelsesordner større og yderligere ved ikke at være

afhængig af de specifikke stoffer samt mediet. Derimod kan komponenterne i  $\mathbf{K}$ , i modsætning til den molekylære koefficient, have forskellige værdier.

I DEM fastsættes de horisontale diffusionskoefficienter til  $K_x = K_y = 30000 \text{ m}^2/\text{s}$  ved henvisning til [Gifford 1982]. Herved bliver  $\frac{\partial K_x}{\partial x} = \frac{\partial K_y}{\partial y} = 0$ , hvilket i betragtelig grad forenkler ligning (2.14). For at få klarhed over den vertikale diffusionskoefficient  $K_z$  er det nødvendigt at introducere mixhøjden,  $H_{\text{mix}}$ .

*Mixhøjden* angiver højden af det nederste lag i atmosfæren hvor opblandingen af luftmasserne er stor. I dette lag er vindretninger, vindhastigheder og vertikal opblanding stærkt påvirket af stedets topografi såsom bjerge, byer, vegetation m.m. Dette lag benævnes mixlaget eller grænselaget og det ændres således med stedets topografi. Fastsættelsen af mixlagets størrelse for et givet sted afhænger blandt andet af ændringer i temperaturen på jordoverfladen. Om dagen strækker laget sig fra jordoverfladen og op til 1-2 km's højde. Om natten ændres mixhøjden til 10-400 meter [Pasquill and Smith 1983].

Over mixlaget ligger *den fri troposfære*, som strækker sig fra ca. 1-2 km's højde til ca. 18 km's højde. Den fri troposfære udgøres af et lag med konstant lufttæthed som bevirker at de turbulente bevægelser undertrykkes. Cirkulationen i den fri troposfære er primært bestemt af to faktorer: solindstrålingen og jordens rotation [Pedersen 1992].

I DEM benyttes højden af mixlaget til at beskrive den vertikale diffusionskoefficient idet denne defineres ved:

$$K_z(x, y, z, t) = \begin{cases} K & \text{hvis } z \leq H_{\text{mix}} \\ 0 & \text{hvis } z > H_{\text{mix}} \end{cases} \quad (2.15)$$

hvor  $K$  er en positiv konstant. I [Zlatev 1995, s. 37] foreslås  $K = 300 \text{ m}^2/\text{s}$  om dagen og at  $K = 50 \text{ m}^2/\text{s}$  om natten.

I DEM er alle komponenter af  $\mathbf{K}$  således konstante og diffusionsligningen (2.14) forenkles til:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (2.16)$$

## 2.3 Omsætningsligningerne

Omsætningsligningerne i DEM beskriver koncentrationsændringen af stof  $s$  som følge af deposition, emission og kemiske reaktioner. I modsætning

til transportligningerne kan omsætningsligningerne bevirke at den samlede mængde af stof  $s$  øges eller mindskes i atmosfæren. Endvidere er omsætningsligningerne stofs specifikke og i DEM indgår således 35 forskellige depositions, emissions og kemi ligninger.

Omsætningsligningerne adskiller sig yderligere fra transportligningerne idet de ikke indeholder rumligt afledte af koncentrationen. Dette bevirker at omsætningsligningerne kan betragtes som ordinære differentiaalligninger (ODE) i stedet for PDE's.

### 2.3.1 Deposition

De forurenende (og ikke forurenende) stoffer som findes i atmosfæren udgør dels en *homogen* gasfase (som til største del består af  $N_2$  (78.1%) og  $O_2$  (20.9%)), dels en *heterogen* fase, som til største del består af tåge og skyer. En lille del af den heterogene fase består af *aerosoler*, som er små partikler (radius =  $10^{-9}$  m -  $10^{-4}$  m). Aerosoler kan også være små vanddråber hvori et stof er opløst, f.eks. svovlsyre aerosoler. Fælles for aerosolerne er, at de kan holde sig svævende i atmosfæren i en bestemt tid, hvorefter aerosolerne enten vil regne ud, når tilstrækkeligt store regndråber er dannet, eller vil synke gravitationelt og blive deponeret på overflader, f.eks. vegetation. Man kalder disse typer af deposition for hhv. *våddeposition* og *tørdeposition*. Ved deposition vil stof fjernes fra atmosfæren, dvs. ændringen af et stofs koncentration i atmosfæren,  $\frac{dc_s}{dt}$ , vil være negativ (eller 0 hvis der ikke forekommer deposition). Partikler i atmosfæren kan slå sig sammen og danne større partikler. Jo større en partikel er, jo hurtigere deponeres den. Er koncentrationen høj, vil flere partikler kunne slås sammen, end hvis koncentrationen er lav. Derfor vil  $\frac{\partial c_s}{\partial t}$  også afhænge af koncentrationen. Desuden vil depositionen afhænge af, hvor meget det regner samt af mixhøjden. Dette angives med tørdepositions-koefficienten  $k_{s_1}(x, y, t)$  og våddepositions-koefficienten  $k_{s_2}(x, y, z, t)$ , hvor  $k_{s_1}$  ikke afhænger af  $z$ .

Antag, at  $k_{s_1}$  og  $k_{s_2}$  er kendte funktioner i domænet  $\Omega$  og i tidsintervallet  $[0, T]$ .  $k_{s_1}$  og  $k_{s_2}$  beregnes for hvert gitterpunkt. For et bestemt gitterpunkt  $(x, y, z)$  er  $k_{s_1}$  og  $k_{s_2}$  konstante og depositionen af et stof,  $c_s(x, y, z, t)$  i punktet  $(x, y, z) \in \Omega \subset \mathbf{R}^3$  til tiden  $t \in [0, T]$  kan således beskrives ved følgende lineære homogene ordinære differentiaalligning af første orden:

$$\frac{dc_s}{dt} = -(k_{s_1} + k_{s_2})c_s$$

hvor dimensionen af  $k_{s_1}$  og  $k_{s_2}$  er 1 per tid og dimensionen af  $c_s$  er antal molekyler per volumen. Da der er 35 stoffer i DEM vil der være 35 ligninger

af type (2.3.1), en for hvert stof. Ligning (2.3.1) kan i hvert gitterpunkt løses analytisk:

$$c_s = c_s(t_0)e^{-(k_{s_1}+k_{s_2})(t-t_0)}$$

hvor  $c_s(t_0)$  er koncentrationen til tiden  $t = t_0$ . I DEM løses (2.3.1) analytisk i hvert tidsskridt.

Tørdeposition foregår under hele transporten gennem forskellige mekanismer. For store partikler vil tyngdevirkningen fjerne disse fra atmosfæren. Sammenstød med vegetation er en anden. Tørdepositions-koefficienten,  $k_{s_1}$ , er ifølge [Zlatev et al. 1992] givet ved:

$$k_{s_1} = \frac{g_{s_1}}{H_{\text{mix}}} \quad (2.17)$$

hvor  $g_{s_1}$  (dimension: længde per tid) er faldhastigheden for stof  $s$  og  $H_{\text{mix}}$  (dimension: længde) er mixhøjden, som er en funktion afhængig af tid og sted.  $g_{s_1}$  varierer fra 0 cm/s til 1.0 cm/s afhængigt af stof. For  $\text{SO}_2$  og  $\text{O}_3$  er der desuden døgnvariation og årstidsvariation på  $g_{s_1}$ .

Våddeposition foregår, når det regner, og våddepositions-koefficienten,  $k_{s_2}$ , er ifølge [Zlatev et al. 1992] givet ved:

$$k_{s_2} = \frac{g_s I}{H_{\text{mix}}} \quad (2.18)$$

hvor  $I$  angiver hvor meget det regner (målt i cm/s) og  $g_s$  er et dimensionsløst "scavenging" forhold, angivet for hvert stof. For de fleste stoffer er  $g_s = 0$ , men for nogle stoffer (isærligt, [Zlatev et al. 1992]) ligger  $g_s$  mellem  $2.0 \cdot 10^5 - 7.0 \cdot 10^5$ .

I DEM er det antaget, at depositionen af et givet stof ikke afhænger af andre stoffers koncentration, men kun af stoffets egen koncentration, se ligning (2.3.1), samt at  $k_{s_1}$  og  $k_{s_2}$  ikke afhænger af koncentrationen af stof  $s$  og heller ikke af andre stoffers koncentration.

### 2.3.2 Emission

Emission betyder udledning. Når et stof udledes (emitteres) fra f.eks. en fabrik eller et kraftværk, vil koncentrationen af dette stof *vokse* i atmosfæren, dvs.  $\frac{\partial c_s}{\partial t}$  vil være positiv (eller 0). Koncentrationsændringen som følge af emission af et stof,  $c_s(x, y, z, t)$ , i punktet  $(x, y, z) \in \Omega \subset \mathbf{R}^3$  til tiden  $t \in [0, T]$  kan således beskrives ved følgende ordinære differentiaalligning:

$$\frac{dc_s}{dt} = E_s(x, y, z, t) \quad (2.19)$$

Da der er 35 stoffer i DEM, vil der være 35 ligninger af type (2.19), en for hvert stof. Emissionen, ligning (2.19), behandles numerisk sammen med de kemiske reaktioner, se afsnit 2.3.3, hvor emissionerne vil indgå i produktledene i de kemiske reaktioner (de stoffer som dannes). Problemet er, at beskrive emissionerne matematisk, dvs. at finde funktionen  $E_s(x, y, z, t)$ . I praksis i DEM opstiller man først emissionsfunktionerne efter diskretiseringen, således at der i hvert gitterfelt fastlægges en emissionsfunktion for stof  $s$ , som kun afhænger af tiden og årsemissionen i gitterfeltet (se endvidere afsnit 2.4.2). Dvs. at emissionen bliver en funktion af typen  $E_s : [0, T] \rightarrow \mathbf{R}$  og hvis denne funktion er kontinuert, kan den løses analytisk:

$$c_s = \mathbf{E}_s(t) + K_s$$

hvor  $\mathbf{E}_s$  er en stamfunktion til  $E_s(t)$  og  $K_s$  er en konstant for stof  $s$ .

Et eksempel på en emissionsfunktion er for  $\text{SO}_2$ , hvor man efter diskretiseringen i hvert gitterfelt opstiller en cosinusfunktion, med maksimum om vinteren (1.35 gange middelværdien for årsemissionen i dette gitterfelt) og minimum om sommeren (0.65 gange middelværdien), således at integralet af funktionen giver årsemissionen  $E_{\text{total}}$  dvs.  $\int_0^1 E_s(t) dt = E_{\text{total}}$ .

### 2.3.3 Kemiske reaktioner

I DEM bruger man et reaktionsskema som kaldes det *kondenserede CBM IV* (Carbon-Bond Mechanism) skema [Zlatev 1995]. Dette reaktionsskema består af 67 reaktioner. Desuden er der tilføjet yderligere 4 reaktioner (nitrat og ammonium/ammoniak) således at der er 71 reaktioner i alt. Koncentrationen af et stof,  $c_s(x, y, z, t)$ , i punktet  $(x, y, z) \in \Omega \subset \mathbf{R}^3$  til tiden  $t \in [0, T]$  ændres med tiden på grund af kemiske reaktioner. Det kan matematisk formuleres ved følgende ordinære differentialligning:

$$\frac{dc_s}{dt} = Q_s(c_1, c_2, c_3, \dots, c_q)$$

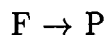
hvor  $s = 1, 2, \dots, q$ ,  $q = 35$  er antallet af stoffer og  $Q_s$  er reaktionshastigheden. I DEM er  $Q_s$  enten lineær eller ikke-lineær, afhængig af reaktionsmekanismen for stof  $s$ . For at finde et udtryk for funktionen  $Q_s$  er det først nødvendigt med en omtale af kemiske reaktioners orden.

#### Kemiske reaktioners orden

Kemiske reaktioners hastighed (kinetik) afhænger som regel af de involverede stoffers koncentration, temperaturen samt trykket.

Man taler om reaktioner af 0. orden, 1. orden, 2. orden<sup>1</sup> osv. alt efter hvordan reaktionshastigheden afhænger af koncentrationen. I DEM indgår kun reaktioner som er af 1. og 2. orden.

En reaktion er af 1. orden, hvis det for reaktionen



gælder, at

$$Q_f = \frac{d[F]}{dt} = -k[F] \quad (2.20)$$

hvor  $Q_f$  er reaktionshastigheden for stof F (indeks  $f$ ), som er lineær for 1. ordens reaktion,  $[F]$  er koncentrationen af stof F og  $k$  er hastighedskonstanten, som er givet ved:

$$k = A \cdot e^{-E_a/RT} = A \cdot e^{-B/T} \quad (2.21)$$

hvor  $A$  er Arrhenius konstant (kun afhængig af hvilken reaktion det er tale om),  $E_a$  er aktiveringsenergien (enhed: J/mol),  $R$  er en naturkonstant (enhed: J/K/mol),  $T$  er den absolutte temperatur (enhed: K) og  $B = E_a/R$  (enhed: K). Dimensionen på  $A$  er [1/tid] for første ordens reaktioner, og [volumen/(tid × antal molekyler)] for 2. ordens reaktioner. Som det ses af ligning (2.21) har  $k$  samme enhed som  $A$ .

Ligning (2.20) kan løses analytisk:

$$[F]_t = [F]_0 e^{-kt}$$

hvor  $[F]_0$  er koncentrationen af F til tiden  $t = 0$  og  $[F]_t$  er koncentrationen af F til tiden  $t$ . Koncentrationen af F falder altså eksponentielt som funktion af tiden.

**Eksempel 1 [Zlatev 1995, s. 42, nr. 9]:**

Ozon,  $O_3$ , er et ustabil molekyle, og kan spaltes termisk:



Udtrykket for reaktionshastigheden skrives:

$$\frac{d[O_3]}{dt} = -k[O_3]$$

<sup>1</sup>Orden i kemisk forstand svarer matematisk til potensen af den variable funktion. Dvs. en kemisk 1. ordens reaktion giver en lineær ODE og reaktioner af 2. og højere orden giver ikke lineære ODE's. (Begrebet skal således ikke forveksles med f.eks. orden af en differentilligning)

En reaktion er af 2. orden, hvis det for reaktionen



gælder, at

$$Q_t = \frac{d[F]}{dt} = -k[F]^2 \quad (2.23)$$

Ligningen (2.23) kan løses analytisk:

$$[F]_t = \frac{1}{kt + \frac{1}{[F]_0}}$$

**Eksempel 2 [Zlatev 1995, s. 42, nr. 2]:**

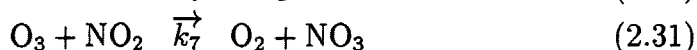
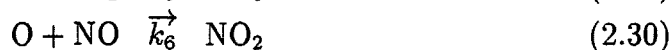
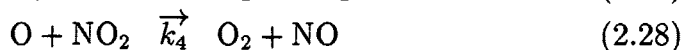
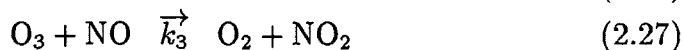
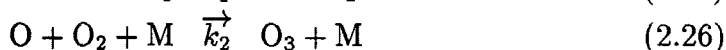


M er typisk  $O_2$  eller  $N_2$  og deltager ikke i selve reaktionen. Reaktionen er en 3. ordens reaktion, men da koncentrationen af M er stort set konstant, bliver reaktionen en *pseudo* 2. ordens reaktion. Udtrykket for reaktionshastigheden skrives:

$$\frac{d[O_2]}{dt} = \frac{d[O]}{dt} = -k[O][O_2][M] = \bar{k}[O][O_2]$$

hvor  $\bar{k} = k[M]$  med god tilnærmelse er konstant, dvs. en *pseudo* 2. ordens reaktion. Som det ses, kan en reaktion også være af 2. orden, når 2 forskellige stoffer reagerer med hinanden.

Lad os nu se på reaktion (2.22), (2.24) samt yderligere 6 reaktioner fra [Zlatev 1995, s. 42, nr. 3-7 og 12], dvs. i alt 8 kemiske reaktioner med 6 forskellige stoffer:



Vi antager (meget simplificeret) at disse 8 reaktioner er de eneste som foregår. Vi kan da opskrive reaktionshastigheden for de 6 stoffer som indgår i de 8



reaktioner, hvor  $\bar{k}_2 = k_2[M]$ :

$$Q_1 = \frac{d[O_3]}{dt} = \bar{k}_2[O][O_2] - k_1[O_3] - k_3[O_3][NO] - k_7[O_3][NO_2] \quad (2.33)$$

$$Q_2 = \frac{d[O_2]}{dt} = k_1[O_3] + k_3[O_3][NO] + k_4[O][NO_2] + k_7[O_3][NO_2] - \bar{k}_2[O][O_2] \quad (2.34)$$

$$Q_3 = \frac{d[O]}{dt} = k_1[O_3] - \bar{k}_2[O][O_2] - (k_4 + k_5)[O][NO_2] - k_6[O][NO] \quad (2.35)$$

$$Q_4 = \frac{d[NO]}{dt} = k_4[O][NO_2] - k_3[O_3][NO] - k_6[O][NO] - k_8[NO_3][NO] \quad (2.36)$$

$$Q_5 = \frac{d[NO_2]}{dt} = k_3[O_3][NO] + k_6[O][NO] + 2k_8[NO_3][NO] - (k_4 + k_5)[O][NO_2] - k_7[O_3][NO_2] \quad (2.37)$$

$$Q_6 = \frac{d[NO_3]}{dt} = k_5[O][NO_2] + k_7[O_3][NO_2] - k_8[NO_3][NO] \quad (2.38)$$

hvor indeks 1 angiver  $O_3$ , indeks 2  $O_2$ , indeks 3  $O$ , indeks 4  $NO$ , indeks 5  $NO_2$  og indeks 6  $NO_3$ . Vi har nu fået 6 ordinære differentiaalligninger (ODE) som er koblede til hinanden. Af ovenstående kan det også ses, at ozon dannes i reaktion (2.26) og derfor bidrager med et positivt led til reaktionshastigheden for ozon, ligning (2.33), mens ozon forbruges i reaktion (2.25), (2.27) og (2.31) og derfor bidrager med tre negative led til reaktionshastigheden for ozon. Til ligning (2.33) kan også tilføjes emission (se afsnit 2.3.2) af ozon, da emission kan opfattes som en form for dannelse af stof. På tilsvarende måde er det muligt, at opfatte deposition som en tabsreaktion, med hastighedskonstanter  $k_{s1}$  (tørdeposition) og  $k_{s2}$  (våddeposition), men dette gøres ikke i DEM, da depositionsleddet løses analytisk. I DEM vil der være 35 ligninger, en for hvert stof, af type (2.33) - (2.38).

Det er specielt 3 ting som udmærker sig for de kemiske reaktioner:

1. De kemiske reaktioner beskrives ved ordinære differentiaalligninger (ODE).
2. De kemiske reaktioner (ODE) er ofte koblede til hinanden, se ligning (2.33) - (2.38) og har forskellige reaktions hastigheder (stift system).
3. De er som regel ikke-lineære.

En kombination af punkt 2 og 3 vanskeliggør den numeriske løsning.

I DEM deler man de kemiske reaktioner op i et tabsled og et produktionsled [Zlatev et al. 1992]:

$$Q_s = \frac{dc_s}{dt} = -L_s c_s + P_s \quad (2.39)$$

hvor  $L$  er tabsledet ("loss" på engelsk) og  $P$  er produktionsledet, sammenlign med (2.33) - (2.38) for oven. Det at der er ganget  $c_s$  på tabsledet indikerer bare at stoffet selv altid vil indgå i disse reaktioner, se de negative led i (2.33) - (2.38). Det er ikke tilfældet i produktionsledet, se de positive led i (2.33) - (2.38). En anden måde at skrive ligning (2.39) på er [Zlatev et al. 1992]:

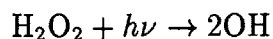
$$\frac{dc_{si}}{dt} = - \sum_{j=1}^q \alpha_j c_{ji} + \sum_{k=1}^q \sum_{j=1}^q \beta_{kj} c_{ki} c_{ji} \quad (2.40)$$

hvor index  $i$  angiver gitterpunkt og  $\alpha$  (negativ hvis det er et produktionsled og positiv hvis det er et tabsled) og  $\beta$  (positiv hvis det er et produktionsled og negativ hvis det er et tabsled) er hastighedskonstanter, se ligning (2.21) og (2.41). I denne ligning er det delt op i et 1. ordens led (enkelt summen) og et 2. ordens led (dobbelt summen).

### Fotokemiske reaktioner

I dette afsnit omtales fotokemiske reaktioner. For en mere uddybende gennemgang kan der henvises til f.eks. [Alberty 1987] og [Pedersen 1992].

Nogle kemiske reaktioner foregår ved at et stof *absorberer* et lyskvantum, givet ved  $E = h\nu$ , hvor  $E$  er energien af lyset,  $h$  er Planck's konstant og  $\nu$  er frekvensen af lyset. Et eksempel på en fotokemisk reaktion fra CBM IV skemaet i DEM [Zlatev 1995, s. 44, nr. 66] er:



hvor et hydrogenperoxidmolekyle,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , ved absorption af et lyskvantum spaltes til 2 hydroxidradikaler, OH. For en fotokemisk reaktion kan hastighedskonstanten, eller fotolysekonstanten,  $J$ , som den bliver kaldt, ikke beregnes direkte fra ligning (2.21) idet konstanten bl.a. afhænger af hvor meget lys (energi) molekylet modtager fra solen og hvilket molekyle der er tale om.

I DEM angives fotolysekonstanten ved:

$$J = A \cdot e^{-B_{\text{foto}}/\cos\theta} \quad (2.41)$$

hvor  $\theta$  er zenithvinkelen (ved ækvator er  $\theta = 0$ ) og  $B_{\text{tot}}$  er en fotokemisk konstant. Hvis  $L$  angiver tykkelsen eller længden (i højden) af atmosfæren, så vil  $\frac{L}{\cos\theta}$  svare til den længde som sollyset passerer og  $\frac{1}{\cos\theta}$  vil svare til hvor mange gange atmosfærens tykkelse lyset har passeret. Jo længere lyset har passeret gennem atmosfæren, des mindre vil intensiteten af lyset være (på grund af at molekyler absorberer lys undervejs samt at lys spredes). Dette er givet ved Lambert-Beers lov:

$$I_{\bar{z}} = I_{0\bar{z}} e^{-t_{\bar{z}}/\cos\theta} \quad (2.42)$$

hvor vejlængden  $l$  i Lambert-Beers lov i (2.42) er  $\frac{l}{\cos\theta}$ ,  $I_{\bar{z}}$  er intensiteten af sollyset ved jordoverfladen og  $t_{\bar{z}}$  er *dæmpningskoefficienten* (dimensionsløs).  $t_{\bar{z}}$  er primært afhængig af skydækket idet størrelsen beskriver spredning af lyset samt absorption af lyset hen gennem atmosfæren. Eksponentialledet i ligning (2.41) skyldes altså Lambert-Beers lov.

## 2.4 Inputdata

I den foreløbige beskrivelse af DEM har vi antaget at en række af de parametre som indgår i modellen er kendte funktioner i tid og sted. Dette er dog langt fra tilfældet. F.eks. i forbindelse med vindhastigheden  $V=(u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t))$  som benyttes i advektionsligningen (ligning (2.7)), emissionen af de forskellige stoffer ( $E_s(x, y, z, t)$ ) og mixhøjden  $H_{\text{mix}}(x, y, z, t)$  som bl.a. indgår i beskrivelsen af den vertikale diffusionskoefficient  $K_z$  (ligning (2.15)) samt i depositions-koefficienterne.

I DEM benyttes målte data til at beskrive disse og mange flere parametre som indgår i modellen og der er således krav om en række inputdata.

De inputdata som er påkrævet i DEM kan inddeles i 3 grupper.

1. Meteorologiske data (f.eks. vindhastigheder og højden af mixlaget).
2. Emissionsdata til beskrivelse af  $E(x, y, z, t)$ .
3. Data som benyttes til beskrivelse af randbetingelserne (til den numeriske løsning)

### 2.4.1 Meteorologiske data

De meteorologiske data kommer fra MSC-W EMEP<sup>2</sup> og findes for hver 6. time og for hver 150 km × 150 km. De meteorologiske input data, som benyttes i DEM udgøres af:

- Vindhastighed. Disse data angiver for hvert målepunkt vindhastigheden i  $x, y$  planet (horisontalt) d.v.s disse data angiver en vektor med to komponenter, som benyttes til at fastlægge advektionskomponenterne  $(u, v)$ .
- Vertikal vind. Benyttes til fastlæggelse af 3. komponenten  $w$  i vindfeltet  $V$ .
- Højden af mixlaget ( $H_{\text{mix}}$ ) måles, i modsætning til de resterende meteorologiske data, kun hver 12. time. Størrelsen af dette lag indgår i beskrivelsen af den vertikale diffusions koefficient  $K_z$  samt til fastlæggelse af depositions-koefficienterne ( $k_{s1}$  og  $k_{s2}$ ).
- Temperaturen i mixlaget. Benyttes til fastlæggelse af de temperaturafhængige kemiske hastighedskoefficienter.
- Nedbør (ved jordoverfladen): Benyttes til fastlæggelse af  $I$  som indgår i våddepositions-koefficienten.
- Overfladetemperaturen: Benyttes til beregning af naturlige VOC emissioner (dvs. funktionen  $E_s(x, y, z, t)$ , når  $s$  angiver en naturlig VOC).
- Skydække (fri troposfære): Benyttes til beregning af hastighedskonstanten  $J$  for de fotokemiske reaktioner.

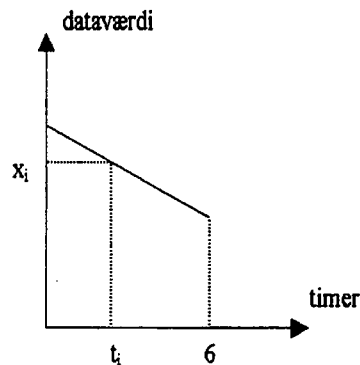
Som det senere vil fremgå er der til løsning af DEM behov for input data hvert 15 min. For at skaffe disse data laves simple lineære interpolationer i tid mellem de målte data [Zlatev et al. 1993] (se figur 2.4).

Figur 2.4 viser de meteorologiske data som funktion af tiden. Der er to data punkter – til tiden 0 og til tiden 6 (angivet i timer). Da DEM's tidsskridt er på 15 minutter, vil  $i$  gå fra 1 til 23, og man vil således generere et datasæt på 23 værdier imellem de to målte værdier.

I de nyere versioner af DEM er det endvidere nødvendigt også at lave geografiske interpolationer.

---

<sup>2</sup>MSC-W EMEP er en forkortelse for Meteorological Synthesizing Centre-West of the European Monitoring and Evaluation Programme



Figur 2.4  $t_i$  er tiden til den værdi man vil interpolere,  $x_i$  er den interpolerede værdi.

### 2.4.2 Emissionsdata

I DEM benyttes emissionsdata til fastlæggelse af funktionen  $E_s(x, y, z, t)$ . Disse data kommer også fra MSC-W EMEP, som dels har målt og dels estimeret hvor mange tons af stof  $s$  der emitteres pr. år i et givet område på  $150 \text{ km} \times 150 \text{ km}$ . Dette betyder at emissionsdata kun findes som en årlig totalværdi for hvert gitterfelt. Denne værdi benævner vi  $E_{s, \text{total}}$ . For at kunne beskrive funktionen  $E_s(x, y, z, t)$  er det nødvendigt at interpolere disse data over tid. I DEM afhænger interpoleringsmetoden af det specifikke stof  $s$ . For f.eks.  $\text{NH}_3$  emissionerne antages en ligelig fordeling over året [Zlatev et al. 1993]. Derved fås at

$$E_{\text{NH}_3}(x, y, z, t) = \frac{E_{\text{NH}_3, \text{total}}(x, y, z)}{\Lambda} = \bar{E}_{\text{NH}_3}(x, y, z) \quad t \in [0, \Lambda]$$

hvor  $\Lambda$  angiver antallet af tidsskridt pr. år og  $\bar{E}_{\text{NH}_3}$  angiver middelværdien for  $\text{NH}_3$ -emissionen i et gitterfelt.

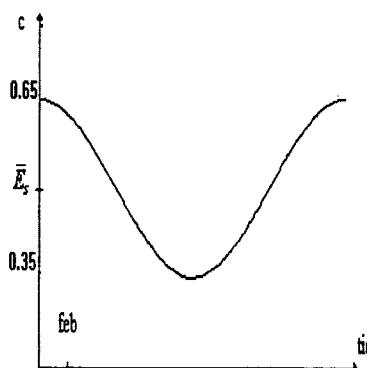
Svovlforbindelserne ( $\text{SO}_2$  og  $\text{SO}_4^{2-}$ ) varierer derimod med årstiden. I DEM er denne årstidsvariation approximeret med en cosinus funktion som svinger omkring årsmiddelværdien,  $\bar{E}_{\text{svovl}}$ . Denne cosinus funktion antager sit maksimum ( $1,35 \bar{E}_{\text{svovl}}$ ) om vinteren og minimum ( $0,65 \bar{E}_{\text{svovl}}$ ) om sommeren [Zlatev et al. 1992]. Emissionsfunktionen for svovlforbindelserne er i et gitterfelt  $(x, y, z)$  således defineret ved

$$E_{\text{svovl}}(x, y, z, t) = \bar{E}_{\text{svovl}}(x, y, z) + 0,35 \bar{E}_{\text{svovl}}(x, y, z) \cos\left(\frac{2\pi}{\Lambda} t\right) \quad (2.43)$$

hvor  $t \in [0, \Lambda]$

hvor  $\Lambda$  som før angiver antallet af tidskridt pr. år. Heraf ses at hvis  $t = \frac{1}{2}\Lambda$  (sommer) antager ligning (2.43) sit minimum og tilsvarende antager funktionen sit maximum for  $t = 0$  (vinter).

Variationen af svovl emissionen er illustreret på fig. 2.5.



Figur 2.5 Interpoleret svovl-variation over året.

Emissionen af de specifikke svovlforbindelser beregnes ud fra antagelsen om, at  $\text{SO}_2$  udgør 80% af totalt emitteret svovl og  $\text{SO}_4^{2-}$  udgør 5%. De resterende 15% udfældes som ren svovl [Zlatev et al. 1992].

Emissionen af  $\text{NO}_x$  og de menneskeskabte VOC emissioner varierer ikke på årsbasis, men over døgnet. Emissionsfunktionen for disse stoffer antages at være stykvis konstant med en dagsemission som er tre gange højere end emissionen om natten.

Der er også dagsvariation på naturlige VOC emissioner, og selve emissionsfunktionen approximeres ud fra viden om skovarealer i gitterpunkterne og inputdata om jordtemperaturen, efter Lübkert og Schöp metoden [Zlatev et al. 1993]. Der benyttes således flere forskellige interpolationsalgoritmer til beskrivelse af emissionsfunktionen i DEM. Fælles for dem alle er, at de tager udgangspunkt i den målte (og estimerede) årsværdi for emissionen i et gitterpunkt idet det generelt skal gælde at  $\int_0^\Lambda E_s(t) dt$  skal svare til den årlige totalværdi (inputværdien) i gitterpunktet.

### 2.4.3 Begyndelses- og randbetingelser

For at løse modellen numerisk er det nødvendigt at have rand- og begyndelsesbetingelser. Begyndelsesbetingelsen skal definere funktionen  $c_s(x, y, z, t =$

0), dvs. angive koncentrationen af stof  $s \forall (x, y, z) \in \Omega$  til tiden  $t = 0$ . De resterende randbetingelser definerer de geografiske (eller rumlige) grænser for DEM. I den 2-dimensionale udgave af DEM findes 4 geografiske rande nemlig for  $(x = 0)$ ;  $(x = X)$ ;  $(y = 0)$  og  $(y = Y)$ .

I den 3-dimensionale udgave af DEM er der yderligere 2 rande; nemlig jordoverfladen,  $(z = 0)$ , samt en øvre grænse for  $(z = Z)$ .

### Begyndelsesbetingelsen

For at definere begyndelsesbetingelsen er det nødvendigt at kende koncentrationerne af hver af de 35 stoffer for  $t = 0$ , dvs. at  $c_s(x, y, z, 0) = p_s(x, y, z)$  er en kendt funktion. Denne funktion kendes imidlertid ikke, og det kan være svært at finde gode approximationer. Problemet løses ud fra følgende algoritme: [Zlatev et al. 1993]

- Tag nogle grove gæt.
- Kør modellen i fem dage.
- Tag de koncentrationer der er fremkommet og brug som startværdier i kørslen.

Det understreges, at jo flere dage i forvejen modellen startes des mindre er behovet for at have præcise startværdier. Herved tillægges genererede startværdier større pålidelighed end målte koncentrationer. [Zlatev 1995, s.101]. Denne holdning er helt analog til [Hamming 1962] som siger

Instead of information retrieval we prefer information regeneration.

Især i de tredimensionale kørsler af modellen er problemerne med startværdierne store og overskygger problemerne med de numeriske metoder. [Zlatev et al. 1993, s. 5]

### Randbetingelser

I DEM er man interesseret i koncentrationer i Europa, for hvilket man har defineret et afgrænset geografisk domæne  $x \in [0, X]$ ,  $y \in [0, Y]$ . Problemerne med denne afgrænsning er, at der i virkeligheden stadig vil være påvirkninger på det afgrænsede område udefra, men dette kan ikke tages direkte med i

modellen. Et eksempel kunne være stof, der blæser ud af systemet, for derefter at blæse ind igen. Dette vil modellen ikke kunne tage højde for, da stoffet er forsvundet fra systemet. Det ideelle ville være at betragte hele jorden som et system, men i praksis opstilles randbetingelser (f.eks. funktioner), der styrer, hvad der sker mellem domænet og udenfor domænet.

I DEM benyttes såkaldte Dirichlet betingelser, hvor man fastlægger koncentrationen af stof  $s$  på de horisontale grænser enten som funktioner eller ved konstante værdier. Disse er givet ved:

$$\begin{aligned}c_s(0, y, t) &= b_{s1}(y, t) \\c_s(X, y, t) &= b_{s2}(y, t) \\c_s(x, 0, t) &= b_{s3}(x, t) \\c_s(x, Y, t) &= b_{s4}(x, t)\end{aligned}\tag{2.44}$$

hvor  $b_{si}$  enten kan beskrives ved *inputdata* eller ved en *funktion*, man skal dog passe på, da en numerisk metode som f.eks. pseudospektralmetoden kræver, at randbetingelserne er periodiske. Inputdata leveres i praksis af en model, der har kørt i samme tidsinterval – men på et større domæne [Zlatev 1995, s. 103]. Dirichlet betingelserne bevirker (i fysisk forstand) at der kan transporteres stof over de horisontale grænser idet koncentrationerne pga. randbetingelserne er “kunstigt” fastholdte. Dette betyder nemlig at hvis koncentrationen i et gitterpunkt ved randen er højere end den fastholdte værdi vil der forsvinde stof ud af systemet og hvis koncentrationen er lavere end den fastholdte værdi så vil der blive tilført stof til systemet.

Det er dog problematisk at finde disse fastholdte værdier (eller funktioner),  $b_{si}$ , som beskriver koncentrationen på randen. I DEM løses dette problem ved at tage et meget stort område i betragtning, hvilket bevirker at randbetingelserne får mindre indflydelse på det interessante område, specielt hvis de sættes til at være tæt på baggrundskoncentrationen.

Randbetingelsen for den nedre grænse ( $z = 0$  dvs. ved jordoverfladen) bestemmes ud fra tørdepositionen. Hvis stof  $s$  tørdeponeres er randbetingelsen givet ved en inhomogen Neumann betingelse på formen

$$\frac{\partial c_s(x, y, 0, t)}{\partial z} = b_{s5}(x, y, t)$$

hvor  $b_{s5}(x, y, t)$  afhænger af stoffets depositions-hastighed. Hvis stoffet *ikke* deponeres sættes  $b_{s5}(x, y, t) = 0$  (homogen Neumann betingelse). Denne randbetingelse betyder (i fysisk forstand) at stoftransporten ud af systemet er bestemt af tørdepositionen. Er der ingen deposition er randen lukket (dvs. ingen stoftransport over randen).



For den øvre grænse ( $z = Z$ ) bruges en Dirichlet betingelse analogt til (2.44):

$$c_s(x, y, Z, t) = b_{s6}(x, y, t)$$

hvor  $b_{s6}(x, y, t)$  er en funktion af  $c_s$  i den fri troposfære. Man har kun få målinger til fastlæggelse af  $b_{s6}(x, y, t)$  som derfor er behæftet med ret store usikkerheder. For nogle stoffer, f.eks. ozon, er man desuden nødt til at tage hensyn til udveksling af stof mellem mixlaget og den fri troposfære. Det er dog meget svært at bestemme denne udveksling og i DEM har man testet forskellige udvekslingsalgoritmer (for ozon, se f.eks. [Zlatev et al. 1993]). Den matematiske beskrivelse af stofudvekslingen med den fri troposfære er dog stadig under udvikling.

## 2.5 Numerisk behandling af DEM

DEM består af et antal partielle differentiaalligninger, en for hvert stof i modellen, se ligning (2.1). Denne ligning kan ikke løses analytisk<sup>3</sup>, med mindre der laves meget urealistiske antagelser, og det er derfor nødvendigt med en numerisk løsning [Zlatev 1995]. Hertil kræves både en geografisk og en tidslig diskretisering. Som det senere vil fremgå, har disse diskretiseringer forskellige funktioner, idet den geografiske diskretisering benyttes til at transformere PDE til ODE, og tidsdiskretiseringen benyttes til at løse disse ODE's. I dette afsnit beskrives først, hvorledes DEM er diskretiseret, og derefter skitseres den overordnede procedure, hvormed DEM løses numerisk. Denne procedure inkluderer mange forskellige numeriske algoritmer. Det er imidlertid ikke indenfor dette projekts rammer at give en detaljeret beskrivelse af de numeriske metoder, som kan benyttes til løsning af (2.1), og vi henviser istedet til den omfattende litteratur der findes om emnet (f.eks. [Marchuk 1975]).

### 2.5.1 Diskretisering

Det geografiske område, som udgør domænet for DEM, er på 4800 km × 4800 km og inkluderer hele Europa og dele af Afrika og Asien. I den geografiske diskretisering lægges et gitter ned over dette område. Gitterstørrelsen er primært bestemt af tilgangen til den nødvendige data (se afsnit 2.4), men også antallet af beregninger er bestemmende for, hvor fin netinddelingen er. I

<sup>3</sup>Det er dog muligt at løse advektions-diffusionsligningen analytisk, når hastighedsfeltet er stykvis lineært [Bernard 1990], hvilket faktisk er tilfældet i DEM grundet de lineære interpolationer mellem vindmålingerne (se afsnit 2.4.1), dette er dog forbigået i DEM

de tidligere udgaver af DEM arbejdede man med en geografisk diskretisering på  $\Delta x = \Delta y = 150$  km. Dette svarer til  $32 \times 32 = 1024$  gitterpunkter. Efter 1993 har man brugt et finere gitter med  $\Delta x = \Delta y = 50$  km, hvilket svarer til  $96 \times 96 = 9216$  gitterpunkter (se evt. fig 2.3).

I den tredimensionale udgave af DEM er det også nødvendigt at diskretisere langs den vertikale akse  $z$ . I DEM regner man med 10 lag.

Tidsdomænet  $[0, T]$  i DEM er ofte på en måned, men kan være helt op til et år. Dette interval diskretiseres med  $\Delta t = 15$  min. For kemidelen i DEM kræves dog en finere diskretisering på  $\Delta t = 2.5$  min.

Den rumlige og tidslige diskretisering betyder, at der skal løses flere millioner aritmetiske ligninger pr. simulering. Antag f.eks. at der skal laves en beregning for en måned (31 dage), hvor modellen skal køre i 5 dage for at generere startværdier. For advektionsdelen kræver dette  $\frac{36 \cdot 24 \cdot 60}{15} = 3456$  tidsskridt for hvert gitterpunkt ( $96 \times 96 \times 10$ ) og for hvert stof (35) (med den tredimensionelle model). Dette giver  $96 \cdot 96 \cdot 10 \cdot 35 \cdot 3456 = 1,1 \cdot 10^{10}$  ligninger. Hertil kræves hurtige computere og effektive algoritmer, hvilket er et af de områder, der forskes meget i som en del af DEM-modelleringen (se f.eks. kapitel 6-9 i [Zlatev 1995]).

## 2.5.2 Opdeling i submodeller

Første del af den numeriske løsning af DEM består i en opsplitning af (2.1) i submodeller. Det er uhensigtsmæssigt at løse ligning (2.1) med en fælles numerisk metode, idet ligningen beskriver forskellige fysiske processer med forskellige matematiske egenskaber så som PDE's - ODE's, 1. afledt - 2. afledt, lineær - ikke-lineær og forskellige karakteristiske tider svarende til små og store egenverdier. Modellen deles derfor op efter de fysiske processer:

$$\frac{\partial c_s^{(1)}}{\partial t} = -\frac{\partial (uc_s^{(1)})}{\partial x} - \frac{\partial (vc_s^{(1)})}{\partial y} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial c_s^{(2)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial c_s^{(2)}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial c_s^{(2)}}{\partial y} \right) \quad (2.46)$$

$$\frac{dc_s^{(3)}}{dt} = E_s + Q_s (c_1^{(3)}, c_2^{(3)}, \dots, c_q^{(3)}) \quad (2.47)$$

$$\frac{dc_s^{(4)}}{dt} = -(k_{1s} + k_{2s}) c_s^{(4)} \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial c_s^{(5)}}{\partial t} = -\frac{\partial (wc_s^{(5)})}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial c_s^{(5)}}{\partial z} \right) \quad (2.49)$$

hvor hver ligning (submodel) løses separat. Ligning (2.45) beskriver den horisontale advektion, (2.46) den horisontale diffusion, (2.47) kemi og emission, (2.48) depositionen og (2.49) den vertikale transport. Som det kan bemærkes, er ligningerne (2.45), (2.46) og (2.49) partielle, hvorimod ligning (2.48) og (2.47) er ordinære differentiaalligninger.

Ovenstående inddeling har flere fordele ([Zlatev 1995], [Zlatev et al. 1996]):

1. Ligning (2.45)-(2.49) er nemmere at beregne end ligning (2.1).
2. De fysiske processer i modellen kan studeres særskilt.
3. Man kan bruge forskellige numeriske metoder til at løse (2.45)-(2.49) og dermed er det lettere at finde optimale (eller gode) metoder, end hvis (2.1) skulle løses numerisk.
4. Der er muligt at lave submodellerne separat.
5. Modellen bruges ofte som en todimensional model, og i dette tilfælde skal det sidste led, (2.49), ikke med.

Ulempen ved opdelingen er bl.a. at det er svært at kontrollere den fejl, som skyldes selve måden at opdele modellen på.

I [Zlatev 1995] bliver det fremhævet, at det ikke er nok at vælge numeriske metoder, som fungerer optimalt (eller godt) for hver submodel. Det er også nødvendigt at teste modellen globalt, dvs. om opdelingen og de valgte numeriske metoder fungerer godt sammen.

### 2.5.3 Transformering af PDE til ODE

Anden del af den numeriske procedure består i at transformere ligningerne (2.45), (2.46) og (2.49) til et system af ordinære differentiaalligninger. Hertil benyttes forskellige numeriske algoritmer, som diskretiserer de rumligt afledte i de partielle submodeller (rumlig diskretisering).

Antag nu at domænet  $\Omega$  er et parallelepiped (en "kasse") med en rumlig diskretisering, som er ækvivalent og med  $N_x \times N_y \times N_z$  gitterpunkter, hvor  $N_x$ ,  $N_y$  og  $N_z$  er antallet af gitterpunkter langs hhv.  $x$ ,  $y$  og  $z$ -akserne. Lad  $q$  angive antallet af kemiske stoffer. Antag desuden, at de rumligt afledte i

ligning (2.1) (dvs. ligning (2.45), (2.46) og (2.49)) er diskretiseret med en numerisk metode. Ligning (2.1) kan da skrives som et system af ordinære differentialligninger af formen:

$$\frac{d\mathbf{g}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{g})$$

hvor  $\mathbf{g}(t) : [0, T] \rightarrow \mathbf{R}^{N_x \cdot N_y \cdot N_z \cdot q}$  er en vektorfunktion med  $N_x \times N_y \times N_z \times q$  komponenter. Hver komponent angiver koncentrationen af et stof som funktion af tid i et bestemt gitterpunkt. Og hele vektorfunktionen angiver koncentrationerne af de 35 stoffer i alle gitterpunkter.

$\mathbf{f}(t, \mathbf{g})$  er også en vektorfunktion med samme antal komponenter, som afhænger af den anvendte rumlige diskretiseringsmetode.

For den opdelte model ((2.45)-(2.49)) fås:

$$\frac{d\mathbf{g}^{(i)}}{dt} = \mathbf{f}^{(i)}(t, \mathbf{g}^{(i)}) \quad (2.50)$$

hvor  $i = 1, 2, 3, 4, 5$ .

Der findes flere forskellige numeriske metoder til at omskrive ligningerne på formen angivet i (2.50). I DEM afhænger valget af metode af den specifikke ligning. Således bliver den **horisontale advektion**, ligning (2.45), og den **horisontale diffusion**, ligning (2.46) løst med *pseudospectral* algoritmen og med *finite element* algoritmen [Zlatev et al. 1992], men man kan også bruge andre metoder, f.eks. finite difference.

I pseudospectralalgoritmen approksimeres de rumlige afledte i gitterpunkterne med trunkerede Fourier rækker. I én rumlig dimension har den trunkerede Fourier række følgende udseende:

$$A(t) + \sum_{k=1}^M [a_k(t) \cos(kx) + b_k(t) \sin(kx)]$$

hvor  $k = 1, \dots, M$  angiver den ækvidistante gitterinddeling i x-retningen.

Metoden benyttes primært til løsning af advektionsligningen, som kræver ekstra opmærksomhed, sandsynligvis fordi advektionsligningen af natur er asymmetrisk, hvorved en "falsk" diffusion introduceres i den numeriske løsning af ligningen [Patel and Markatos 1986]. Pseudospectralalgoritmen adskiller sig fra de resterende metoder, bl.a. fordi periodiske randbetingelser er påkrævet.

Finite elements metoden har den klare fordel, at diskretiseringen ikke behøver at være ækvidistant. Hermed er det muligt at lave en finere diskretisering

i områder, som kræver større opmærksomhed (f.eks. områder hvor koncentrationsgradienten er stor).

De kemiske reaktioner og depositionen afhænger *ikke* af stedet (dvs. gitterpunkt), og det er derfor trivielt at omskrive ligning (2.47) og (2.48) på formen (2.50).

### 2.5.4 Sammenkobling af submodellerne

Tredje og sidste del af den numeriske procedure består i at sammenkoble ligning (2.45)-(2.49), hvilket foregår vha. den numeriske tidsintegration. Antag, at koncentrationerne i alle gitterpunkter er beregnet til tiden  $t = t_n$  (dvs. komponenterne til  $\mathbf{g}(t_n)$ ). Koncentrationerne i næste tidsskridt,  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ , kan beregnes ved at ligning (2.45)-(2.49) på formen (2.50) løses efter hinanden. Dvs. at værdierne af  $\mathbf{g}(t_n)$  bruges som startværdier til løsning af (2.45). De koncentrationer som fås når (2.45) løses,  $\mathbf{g}^{(1)}(t_{n+1})$ , bruges som startværdier til at løse (2.46) osv. indtil (2.49) er løst. Herved fås en approksimation til  $\mathbf{g}(t_{n+1})$ , dvs. for den globale proces. Proceduren gentages i tidsskridt  $n + 2$  for at beregne  $\mathbf{g}(t_{n+2})$  osv.

Vi vil illustrere opsplittingsproceduren med et trivielt, men forhåbentligt illustrativt eksempel. Antag vi ønsker at løse den ordinære differentiaalligning

$$\frac{dc}{dt} = kc + hc \quad (2.51)$$

med begyndelsesværdien  $c(t = t_0) = C_0$ . Denne ligning illustrerer ligning (2.1) i DEM. Ligningen splittes op i submodellerne

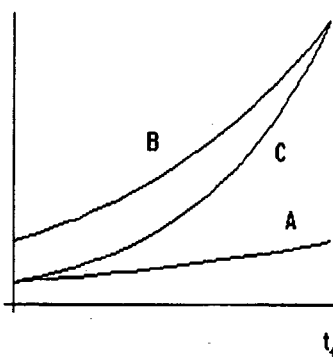
$$\frac{dc^{(1)}}{dt} = kc^{(1)} \quad (2.52)$$

$$\frac{dc^{(2)}}{dt} = hc^{(2)} \quad (2.53)$$

Disse submodeller svarer til ligningssystemet i (2.50). Ligning (2.52) løses nu med begyndelsesværdien  $c(t = t_0) = C_0$ . Den analytiske løsning til (2.52) til tidspunktet  $t = t_1$  er så givet ved

$$c^{(1)}(t_1) = C_0 e^{kt_1} \quad (2.54)$$

Denne værdi benyttes som begyndelsesværdi for (2.53), dvs.



Figur 2.6  $A = C_0 e^{kt}$ ,  $B = C_0 e^{kt_1} e^{ht}$  og  $C = C_0 e^{kt+ht}$ .

$$c^{(2)}(t_1) = c^{(1)}(t_1) e^{ht_1} = C_0 e^{kt_1} e^{ht_1} \quad (2.55)$$

hvor (2.54) er indsat i (2.55). Løsningen til den oprindelige ligning (ligning (2.51)) er da ækvivalent med ligning (2.55), idet

$$c(t_1) = C_0 e^{kt_1+ht_1} = C_0 e^{kt_1} e^{ht_1} = c^{(2)}(t_1) \quad (2.56)$$

hvilket viser, at metoden giver mening i hvert tilfælde for simple (lineære) ODE's (se også figur 2.6).

I DEM er det kun depositions-ligningen, der kan løses analytisk. De resterende submodeller skal, i modsætning til eksemplet, løses numerisk. Til løsning af ligningerne (2.45)-(2.47) og (2.49) på formen (2.50) benyttes igen forskellige metoder afhængig af processen. Således løses den horisontale diffusion og advektion på formen (2.50) ved den almindelige *predictor-corrector* metode og ligning (2.49) på formen (2.50) med klassiske integrationsmetoder (som f.eks. Runge-Kutta metoden og Trapezodialreglen).

Et af de største numeriske problemer er forbundet med løsning af kemi/emissionsdelen (ligning (2.47)). Problemet her er primært, at de kemiske reaktioner forløber med meget forskellige hastigheder, og derved er der et sammenfald af hurtige og langsomme reaktioner. Matematisk resulterer dette i et "stift" system af ODE, idet der både er meget store og meget små egenverdier [Zlatev 1995]. Men problemet er også, at ligning (2.47) indeholder ikke-lineære og koblede led og ydermere er den mest tidskrævende

submodel, hvilket øger behovet for effektive numeriske algoritmer [Zlatev 1995]. Der er overordnet tre strategier, som kan benyttes til løsning af dette ligningssystem:

1. Numeriske metoder, der udnytter de særlige kemiske egenskaber ved reaktionen.
2. Klassiske numeriske metoder (f.eks. Runge Kutta).
3. Numeriske metoder baseret på ekstrapolationsmetoder.

I DEM benyttes *quasi-steady-state* algoritmen, som er et eksempel på den første strategi. Denne algoritme er relativt simpel og stabil, men ikke særlig nøjagtig, hvilket nødvendiggør, at tidskridtene for kemi-/emissionssubmodellen er meget mindre ( $\Delta t = 2, 5$  min) end for de resterende submodeller ( $\Delta t = 15$  min). [Zlatev et al. 1996]. Quasi-steady-state metoden kan kort skitseres som følger: Ligning (2.47) omskrives til formen

$$\frac{dc_s}{dt} = P_s - L_s c_s \quad (2.57)$$

(se ligning (2.39)), hvor  $P_s$  og  $L_s$  er hhv. produktionsled og tabsled som ofte er ikke-lineære led. Emissionen ( $E_s$ ) betragtes her som en produktion af stof  $s$  og indgår derfor i  $P_s$ .

Quasi-steady-state metoden er i dette tilfælde baseret på, at udtrykkene i (2.57) kan behandles separat (dvs. at ledene  $P_s$  og  $L_s$  for et lille tidsskridt antages at være uafhængige af koncentrationen af de resterende stoffer). Hvert af disse udtryk behandles efter tre formler, alt efter størrelsen af  $\Delta t L_s$ . For et givet tidsskridt  $n$  er der tre rekursionsformler:

$$\text{For } \Delta t L_s > 10 : \quad c_s^{n+1} = P_s / L_s \quad (2.58)$$

$$\text{For } 0.01 < \Delta t L_s \leq 10 : \quad c_s^{n+1} = P_s / L_s + (c_s^n - P_s / L_s) \exp(-\Delta t L_s) \quad (2.59)$$

$$\text{For } \Delta t L_s \leq 0.01 : \quad c_s^{n+1} = c_s^n + \Delta t (P_s - L_s c_s^n) \quad (2.60)$$

Formel (2.58) følger direkte af ligning (2.57), når det antages, at  $dc/dt = 0$  for  $t \in [t_n, t_n + \Delta t]$  (dvs. **steady state** - heraf navnet til algoritmen). Når tabsledet er stort, er det rimeligt, for et lille tidsskridt, at antage steady state, idet forskellen mellem produktion og tab herved bliver relativ lille.

Formel (2.59) er den eksakte løsning til (2.57), når det antages, at  $P_s$  og  $L_s$  er konstante i intervallet  $[t_n, t_n + \Delta t]$ . Med denne antagelse reduceres (2.57) til en lineær ODE med konstante koefficienter.

Den sidste formel (ligning (2.60)) er en anvendelse af 1. ordens Euleralgoritme, som antages stabil for  $\Delta t L_s \leq 0.01$ .

Opsplitningen af DEM i submodeller er helt grundlæggende i den numeriske løsning af DEM. For en nærmere beskrivelse af opsplittingsprocedurer generelt og i særdeleshed komponentvis opsplitning henvises f.eks. til [Marchuk 1975], som meget detaljeret beskriver metoden anvendt dels på meget simple systemer (to operatorer – en partiel analog til eksemplet), men også på mere komplekse systemer.

Hermed vil vi afslutte beskrivelsen af DEM. I kapitel 4 vender vi tilbage til modellen, hvor vi vil undersøge, hvordan DEM er blevet verificeret. Inden vi er i stand til det, må vi dog først opstille en procedure til generel verificering af computerbaserede matematiske modeller. Denne procedure beskriver vi i næste kapitel. Med proceduren i hånden undersøger vi verificeringen af DEM.



## Kapitel 3

# Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

Computerbaserede matematiske modeller bruges i stadigt større omfang indenfor mange områder. F.eks. udvikles hele tiden flere modeller til at beregne meteorologiske forhold, enten til brug i vejrforudsigelser eller til at beregne ændringerne i klimaet som følge af øget forurening. For at kunne bruge modelberegningerne, f.eks. som grundlag for beslutninger, er det nødvendigt at kunne bestemme, hvornår beregningerne kan anses for "gyldige" – eller rettere: "Præcise nok til at opfylde modellens formål". Det er forhold som disse, en verificeringsprocedure, eller kvalitetsbedømmelsesprocedure skal danne grundlag for at kunne vurdere.

Nogle mener ikke, det giver mening at tale om, at en model kan være gyldig på baggrund af en verificeringsprocedure. [Davis and Goodrich 1990] er et eksempel på dette. Her fremstilles synspunktet, at der ved forskellig testning og verificering kun kan opnås rimelig sikkerhed for, at en model ikke er ugyldig og altså ikke, at den er gyldig. Det giver for dem kun mening at tale om "ugyldige" eller "ikke-ugyldige" modeller og en verificering vil i dette tilfælde kun kunne klassificere en model "ikke-ugyldig".

Mange andre bekender sig imidlertid til definitionen af verificering som "dokumentation for, at en model er tilstrækkelig præcis i forhold til formålet", som også er definitionen, vi vil bruge. Definitionen er inspireret af Robert G. Sargent, der i artiklen "Validation of mathematical models" [Sargent 1990], (som er et bidrag til konferencen Safety Assessment of Radioactive Waste Repositories: Validation of Geosphere Flow and Transport Models)

## 42 Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

diskuterer, hvordan computerbaserede matematiske modeller kan valideres. Her bruges termen "validering" om dette begreb. Vi skelner lidt anderledes mellem begreberne "verificering" og "validering":

**Verificering** er en procedure, hvormed *modelbyggeren* sikrer sig, at modellen virker efter formålet, altså at den udgør en passende præcis repræsentation af det virkelighedsområde der modelleres. Til verificeringsproceduren hører en vurdering af, hvor store fejlkilder, der indgår i modellen, og om nogle af dem eventuelt kan mindskes. Modelverificeringen er kendetegnet ved

- Verificeringen foregår sideløbende med modelbygningen
- Den tager udgangspunkt i modellens formål

**Validering** er proceduren, der giver *modelbrugeren* mulighed for at vurdere om modellen er valid (dvs. god nok til anvendelse). Kendetegnende for proceduren er:

- Den finder sted, når modellen er færdigudviklet og klar til brug.
- Den afhænger af aftagerens specifikke formål med anvendelsen af modellen.

Begge procedurer foretages primært af modelbyggeren, men i valideringen foregår det i samspil med modelaftageren.

Vi vil fokusere på *verificeringen* af en matematisk model, men opstiller i slutningen af dette kapitel forslag til hvilke generelle krav en validering kunne indeholde. Valideringskravene kan også betragtes som forslag til en modeldokumentation, der giver modelbrugeren mulighed for at vurdere modellens gyldighed.

Verificeringen er noget af det vigtigste for såvel modelbyggeren som for brugerne af modellen. Modelbyggeren fordi resultatet af en verificering kan indikere, om modellen kan bruges til at beskrive det genstandsområde, der skulle modelleres – og modelbrugeren, fordi det danner grundlag for modelvalideringen. Verificeringen giver indsigt i, i hvilken udstrækning modellen virker og således, hvor den eventuelt kan udbygges og måske derved blive mere præcis. Modelaftageren har behov for at vide, dels hvor modellen kan bruges, dels hvor præcise beregningerne er indenfor gyldighedsområdet. I [Sargent 1990] fremhæves det, at der er gjort forsøg på at opstille generelle krav til verificering af matematiske modeller. Ét forsøg er såkaldte scoringsmodeller eller tests, der indeholder en række spørgsmål til modellen, som giver points efter

en skala (se f.eks. [Gass 1977]). Sådanne generelle verificeringer giver imidlertid ikke noget godt billede af modellens virkeområde. For det første er det umuligt at lave spørgsmål, som vil passe til alle modeller, for det andet vil en model kunne opnå en god gennemsnitsvurdering, selvom den på delområder har alvorlige mangler. Derudover er der risiko for, at konklusionen, der kommer i form af et tal fra en sådan scoringstest kan opfattes mere objektiv, end den egentlig er.

I terminologien foreslået af Jens Højgård Jensen i [Jensen 1988] befinder matematiske modeller sig i et spektrum der udspringer af de såkaldte teori-afledte modeller og de enkeltstående modeller eller ad-hoc modeller. Metoden til verificering af modellen hænger tæt sammen med hvilken type model der er tale om. Teoriafledte modeller har den klare fordel, at de kan underlægges både en teoretisk og empirisk kontrol, hvorimod ad hoc modeller kun kan verificeres ved sammenligning med empiriske data. De fleste modeller, inklusiv DEM, indeholder dels elementer, som er del af et større teorikompleks og dermed kan underlægges en vis teoretisk kontrol og dels elementer, der kun kan verificeres empirisk. Således er der dele af modellerne, der stort set ikke er til diskussion og dele, som det er en tillidssag, om man vil stole på. Denne opdeling i teoribaserede og ad hoc modeller er temmelig grov, det fremhæver forfatteren også selv. Opdelingen viser imidlertid, at der er forskel på (komponenterne i) modeller og at disse forskellige dele kræver forskellig verificering.

Den umiddelbart mest oplagte metode til at verificere en model er måske at sammenligne beregninger fra modellen med målte data. På denne måde kan man se, hvor godt modellen stemmer overens med "virkeligheden" (repræsenteret ved målte data). Det er imidlertid ikke tilstrækkeligt at verificere en model med empiriske data. Når der er tale om en model af virkeligheden, vil der altid være en afvigelse mellem empiri og beregninger. Modellen kan derfor være god nok, selvom den ikke stemmer godt overens med målingerne. Derfor er det vigtigt at bestemme, i hvilke situationer modellen kan fungere samt forsøge at angive, hvor præcist den gengiver virkeligheden og pege på, hvor eventuelle afvigelser kan opstå.

En verificeringsprocedure bør indeholde forskellige tests og evalueringer, der kan klargøre om modellen udgør en passende repræsentation af virkelighedsområdet, der modelleres. I [Sargent 1990] diskuteres, hvordan computerbaserede matematiske modeller kan verificeres. Transport af radioaktivt materiale er en alvorlig problemstilling. Det er særlig nødvendigt at fastsætte krav til verificeringen indenfor denne problemstilling, idet der er tale om forudsigelser langt ud i fremtiden, og der således ikke kan sammenlignes med virkeligheden.

## 44 Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

I det følgende skitserer vi, hvordan en verificeringsprocedure til computerbaserede matematiske modeller med numerisk løsning kan opdeles og beskrives de enkelte dele. Vi redegør for, hvilke redskaber der kan tages i brug for at verificere de enkelte dele. En del af redskaberne er inspirerede af opsummeringen af verificeringsredskaber i [Sargent 1990], vi har imidlertid omformuleret mange begreber og redskaber og tilføjet flere. En alfabetisk liste over de verificeringsredskaber vi bruger (angivet i kursiv) findes i appendix.

### 3.1 Verificeringsprocedure

Verificeringen af en matematisk model er en fortløbende proces, der i modsætning til valideringen ikke er adskilt fra selve modelbygningen. Verificeringen skal bl.a. sikre at de valg og antagelser, der er foretaget, er rimelige i forhold til modellens formål, og at modellens resultater er passende præcise/pålidelige. Generelt skal der opbygges tillid til gyldigheden af modellen og dens resultater. Selve verificeringsproceduren har vi delt i fire dele. En **konceptuel verificering**, hvor forholdet mellem det virkelighedsområde modellen skal beskrive, og selve den matematiske model vurderes. Her skal f.eks. modellens antagelser og opstillingen af ligninger vurderes. En **dataverificering**, som vurderer pålideligheden af de data, der benyttes i modelopbygningen, til kørsel af modellen og til verificeringen af modellen. En **verificering af computerprogram og numeriske metoder** til sikring af korrekt implementering af modellen og de numeriske algoritmer. Og endelig en **empirisk verificering** til vurdering af modeloutput i forhold til empiriske data. Bemærk, at empirisk verificering (sammenligning med målte data) også kan foregå lokalt inden for både konceptuel- og computer/numerisk verificering. Når vi skriver "empirisk verificering" som et af de fire overordnede verificeringsbegreber, er det således empirisk verificering af de globale modelresultater, dvs. modeloutputtet. Det skal også bemærkes her, at de fire verificeringsdele ikke har samme status. Dataverificeringen og computer- og numerisk verificering bidrager ikke direkte i en verificering af selve den matematiske model, men er en nødvendig forudsætning for, at modellen kan verificeres empirisk (hvis dette er muligt). Man er med andre ord nødt til at stole på de data der indgår i modellen, de numeriske metoder og computerimplementeringen før modellen kan underkastes empirisk verificering. Derimod er både den konceptuelle og empiriske verificering en direkte verificering af modellen, såfremt de benyttede algoritmer og data er verificeret.

### 3.1.1 Konceptuel verificering

Det overordnede formål med den konceptuelle verificering er at vurdere om virkelighedsområdet, som skal modelleres, er indfanget på passende vis i den matematiske model.

Dette indebærer en vurdering af, hvorvidt de udvalgte processer beskriver virkelighedsområdet på et passende niveau og til angivelse af dette passende niveau er formålet med modellen helt essentielt. Modellens formål har afgørende betydning for, hvilke processer der er centrale, og hvilke der skal frasorteres og dermed afgørende for, hvilke træk af virkelighedsområdet, modellen skal indfange. Nemlig at verificere

- udvælgelsen af de processer, der skal indgå i modelleringen
- matematificeringen af disse processer – herunder at vurdere antagelser og fastsættelsen af de parametre, der indgår i matematificeringen af processerne
- modellens logik og indre konsistens

Til vurdering af, hvorvidt de centrale processer er blevet korrekt udvalgt og korrekt beskrevet i den matematiske model, kan man bl.a. benytte *face-verificering*, hvor eksperter indenfor problemfeltet, der modelleres, vurderer ud fra deres baggrund, om modellens design er korrekt og rimelig i forhold til modellens formål, eller om essentielle processer mangler. Hertil kan *animation* (grafisk fremstillingen af processen i modellen) bruges, hvorved man kan se om modellens opførsel over tid virker realistisk. *Følsomhedstests* der angiver, hvor meget output ændres som følge af en parameter ændring, kan også benyttes i denne sammenhæng. Dels fordi processer der udviser lille følsomhed sandsynligvis kan frasorteres, dels til at vurdere, om en parameterændring medfører den forventede effekt i output. Desuden kan man ved følsomhedstests blive opmærksom på, hvilke parametre eller inputdata, der kræver særlig præcision. Hvis det er praktisk muligt at følge en given størrelse gennem modellen kan også *sporingstesten* benyttes til at afgøre, om effekten på den fulgte størrelse er som forventet. Er modellen kompliceret kan *degenereringstesten* benyttes til at simplificere modellen ved at fjerne udvalgte dele af modellen. Herved bliver det muligt at vurdere, om de enkelte dele af modellen fungerer efter hensigten.

De antagelser som modellen bygger på (det kan ofte være linearitet, uafhængighed eller stationaritet) skal også testes. Antagelserne kan i de fleste

## 46 Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

tilfælde testes enten empirisk eller med *face-verificering* og *statistiske metoder* så som hypotesetests, tilpasning af data til en fordeling, sammenligning af middelværdier og spredning, korrelation mellem data m.m.

Modellens logik er svær at teste direkte, men også her ville *face-verificering* være på sin plads. Det kunne f.eks. bestå i at sørge for, at der ikke er modstrid i antagelserne.

Endvidere kan modellen testes under *ekstreme forhold* dvs. ved at gøre udvalgte inputdata eller parametre meget små eller store og dermed simulere en ekstrem situation. Dette kan afgøre, om de antagelser modellen bygger på også er gældende udenfor normale situationer. Hvis det ikke er tilfældet, skal modellen enten konceptuelt modificeres eller også skal gyldighedsområdet for modellen angives.

### 3.1.2 Dataverificering

Verificering af data er en garanti for, at de data som benyttes i modellen er **tilstrækkelige og tilpas nøjagtige**. Data benyttes både til at bygge modellen (parameterestimation), til kørsler af modellen (inputdata) og til den empiriske verificering. I modelbygning bruges empiri til estimering af parametre, og det er vigtigt at der her er en tilstrækkelig mængde, til udførelse af statistik.

Når modellen skal køres er det ønskværdigt at passende, nøjagtige og tilstrækkelige data er tilgængelige, det er imidlertid sjældent, at der foreligger en tilstrækkelig datamængde. Derfor bliver det nødvendigt med interpolationer og datagenerering. For målte data der benyttes til den empiriske verificering skal det fortrinsvis sikres at de er repræsentative for det område, der modelleres, da en sammenligning med modeloutput ellers vil være misvisende. Metoderne til fremskaffelse af den nødvendige datamængde skal vurderes og usikkerhederne herved estimeres. Man skal også kontrollere at de indsamlede data passer til den videre brug (f.eks. til diskretiseringen), at de faktisk findes og endvidere skal eventuelle ekstreme afvigelse (outliers) undersøges. Hertil kan benyttes procedurer til kontrol af datakonsistens samt screening for afvigelse.

### 3.1.3 Verificering af numeriske algoritmer og computerprogram

I denne verificeringsfase skal det sikres, at de numeriske metoder der benyttes til den matematiske model fungerer efter hensigten og at implementeringen i

computerprogrammet er korrekt. Dette er dog langt fra trivielt. Verificering af det benyttede computerprogram indebærer at man sikrer sig at programmet er fejlfrit. Hertil findes en del konkrete værktøjer, som vi ikke vil beskrive. Istedet henviser vi til f.eks. [Standish 1994]

De numeriske algoritmer (og inddirekte implementeringen af disse) kan testes ved *sammenligning med andre modeller* hvor resultaterne fra en model med en kendt analytisk løsning sammenlignes med den numeriske løsning. En anden mulighed er at sammenligne modellen med resultater fremkommet med en anden numerisk løsning. Disse tests kan dels afgøre om algoritmerne fungerer efter hensigten og dels give et mål for fejlenes størrelse. Det er også muligt indirekte at teste algoritmerne ved f.eks. *dynamic assertion*, hvor man kan se, om beregningerne fører til urealistiske værdier (f.eks. negative koncentrationer) eller om massen er bevaret i systemet. Ofte testes de numeriske metoder ved at afprøve dem på simplificerede dele af modellen, dette sikrer imidlertid ikke at metoderne vil virke i mere komplekse tilfælde (se afsnit om verificering af de numeriske metoder i DEM). Algoritmerne, men ikke fejlens størrelse, kan også testes ved *faste værdier* hvor modeloutput fra en simplificeret model sammenlignes med resultater beregnet "i hånden". Både løsning af modeller ved forskellige numeriske metoder og fejlretning af computerprogrammerne er store områder, som der er foretaget en del forskning indenfor. Vi har, som nævnt, ikke behandlet problemstillingerne i dette afsnit, men henviser til anden litteratur, for en nærmere beskrivelse af dette.

### 3.1.4 Empirisk verificering

I den empiriske verificering skal modellens resultater konfronteres med empiriske data. Formålet med denne konfrontation er, at vurdere om modellens resultater er tilstrækkeligt nøjagtige i forhold til modellens formål og at kunne lokalisere hvorfra eventuelle afvigelser stammer. En stor del af modelverificeringen foregår i denne fase og det er her, det kan afgøres, om modellen giver en passende reproduktion af virkelighedsområdet, der er modelleret. Er der stor uoverensstemmelse mellem modellens output og de empiriske data, kan det skyldes en mangelfuld matematisk model, at grundlæggende forhold eller processer grundlæggende mangler i modellen, fejl i computerprogrammet eller de numeriske metoder samt mangelfulde eller upræcise data. Nogle uoverensstemmelser må man forvente eksisterer når modellen sammenlignes med empiri, og en stor del af verificeringsprocessen består så i at klarlægge denne uoverensstemmelse.

Der er grundlæggende to metoder til sammenligning af modeldata med empirisk data nemlig

## 48 Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

- Grafisk repræsentation af beregnede og målte data.
- Statistiske metoder, specielt hypotese tests.

*Grafiske repræsentation* skal vise forskellige typer af målinger og forhold. Dette kunne f.eks. være *tidsrækker* og *scatterplots*, hvor målte og beregnede værdier sammenlignes (se beskrivelse af disse redskaber i appendix). Det kunne også være sammenligning af middelværdier, varianser og ekstremer af hver outputvariabel. De grafiske afbildninger kan benyttes af modelbyggerne til en subjektiv vurdering af, om modellen har en nøjagtighed der svarer til det forventede, og vurdere eventuelle uoverensstemmelser. Derudover kan de gøre opmærksom på, under hvilke forhold modellen virker særlig godt eller dårligt. Graferne kan også bruges, når eksperter skal vurdere om modellen er passende nøjagtig og virker pålidelig. Endvidere kan graferne benyttes i *turing tests*, hvor eksperter med kendskab til de genstandsområdets fænomologi spørges, om de kan skelne mellem de beregnede og målte data. Der findes flere *statistiske metoder*, som kan benyttes i en mere objektiv vurdering af overensstemmelsen mellem modelresultater og empiriske datasæt. De statistiske redskaber kan benyttes dels til at få et mål for afstanden mellem beregnede og målte data og dels til at afsløre systematiske fejl og vurdere om der er signifikant forskel mellem empiri og modelberegninger.

Metoder som *residual plots* og *scatterplots* kan i første omgang benyttes til at vurdere, om der overhovedet er en relation mellem de empiriske og beregnede data men bruges primært til at afsløre systematiske fejl som f.eks. en konsekvent undervurdering af stofkoncentrationen. Flere forskellige statistiske tests kan, alt efter omstændighederne, benyttes til *hypotese tests*. En hypotese opstilles og det testes, om hypotesen skal afvises. Hvis hypotesen godtages, vil alle afvigelser mellem observerede og målte data kunne forklares som tilfældige, og således er de beregnede data ligeså troværdige som de målte. Der er imidlertid en risiko, for at det kan føre til forkerte konklusioner, dvs. at en gyldig model afvises eller en ugyldig model antages gyldig.

Ved sammenligning mellem modeloutput og empiriske data er en meget benyttet test den såkaldte Pearson test. Teststørrelsen antages her, dog under visse forudsætninger, at være approximativt  $\chi^2$  fordelt og så er det relativt simpelt at beregne testsandsynligheden [Henningsen 1996].

### 3.2 Generelle valideringskrav

Det skal være muligt for eventuelle brugere af modellen (f.eks. beslutningstagere) at vurdere, om modellen er pålidelig og anvendelig til belysning af



konkrete problemstillinger. Både set i bredt perspektiv, hvordan modellens gyldighedsområde kan defineres og mere snævert, hvor præcise modelberegningerne er og dermed hvordan de kan bruges. Dette kræver, at modellen valideres, hvilket som sagt foregår efter, at modellen er færdigudviklet. Det kan betragtes både som en opsummering af verificeringen og som dokumentation, der gør brugeren i stand til at vurdere modellens anvendelighed til vedkommendes formål.

Vi angiver her forslag til, hvordan kravene til validering af computerbase-rede matematiske modeller kan se ud. De kan samtidig kategoriseres i de fire områder:

- Konceptuel
  - Modellen skal være transparent
  - De antagelser og teorier, som modellen bygger på skal beskrives og testes hvis det er muligt
  - Modellen skal være face-verificeret
- Data
  - Usikkerheden på data der indgår i modellen skal vurderes og kvantificeres
  - Numerisk
    - \* De numeriske metoder skal være undersøgt med forskellige tests
  - Empirisk
    - \* Modeloutput skal sammenlignes med repræsentative empiriske datasæt
    - \* Afvigelser mellem beregnede og målte data, altså modellens nøjagtighed skal kvantificeres
    - \* Der skal skelnes mellem tilfældige og systematiske afvigelser
- Konceptuel/Empirisk
  - Modellens gyldighedsområde skal beskrives. Herunder hører en analyse af typiske situationer, hvor modellen kan svigte

Valideringen skal dermed både give modelaftageren trykthed for, at modellen har gennemgået en tilfredsstillende verificeringsprocedure, samt angive gyldighedsområdet, der sikrer at brugeren kan anvende modellen til sit formål.

## 50 Generelt om verificering af computerbaserede matematiske modeller

De opstillede punkter danner herved et godt grundlag for en validering af computerbaserede matematiske modeller.

Punkterne skal ses som en rettesnor for valideringskrav, der er ikke konkrete anvisninger til, hvordan punkterne udføres. For konkrete anvisninger henvises til redskaberne tidligere i kapitlet. Det vil være forskelligt, hvordan punkterne udføres, alt efter hvilken model og hvilken aftager der er tale om. Som eksempel kan tages punktet om at modellen skal være transparent. En transparent model betyder, at det er let at gennemskue de enkelte dele af modellen og dermed at se, hvordan modellen virker og hvordan den eventuelt kan forbedres. Det er selvfølgelig forskelligt, hvornår en model virker transparent alt efter, hvem der kigger på den. En person uden kendskab til genstandsområdet der modelleres kan have svært ved umiddelbart at gennemskue modellen men også for en ekspert på området kan modellen virke kompleks og ulogisk i sin fremstilling.

## Kapitel 4

# Verificering af den Danske Eulerske model

I dette kapitel vil vi analysere hvordan DEM er blevet verificeret. Hertil vil vi benytte den generelle inddeling af verificeringsproceduren (konceptuel, data, computer/numerisk samt empirisk) som blev opstillet i kapitel 2 og fokusere på hvilke redskaber der er blevet brugt i verificeringen af DEM. Formålet hermed er primært at vurdere hvorledes DEM er verificeret set i lyset af en "ideel" verificeringsprocedure. Men afsnittet skal også danne grundlaget for en senere diskussion af hvorvidt en generel opskrift for verificering af matematiske modeller er anvendelig og fornuftig.

### 4.1 Konceptuel verificering af DEM

I dette afsnit undersøger og beskriver vi hvordan DEM er blevet konceptuelt verificeret. Mere specifikt undersøges

- Hvordan verificeres udvælgelsen af ligninger og antallet af kemiske reaktioner i DEM, herunder verificering af fysiske parametre (f.eks. diffusions- og depositionscoefficients) som indgår i disse ligninger.
- Hvordan afprøves og testes de antagelser og forenklinger som er lavet i modellen.

Dette kan også formuleres som, at formålet med undersøgelsen er, at finde ud af om alle vigtige forhold fra den modellerede virkelighed er passende repræsenteret samt at give en vurdering af, hvor godt disse forhold modelleres.

### 4.1.1 Simple og detaljerede modeller

Der findes to (store) grupper af LRTAP modeller: Detaljerede modeller og simple modeller. I de detaljerede modeller prøver man at i mindste detalje beskrive de fysiske processer. Eksempler på sådanne modeller er ifølge [Zlatev 1995] den canadiske ADOM model (Acid Deposition and Oxidation Model), den amerikanske RADM model (Regional Acid Deposition Model) og den tyske EURAD model (European Reaction Acid Deposition Model). På grund af modellernes størrelse og kompleksitet (dvs. større programmer og dermed krav på større computerkraft) samt fejlakkumulering ved beregningerne kan man kun beregne koncentrationer i en kortere tidsperiode. Fejlakkumulering vil sige, at de beregnede koncentrationer bliver mere usikre, da usikkerhederne på inputdata (som regel ret store) kan akkumuleres i beregningen. De detaljerede modeller er, i modsætning til de simple, gode til, for et givet stof, at beregne døgnvariationer og episoder (normalt et par dage med høj koncentration af luftforurening).

Af simple modeller nævnes, udover DEM, den europæiske EMEP model (European Monitoring and Evaluation Programme). Simple modeller er velegnede til at bestemme årstidsvariationer, fordi de kan køre over længere tidsintervaller. DEM kan køre i perioder op til ti måneder [Harrison et al. 1994].

Opdelingen i simple og detaljerede modeller er vigtig for den konceptuelle verificering. Det nytter ikke at medtage for mange fysiske parametre, hvis formålet med modellen kræver, at beregningerne kan udføres hurtigt, f.eks. ved en varslingsmodel, hvor modellen hurtigt skal kunne beregne spredning af luftforurening i forbindelse med uheld. På samme måde kan modellen ikke være for detaljeret, hvis den skal modellere et længere tidsinterval, da man så kan få problemer med fejlakkumulering, samt at man kan være begrænset af hensyn til computerkraft. Derimod kan der laves omfattende modeller med mange fysiske parametre til simulering af episoder og døgnvariationer.

Klasificeringen af luftforureningsmodeller som simple eller detaljerede modeller er således et spørgsmål om, hvor detaljeret de to grundlæggende processer (transport og omdannelse) er beskrevet.

En god model er en model, hvor fordelene både ved simple og detaljerede modeller indgår. I [Zlatev 1995] opremses tre vilkår som man skal forsøge at opnå i udviklingen af LRTAP modeller:

- Man bør forsøge at tilføre så mange af de vigtige luftforurenende stoffer som muligt.

- Man bør forsøge at opnå pålidelige resultater når der undersøges døgnvariationer
- Det bør stadig være muligt at undersøge årstidsvariationer med modellen

DEM er startet som en simpel model til beskrivelse af svovlforurening. Modellen er blevet udviklet til at medtage flere kemiske stoffer (og dermed flere kemiske reaktioner) og til at kunne operere i tre dimensioner. Modellen er i konstant udvikling og bliver i takt med det mere kompliceret. DEM er således ikke helt simpel, men snarere en mellemting mellem en simpel og en detaljeret model.

DEM er opbygget af submodeller og der kan let tilføjes eller fjernes dele fra modellen som således er fleksibel i sin opbygning. Det vil derfor være muligt at sammensætte dele fra modellen (eller tilføje andre) ud fra en given problemstilling. F.eks. kan man vælge kun at studere transporten og omsætningen af svovlforbindelser.

Vi gennemgår i det følgende, hvordan de enkelte ligninger i DEM er konceptuelt verificeret. Dette sammenholdes med den generelle verifikationsprocedure i kapitel 3.

### 4.1.2 Advektionsligningen

Advektionsligningen i DEM verificeres ved face-verificering og de antagelser, der er foretaget er verificeret ved følsomhedstests og face-verificering.

Ligningen for advektion er en grundlæggende ligning til beskrivelse af transport langs et hastighedsfelt (f.eks. transport af forurening i vand forårsaget af vandstrøm). Det antages at transport af luftforurening forårsaget af vinden tilnærmelsesvis kan beskrives ved advektionsligningen. Der er tilsyneladende konsensus om dette, se f.eks. [Marchuk 1975],[Zlatev 1995],[Pasquill and Smith 1983]. For at gøre det lettere at behandle advektionsligningen antages det, at trykket er konstant (se kapitel 2). Når vinden blæser, vil der fra et givet område fjernes masse og trykket vil falde. Hvis trykket er konstant må der tilføres tilsvarende masse til det givne sted i form af vinden. I fysisk forstand antager man altså at luften ikke kan presses sammen (øget tryk) dvs. at luften betragtes som et inkompressibelt medie. Matematisk kan dette formuleres ved  $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$ . For at beregne vindhastighederne  $u, v$  og  $w$  kræves det, at man kender trykket, men da  $u, v$  og  $w$  fås som inputdata (hver 6. time) vil antagelsen ikke betyde noget for vindhastigheden.

Antagelsen ville dog have langt større konsekvenser, hvis modellens formål var at modellere vindhastighederne. For at få et begreb om, hvor stor betydning denne simplificering har, er der lavet modelkørsler uden antagelsen. Ved denne følsomhedsanalyse er man nået frem til, at fejlen ved at bruge antagelsen er meget lille [Zlatev 1997a]. Antagelsen gør, at advektionsligningen bliver omskrevet fra

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial(uc)}{\partial x} - \frac{\partial(vc)}{\partial y} - \frac{\partial(wc)}{\partial z} \quad (4.1)$$

til formen

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} - v\frac{\partial c}{\partial y} - w\frac{\partial c}{\partial z} \quad (4.2)$$

som er lettere at behandle. Det bemærkes i [Zlatev 1995, s. 29], at antagelsen også er brugt i andre luftforureningsmodeller. I to dimensioner bliver antagelsen mere urealistisk idet det ikke generelt kan antages at udtrykket  $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$  holder [Zlatev 1995]. Derfor må det yderligere antages at der ikke er koncentrationsforskelle i vertikal retning, dvs.  $\frac{\partial c}{\partial z} = 0$ . Således kan antagelsen om konstant tryk også bruges i to dimensioner, men det bemærkes at beskrivelsen er mere præcis uden antagelsen når modellen opererer i to dimensioner. I nogle situationer kan det være nødvendigt at beskrive advektionen i en dimension. Dette er ikke realistisk men kan bruges til enten at se på specielle problemstillinger som f.eks. transport over kort distance uden ændringer i vindhastigheder eller for at checke de numeriske metoder.

### 4.1.3 Diffusionsligningen

Også diffusionsligningen i DEM verificeres ved face-verificering og de antagelser der er gjort ved face-verificering og følsomhedstest.

Modelleringen af turbulent diffusionen stammer fra beskrivelse af diffusion på molekylært niveau. Her anses diffusionsligningen som en gældende naturlov. I DEM overføres den imidlertid til makroskopisk niveau. Det mikroskopiske niveau udelades, da størrelsesordenen af  $D$  er så lille i forhold til  $K$  (se kapitel 2), at den mikroskopiske diffusion ikke har nogen betydning. Diffusionsledet i DEM korrigerer, som tidligere omtalt i kapitel 2, den fejl man begår når gennemsnitlige værdier af vindhastigheden ( $\bar{V}$ ) eller, som det er tilfældet i DEM, målte værdier af vindhastigheden  $V_{\text{målt}}$ , bruges i advektionsligningen. Hvis vi nu ser på vinden i  $x$ -retningen, så kan vi opfatte den sande vindhastighed,  $u$ , som bestående af en middelvindhastighed,  $\bar{u}$ , og en turbulent vindhastighed,

$u_{\text{avr}}$ , [Pasquill and Smith 1983]. Alternativt kan man opfatte  $u_{\text{avr}}$  som den fejl man begår når man sætter  $u = \bar{u}$ . Denne fejl appoximeres ofte med et led som matematisk beskrives analogt til diffusion [Pasquill and Smith 1983]. I DEM kendes den gennemsnitlige vindhastighed imidlertid ikke og i stedet benyttes målte data. Den fejl der herved opstår modelleres ligeledes ved et diffusionsled. I DEM fås (i en dimension):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u_{\text{malt}} \frac{\partial c}{\partial x} - u_{\text{fej}} \frac{\partial c}{\partial x} \approx -u_{\text{malt}} \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

I DEM antages  $K_x$  (og  $K_y$ ) at være konstante (med henvisning til [Gifford 1982]), hvilket i [Zlatev 1995, s.36] underbygges ved, at dette ofte er tilfældet for LRTAP modeller.

Betydningen af de horisontale diffusionskoefficienter er testet ved følsomheds-tests og det er fremkommet, at diffusionen på det makroskopiske niveau ikke har stor betydning, dvs. advektion dominerer over diffusion. En forklaring på at advektion dominerer over diffusion kan være, at der er så stor opblanding i mixlaget [Zlatev 1997a]. Ved kørsler med  $K_x = K_y = 120.000 \text{ m}^2/\text{s}$ , dvs. 4 gange større end den værdi som bruges i modellen, fremkom relative afvigelser af koncentrationen på hovedsagligt 10 procent, enkelte steder er afvigelsen imidlertid over 40 procent [Zlatev 1997a].

Den vertikale diffusionskonstant,  $K_z$ , antages at være stykvis konstant. Det understreges, at dette er en meget grov, men dog anvendelig antagelse. I [Zlatev 1995] diskuteres forskellige andre metoder til fastsættelse af  $K_z$ . Så snart  $K_z$  ikke er konstant vil diffusionsligningen ikke kunne skrives på formen (2.16). Det konkluderes, at en mere sofistikeret beskrivelse af  $K_z$  ikke nødvendigvis vil føre til bedre resultater, hvis den sofistikerede beskrivelse er mere følsom overfor usikkerheden af inputdata.

#### 4.1.4 Depositionsligningen

I depositionsligningen indgår to depositionskonstanter, der fastsættes for hvert af stofferne til hvert tidsskridt. I modsætning til advektionen og diffusionen er depositionen altså afhængig af, hvilket stof der transporteres. Det antages imidlertid, at depositionskonstanterne ikke afhænger af andre stoffer. Således ændres depositionsligningen fra stof til stof men fastsættes uafhængigt af de andre stoffer.

Depositionskonstanten kan også afhænge af koncentrationen af stoffet, hvilket diskuteres i [Zlatev 1995]. Dette forhold vil imidlertid gøre ligningerne ikke-lineære. F.eks. kan opløseligheden af gasser i vand være en begrænsende

faktor for våddepositionen. For f.eks. svovldioxid,  $\text{SO}_2$ , som har et partialtryk på  $5 \cdot 10^{-9}$  atm. i atmosfæren, kan der maksimalt opløses  $2.7 \cdot 10^{-8}$  mol/L ( $1.6 \cdot 10^{13}$  molekyler/cm<sup>3</sup>).  $k_{s_2}$  vil da afhænge af koncentrationen af svovldioxid og ligning (2.3.1) vil være ikke-lineær.  $k_{s_2}$  kan også afhænge af koncentrationen af andre stoffer. Stoffets opløselighed i vand kan også falde, hvis der er et andet stof til stede og desuden kan også en kemisk reaktion foregå i regndråben. Våddepositions-ligningerne for de forskellige stoffer vil da blive kobled til hinanden. Dvs. at i DEM simplificeres en mere realistisk beskrivelse af depositionen,  $(k_{s_1}(x, y, t, c_1, \dots, c_s, \dots, c_q) + k_{s_2}(x, y, z, t, c_1, \dots, c_s, \dots, c_q))c_s$ , til  $(k_{s_1}(x, y, t) + k_{s_2}(x, y, z, t))c_s$ . Beskrivelsen af depositionen ændres således fra et koblet system af ikke-lineære ODE's til et ukoblet lineært system. Det konkluderes [Zlatev 1995, s. 39], at antagelsen om at depositionen er uafhængig af koncentrationen af stoffet og af andre stoffer ikke er urealistisk og at ligningerne vil blive meget mere komplicerede uden antagelserne. Der foretages altså ikke en egentlig verificering af de antagelser, som depositions-ligningen bygger på.

#### 4.1.5 Emissionsligningen

Et problem med emissionerne er, at det er svært at bestemme, hvor meget en given kilde emitterer af hvert stof (idet man kun har tilgang til årstotalværdier). Et andet problem er ifølge [Zlatev 1995], at det kan være svært at lokalisere en del kilder. Desuden er emissionerne tidsafhængige. Man interpolerer derfor emissionerne over tid og sted og der henvises (delvist) til litteratur, dvs. face- verificering.

Antag nu, at kilderne er lokaliseret. Emissionen af stof  $s$  i et punkt  $(x, y, z)$  til tiden  $t$  beskrives ved funktionen  $E_s(x, y, z, t)$ . Generelt gælder, at  $E_s(x, y, z, t) > 0$  for emissionen af stof  $s$ , forudsat at dette stof ikke har reageret kemisk (primært emitteret stof).  $E_s(x, y, z, t)$  kan dog være 0 da f.eks. nogle kraftværker er lukket om natten. Hvis der ingen kilde er ved punktet  $(x, y, z)$  vil  $E_s(x, y, z, t)$  være 0 for alle værdier af  $t$ . Hvis stof  $s$  er et sekundært emitteret stof (dvs. et stof som er dannet ved reaktion med et primært emitteret stof), vil  $E_s(x, y, z, t)$  tillige være 0 for alle værdier af  $t$ , selv om der er en kilde i punktet  $(x, y, z)$ . F.eks. vil der ved udledning af  $\text{SO}_2$  dannes  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (svovlsyre), men det er kun  $\text{SO}_2$  som emitteres. I det gitterpunkt, hvor kilden er, vil  $E_{\text{SO}_2} > 0$ , men  $E_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 0$ . Funktionen  $E_s$  vil ikke være kontinuert i hele domænet. Dette vil dog ikke volde nogen problemer, da (2.19) løses numerisk, og ikke analytisk.

Der er ikke den store diskussion i, hvordan emissionen optræder i lignings-systemet. Det er nogle koncentrationer der skal lægges til. Derimod er det



interessant at se på, hvordan emissionsfunktionerne (interpolationer) er beskrevet. For f.eks.  $\text{SO}_2$  er  $E$  beskrevet som en cosinusfunktion (se afsnit 2.4.2). Af (2.43) ses, at  $E$ 's minimum er på  $0.65\bar{E}$  og maksimum på  $1.35\bar{E}$  [Zlatev et al. 1992]. Denne beskrivelse af emissionen bunder i årstidsvariationerne, da der udledes mere svovl om vinteren end om sommeren fordi der fyres mere. Dette er sandsynligvis realistisk, ihvertfald i Nordeuropa. Efterhånden som modellen udbygges kan det diskuteres om denne modellering skulle justeres således at cosinusalgoritmen er afhængig af gitterpunktet. I Sydeuropa udledes også en del svovl om sommeren fordi bygningerne skal nedkøles (aircondition) [Zlatev 1997a] og derfor ville det være mere realistisk hvis funktionen i gitterpunkterne i Sydeuropa antog maximum om sommeren.

Emissionerne for menneskeskabte VOC gasser sættes tre gange højere om dagen end om natten. Det påpeges at denne modellering ikke er helt præcis, bl.a. fordi overgangen fra dag til nat sker gradvist. Flere af disse interpolationer verificeres ved henvisning til dem, der har udviklet metoden [Zlatev et al. 1993]. Det er ikke umiddelbart muligt at vurdere størrelsen af de fejl der introduceres pga. interpoleringen, idet de faktiske tidsvariationer er ukendte.

#### 4.1.6 De kemiske reaktioner

Kemien i modellen er beskrevet vha. af et antal kemiske reaktioner. Skemaet til modellering af de kemiske reaktioner er det såkaldte CBM IV skema, hvor yderligere fire reaktioner er tilføjet i DEM (se kapitel 2). Hvordan de kemiske stoffer reagerer med hinanden samt hastighedskonstanterne for reaktionerne, ligning (2.21), er bestemt ved laboratorieforsøg (af andre), dvs. ved empirisk verifikation. I DEM anses det for gyldigt og det diskuteres ikke, hvordan det er fremkommet, dvs. det svarer til en face- verificering. Der er gradvist medtaget flere kemiske reaktioner i DEM.

I en konceptuel verificering må det diskuteres, hvor mange kemiske reaktioner der skal indgå og hvorfor. Når antallet af kemiske reaktioner i modellen skal bestemmes, skal følgende 2 egenskaber være opfyldt [Zlatev 1995]:

1. Antallet af reaktioner skal beskrive virkeligheden tilpas godt.
2. Antallet af reaktioner skal ikke være for stort af hensyn til den numeriske løsning.

Det siger sig næsten selv, at det optimale antal af reaktioner ikke kan findes. Derfor foretages løbende ændringer og modificeringer i DEM.

Hvis man kun er interesseret i at se på f.eks. svovlforurening, er det forholdsvis nemt at finde et reaktionsskema. Det meste svovl emitteres som  $\text{SO}_2$  og omdannes primært til svovsyre,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , således at man kan nøjes med at se på reaktionen  $\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4$ . Her må man forudsætte, at alle  $\text{SO}_2$  molekyler omdannes til  $\text{SO}_3$ . Reaktionen ovenfor er en pseudo 1.ordens reaktion (se ligning (2.20) og kommentaren til reaktion (2.24)), da koncentrationen af vand ændres meget lidt ved reaktionen. Modellen bliver i dette tilfælde simpel.

#### 4.1.7 Opsamling

I DEM består den konceptuelle verificering primært i at kigge på de antagelser, der er gjort. Disse kan opdeles i to – de teoretiske og ad-hoc antagelser (dvs. antagelser hvor man tager situationen i betragtning). I den teoretiske ende af skalaen ligger antagelserne i forbindelse med *advektion*, der er meget anerkendte og kan findes i de fleste lærebøger. Resten af antagelserne er mere eller mindre ad-hoc. *Diffusionsligningens* udseende og de tilhørende koefficienters størrelse (i horisontal retning) er ikke nærmere beskrevet, men der er i stedet henvist til kilder, dvs. face-verificering. *Depositionskonstanterne* er også ad-hoc, men her bliver overvejelserne omkring deres udseende taget op, hvor den simple løsning vælges. *Emissionerne* bliver også diskuteret – hvordan årstiden, døgnet og andre faktorer spiller ind. *Kemien* er taget udfra og derfor er diskussionen begrænset, da det antages at det kemiske skema er gyldigt. Udvælgelsen af de 5 hovedligninger (advektion, diffusion, emission, deposition og kemi) baseres på hvordan man generelt gør med LRTAP modeller, dvs. face-verificering.

## 4.2 Data verificering i DEM

Overordnet kan den data (empiri) som benyttes i DEM inddeles i tre grupper

1. Data der benyttes til parameterestimation
2. Data der benyttes som input til modelkørslerne
3. Data der benyttes til empirisk verificering

I DEM indgår en række parametre hvis værdier er estimeret udfra empiriske data. Det drejer sig om de horisontale diffusionskoefficienter, de kemiske

hastighedskoefficienter og parametrene  $g_{s_1}$  samt  $g_s$  som indgår i depositions-konstanterne. Parameterværdierne er, som nævnt i afsnit 4.1 fundet ved laboratorieforsøg eller in situ eksperimenter, som er foretaget uafhængigt af DEM. I DEM foretages ikke en egentlig verificering af selve parameterværdierne eller den datamængde som ligger til grund for estimeringen af parametre, men der henvises til andre. Vi vil derfor koncentrere os om verificering af de data der direkte benyttes i DEM, nemlig inputdata og måledata som benyttes i den empiriske verificering.

### 4.2.1 Verificering af inputdata

Som nævnt i afsnit 2.4 bruges der mange typer inputdata. Usikkerheden på disse data er afgørende for hvor god en overensstemmelse man kan forvente mellem modeloutput og empirisk data. I DEM er "god overensstemmelse" nemlig defineret ved, at forskellen mellem modeloutput og empiriske koncentrationer og depositions målinger er af samme størrelsesorden som usikkerheden på inputdata [Zlatev et al. 1993]. Både de meteorologiske data og emissionsdata stammer fra EMEP. Begge datasæt passer til den geografiske diskretisering på  $150\text{km} \times 150\text{km}$  (se afsnit 2.4.1), men ingen til tidsdiskretiseringen på 15 min.

De *meteorologiske data*<sup>1</sup> vurderes som værende relativt pålidelige. Der findes målinger for hver 6. time (mixhøjde hver 12. time) og derfor er data mængden ikke tilstrækkelig. Til datagenereringen benyttes simple lineære interpolationer og det vurderes at denne interpolering ikke øger usikkerheden nævneværdigt [Zlatev et al. 1993]. Det er dog muligt at korrigere for interpolationsfejlen ved at tilføje ekstra led i modellen. Dette er tilfældet for vinddata hvor diffusionsledet er medtaget for at korrigere for den fejl der opstår, fordi der ikke er tilstrækkelig viden (data) til at beskrive vinden og dermed stoftransporten. Denne korrektion er ikke mulig ved f.eks. mixhøjden og her spiller interpolationsfejlen en rolle [Zlatev et al. 1993]. Der er større usikkerhed forbundet med måling af denne parameter og specielt i at modellere (interpolere) den tidsafhængige variation. Følsomhedstests viser endvidere at output kan ændres op til 60% (for  $\text{NO}_2$ ) hvis kun dagsværdien for mixhøjden benyttes [Zlatev et al. 1991]. Dette indikerer at DEM er relativt følsom overfor denne parameter.

Det fremgår ikke i hvilken grad de benyttede meteorologiske input data kontrolleres for bl.a. transmissionsfejl, outliers og inkonsistens. I tilfældet med

---

<sup>1</sup> Disse data stammer dels fra målinger og dels fra modelkørsler, der vurderes til at være bedre en målte værdier

de data, som benyttes til at estimere vindhastigheden,  $(u, v, w)$ , gives dog et enkelt eksempel på grafisk afbildning af vindhastighedsfeltet [Zlatev 1995]. Herved er der mulighed for at sikre at de benyttede data er rimligt realistiske (dvs. uden åbentlyse outliers og grove fejl) og om der evt. mangler data.

For *emissionsdata* er der større problemer både med pålideligheden og med tilstrækkeligheden. I [Zlatev et al. 1993] vurderes det dog, at problemet med pålideligheden er mindre betydende i forhold til problemet med at fordele emissionerne over tid. Overordnet "verificeres" emissionsdata brugt i DEM ved henvisning til EMEP. Det konkluderes at usikkerhederne på emissionsdata er op til 30% dvs. at den rigtige totalværdi for stof  $s$  kan være op til 30% højere eller lavere end den værdi der benyttes i DEM [Zlatev 1995].

En konsekvens af de usikre inputdata er bl.a. at man i udviklingen af DEM ofte vælger mere robuste (og mindre sofistikerede og præcise) beskrivelser af fysiske parametre. Et eksempel herpå er beskrivelsen af den vertikale diffusionskoefficient  $K_z$ . I DEM defineres  $K_z$  ofte som en stykvis konstant funktion, selvom  $K_z$  teoretisk set kan beskrives mere præcist. Modellen som helhed vil dog ikke blive mere præcis hvis en mere udførlig beskrivelse af  $K_z$  kræver inputparametre, som er behæftede med store usikkerheder [Zlatev 1995].

#### 4.2.2 Verificering af data benyttet til empirisk verificering

Data som benyttes til sammenligning med modeloutput adskiller sig fra input data ved, at der ikke foreligger målinger svarende til den geografiske diskretisering. For at kunne benytte data til sammenligning med modeloutput er det nødvendigt med repræsentative målinger. I [Zlatev 1995] antages det at koncentrationsmålinger er repræsentative, hvis de stammer fra målestationer som opfylder:

- Regularitetskriteriet: Målestationen skal lave minimum 15 luftkoncentrations målinger pr. måned og minimum 5 målinger pr. måned af stofkoncentrationen i nedbøren. ( $O_3$  og  $NH_4^+$  er undtaget fordi meget få stationer måler disse stoffer)
- Placeringskriteriet: Målestationen må maksimalt være placeret 1200 m over havoverfladen (ellers er der risiko for at målestationen ligger over mixhøjden)

- Ingen målestationer må være placeret tæt på det geografiske domænes grænse. Dette skyldes at modelresultaterne tæt på randen er behæftet med så stor usikkerhed at det ikke giver mening at sammenligne med måledata (se 2.4.3).

Disse krav bevirker at der i hele modelområdet kun findes mellem 20 og 40 brugbare målestationer. Dette er dog et tilstrækkeligt antal til statistiske beregninger. Pålideligheden af data, som stammer fra disse stationer er relativ god (usikkerheden er  $<5\%$ ) [Harrison et al. 1994].

Situationen er anderledes for målinger over havområder. Her findes ingen faste målestationer og antallet af målinger er så lille, at det vanskeliggør statistiske beregninger. Endvidere er usikkerheden på måleresultaterne omkring 10% [Harrison et al. 1994].

Data fra målestationerne (både de faste og flydende) undersøges for unaturlige peaks og outliers ved tidsrækker. Ved denne metode plottes i samme graf målingerne fra hver enkelt station og de beregnede data over tid. Dette muliggør vurdering og evt. frasortering af outliers (både målte og beregnede). Et eksempel herpå findes i [Harrison et al. 1994] hvor empiriske afvigere diskuteres. I denne situation vælges det dog alligevel at medtage afvigerne i sammenligningen med modelberegningerne, hvilket skyldes et lille antal målinger.

Udover problemet med at skaffe pålidelige og især tilstrækkelige data til verificering af modellen er det også et problem at disse data ikke er direkte sammenlignelige med modellens output. De målte data angiver koncentrationen i luft (og depositionen) i et punkt, hvorimod modellen beregner en gennemsnits koncentration for et helt gitterområde. Derfor forventes altid en vis uoverensstemmelse mellem modeloutput og empiriske data.

## 4.3 Verificering af numeriske algoritmer i DEM

Vi har valgt at se bort fra den datalogiske verificering af computerprogrammer. For en uddybning af principperne indenfor dette område henvises til anden litteratur, f.eks. [Standish 1994].

De primære formål med numerisk verificering er, at sikre at de opstillede ligninger løses med en så god numerisk metode som muligt, samt at få et mål for størrelsen af de numeriske fejl [Zlatev 1995]. Den numeriske metode skal være så god som muligt for at fejlen kan blive minimal i forhold til de andre faktorer (meteorologiske inputdata og emissionsdata, usikkerheden på

fysiske parametre og processer), og man kan så bedre koncentrere sig om den fysiske side af modellen. Men allerede i starten opstår problemer – vil man have en meget præcis algoritme og en meget fin diskretisering bliver det stort set umuligt at løse den numeriske beregning. Desuden bliver de meteorologiske data og emissionsdata utilstrækkelige hvis man vil have en fin gitterinddeling. Derfor kommer testningen ind i billedet, idet man vil optimere sin numeriske algoritme, så den kun er så tidskrævende som nødvendig til at kunne producere præcise resultater. Nødvendig og præcis vil sige, at fejlen bliver mindre end de ovenstående faktorer.

Den numeriske metode til løsning af DEM er baseret på at (2.1) kan opsplittes i submodeller som løses separat. At det er tilladeligt at opsplitte (2.1) i submodeller, underbygges af, at denne generelle metode er meget anvendt og benyttes til løsning af alle store LRTAP modeller [Zlatev 1995]. Flere forskellige opsplittingsprocedurer er blevet foreslået og diskuteret i litteraturen, hvor den første blev foreslået allerede i 1956 [Marchuk 1975]. Metoden er altså relativt velkendt og accepteret. Det fremhæves i [Zlatev 1995] at det er nødvendigt at teste modellen globalt, dvs. om opsplittningen og de valgte numeriske metoder fungerer godt sammen. Desuden ville det være ideelt med en automatisk vurdering af den globale fejl ved de numeriske beregninger, men det er både svært og dyrt at udvikle sådanne metoder, og man må så nøjes med at teste de enkelte submodeller i DEM [Zlatev 1995]. Indirekte testes de globale numeriske fejl ved massebevarelse: Systemets masse før og efter beregning skal være den samme, ellers er der begået en regnefejl, som kan skyldes de numeriske metoder.

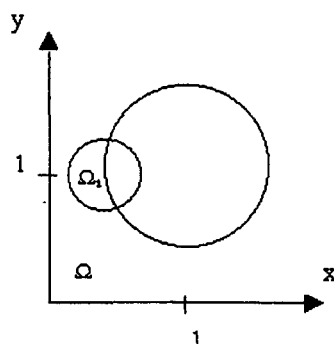
I verificeringen af de numeriske algoritmer som benyttes til at løse de enkelte submodeller undersøges dels hvilke algoritmer der er mest optimale til løsning af den enkelte submodel, og dels undersøges stabiliteten og fejllens størrelse.

### 4.3.1 Test af advektion

Advektionsledet i modellen løses som nævnt i afsnit 2.5 særskilt (opfattes som en submodel) og der findes mange forskellige måder til at lave en diskretisering af advektionsligningen. De algoritmer som specielt testes er pseudospectral og finite elements metoderne. Disse metoder testes på flere forholdsvis simple testproblemer.

Antag at modellen er 2-dimensional. Definer et hastighedsfelt, hvor vindbanerne er koncentriske cirkler omkring domænets midpunkt med konstant vinkelhastighed. Det antages, at koncentrationerne i hele domænet  $\Omega$  er en eller anden baggrundskoncentration  $c_0$  undtaget i et delområde  $\Omega_1 \subset \Omega$ . I  $\Omega_1$

antages det, at koncentrationen er forskellig fra  $c_0$ , typisk meget større end  $c_0$ . Hvis disse betingelser er opfyldt, vil en luftpakke med høj koncentration af et stof rotere omkring midtpunktet i domænet, se figur 4.1.



**Figur 4.1** Den lille cirkel angiver delområdet  $\Omega_1$  med koncentration  $> 0$  (til ét tidspunkt), og den store cirkel angiver rotationen af midtpunktet af koncentrationsområdet.

Denne testmetode kaldes *puff rotations testen* og er simultant udviklet af Crowley og Molenkampf i 1968 [Brandt et al. 1996]. Testen har to umiddelbare fordele:

- Den analytiske løsning er kendt ( $c(x, y, 2\pi) = c(x, y, 0)$ ).
- Den bane (trajektorie) som koncentrationerne følger er cirkulær og dermed ikke triviell, da banen ikke følger en ret linie.

Puff rotations testen er matematisk defineret ved:

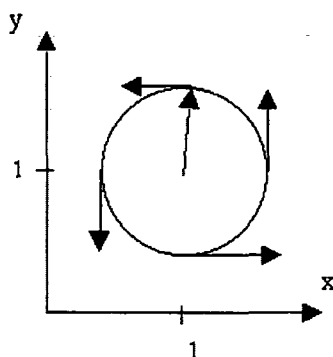
$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(y-1)\frac{\partial c}{\partial x} - (1-x)\frac{\partial c}{\partial y} \quad (4.3)$$

$$x \in [0, 2] \quad y \in [0, 2] \quad t \in [0, 2\pi] \quad (4.4)$$

Hvis (4.3) sammenholdes med advektionsligningen ses, at vindhastighederne  $u$  og  $v$  er givet ved  $u = y - 1$  og  $v = 1 - x$ . Disse vindhastigheder medfører, at vindbanerne vil rotere omkring punktet (1,1) med konstant vinkelhastighed  $\omega = 1$ , dvs.:

$$\omega = \left| \frac{d\gamma(t)}{dt} \right| = |(-\sin t, \cos t)| = 1$$

hvor  $\gamma(t) = (1,1) + (\cos t, \sin t)$  er parameterfremstillingen for en cirkel med centrum i  $(1,1)$ . Tangentvektoren til  $\gamma(t)$  er givet ved  $(d\gamma(t)/dt)/|(d\gamma(t)/dt)| = (-\sin t, \cos t)$  som er vinkelret på  $(\cos t, \sin t)$ , se figur 4.2.



Figur 4.2 Vindfelt med koncentrisk vind (vinkelret på radius).

Et ofte benyttet specialtilfælde af puff rotations testen er *kegle rotationen*, som er defineret ud fra (4.3) og (4.4). Startkoncentrationerne,  $c(x, y, 0)$ , er for subdomænet  $\Omega_1$  givet ved:

$$c(x, y, 0) = c_0 + 99c_0(1 - r^*/r) \quad r^* < r \quad c_0 > 0 \quad (4.5)$$

hvor

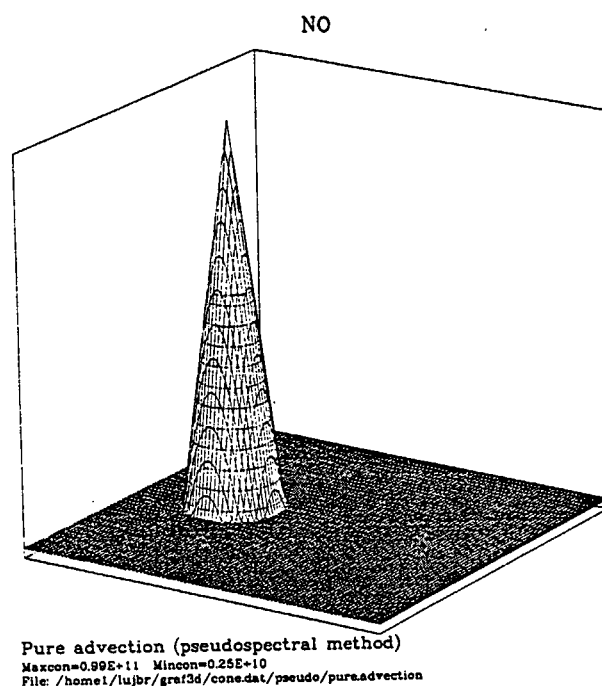
$$\begin{aligned} r^* &= \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} \\ x_0 &= 0.5 \quad y_0 = 1.0 \quad r = 0.25 \end{aligned} \quad (4.6)$$

hvor  $r$  er radius i cirklen. Når  $r^* = 0$  ses af (4.5), at  $c(x, y, 0) = 100c_0$ , og af (4.6) at  $x = x_0$  og  $y = y_0$ . For resten af domænet,  $\Omega \setminus \Omega_1$ , gælder:

$$c(x, y, 0) = c_0 \quad r^* \geq r$$

hvor  $c_0$  er en baggrundskoncentration. Hvis  $c_0 = 0$  bruges, skal  $100(1 - r^*/r)$  bruges i stedet for  $99c_0(1 - r^*/r)$  i ligning (4.5). Begyndelsesbetingelserne (4.5) og (4.3.1) sikrer, at startfordelingen af et stof danner en kegle i subdomænet  $\Omega_1$  med centrum i  $(x_0, y_0)$ , radius  $r$  og højden  $100c_0$ . Desuden bevirker (4.3), (4.4), (4.5) og (4.6), at centrum af keglen roteres langs en cirkel med centrum i  $(1,1)$  og radius 0.5. Kegleens form bevares under rotationen, deraf navnet kegle rotation. Resultaterne af forsøg med keglerotationstesten viser





**Figur 4.3** Koncentrationen af NO efter 1 rotation af keglen, beregnet med pseudospectralmetoden [Zlatev 1995, ,s.116]

at pseudospectral metoden giver bedre resultater end finite elements algoritmen. Dette er illustreret på figur 4.3 og 4.4, hvor det skal bemærkes at der er ujævnheder (numeriske fejl) omkring keglen på figur 4.4.

Emission kan tilføjes rotationstesten ved simpelthen at addere  $E(x, y, t)$  på højre side af ligning (4.3):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(y-1)\frac{\partial c}{\partial x} - (1-x)\frac{\partial c}{\partial y} + E(x, y, t)$$

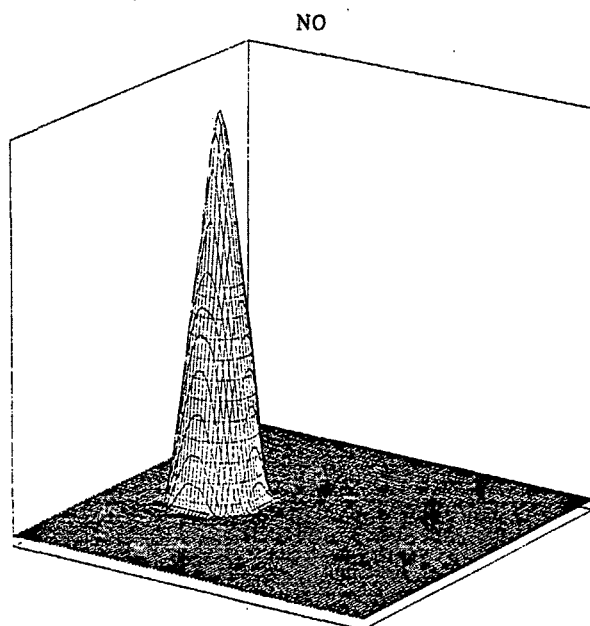
Denne test kaldes *plume rotation*. Når en eller flere emissionskilder er tilføjet, er startkoncentrationerne defineret ved:

$$c(x, y, 0) = c_0 \quad \forall x \in [0, 2] \quad \text{og} \quad \forall y \in [0, 2]$$

dvs. de samme som baggrundskoncentrationerne. Hvis kun en emissionskilde er tilføjet, er den givet ved:

$$E(x, y, t) = 100a(1 - r^*/r) \quad r^* < r \quad (4.7)$$

$$E(x, y, t) = 0 \quad r^* \geq r \quad (4.8)$$



Pure advection (finite elements)  
 Maxcon=0.93E+11 Mincon=0.19E+10  
 File: /home1/tujbr/graf3d/cone.dat/iter/pure.advection

**Figur 4.4** Koncentrationen af NO efter 1 rotation af keglen, beregnet med finite element metoden [Zlatev 1995, s. 119].

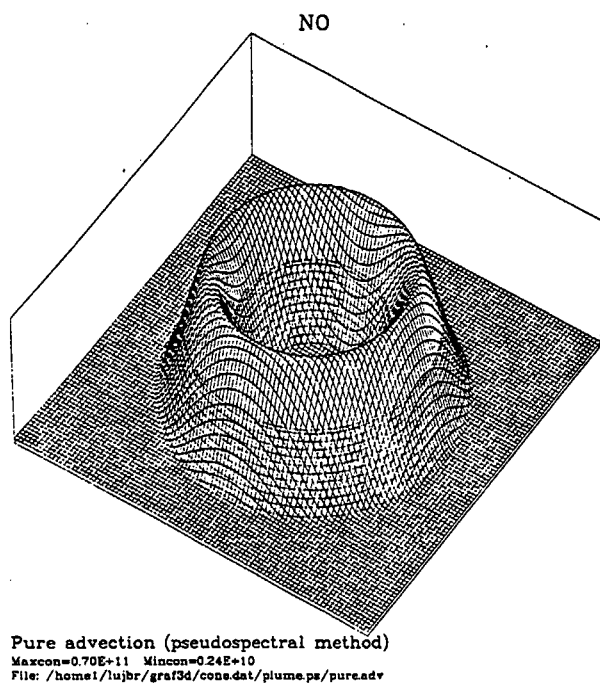
hvor  $a$  er konstant og vælges på en sådan måde, at koncentrationen i toppen af plumen er af samme størrelsesorden som koncentrationen i toppen af keglen (kegle rotationen), se figur 4.5

Resultaterne af disse testforsøg viser at både pseudospektralmetoden og finite element metoden, som er de mest anvendte i løsningen af advektionsligningen, giver acceptable resultater med både kegle og plume rotations testen. Dog giver finite element algoritmen, som nævnt, en større fejl i keglrotationstesten end pseudospektral metoden, se figur 4.4 og figur 4.3.

### 4.3.2 Test af numeriske algoritmer til advektion og kemi

Det er vigtigt, at teste nøjagtigheden af de numeriske algoritmer som bruges i den kemiske sub-model (primært quasi-steady-state), samt koblingen mellem advektion og kemi. Den mest simple test, som samtidig er tilstrækkelig til at verificere løsningsalgoritmerne, skal overholde:

- Færrest mulige antal ligninger (dvs. lille antal stoffer)



**Figur 4.5** Koncentrationen af NO efter 1 rotation af plumen, beregnet med pseudospectral metoden, [Zlatev 1995, s. 117].

- Samtlige numeriske “besværligheder” skal bevares i testen, dvs. ligningerne skal beskrive både ikke lineære og fotokemiske reaktioner samt koblede reaktioner med forskellige reaktionshastigheder.

Et simplificeret reaktionsskema med kun 10 stoffer (i modsætning til 35 i DEM) opfylder de 2 kriterier for oven. Ovenstående kan testes ved at indføre følgende sæt af partielle differentialligninger:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = -(y-1)\frac{\partial c_s}{\partial x} - (1-x)\frac{\partial c_s}{\partial y} + Q_s(c_1, c_2, \dots, c_q) + E_s(x, y, t) \quad (4.9)$$

$$s = 1, 2, \dots, q, \quad q = 10$$

hvor  $x, y$  og  $t$  er defineret som i (4.4).

Denne testmetode adskiller sig fra puff og plume rotationstesten ved dels at indeholde  $q$  koblede differentialligninger (de andre test indeholder kun en ligning), men primært ved, at den analytiske løsning *ikke* er kendt.

Ligning (4.9) kan bruges på forskellige måder:

**1) Ren kemi.**

Der ses kun på leddet  $Q_s$ , dvs. de kemiske reaktioner i et vilkårligt punkt i domænet er uafhængige af reaktioner i andre punkter. Startkoncentrationerne er da givet ved:

$$c_s(x, y, 0) = c_{s0} + 99c_{s0}(1 - r^*/r) \quad r^* < r \quad c_{s0} > 0 \quad (4.10)$$

$$c_s(x, y, 0) = c_{s0} \quad r^* \geq r \quad (4.11)$$

for de fire stoffer NO, NO<sub>2</sub>, HC og ALD. For de resterende seks stoffer fås:

$$c_s(x, y, 0) = c_{s0} \quad \forall x \in [0, 2] \quad \text{og} \quad \forall y \in [0, 2]$$

hvor  $c_{s0}$  er baggrundskoncentrationen af stof  $s$ .

For at verificere testen laves en nøjagtig numerisk beregning af koncentrationen i få gitterpunkter med meget små tidskridt. Herefter er det muligt at beregne en tilstrækkelig præcis approximation i hele domænet, som benyttes til at verificere, at den numeriske metode brugt til at løse den kemiske submodel (quasi-steady-state-algoritmen) for alle 35 stoffer er numerisk stabil<sup>2</sup>. I figur 4.6 er vist koncentrationen af NO når kun kemisubmodellen bruges med quasi-steady-state-metoden.

**2) Advektion og kemi.**

Koblingen mellem advektion og kemi kan testes ved at udelade emissionen fra (4.9) og bibeholde betingelserne (4.10) og (4.11). Ideelt set burde resultatet fra denne test efter én rotation være ækvivalent med den approximerede løsning fra kemi submodellen. Resultaterne fra test af koblingen mellem advektion- og kemisubmodellen viser ifølge [Zlatev 1995], at der opnås bedre resultater, hvis advektionsligningen løses med pseudospektralmetoden end finite element metoden (når kemisubmodellen løses med quasi-steady state algoritmen), se figur 4.7 og 4.8.

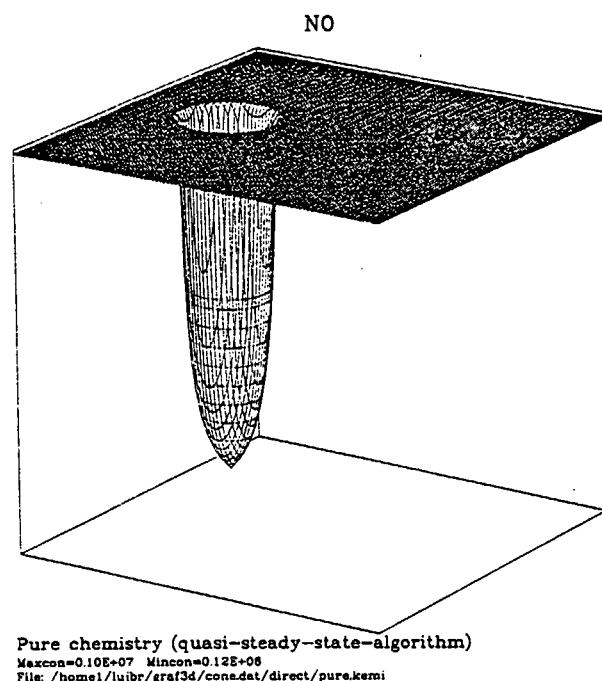
**3) Advektion, emission og kemi.**

Dette er hele ligning (4.9). Startkoncentrationerne er som før og emissionen af NO, NO<sub>2</sub>, HC og ALD er givet ved ligningerne (4.7) og (4.8). Også med denne metode fås gode resultater med pseudospektralmetoden og finite element metoden [Zlatev 1995].

**4.3.3 Andre testmetoder**

De ovenfor nævnte submodeller udgør de centrale testproblemer i DEM. Men også andre testproblemer har været anvendt især til belysning af de reste-

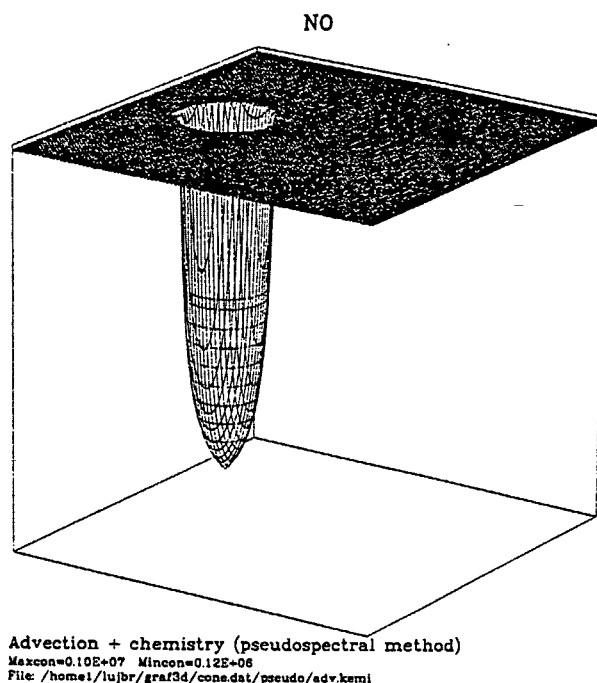
<sup>2</sup>Numerisk stabil betyder at den numeriske løsning ikke ændres (væsentligt) når tidskridt længden mindskes



**Figur 4.6** Brug af kemisubmodellen til at beregne koncentrationen af NO med quasi-steady-state-metoden. Tidsintervallet svarer til den tid som er nødvendig for 1 rotation, [Zlatev 1995, s. 124].

rende komponenter i DEM:

- 1-dimensionale modeller kan give værdifuld information. I DEM er advektion og koblingen mellem advektion og diffusion blevet testet i 1 dimension.
- Diffusionen er også blevet testet, bl.a. fordi diffusionen afhænger af gitterstørrelsen – laves diskretiseringen finere bliver diffusionen mindre. Her kan man også få kvalitative test, f.eks. kan man studere  $K_z$ 's afhængighed af mixhøjden.
- 3-dimensionale testproblemer er nødvendige, hvis DEM skal bruges i 3 dimensioner. Her benyttes især en tredimensional udgave af keglerotations testen (advektion), som kan løses analytisk samt en test af koblingen mellem advektion, diffusion og emission. Sidstnævnte test er dog kun kvalitativ.

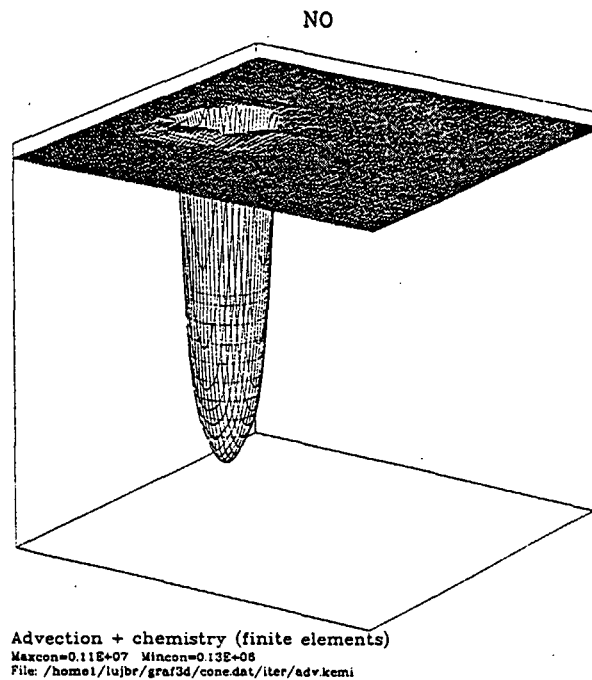


**Figur 4.7** Brug af advektion- og kemisubmodellen til at beregne koncentrationen af NO med pseudospektral og quasi-steady-state-metoden efter 1 rotation, [Zlatev 1995, s. 125].

#### 4.3.4 Opsamling

De numeriske algoritmer som benyttes til at løse de enkelte submodeller i DEM testes med forskellige simple, men ikke trivielle testproblemer. Der er specielt fokus på advektions og kemi submodellen, som numerisk set udgør de mest besværlige komponenter i DEM. For advektionen skyldes dette sandsynligvis at advektionsligningen, i modsætning til diffusionen, er asymmetrisk. Dette besværliggør diskretiseringen og desuden får man introduceret en "falsk" diffusion [Patel and Markatos 1986]. Testresultaterne viser at pseudospectralalgoritmen er at foretrække til løsning af advektionsligningen og at denne algoritme bevirker at fejlene bliver tilstrækkeligt små. Den kemiske submodel er i fokus primært fordi det er et stift system af ODE's og det derfor er ganske tidskrævende at løse disse ligninger. Her anvendes hovedsagligt quasi-steady-state-algoritmen.

For en 2 dimensional model er det (tilsyneladende) kun muligt kvantitativt at teste koblingen mellem advektion, kemi og emission samt advektion, diffusion



**Figur 4.8** Brug af advektion- og kemisubmodellen til at beregne koncentrationen af NO med finite element og quasi-steady-state-metoden efter 1 rotation, [Zlatev 1995, s. 126].

og emission.

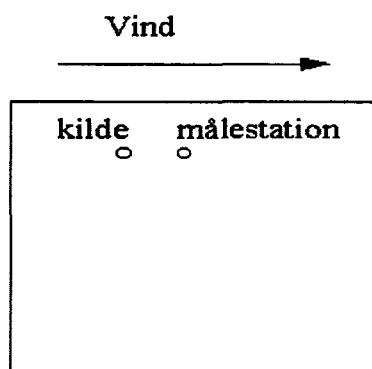
For at vurdere den globale numeriske fejl (koblingen af samtlige komponenter i DEM, både i 2 og 3 dimensioner) benyttes kvalitative tests, bl.a. test af massebevarelse som giver et fingerpeg om nøjagtigheden af den globale numeriske fejl. Det er imidlertid svært at kvantitativt bestemme størrelsen af den globale numeriske fejl, idet der ikke eksisterer en global analytisk løsning. Det skal dog bemærkes at der ikke introduceres nævneværdige fejl via de numeriske løsninger [Zlatev 1997a].

## 4.4 Empirisk verificering af DEM

DEM verificeres empirisk ved sammenligning mellem måledata og beregnede output fra modellen. Der findes flere typer af modeloutput for det *s*'te stof nemlig koncentrationen i luften, der fås som løsning til hele modellen, og tør- og våddeposition samt koncentrationen i nedbøren, der fås ved at beregninger

fra depositionssubmodellen, der kan løses analytisk [Zlatev 1995, s. 271]. Det er dog hovedsageligt koncentrationen i luften af stofferne  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$  samt  $\text{O}_3$ , der benyttes til sammenligning med empiri.

De empiriske data som er tilgængelige er ikke direkte sammenlignelige med modeloutput, idet målestationerne måler i et geografisk punkt, mens modeloutput er beregnet ud fra gennemsnitsværdier for et stort geografisk område. Modelberegningmæssigt kan dette, ved grove diskretiseringer, resultere i større uoverensstemmelse mellem beregnede og målte værdier, fordi punktformige kilder opfattes som et helt område (emissionen spredes). Måleteknisk kan der opstå unøjagtigheder (idet en enkelt måling ikke er repræsentativ for et helt gitterpunkt) især i de gitterpunkter, hvor der er en kraftig emissionskilde i nærheden af målestationen.



Figur 4.9 Gitterpunkt med kilde og målestation.

I tilfældet som ved figur 4.9, vil modellen underestimere koncentrationerne i forhold til de målte. Hvis vinden derimod kommer fra andre retninger, vil modellen overestimere koncentrationerne.

Sammenligningen mellem punktmålinger og gennemsnitsberegninger bevirker, at man *ikke* forventer fuld overensstemmelse mellem empiri og model [Zlatev 1995]. Mange forhold i DEM medvirker udover de nævnte til det, man kunne betegne som *den nødvendige afvigelse* mellem beregnede værdier og målte data. I afsnit 4.1 fremgår det, at der i opbygningen af DEM er lavet en række antagelser dels for at simplificere "virkeligheden" (f.eks. valget af 35 kemiske stoffer og 71 reaktioner) og dels for at kunne udtrykke de parametre som indgår (f.eks. interpolationer af emissionsdata, depositionscoefficientserne og  $K_z$ ). Disse ad-hoc antagelser vil også resultere i afvigelser mellem målte og beregnede værdier og disse afvigelser vil ofte være systematiske.



I den empiriske verificering af DEM benyttes forskellige metoder til kvalitativt og kvantitativt at få et mål for afvigelsen mellem målinger og beregninger. Disse metoder kan groft inddeles i *grafiske repræsentationer* af målte og beregnede værdier (specielt tidsrækker og scatter plots) og *statistiske beregninger* (specielt fejlestimationer og korrelation) (se også kapitel 3. Endvidere testes modellen empirisk under mange forskellige fysiske (og kemiske) forhold.

#### 4.4.1 Grafiske repræsentationer

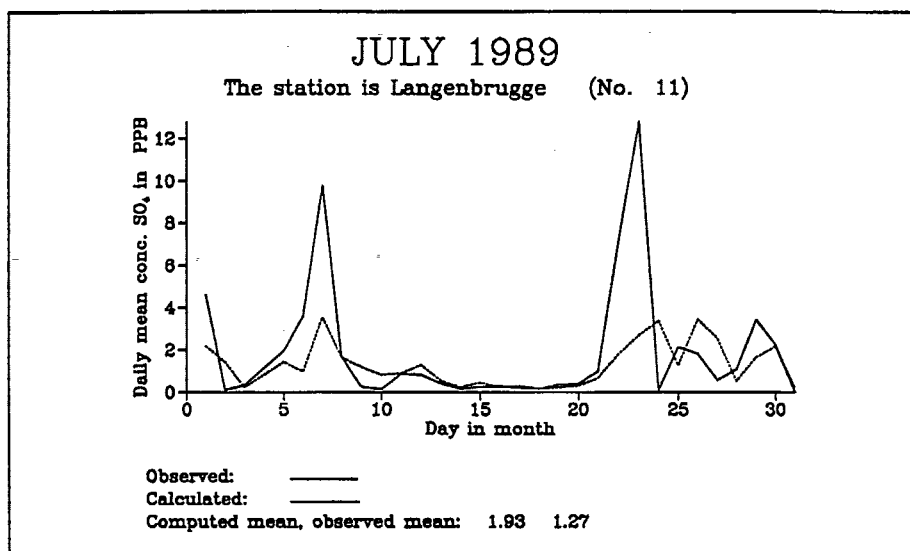
Sideløbende med opbygningen af DEM er et omfattende visualiseringsprogram blevet udviklet. Dette program gør det muligt at vise beregnede koncentrationer eller depositioner for et vilkårligt stof i et ønsket subdomæne (f.eks. et enkelt gitterpunkt eller hele domænet). Afbildningen kan enten vise koncentrationsvariationen i et givet tidsinterval (benyttes til tidsrækker) eller vise et gennemsnit for et givet tidsinterval (benyttes til scatter plots). Der er således stor flexibilitet i mulige outputstørrelser og den empiriske verificering af DEM er derfor primært begrænset af de (få) tilgængelige måledata.

##### Tidsrækker i DEM

I verificeringen af DEM benyttes tidsrækker hovedsageligt til at vise månedlige variationer men også sæson, års og døgn variationer benyttes alt efter mængden af tilgængeligt data. Grundlæggende benyttes to typer af tidsrækker. Ved sammenligning med resultater fra de faste stationer på land beregnes koncentrationsvariationen i et enkelt gitterpunkt og sammenlignes med resultater fra målestationen som repræsenterer dette gitterpunkt (se figur 4.9). For de flydende målestationer beregnes koncentrationen i den bane som skibet følger (dvs. flere gitterpunkter). De målte data sammenlignes med resultater beregnet i det gitter og til samme tid som målingen blev foretaget. Udfra tidsrækker vurderes det om der er kvalitativ og tildels kvantitativ overensstemmelse mellem de målte og beregnede resultater. Desuden kan testen afsløre fejl som gennemsnitsbaserede testmetoder (f.eks. scatterplots) ville sløre.

Et eksempel på en kvalitativ vurdering ses i [Zlatev 1995, s. 281] hvor tidsrækker benyttes til at afsløre fejl på enkelte dage. Her er koncentrationen af  $\text{SO}_4^{2-}$  i løbet af juli måned angivet for fire målestationer (se figur 4.10).

Der observeres en rimelig overensstemmelse mellem beregnede og målte data for 29 dage. Men d. 7 og 23. juli er der kraftige peaks i model beregningerne som ikke modsvares af de målte data. Modellen overestimerer således koncentrationen i de to dage. Den mest sandsynlige forklaring herpå er ifølge



**Figur 4.10** Tidsrække over daglige gennemsnit af beregnede og målte svovlkoncentrationer [Zlatev 1995, s. 282].

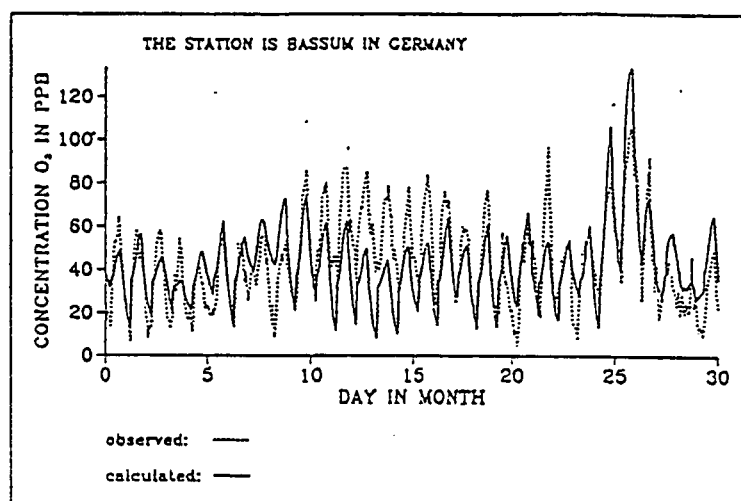
[Zlatev 1995] at de relevante gitterpunkter i de to dage befinder sig i områder hvor der er rapporteret (for) lave horisontale vindhastigheder.

Et typisk eksempel på brugen af tidsrækker til kvalitativ verificering af DEM ses i [Zlatev et al. 1993]. Her sammenlignes den beregnede- og den målte døgn variation af ozonkoncentration i juni 1989 (se figur 4.11).

Det konkluderes at der generelt er kvalitativ overensstemmelse idet modellen kan beskrive de høje eftermiddags koncentrationer og lave nat/morgen koncentrationer. De steder hvor det ikke stemmer godt overens har været enten ved høje målestationer (over 1200m), eller hvor der er observeret ret lave koncentrationer.

Et knapt så typisk eksempel på brugen af tidsrækker ses i [Harrison et al. 1994] hvor målingerne er foretaget fra et sejrende skib. Her er koncentrationen afbildet som funktion af både tid og sted, hvor den i normale tidsrækker kun er afbildet som funktion af tid. Pga. større måleusikkerheder over vand (ca. 10% over vand mod ca. 5% over land, se dataverificering afsnit 4.2 var der forventet større relativ fejl mellem målinger og beregninger, men beregningerne stemmer alligevel bedre overens på havet og dette skyldes:

- Ingen terrænproblemer.  
Og dermed ingen lokale vindforhold, som f.eks. vindstille eller opadgående vind.



**Figur 4.11** Tidsrække over beregnede og målte ozon koncentrationer (juni 1989), [Zlatev et al. 1993, s. 857].

- Ikke mange emissionskilder.
- Ikke problemer med forskelligt land (byer, skove etc.).  
Og dermed ikke problemer med forskellige emissionskilder

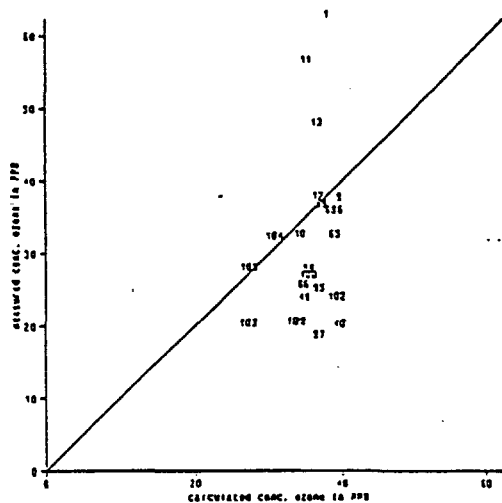
Modellen virker altså godt over vand. De mange simplificeringer, der er medtaget i DEM gør, at modellen er god til at lave beregninger over havet, idet forholdene her fra naturens side *er* meget simple.

### Scatterplots i DEM

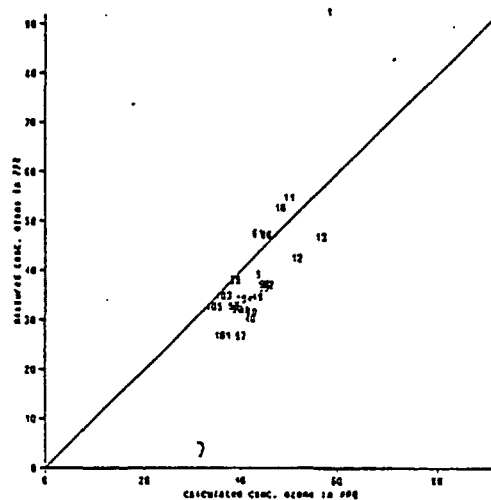
En anden meget anvendt grafisk repræsentation til empirisk verificering af DEM er scatterplots. Metoden benyttes primært til at teste om de målte og beregnede gennemsnit stemmer overens [Zlatev et al. 1993]. Til gennemsnitsberegningerne benyttes også både års-, sæson- og månedsvariationer afhængig af de tilgængelige data.

Men metoden bruges også til at sikre at der ikke forekommer systematiske fejl som f.eks. en generel over- eller underestimering eller til at vurdere om enkelte målestationer skiller sig ud.

Et eksempel på brugen af scatterplots til vurdering af modellens egnethed til beskrivelse af koncentrationens gennemsnit ses i [Zlatev et al. 1993]. Her er den målte og beregnede gennemsnitlige ozonkoncentration (gennemsnit for en måned) for hhv. dag og nat angivet for 23 målestationer i to scatterplots (se figur 4.12 og 4.13).



**Figur 4.12** Scatterplot af ozonkoncentrationer om natten (juli 1985) [Zlatev et al. 1993, s. 853].



**Figur 4.13** Scatterplot af ozonkoncentrationer om dagen (juli 1985) [Zlatev et al. 1993, s. 849].

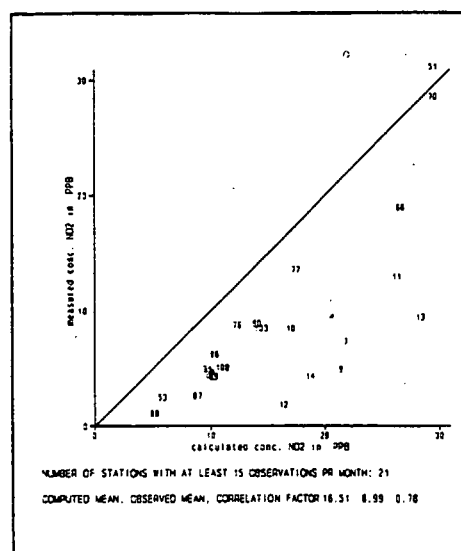
Det konkluderes at det beregnede gennemsnit for både dag og nat stemmer godt overens med de observerede data, men at der opnås en dårligere overensstemmelse for gennemsnittet om natten end om dagen. (Dette kan bl.a. ses idet spredningen for gennemsnittet om natten er større, samt at data afviger meget fra diagonalen). I artiklen angives en upræcis beregning af mixhøjden om natten som den primære årsag til den ringere beskrivelse af gennemsnittet om natten.

I [Zlatev 1995] ses et eksempel hvor scatterplot afslører systematiske fejl i form af en konsekvent overestimering af  $\text{NO}_2$  koncentrationen i vinterperioden (punkterne ligger alle under diagonalen) (se figur 4.14).

I dette tilfælde konkluderes det at CBM IV ikke er så anvendeligt for  $\text{NO}_2$  i vinterperioden.

#### 4.4.2 Statistiske beregninger

De statistiske beregninger benyttes dels til at få et mere objektivi mål for afstanden mellem målte og beregnede data og dels til at vurdere om den forskel der er, skyldes tilfældige afvigelser eller om der er signifikant forskel mellem de to datasæt. De statistiske beregninger som benyttes i den empiriske



Figur 4.14 Scatterplot over NO<sub>2</sub> koncentrationer (vinter 1989) [Zlatev 1995, s. 277].

verificering af DEM udgøres primært af fejlestimationer mellem målte og beregnede størrelser. Fejlen beregnes som en relativ fejl:

$$\text{Fejl} = \frac{100 \cdot |X_{\text{Beregnet}} - X_{\text{Målt}}|}{X_{\text{Målt}}} \quad (4.12)$$

hvor  $X$  kan repræsentere en enkelt måling/beregning eller, som det oftere er tilfældet, et gennemsnit for hhv. målte og beregnede værdier. Fejlestimering udgør den kvantitative del af den empiriske verifikation af DEM og benyttes primært sammen med scatterplots til sammenligning af de beregnede og målte koncentrationsgennemsnit. Er den relative fejl mellem beregnede og målte data mindre end 30% (usikkerheden på emissionsdata) er der god kvantitativ overensstemmelse mellem model og empiri (se afsnit 4.2). Er den relative fejl større undersøges omstændighederne nærmere og i visse tilfælde modificeres enkelte moduler i DEM. Et eksempel på ændringer af submodeller i DEM som følge af for stor uoverensstemmelse ses i [Harrison et al. 1994] hvor kemidelen blev ændret, ved at revidere det kemiske skema. I den tidlige udgave af modellen blev fejlen fundet til at ligge mellem 5% og 200%. Dette var ikke acceptabelt og kemidelen blev modificeret, hvorefter fejlen blev estimeret mellem 2% og 25%.

I enkelte tilfælde benyttes også et andet statistisk kriterium, som oprindeligt er forslået i Hanna og Heinold, 1985 (reference i [Harrison et al. 1994]). Fejlen er i dette tilfælde givet ved

$$M = \frac{D}{\bar{C}_0 \bar{C}_1} = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (c_{0i} - c_{1i})^2}{\bar{C}_0 \bar{C}_1} \quad (4.13)$$

hvor  $D$  er gennemsnittet af kvadratet på differencen mellem det målte ( $c_{0i}$ ) og det tilhørende beregnede ( $c_{1i}$ ) resultat,  $\bar{C}_0$  er middelværdien af mængden af målte koncentrationer, og  $\bar{C}_1$  er middelværdien af den tilhørende beregnede mængde, og  $n$  er antal observationer. For skibsmålingerne blev  $M$  beregnet til  $0.6 \leq M \leq 2.53$ , hvilket er mindre end de  $M$  størrelser der blev fundet i Hanna og Heinold og derfor konkluderes det, at resultatet på trods af de få målepunkter er ret godt. Det fremgår dog ikke hvorledes størrelsen  $M$  benyttes i statistisk sammenhæng, men vi gætter på at  $M$  benyttes som teststørrelse i en kvotienttest for hypotesen  $H_0$ : at de målte og beregnede data er ens. Hvis  $M$  er relativt lille bliver testsandsynligheden stor, dvs. at der ikke er umiddelbar grund til at forkaste  $H_0$ .

#### 4.4.3 Test under forskellige forhold

Udover de ovennævnte metoder til sammenligning af empiri og beregnede resultater bliver DEM verificeret empirisk ved at sammenholde empiri med output beregnet under forskellige fysiske og kemiske forhold.

Af eksemplerne fremgår det, at der foretages sammenligninger mellem empiri og model bl.a. på forskellige årstider, ved lave og høje stofkoncentrationer, med forskellige kemiske stoffer (både primært og sekundært emitterede stoffer), på forskellige lokaliteter, ved lave vindhastigheder, over land og over vand. Endvidere er der foretaget sammenligninger på geografiske lokaliteter med meget høje emissioner [Zlatev et al. 1993] og meget lave emissioner [Harrison et al. 1994] samt for koncentrationen i både luft og nedbør [Zlatev et al. 1992].

Alle disse tests giver til en vis grad tilfredsstillende resultater (fejl på output er mindre end fejl på input), men det fremgår ikke hvorvidt DEM betragtes som værende endeligt empirisk verificeret. Det er dog muligt at uddrage nogle generelle tendenser for gyldigheden af DEM.

Det er karakteristisk for langt de fleste forsøg, at den relative fejl (ligning (4.12)) mellem modellen og empiri er mindre end usikkerhederne på input-

data dvs. ca. 30%. Derfor konkluderes det, at der generelt er god overensstemmelse mellem modelresultater og empiri. Vi vil senere (i afsnit 5.2.4) diskutere gyldigheden af denne "konklusion".

Modellen er specielt god til at beskrive situationer, hvor emissionerne er homogent fordelt (der ikke er for store gradienter) eller til at beskrive stoffers koncentration som ikke varierer meget over tid.

Når der er større forskelle mellem empiri og beregnede resultater skyldes dette overordnet 3 faktorer [Zlatev 1995].

1. Måledata er ikke direkte sammenlignelige med de beregnede data (som før beskrevet i starten af kapitel 4.4).
2. Problemet med især emissionerne, men også de resterende inputdata (se afsnit 4.2).
3. Manglende indsigt i de fysiske/kemiske mekanismer hvilket resulterer i en mangelfuld matematisk beskrivelse [Zlatev et al. 1991]

Punkt 3 inkluderer, som det fremgår af eksemplerne, bl.a. det kemiske skema CBM IV, som tilsyneladende ikke er repræsentativt i vinterperioden. Men også under specielle vindforhold (såsom saddelpunkter i vindfeltet) opstår der problemer. Beskrivelsen af højden af mixlaget og dermed den matematiske beskrivelse af  $K_z$  giver også anledning til problemer i DEM.  $K_z$ 's afhængighed af  $z$  er stadig under udvikling [Zlatev 1995]. Men også stofudvekslingen med den fri troposfære er problematisk at beskrive og har stor betydning især for beregningerne af  $O_3$  koncentrationen i luften. Det er endnu ikke klargjort hvorledes denne udveksling foregår og den matematiske beskrivelse af en  $O_3$  udvekslingsalgoritme er derfor stadig under udvikling [Zlatev et al. 1993].

## 4.5 Validering af DEM med INERIS som aftager

Dette afsnit er et eksempel på validering af en model med en bruger involveret. I dette tilfælde bliver DEM valideret af INERIS<sup>3</sup>, men det skal nævnes at valideringen endnu ikke er tilendebragt. INERIS præsenterer i [INERIS and NERI 1997] nogle indledende overvejelser samt nogle de foreløbige få scenarier, der er afprøvet. Målet er i sidste ende at få svar på disse spørgsmål:

---

<sup>3</sup>Institut National De L'Environnement Industriel Et Des Risques

- Hvad er forureningen i forskellige dele af Frankrig?
- Hvad er effekten af en variation af emissionskilderne på luftforureningen i Frankrig?
- Kan man bedst opnå en reduktion af luftforureningsniveauet
  - ved kun at regulere franske emissions kilder?
  - ved at regulere kilder i et større område indeholdende Frankrig?

Yderligere vil de gerne se på 21 mere detaljerede områder i Frankrig, og stille samme spørgsmål i forbindelse med disse områder

Her bemærker de i forbindelse med beskrivelsen af domænet, at de enkelte submodeller kan køres separat. Da diskretiseringen er på  $50 \times 50$ , vil der være gitterpunkter med stor emission, og påvirkningen af disse gitterpunkter på deres omgivelser skal også studeres. Flere hundrede scenarier vil blive kørt, for at få afklaret disse spørgsmål. Pga. de ressourcekrævende computerkørsler vil de overvejende blive kørt i den to-dimensionale version af DEM, også fordi det er meget nemmere at få inputdata til disse.

Et andet vigtigt aspekt er visualiseringen af beregningerne, der bevirker at selv ikke-specialister forstår det. Det kræver kraftige computere og der skal arbejdes mere med softwaren for at gøre programmet hurtigere og mere brugervenlig. Programmet har allerede på nogle af de første testscenarier vist, at det kan løse nogle af problemerne.

Resultaterne af scenarierne vil blive sammenlignet med måledata fra hhv. EMEP og INERIS. Desuden vil sammenligningerne i andet materiale (bl.a. [Zlatev 1995]) blive indraget i valideringen, hvilket bl.a. [Sargent 1990] også anbefaler at man generelt bør gøre. Der er allerede blevet foretaget enkelte scenarier, for at se på konsekvensen af et totalt stop af  $\text{NO}_x$  emission.

Denne rapport indeholder kun indledende overvejelser, hvor der bliver stillet forskellige typer krav i den til både hvad modellen kan, og hvordan den i en brugermæssig sammenhæng skal præsentere resultater. Den endelige konklusion og anbefaling vil først blive foretaget i en senere rapport.



# Kapitel 5

## Diskussion

I projektet har vi ønsket at undersøge, hvordan en generel modelverificeringsprocedure kan se ud, primært for at kunne vurdere hvordan en konkret model (DEM) er blevet verificeret.

I dette afsluttende kapitel vil vi først diskutere, om der overhovedet er fornuft i at betragte verificeringen af matematiske modeller generelt, som første del af problemformuleringen lægger op til. Endvidere vil vi diskutere vores bud på en sådan procedure (kapitel 3) og dens mulige anvendelser. Dernæst diskuterer og opsummerer vi resultaterne fra vores analyse af, hvordan DEM er verificeret (kapitel 4) set i lyset af den generelle verificeringsprocedure.

### 5.1 Generel verificering

#### 5.1.1 Berettigelsen af en generel verificeringsprocedure

Her kan man umiddelbart stille spørgsmålene:

Er en generel verificeringsprocedure berettiget? Kan man lave en generel opskrift, som kan verificere alle modeller? Er matematiske modeller ikke så forskellige i status, struktur og formål, at en generel verificeringsprocedure er meningsløs? Det er der mange som mener. Ifølge [Jensen 1988] afhænger verificeringen og modelkontrollen udelukkende af modellens status som værende hhv. teoribaseret eller en ad-hoc model. En ad-hoc model kan kun underlægges empirisk kontrol, hvorimod teoribaserede (teoriafledte) modeller yderligere kan verificeres teoretisk. Her åbnes altså ikke umiddelbart mulighed for en generel verificeringsprocedure, der dækker begge modeltyper. I [Hermann and Niss 1982] genfindes denne holdning til en generalisering af

verificeringen. De mener ikke, det er meningsfyldt at give en generel og systematisk udredning af de spørgsmål, som er beslægtede med verificeringen af matematiske modeller, med mindre dette belyses af et arsenal af konkrete eksempler.

Både i [Jensen 1988] og [Hermann and Niss 1982] illustreres ad-hoc og teori-baserede modeller med meget simple eksempler, som tydeligt viser forskellen på de to modeltyper, men desværre ikke er illustrativt for hovedparten af matematiske modeller, som ofte indeholder både ad-hoc elementer og mere teoribaserede elementer.

I [Hermann and Niss 1982] angives som eksempel på en ad-hoc model en eksponentiel vækstmodel, der beskriver væksten i en bakteriepopulationen. I følge [Hermann and Niss 1982] kan denne model *kun* verificeres ved sammenholdning med empirisk data. Men her mener vi, at en sådan model også kan og skal verificeres konceptuelt. Det ville f.eks. være rimeligt at spørge en biolog, om en sådan beskrivelse af væksten er rimelig. Svaret ville efter al sandsynlighed være, at den eksponentielle vækst er forventet, så længe ydre faktorer endnu ikke er begrænsende for væksten (mangel på føde og plads). En ren empirisk verificering er i dette tilfælde ikke tilstrækkelig, idet der dels er mange og store usikkerheder forbundet med tælling af bakteriepopulationer, dels er der problemer med at sikre optimale forhold for væksten.

Vi mener, i modsætning til bl.a. ovennævnte, at der er fællestræk ved matematiske modeller, som kan udnyttes til at opstille generelle kriterier for verificeringen. Denne påstand underbygges dels af, at vi har set tiltag i opstilling af generelle retningslinier for verificering i [Hydraulics 1993], [Teknologirådet 1994/5], [Gass 1977] og [Sargent 1990] og dels af, at en generel verificeringsprocedure kan benyttes til analyse af modeltyper som DEM og modeller til beskrivelse af transporten af radioaktivt affald [Sargent 1990]. I kapitel 3 har vi vist, at det giver mening at anvende den generelle verificeringsprocedure til analyse af en matematisk model. Proceduren skaber en struktur og et fokus på de områder, der specielt skal undersøges.

Man skal selvfølgelig være varsom med at konkludere alt for meget ud fra få eksempler, men vi mener, der er så store fællestræk ved computerbaserede modeller, at der (endnu) ikke er grund til at betvivle berettigelsen af en generel verificeringsprocedure.

### 5.1.2 Indhold og anvendelse af en generel verificeringsprocedure

Hvad skal en sådan generel procedure, som kan benyttes til at verificere matematiske modeller, indeholde? Matematiske modeller er ofte en blanding af både teoribaserede og ad-hoc elementer, og ligesom [Jensen 1988] og [Hermann and Niss 1982] mener også vi, at matematiske modeller kan og skal konfronteres med empiri. Modeller har til formål at give en forenklet og tilpasset fremstilling af et givet virkelighedsområde. Det er derfor naturligt at konfrontere modellens resultater med målte data, som repræsenterer dette virkelighedsområde. Men blind tiltro til en model, blot fordi den kan reproducere målte data, er ikke tilstrækkelige krav til en egentlig verificering. Matematiske modeller er baseret på teoretiske overvejelser og antagelser om det virkelighedsområde, der skal modelleres. Der er foretaget simplificeringer. Processer og sammenhænge i virkelighedsområdet er negligeret enten bevidst eller af mangel på viden. Disse forhold i modelopbygningen kan og skal vurderes kritisk. Det har vi valgt at kalde konceptuel verificering. Endvidere er de fleste modeller afhængige af målte data, enten til parameterestimering, i form af inputværdier eller til sammenholdning med modeloutput. Det er nødvendigt at vurdere de usikkerheder, der er forbundet med benyttet empiri dels for at vurdere præcisionen i output og dels til vurdering af, hvilken overensstemmelse mellem output og empiri man kan forvente. For computerbaserede modeller vil pålideligheden af modeloutput i høj grad være afhængig af pålideligheden af computerprogrammet og de numeriske algoritmer (hvis modellen løses numerisk). For denne modeltype vil verificering af computerprogrammet og de numeriske metoder naturligvis være påkrævet.

Med en inddeling i konceptuel, data, computer/numerisk og empirisk verificering mener vi således, at de centrale aspekter i modelverificeringen er dækket ind. Men inddelingen af verificeringsproceduren kunne muligvis være anderledes. I f.eks. [Onofrei 1995] er en kort skitsering af de krav, man burde stille til modelverificeringen. Her findes analoger til det, vi har betegnet konceptuel, numerisk og empirisk verificering. Men dataverificeringen er ikke medtaget. Tilgængæld indgår et krav om, at modellen og modellens output skal konfronteres med andre videnskabsfolks sunde fornuft og intuition. Men som før nævnt er det nødvendigt, at vurdere datausikkerhederne bl.a. for at kunne vurdere modellens udsagnskraft og præcision. Vi mener dog ligesom [Onofrei 1995], at andre eksperters mening (intuition og sunde fornuft) om modellen er af stor betydning for modellens pålidelighed, men har valgt at betragte andre eksperters mening som et redskab (face verificering), der på forskellig måde kan benyttes til især konceptuel men også empirisk verificering af

modellen (f.eks. i en turing test).

Udover selve inddelingen af verificeringsproceduren har vi angivet hvilke konkrete metoder, der evt. kan benyttes til at verificere modellen. Nogle af redskaberne er ikke anvendelige for alle typer af modeller men skal betragtes som mulige redskaber og som inspiration til at verificere modellen.

Hvad kan denne verificeringsprocedure så benyttes til? Her ser vi umiddelbart to anvendelser:

1. Den kan benyttes af modelbyggeren til at opnå struktur og systematik i modelverificeringen, idet proceduren angiver retningslinier for, hvad der burde inddrages i en modelverificering.
2. Den kan benyttes af modelbrugeren eller andre, som ønsker at vurdere en matematisk models gyldighed.

Hvis resultatet af en konceptuel, data, computer/numerisk og empirisk verificering er tilfredsstillende, mener vi ikke, der er nogen indikationer på, at modellen skulle være ugyldig. Endvidere vil der på disse fire centrale områder være skabt *tillid* til, at modellen er gyldig, og at den virker efter hensigten.

For eventuelle brugere af en model er det selvfølgelig vigtigt, at i hvert fald hovedresultaterne af en sådan verificering er tilgængelige. I afsnittet *valideringskrav* har vi angivet forslag til, hvad en mulig modeldokumentation kunne indeholde, for at modelbrugeren kan vurdere gyldigheden af modellen. Det drejer sig primært om en konkret angivelse af modellens gyldighedsområde og en præcisering af de områder, hvor modellen ikke er gyldig. Endvidere er det helt centralt for brugeren at kende usikkerheden på modeloutput. En model kan efter vores definition godt være verificeret, men indeholde så store usikkerheder på f.eks. inputdata, at modeloutput bliver for upræcist til, at en bruger kan benytte modellen i praksis. Bl.a. derfor bliver *valideringskravene* til en model meget brugerspecifik. For en modelbruger er det yderligere væsentligt at få præciseret og vurderet de ad-hoc antagelser, som indgår i modellen. Det er ofte ikke muligt for en bruger at vurdere om de antagelser, der indgår i modellen, er rimelige, hvilket for os at se nødvendiggør behovet for en face verificering i modeldokumentationen.

## 5.2 Verificering af DEM

I diskussionen af hvordan DEM er blevet verificeret opsummerer vi resultaterne af vores analyse (kapitel 4) og diskuterer disse i forhold til den opstillede

verificeringsprocedure (kapitel 3). Vi vil fokusere på de mangler, som vi mener der er i verificeringen, men må dog her gøre opmærksom på, at vi primært har haft adgang til publiceret materiale vedrørende DEM, og det er derfor muligt, at DEM er blevet underlagt yderligere kontrol, som ikke eksplicit er beskrevet i kildematerialet. Endvidere foreligger endnu ikke en egentlig modeldokumentation (er undervejs i form af INERIS' rapport), og det er derfor ikke rimeligt at kritisere DEM eller modelbyggerne for ikke at opfylde de krav, vi har opstillet i afsnittet *valideringskrav* (afsnit 3.2).

I en vurdering af hvordan DEM er verificeret, er det vigtigt at indse, at der ikke kan opnås fuld overensstemmelse mellem modeloutput og virkeligheden. Fuld overensstemmelse er således ikke et kvalitetsmål, hverken for modellen eller for verificeringsproceduren. Formålet med verificeringsproceduren er derimod at lokalisere de kilder i modellen, der forårsager uoverensstemmelsen og vurdere, om de kan minimeres. I DEM er uoverensstemmelsen mellem modellen og virkeligheden forårsaget af:

- Koncentrationen af et stof måles i et *punkt*, mens den beregnes for et kvadrat (50km×50km), dvs. den beregnede koncentration er en *middelværdi*. Denne afvigelse kan ikke undgås men reduceres ved at mindske gitterstørrelsen.
- DEM har en indbygget fejl i form af unaturlig udjævning af koncentrationsgradienter.
- DEM bygger på en række (ad hoc) antagelser, se kapitel 2 og 4. Denne fejkilde kan minimeres.
- Usikkerhed på inputdata. Denne usikkerhed kan, som følge af flere målestationer og bedre beregningsalgoritmer, med tiden minimeres.
- Transmissionsfejl (fejl ved overføring af data m.v.) som kan minimeres.
- Programmeringsfejl, som sandsynligvis afsløres efter længere tids brug af programmet (såfremt der ikke laves fornyelser).

### 5.2.1 Konceptuel verificering

I den konceptuelle verificering af DEM er det mest benyttede redskaber *face verificering* i form af referencer til videnskabelige artikler. Redskabet bruges dels i udvælgelsen af ligninger og kemiske reaktioner i modellen og dels i den mere detaljerede beskrivelse af de indgående parametre. Desuden benyttes

logiske argumentationer og forklaringer fra modelbyggeren selv, hvilket kan bruges i en face verificering. *Følsomhedsanalyse* bruges for at bekræfte nogle af de antagelser som er foretaget. I en vis forstand bruges også *sammenligning med andre modeller* i diskussionen af simple og detaljerede modeller, se kapitel 4.

Der er således blevet benyttet en del redskaber for at verificere udvælgelsen af ligninger og beskrivelsen af de indgående parametre. Generelt er det dog svært for ikke-fagfolk (som os) at vurdere om DEM er *tilstrækkeligt* verificeret. Tilstrækkeligheden er tildels afhængig af hvor velfunderet antagelsen er indenfor området der modelleres. Her ville det være ønskeligt med en eksplisit beskrivelse af hvilke antagelser, der i fagkredse betragtes som "common knowledge", og derfor ikke behøver den store opmærksomhed og hvor der tilsyneladende laves mere eller mindre kvalificerede gæt, som burde underlægges større kontrol.

Udfra kildematerialet om DEM og i den supplerende litteratur (f.eks. [Pasquill and Smith 1983] [Stern et al. 1984]) kan vi dog se, at der tilsyneladende er konsensus omkring den matematiske beskrivelse af vinden. Advektionsligningen kræver derfor ikke den store (konceptuelle) opmærksomhed. Også det horisontale diffusionsled er relativt anvendt (i hvert tilfælde i eulerske modeller). Men tilsyneladende kan koefficientens afhængighed af f.eks. vindhastigheden og diskretiseringen diskuteres [Abbott and Basco 1989] [Zlatev 1997a]. I DEM er koefficienten antaget konstant (med henvisning til [Gifford 1982]), men af denne artikel fremgår det at koefficienten kan antage forskellige konstante værdier. I DEM har man dog ved følsomhedstest konstateret at modellen udviser relativ lille følsomhed overfor den horisontale diffusionskoefficient (en ændring af koefficienterne på en faktor 4 resulterer i koncentrationsforskelle på hovedsagligt 10%). Dette retfærdiggør tildels, den for os at se, mangelfulde verificering af diffusionen. For at teste diffusionsledet kunne det f.eks. være interessant at teste modellen i vindstille vejr. Her ville den eneste transportform være den molekylære diffusion hvilket betyder at diffusionen i DEM er en faktor  $10^8$  (forskellen mellem størrelsesordenen på den molekylære diffusionskoefficient ( $10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$ ) og den makroskopiske ( $10^4\text{m}^2/\text{s}$ )) højere end i "virkeligheden".

Både i beskrivelsen af depositionen samt den horisontale diffusionskoefficient indgår ad-hoc antagelser, hvilket også understreges i DEM. Disse koefficienter burde derfor underlægges skærpet kontrol, f.eks. følsomhedstests, eller hvis det er muligt, testes empirisk.

Et eksempel på hvordan man måske kunne lave en bedre verificering af modellen er våddepositionen. Koefficienten  $I$ , som indgår i våddepositionscoef-

ficienten, kan defineres på forskellige måder. I Pasquill and Smith [1983] er der opremset fire forskellige metoder at modellere koefficienten  $I$ :

1. Det regner lidt hele tiden (enten konstant eller med årlige variationer).
2. Målte nedbørmængder interpoleres over tid og sted.
3. Stokastisk beregning af nedbør (afhængig af regn/ikke regn på nærliggende målestationer).
4. Der defineres våd- og tørregioner langs trajektorier. Disse regioner bestemmes stokastisk.

I DEM bruges antagelse nummer 2. Metoden til modellering af våddepositionen er altså brugt andre steder. Dette indikerer, at den valgte metode er rimelig. Eksemplet viser samtidigt, at der i fagkredse ikke er enighed om, hvordan koefficienten bedst kan beskrives. Samtidig kan forskellige metoder vise sig bedre egnede til bestemte situationer.

Udover de benyttede redskaber kunne man også anvende en degenereringstest til at få et overblik over dele af den komplekse model, teste modellen under ekstreme forhold for at undersøge modellens evner i ekstreme situationer og sporing for at studere logikken og nøjagtigheden i modellen.

### 5.2.2 Dataverificering

Verificeringen af de data, som benyttes til modelinput, foregår primært ved at referere til EMEP. Herudover benyttes grafiske repræsentationer, hvorved muligt afvigende data i nogle tilfælde kan detekteres. For data, som benyttes i den empiriske verificering, stilles endvidere krav til de relevante målestationer. Disse krav skal sikre at målingerne er repræsentative.

Generelt er der altså ikke meget kontrol af de data som benyttes i DEM. Da der benyttes store datamængder (hvor der næsten ikke kan undgå at optræde fejl) ville det muligvis være relevant med en automatiseret kontrol (og ikke blot stikprøver) af data. Denne kontrol skulle bl.a sikre mod transmissionsfejl og screene for outliers.

En væsentlig kritik af DEM er benyttelsen af emissionsdata med store usikkerheder (ca. 30%) og at disse data interpoleres uden at der foretages et skøn over størrelsen af de fejl der herved introduceres. Problemet ville være mindre betydende, hvis der var bedre kontrol dels over usikkerheden på inputdata, og

dels på størrelsen af fejlakkumulering i modellen. Det angivne usikkerhedsinterval for inputdata er baseret på estimationer, overslag og skøn og derfor i sig selv meget usikre. Dette har store konsekvenser især for den kvantitative vurdering af DEM idet den relative fejl fra inputdata udgør det acceptable fejlniveau for DEM. Det fremgår ikke om der er foretaget analyser af hvordan fejlene (især fra inputdata men også fra den numeriske behandling) interfererer. Det vurderes, at det kun er den største relative fejl (emissionsdata) som influerer på output (da denne usikkerhed er meget større end de andre) og at denne direkte kan benyttes som usikkerhedsmål på output.

Et relevant spørgsmål kunne være om der overhovedet er fornuft i at udvikle en model, som er baseret på forholdsvis usikre emissionsdata. Emissionsdata foreligger som årstotalværdier for hvert gitterfelt. Det må dog være muligt at få disse data med kortere tidsinterval og dermed (tildels) undgå grove interpolationer. Desuden må det være muligt – i takt med at der kommer flere målestationer og bedre beregningsalgoritmer – at få et mere troværdigt billede af emissionerne, især den emission som skyldes trafik.

### 5.2.3 Verificering af computerprogram og numeriske algoritmer

Verificeringen af de numeriske algoritmer har været og er stadig et af de helt centrale områder i testningen af DEM, og der bliver gjort meget ud af denne del af verificeringen. Algoritmerne er blevet verificeret med en række forholdsvis simple test problemer, hvilket i kapitel 3 blev defineret som *sammenligning med andre modeller*. Desuden foretages *dynamic assertion*, dvs. der testes for illegale værdier og det er automatisk kontrol af om modellen er massebevarende.

De algoritmer som benyttes til løsning af DEM viser sig pålidelige i relativt simple testforsøg. Spørgsmålet er så om disse testforsøg er tilstrækkelige til at vurdere den numeriske løsnings nøjagtighed globalt set. Der opstår uforudsigelige numeriske fejl som afsløres f.eks. i forbindelse med følsomhedstests af DEM. Dette er bekymrende, idet det ikke er muligt (i hvert fald for os), at vurdere for hvilke parameterverdier og i hvilke situationer de numeriske algoritmer er stabile og pålidelige – og hvornår de ikke er.

En sammenligning med andre modeller (ikke nødvendigvis LRTAP modeller) som har en lignende struktur (PDE og ODE) og samme eller lignende numeriske metoder ville måske be-/afkræfte algoritmerne. Yderligere kunne man sammenligne den numeriske løsning af koblingen mellem advektion og diffusion med den tilsvarende analytiske løsning angivet i [Bernard 1990].



Udover en test for massebevarelse, som er foretaget ifølge [Zlatev 1997b] testes de numeriske metoder ikke globalt. Det kunne være ønskværdigt med globale tests af de numeriske metoder, f.eks. en følsomhedstest, hvor koncentrationen af ét stof øges, og det testes, om det fejlagtigt medfører øget koncentration af andre stoffer. Det vurderes dog, at der ikke introduceres nævneværdige fejl via den numeriske løsning.

### 5.2.4 Empirisk verificering

Hovedparten af verificeringen af DEM er baseret på sammenligning med målte koncentrationer. Til denne sammenligning benyttes primært grafiske repræsentationer i form af *tidsrækker* og *scatterplots*. Desuden indgår *statistiske metoder* samt test under forskellige forhold, se kapitel 4.

Resultatet af sammenligningen mellem modeloutput og målte data viser, at der generelt er en afvigelse på mindre end 30%. Herudaf konkluderes det at der udover usikkerhederne på emissionsdata ikke introduceres fejl i modellen og at resultatet derfor er acceptabelt. Men denne konklusion er kun gyldig hvis der er en lineær sammenhæng mellem emission og output hvilket ikke er tilfældet i DEM. Dette kan anskueliggøres ved et simpelt regneeksempel. Antag at sammenhængen mellem modeloutput  $c_i$  og en inputparameter  $E_i$  er ikke lineær (f.eks. at  $c_i \propto E_i^2$ ). Antag yderligere at  $E_i$  har en usikkerhed på  $\delta_i$ , dvs  $E_i \pm \delta_i$  hvor  $\frac{\delta_i}{E_i} \leq 0,3$ . Så er usikkerheden på  $c_i$ :

$$\frac{(E_i + \delta_i)^2 - E_i^2}{E_i^2} = \frac{E_i^2 + \delta_i^2 + 2E_i\delta_i - E_i^2}{E_i^2} = \frac{\delta_i}{E_i} \left( \frac{2E_i}{E_i} + \frac{\delta_i}{E_i} \right) \approx 0,7 \quad (5.1)$$

Eksemplet viser at usikkerheden på output i dette tilfælde kan blive 70%. I DEM er der imidlertid ikke en kendt sammenhæng mellem usikkerhederne på inputdata og usikkerheden på modeloutput. Man kan derfor ikke bestemme hvorfra usikkerheden på output stammer og det er således muligt at der udover usikkerhederne på emissionsdata introduceres "fejl" f.eks. via modellen, de numeriske algoritmer eller input- samt verificerings data. Tilsyneladende er en afvigelse på 30% mellem modeloutput og empiri dog acceptabel uanset årsagen.

Der er dog problemområder som man umiddelbart ikke ville forvente (f.eks. om vinteren). Måske kan disse områder forbedres når de opdages, men det indikerer at den konceptuelle model og de antagelser den bygger på er mangelfuld, eller at de usikre inputdata også spiller ind her. At det er nødvendigt at videreudvikle modellen påpeges da også gang på gang i f.eks. [Zlatev 1995].

Der er dog ikke godtgjort for, at problemerne afhjælpes ved en videreudvikling.

Turing test ville måske være et godt supplement til face verificering som bruges i den konceptuelle verificering. Som tidligere nævnt kunne man bruge hypotesetest for at afgøre om afvigelsen mellem modeloutput og målte data er tilfældig (og f.eks. kan skyldes punktmåling vs. gennemsnitsberegning) eller systematisk.

### 5.3 Konklusion

Resultaterne af vores analyse viser, at der i DEM er foretaget undersøgelser indenfor de fire områder, vi her har betegnet som centrale for verificeringen af en matematisk model. Mange forskellige redskaber er blevet anvendt for at belyse modellens gyldighed. DEM er en model, der skal beskrive et meget komplekst virkelighedsområde, som involverer mange forskellige fagdiscipliner. Man skal derfor være godt fagligt rustet for at få en rigtig god indsigt i, om modellen repræsenterer virkelighedsområdet. Man kan dog pege på opgaver, som modellen er god til at løse, og man kunne så sige, at modellen er tilstrækkeligt verificeret mht. til løsning af en bestemt opgave, f.eks. bestemte stoffer eller ved bestemte meteorologiske situationer.

Resultaterne af verificeringen af DEM tyder på, at modellen i hvert fald kvalitativt, kan beskrive transporten og omsætningen af udvalgte stoffer i atmosfæren under mange forskellige fysiske og kemiske forhold. Herved mener vi, at modellen kan anvendes til at vurdere, hvilken effekt (fiktive) emissionsreduktioner har for luftforureningen (2. hovedformål med DEM). Her har man primært brug for at kende *forholdet* mellem f.eks. en halvering af emissionen og den resulterende ændring i luftforureningen. Derimod anser vi ikke modellen for at være tilstrækkelig præcis til brug for første hovedformål: at beregne hvor meget en konkret emissionskilde bidrager til luftforureningen i andre lande. Dette skyldes ikke for store unøjagtigheder i selve modellen, men derimod manglen på tilstrækkeligt præcise emissionsdata.

For at kunne fremkomme med konklusionen af gyldigheden af DEM har vi brugt den generelle verificeringsprocedure opstillet i kapitel 3. Proceduren er baseret på verificering af en anden type matematiske model, men viser sig egnet til at verificere modellen, vi betragter. Vi konkluderer således, at det er berettiget med en generel verificeringsprocedure, og at proceduren opstillet i kapitel 3 er et godt bud til verificering af computerbaserede matematiske modeller. Det er imidlertid nødvendigt at afprøve proceduren på andre modeller for at vurdere gyldigheden af proceduren.

# Appendiks A

## Verificeringsredskaber

### **Animation (grafisk fremstilling af modellen)**

Modellens opførsel fremstilles grafisk i løbet af den tid modellen kører. F.eks. kunne det vises grafisk, hvordan komponenter forandres i løbet af processen på en fabrik. Animation er en god måde at give et let tilgængeligt overblik over, hvordan modellens mekanismer kører i de enkelte trin.

### **Begivenhedstests**

Modellen køres med særlige begivenheder(events), f.eks., kunne DEM køres i en periode med stærkt forhøjet smog i luften. Modelberegningerne sammenholdes med situationen i virkeligheden.

### **Degenereringstest**

Modellen degenereres ved at fjerne dele af modellen eller udvalgte inputværdier. Metoden er en simplificering af modellen, der giver overblik over, hvordan de enkelte dele af modellen (submodellerne) virker isoleret.

### **Dynamic assertion**

Her testes om der i modelberegningerne opstår illegale værdier. F.eks. om der forekommer negative koncentrationer eller om massen/energien er bevaret.

### **Ekstreme forhold**

Modellen burde kunne tage højde for ekstreme forhold og den logik som modellen bygger på burde være gyldig udenfor normalsituationer. For eksempel kan DEM køres i perioder med stormvejr eller næsten uden vind. Det ses, om modellen kører realistisk eller om den ikke kan tåle sådanne ekstreme forhold.

### **Face-verificering**

Går ud på, at man spørger eksperter indenfor det modellerede område om modellen virker fornuftig. Er logikken i modellen i orden, og er forholdet mellem input-output rimeligt. Verificering iform af henvisning til andres arbejde (artikler, teorieretc.) hører også under denne kategori.

### **Faste værdier**

Bruges til at sammenligne modellens resultater med resultater som er lette at overskue. Nogle værdier i modellen holdes fast, så modellen bliver simplificeret. Således kan modelberegningerne sammenholdes med beregninger som er fremkommet ved udregninger i hånden. Et eksempel kan være, at lade vinden blæse fra kun én retning i DEM.

### **Forudsigelser**

Modellen bruges til at forudsige resultater som i nogle tilfælde senere kan sammenlignes med måledata. I andre tilfælde findes måledata ikke (f.eks. i beregning af transport af radioaktivt materiale over lang tidshorizont) Man må i dette tilfælde sammenligne de dele af modellen hvor måledata eksisterer, i stedet for at lave en total empirisk sammenligning. Metoden tester modellens evne til at forudsige virkeligheden.

### **Følsomhedsanalyse**

Går ud på, at man ændrer værdien af en eller flere inputdata eller parametre og ser på effekten på output. Hvis en lille ændring i input resulterer i stor ændring i output er modellen følsom overfor denne inputdata/parameter. De data/parametre i modellen som er følsomme, skal man være opmærksomme på og tilstræbe, at de bliver gjort tilpas nøjagtige.

## Historiske data

Har man tilgang til historiske data kan nogle af dem bruges til at bygge modellen og nogle til at teste modellen, altså se om modellen er i stand til at reproducere.

## Hypotesetests

En hypotese opstilles og det testes, om hypotesen kan godtages. Hvis hypotesen ikke afvises skal alle afvigelser mellem observerede og målte data kunne forklares som tilfældige, men hypotesen er ikke nødvendigvis sand. [Henningsen 1996]

## Intern gyldighed

Her sikres at strukturen i modellen er konsistent og stabil. Der må ikke forekomme modstrid og inkonsistens. Modellens stabilitet kan underinddelt i strukturel stabilitet (konceptuel verificering), numerisk stabilitet og stabil overfor begyndelses og randbetingelser (numerisk verificering).

## Residualplots

Fejlene mellem de målte og beregnede data plottes i et koordinatsystem. Enten som den numeriske afvigelse, eller som den absolutte værdi. Metoden undersøger om fejlen er tilfældig og således ubetydelig eller om der er systematiske afvigelser.

## Sammenligning med andre modeller (intersimulering)

Beregnete resultater kan sammenlignes med resultater fra andre modeller. Sammenligningen kan dels ske med modeller, der repræsenterer samme virkelighedsområde og dels med modeller, som kan løses analytisk. Denne verificering er god til modeller, hvor der ikke findes empiriske data at sammenligne med. Den kan imidlertid bruges på alle modeller for at se om modelresultaterne også kunne være opnået på anden vis. Sammenligning med analytiske løsninger kan endvidere fungere som test af de benyttede numeriske algoritmer.

### Scatterplots

Denne metode går ud på, at man plotter de målte værdier ud af den ene akse i et koordinatsystem og de beregnede ud af den anden. Det mest optimale resultat vil så være, at punkterne ligger på en ret linje med hældningen 1 gennem (0,0) svarende til at værdierne er sammenfaldende.

### Sporing

Her følges en given størrelse gennem hver submodel og dermed gennem hele modellen for at se, om logikken er i orden og om den forventede nøjagtighed findes i modellen.

### Tidsrækker

Tidsrækker viser udviklingen (af f.eks. koncentrationen af det luftforurenende stof) som funktion af tiden. Der bliver plottet to grafer – en for beregnede værdier og en for målte. Sammenligningen af de to grafer kan så ske ved statistiske beregninger, man kan imidlertid også direkte ud fra graferne se en tendens.

### Turing test

Personer som har godt kendskab til genstandsområdet, der modelleres spørges om de kan skelne mellem målte og beregnede værdier.

# Litteratur

Abbott, M. and Basco, D. [1989]. *Computational Fluid Dynamics – An Introduction for Engineers*, John Wiley and Sons, N.Y, USA.

Alberty, R. [1987]. *Physical Chemistry*, John Wiley and Sons.

Bernard, P. S. [1990]. Convective diffusion in two-dimensional incompressible linear flow, *Society fo Industrial and Applied Mathematics* **32**,(Nr. 4).

Brandt, J., Mikkelsen, T., Thykier-Nielsen, S. and Zlatev, Z. [1996]. Using a combination of two models in tracer simulations, *Math. Comput. Modeling* **23**,(Nr. 10).

Chorin, A. and Marsden, J. [1993]. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*, Springer-Verlag N.Y.

Davis and Goodrich [1990]. *A Proposed Strategy for the Validation of Ground-Water Flow and Solute Transport Models: Validation of Geosphere Flow and Transport Model (GEOVAL)*, Stockholm.

Gass, S. I. [1977]. *A Procedure for the Evaluation of Complex Models: First International Conference in Mathematical Modeling*.

Ghez, R. [1988]. *A Primer of Diffusion Problems*, John Wiley and Sons, N.Y, USA.

Gifford, F. A. [1982]. Horizontal diffusion in the atmosphere: A lagrangian-dynamical theory, *Atmospheric Enviroment* **16**,(Nr. 3): 505-512.

Hamming, R. [1962]. *Numerical Methods for Scientist abd Engineers*, Dover Publications, Inc., 2.ed, N.Y, USA.

Harrison, R., Zlatev, Z. and Ottley, C. [1994]. A comparison of the predictions of an eulerian atmospheric transport - chemistry model with experimental measurement over the north sea, *Atmospheric Environment* **28**,(Nr. 3): 497-516.

- Henningsen, I. [1996]. *Statistik*, H.C.Ø. Tryk.
- Hermann, K. and Niss, M. [1982]. *Beskæftigelsesmodellen i SMEC III*, Nyt Nordisk Forlag Arnold Busck, København.
- Hydraulics, D. [1993]. *A Framework for the Validation of Generic Computational Models*.
- INERIS and NERI [1997]. Euroair, *ESPRIT Project Nr. 24618*.
- Jensen, J. [1988]. *Matematiske modeller - vejledning eller vildledning?*, IM-FUFA tekst 164.
- Lide, D. R. [1993-1995]. *Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press.
- Marchuk, G. [1975]. *Methods of Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, N.Y, USA.
- Onofrei, C. [1995]. *Modeling Hygro-Thermo-Mechanical Behaviour of Engineered Clay Barriers - Validation Phase: GEOVAL '94, Validation through Model Testing*, OECD Documents.
- Pasquill, F. and Smith, F. B. [1983]. *Atmospheric Diffusion, 3.ed*, Ellis Horwood Limited, Chichester.
- Patel, M. and Markatos, N. [1986]. An evaluation of eight discretization schemes for two-dimensional convection-diffusion equations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 6.
- Pedersen, T. [1992]. *Atmosfærekemi*, H.C.Ø. Tryk, København.
- Sargent, R. [1990]. *Validation of Mathematical Models: Validation of Geosphere Flow and Transport Model (GEOVAL)*, Stockholm.
- Standish, T. [1994]. *Data Structures, Algorithms, and Software Principles*, Addison-Wesley Publishing Company.
- Stern, A., Boubel, R., Turner, D. and Fox, D. [1984]. *Fundamentals of Air Pollution, 2.ed.*, Academic Press, INC., London.
- Teknologirådet [1994/5]. *Magt og Modeller*, Teknologirådet, København.
- Zlatev, Z. [1995]. *Computer Treatment of Large Air Pollution Models*, Kluwer Academic, Netherlands.
- Zlatev, Z. [1997a]. *Interview den 11/11*, DMU.



---

Zlatev, Z. [1997b]. *Interview den 18/8 og den 2/9, DMU.*

Zlatev, Z. and Berkowicz, R. [1988]. Numerical treatment of large-scale air pollution models, *Comput. Math. Applic.* **16**,(Nr. 1/2): 93-109.

Zlatev, Z., Berkowicz, R., Christensen, J., Eliassen, A., Hov, Ø., Iversen, T. and Prahm, L. P. [1991]. A qualitative study of the sensitivity of an eulerian model with nonlinear chemistry to changes of certain physical parameters, *EMEP Workshop on Photooxidant Modelling for Long-Range Transport in Relation to Abatement Strategies, Berlin* .

Zlatev, Z., Christensen, J. and Eliassen, A. [1993]. Studying high ozone concentrations by using the danish eulerian model, *Atmospheric Environment* **27A**,(Nr. 6): 845-865.

Zlatev, Z., Christensen, J. and Hov, Ø. [1992]. A eulerian air pollution model for europe with nonlinear chemistry, *Journal of Atmospheric Chemistry* **15**: 1-37.

Zlatev, Z., Fenger, J. and Mortensen, L. [1996]. Relationships between emission sources and excess ozone concentrations, *Computers Math. Applic.* **32**,(Nr. 11).

Liste over tidligere udkomne tekster  
tilsendes gerne. Henvendelse herom kan  
ske til IMPUFA's sekretariat  
tlf. 46 75 77 11 lokal 2263

- 
- 217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING  
IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"  
by: Mogens Niss
- 218/92 "A Three-Square Theorem"  
by: Lars Kadison
- 219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"  
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen  
Vejleder: Jesper Larsen
- 220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"  
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen  
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH  
APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"  
by: Thomas P. Branson, Gestur Olafsson and  
Henrik Schlichtkrull
- 222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional  
Groups and Algebras Related to Quantum Physics  
by: Johnny T. Ottesen
- 223/92 THE FUNCTIONAL DETERMINANT  
by: Thomas P. Branson
- 224/92 UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT  
LOW TEMPERATURES  
by: Jeppe C. Dyre
- 225/92 "HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent  
en-krystallinsk silicium  
af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer,  
Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild  
og Thomas Hougaard  
Vejleder: Petr Viscor
- 226/92 "METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL  
CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY  
CONVERSION"  
by: Bent Sørensen
- 227/92 "Computersimulering og fysik"  
af: Per M.Hansen, Steffen Holm,  
Peter Maibom, Mads K. Dall Petersen,  
Pernille Postgaard, Thomas B.Schrøder,  
Ivar P. Zeck  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 228/92 "Teknologi og historie"  
Fire artikler af:  
Mogens Niss, Jens Høyrup, Ib Thiersen,  
Hans Hedal
- 229/92 "Masser af information uden betydning"  
En diskussion af informationsteorien  
i Tor Nørretranders' "Mærk Verden" og  
en skitse til et alternativ baseret  
på andenordens kybernetik og semiotik.  
af: Søren Brier
- 230/92 "Vinklens tredeling - et klassisk  
problem"  
et matematisk projekt af  
Karen Birkelund, Bjørn Christensen  
Vejleder: Johnny Ottesen
- 231A/92 "Elektrondiffusion i silicium - en  
matematisk model"  
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund,  
Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen  
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen
- 231B/92 "Elektrondiffusion i silicium - en  
matematisk model" Kildetekster  
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund,  
Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen  
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen
- 232/92 "Undersøgelse om den simultane opdagelse  
af energiens bevarelse og isærdeles om  
de af Mayer, Colding, Joule og Helmholtz  
udførte arbejder"  
af: L.Arleth, G.I.Dybkjær, M.T.Østergård  
Vejleder: Dorthe Posselt
- 233/92 "The effect of age-dependent host  
mortality on the dynamics of an endemic  
disease and  
Instability in an SIR-model with age-  
dependent susceptibility  
by: Viggo Andreasen
- 234/92 "THE FUNCTIONAL DETERMINANT OF A FOUR-DIMENSIONAL  
BOUNDARY VALUE PROBLEM"  
by: Thomas P. Branson and Peter B. Gilkey
- 235/92 OVERFLADESTRUKTUR OG POREUDVIKLING AF KOKS  
- Modul 3 fysik projekt -  
af: Thomas Jessen
-

- 236a/93 INTRODUKTION TIL KVANTE  
HALL EFFEKTEN  
af: Anja Boisen, Peter Bøggild  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen  
Erland Brun Hansen
- 236b/93 STRØMSSAMMENBRUD AF KVANTE  
HALL EFFEKTEN  
af: Anja Boisen, Peter Bøggild  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen  
Erland Brun Hansen
- 237/93 The Wedderburn principal theorem and  
Shukla cohomology  
af: Lars Kadison
- 238/93 SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (2)  
Vektorbånd og tensorer  
af: Peder Voetmann Christiansen
- 239/93 Valgsystemer - Modelbygning og analyse  
Matematik 2. modul  
af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen,  
Maria Hermannsson, Allan Jørgensen,  
Ragna Clauson-Kaas, Poul Lützen  
Vejleder: Mogens Niss
- 240/93 Patologiske eksempler.  
Om sære matematiske fisks betydning for  
den matematiske udvikling  
af: Claus Dræby, Jørn Skov Hansen, Runa  
Ulsøe Johansen, Peter Meibom, Johannes  
Kristoffer Nielsen  
Vejleder: Mogens Niss
- 241/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 1  
af: Bent Sørensen
- 242/93 Brovedligeholdelse - bevar mig vel  
Analyse af Vejdirektoratets model for  
optimering af broreparationer  
af: Linda Kyndlev, Kare Fundal, Kamma  
Tulinus, Ivar Zeck  
Vejleder: Jesper Larsen
- 243/93 TANKEEKSPERIMENTER I FYSIKKEN  
Et 1.modul fysikprojekt  
af: Karen Birkelund, Stine Sofia Korremann  
Vejleder: Dorte Posselt
- 244/93 RADONTRANSFORMATIONEN og dens anvendelse  
i CT-scanning  
Projektrapport  
af: Trine Andreasen, Tine Guldager Christiansen,  
Nina Skov Hansen og Christine Iversen  
Vejledere: Gestur Olafsson og Jesper Larsen
- 245a+b  
/93 Time-Of-Flight målinger på krystallinske  
halvledere  
Specialerapport  
af: Linda Szkotak Jensen og Lise Odgaard Gade  
Vejledere: Petr Viscor og Niels Boye Olsen
- 246/93 HVERDAGSVIDEN OG MATEMATIK  
- LÆREPROCESSER I SKOLEN  
af: Lena Lindenskov, Statens Humanistiske  
Forskningsråd, RUC, IMPUFA
- 247/93 UNIVERSAL LOW TEMPERATURE AC CON-  
DUCTIVITY OF MACROSCOPICALLY  
DISORDERED NON-METALS  
by: Jeppe C. Dyre
- 248/93 DIRAC OPERATORS AND MANIFOLDS WITH  
BOUNDARY  
by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski
- 249/93 Perspectives on Teichmüller and the  
Jahresbericht Addendum to Schappacher,  
Scholz, et al.  
by: B. Booss-Bavnbek  
With comments by W.Abikoff, L.Ahlfors,  
J.Cerf, P.J.Davis, W.Fuchs, F.P.Gardiner,  
J.Jost, J.-P.Kahane, R.Lohan, L.Lorch,  
J.Radkau and T.Söderqvist
- 250/93 EULER OG BOLZANO - MATEMATISK ANALYSE SET I ET  
VIDENSKABSTEORETISK PERSPEKTIV  
Projektrapport af: Anja Juul, Lone Michelsen,  
Tomas Højgård Jensen  
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 251/93 Genotypic Proportions in Hybrid Zones  
by: Freddy Bugge Christiansen, Viggo Andreasen  
and Ebbe Thue Poulsen
- 252/93 MODELLERING AF TILFÆLDIGE FÆNOMENER  
Projektrapport af: Birthe Friis, Lisbeth Helmsgaard,  
Kristina Charlotte Jakobsen, Marina Mosbæk  
Johannessen, Lotte Ludvigsen, Mette Hass Nielsen
- 253/93 Kuglepakning  
Teori og model  
af: Lise Arleth, Kåre Fundal, Nils Kruse  
Vejleder: Mogens Niss
- 254/93 Regressionsanalyse  
Materiale til et statistikkursus  
af: Jørgen Larsen
- 255/93 TID & BETINGET UAFHÆNGIGHED  
af: Peter Harremoës
- 256/93 Determination of the Frequency Dependent  
Bulk Modulus of Liquids Using a Piezo-  
electric Spherical Shell (Preprint)  
by: T. Christensen and N.B.Olsen
- 257/93 Modellering af dispersion i piezoelektriske  
keramikker  
af: Pernille Postgaard, Jannik Rasmussen,  
Christina Specht, Mikko Østergård  
Vejleder: Tage Christensen
- 258/93 Supplerende kursusmateriale til  
"Lineære strukturer fra algebra og analyse"  
af: Mogens Brun Heefelt
- 259/93 STUDIES OF AC HOPPING CONDUCTION AT LOW  
TEMPERATURES  
by: Jeppe C. Dyre
- 260/93 PARTITIONED MANIFOLDS AND INVARIANTS IN  
DIMENSIONS 2, 3, AND 4  
by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

- 261/93 OPGAVESAMLING  
Bredde-kursus i Fysik  
Eksamensopgaver fra 1976-93
- 262/93 Separability and the Jones  
Polynomial  
by: Lars Kadison
- 263/93 Supplerende kursusmateriale til  
"Lineære strukturer fra algebra  
og analyse" II  
af: Mogens Brun Heefelt
- 264/93 FÖTOVOLTAISK STATUSNOTAT 2  
af: Bent Sørensen
- 
- 265/94 SPHERICAL FUNCTIONS ON ORDERED  
SYMMETRIC SPACES  
To Sigurdur Helgason on his  
sixtyfifth birthday  
by: Jacques Faraut, Joachim Hilgert  
and Gestur Olafsson
- 266/94 Kommensurabilitets-oscillationer i  
laterale supergitre  
Fysikspeciale af: Anja Boisen,  
Peter Bøggild, Karen Birkelund  
Vejledere: Rafael Taboryski, Poul Erik  
Lindelof, Peder Voetmann Christiansen
- 267/94 Kom til kort med matematik på  
Eksperimentarium - Et forslag til en  
opstilling  
af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen  
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 268/94 Life is like a sewer ...  
Et projekt om modellering af aorta via  
en model for strømning i kloakrør  
af: Anders Marcussen, Anne C. Nilsson,  
Lone Michelsen, Per M. Hansen  
Vejleder: Jesper Larsen
- 269/94 Dimensionsanalyse en introduktion  
metaprojekt, fysik  
af: Tine Guldager Christiansen,  
Ken Andersen, Nikolaj Hermann,  
Jannik Rasmussen  
Vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 270/94 THE IMAGE OF THE ENVELOPING ALGEBRA  
AND IRREDUCIBILITY OF INDUCED REPRESENTATIONS OF EXPONENTIAL LIE GROUPS  
by: Jacob Jacobsen
- 271/94 Matematikken i Fysikken.  
Opdaget eller opfundet  
NAT-BAS-projekt  
vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 272/94 Tradition og fornyelse  
Det praktiske elevarbejde i gymnasiets  
fysikundervisning, 1907-1988  
af: Kristian Hoppe og Jeppe Guldager  
Vejledning: Karin Beyer og Nils Hybel
- 273/94 Model for kort- og mellemdistanceløb  
Verifikation af model  
af: Lise Fabricius Christensen, Helle Pilemann,  
Bettina Sørensen  
Vejleder: Mette Olufsen
- 274/94 MODEL 10 - en matematisk model af intravenøse  
anæstetikas farmakokinetik  
3. modul matematik, forår 1994  
af: Trine Andreasen, Bjørn Christensen, Christine  
Green, Anja Skjoldborg Hansen, Lisbeth  
Helmgard  
Vejledere: Viggo Andreasen & Jesper Larsen
- 275/94 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht  
2nd Edition  
by: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 276/94 Dispersionsmodellering  
Projektrapport 1. modul  
af: Gitte Andersen, Rehannah Borup, Lisbeth Friis,  
Per Gregersen, Kristina Vejro  
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 277/94 PROJEKTARBEJDSPÆDAGOGIK - Om tre tolkninger af  
problemorienteret projektarbejde  
af: Claus Flensted Behrens, Frederik Voetmann  
Christiansen, Jørn Skov Hansen, Thomas  
Thingstrup  
Vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 278/94 The Models Underlying the Anaesthesia  
Simulator Sophus  
by: Mette Olufsen(Math-Tech), Finn Nielsen  
(RISØ National Laboratory), Per Føge Jensen  
(Herlev University Hospital), Stig Andur  
Pedersen (Roskilde University)
- 279/94 Description of a method of measuring the shear  
modulus of supercooled liquids and a comparison  
of their thermal and mechanical response  
functions.  
af: Tage Christensen
- 280/94 A Course in Projective Geometry  
by Lars Kadison and Matthias T. Kromann
- 281/94 Modellering af Det Cardiovasculære System med  
Neural Puls kontrol  
Projektrapport udarbejdet af:  
Stefan Frello, Runa Ulsøe Johansen,  
Michael Poul Curt Hansen, Klaus Dahl Jensen  
Vejleder: Viggo Andreasen
- 282/94 Parallele algoritmer  
af: Erwin Dan Nielsen, Jan Danielsen,  
Niels Bo Johansen

- 283/94 Grænser for tilfældighed  
(en kaotisk talgenerator)  
af: Erwin Dan Nielsen og Niels Bo Johansen
- 284/94 Det er ikke til at se det, hvis man ikke  
lige ve' det!  
Gymnasie matematikkens begrundelsesproblem  
En specialerapport af Peter Hauge Jensen  
og Linda Kyndlev  
Vejleder: Mogens Niss
- 285/94 Slow coevolution of a viral pathogen and  
its diploid host  
by: Viggo Andreasen and  
Freddy B. Christiansen
- 286/94 The energy master equation: A low-temperature  
approximation to Bässler's random walk model  
by: Jeppe C. Dyre
- 287/94 A Statistical Mechanical Approximation for the  
Calculation of Time Auto-Correlation Functions  
by: Jeppe C. Dyre
- 288/95 PROGRESS IN WIND ENERGY UTILIZATION  
by: Bent Sørensen
- 289/95 Universal Time-Dependence of the Mean-Square  
Displacement in Extremely Rugged Energy  
Landscapes with Equal Minima  
by: Jeppe C. Dyre and Jacob Jacobsen
- 290/95 Modellering af uregelmæssige bølger  
Et 3. modul matematik projekt  
af: Anders Marcussen, Anne Charlotte Nilsson,  
Lone Michelsen, Per Mørkegaard Hansen  
Vejleder: Jesper Larsen
- 291/95 1st Annual Report from the project  
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH  
ENERGY SYSTEM  
an example of using methods developed for the  
OECD/IEA and the US/EU fuel cycle externality study  
by: Bent Sørensen
- 292/95 Fotovoltaisk Statusnotat 3  
af: Bent Sørensen
- 293/95 Geometridiskussionen - hvor blev den af?  
af: Lotte Ludvigsen & Jens Frandsen  
Vejleder: Anders Madsen
- 294/95 Universets udvidelse -  
et metaprojekt  
Af: Jesper Duelund og Birthe Friis  
Vejleder: Ib Lundgaard Rasmussen
- 295/95 A Review of Mathematical Modeling of the  
Controlled Cardiovascular System  
By: Johnny T. Ottesen
- 296/95 RETIKULER den klassiske mekanik  
af: Peder Voetmann Christiansen
- 297/95 A fluid-dynamical model of the aorta with  
bifurcations  
by: Mette Olufsen and Johnny Ottesen
- 298/95 Mordet på Schrödingers kat - et metaprojekt om  
to fortolkninger af kvantemekanikken  
af: Maria Hermannsson, Sebastian Horst,  
Christina Specht  
Vejledere: Jeppe Dyre og Peder Voetmann Christiansen
- 299/95 ADAM under figenbladet - et kig på en samfunds-  
videnskabelig matematisk model  
Et matematisk modelprojekt  
af: Claus Dråby, Michael Hansen, Tomas Højgård Jensen  
Vejleder: Jørgen Larsen
- 300/95 Scenarios for Greenhouse Warming Mitigation  
by: Bent Sørensen
- 301/95 TOK Modellering af træers vækst under påvirkning  
af ozon  
af: Glenn Møller-Holst, Marina Johannessen, Birthe  
Nielsen og Bettina Sørensen  
Vejleder: Jesper Larsen
- 302/95 KOMPRESSORER - Analyse af en matematisk model for  
aksialkompressor  
Projektrapport af: Stine Bøggild, Jakob Hilmer,  
Pernille Postgaard  
Vejleder: Viggo Andreasen
- 303/95 Masterlignings-modeller af Glasovergangen  
Termisk-Mekanisk Relaksation  
Specialerapport udarbejdet af:  
Johannes K. Nielsen, Klaus Dahl Jensen  
Vejledere: Jeppe C. Dyre, Jørgen Larsen
- 304a/95 STATISTIKNOTER Simple binomialfordelingsmodeller  
af: Jørgen Larsen
- 304b/95 STATISTIKNOTER Simple normalfordelingsmodeller  
af: Jørgen Larsen
- 304c/95 STATISTIKNOTER Simple Poissonfordelingsmodeller  
af: Jørgen Larsen
- 304d/95 STATISTIKNOTER Simple multinomialfordelingsmodeller  
af: Jørgen Larsen
- 304e/95 STATISTIKNOTER Mindre matematisk-statistisk opslagsværk  
indeholdende bl.a. ordforklaringer, resuméer og  
tabeller  
af: Jørgen Larsen

- 305/95 The Maslov Index:  
A Functional Analytical Definition  
And The Spectral Flow Formula  
  
By: B. Booss-Bavnbek, K. Furutani
- 306/95 Goals of mathematics teaching  
  
Preprint of a chapter for the forthcoming International Handbook of Mathematics Education (Alan J. Bishop, ed)  
  
By: Mogens Niss
- 307/95 Habit Formation and the Thirdness of Signs  
Presented at the semiotic symposium  
The Emergence of Codes and Intensions as a Basis of Sign Processes  
  
By: Peder Voetmann Christiansen
- 308/95 Metaforer i Fysikken  
  
af: Marianne Wilcken Bjerregaard, Frederik Voetmann Christiansen, Jørn Skov Hansen, Klaus Dahl Jensen, Ole Schmidt  
  
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og Petr Viscor
- 309/95 Tiden og Tanken  
En undersøgelse af begrebsverdenen Matematik udført ved hjælp af en analogi med tid  
  
af: Anita Stark og Randi Petersen  
  
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 
- 310/96 Kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse" (E1)  
  
af: Mogens Brun Heefelt
- 311/96 2nd Annual Report from the project  
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM  
  
by: Héléne Connor-Lajambe, Bernd Kuemmel, Stefan Krüger Nielsen, Bent Sørensen
- 312/96 Grassmannian and Chiral Anomaly  
  
by: B. Booss-Bavnbek, K.P. Wojciechowski
- 313/96 THE IRREDUCIBILITY OF CHANCE AND THE OPENNESS OF THE FUTURE  
The Logical Function of Idealism in Peirce's Philosophy of Nature  
  
By: Helmut Pape, University of Hannover
- 314/96 Feedback Regulation of Mammalian Cardiovascular System  
  
By: Johnny T. Ottesen
- 315/96 "Rejsen til tidens indre" - Udarbejdelse af a + b et manuskript til en fjernsynsudsendelse + manuskript  
  
af: Gunhild Hune og Karina Goyle  
  
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og Bruno Ingemann
- 316/96 Plasmaoscillation i natriumklynger  
Specialerapport af: Peter Meibom, Mikko Østergård  
Vejledere: Jeppe Dyre & Jørn Borggreen
- 317/96 Poincaré og symplektiske algoritmer af: Ulla Rasmussen  
Vejleder: Anders Madsen
- 318/96 Modelling the Respiratory System  
by: Tine Guldager Christiansen, Claus Dræby  
Supervisors: Viggo Andreassen, Michael Danielsen
- 319/96 Externality Estimation of Greenhouse Warming Impacts  
  
by: Bent Sørensen
- 320/96 Grassmannian and Boundary Contribution to the -Determinant  
  
by: K.P. Wojciechowski et al.
- 321/96 Modelkompetencer - udvikling og afprøvning af et begrebsapparat  
  
Specialerapport af: Nina Skov Hansen, Christine Iversen, Kristin Troels-Smith  
  
Vejleder: Morten Blomhøj
- 322/96 OPGAVESAMLING  
Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1996
- 323/96 Structure and Dynamics of Symmetric Diblock Copolymers  
PhD Thesis  
by: Christine Maria Papadakis
- 324/96 Non-linearity of Baroreceptor Nerves  
by: Johnny T. Ottesen
- 325/96 Retorik eller realitet ?  
Anvendelser af matematik i det danske Gymnasiums matematikundervisning i perioden 1903 - 88  
  
Specialerapport af Helle Pilemann  
Vejleder: Mogens Niss
- 326/96 Bevisteori  
Eksemplificeret ved Gentzens bevis for konsistensen af teorien om de naturlige tal  
af: Gitte Andersen, Lise Mariane Jeppesen, Klaus Frovin Jørgensen, Ivar Peter Zeck  
  
Vejledere: Bernhelm Booss-Bavnbek og Stig Andur Pedersen
- 327/96 NON-LINEAR MODELLING OF INTEGRATED ENERGY SUPPLY AND DEMAND MATCHING SYSTEMS  
  
by: Bent Sørensen
- 328/96 Calculating Fuel Transport Emissions  
by: Bernd Kuemmel

- 329/96 The dynamics of cocirculating influenza strains conferring partial cross-immunity and  
A model of influenza A drift evolution  
by: Viggo Andreasen, Juan Lin and Simon Levin
- 330/96 LONG-TERM INTEGRATION OF PHOTOVOLTAICS INTO THE GLOBAL ENERGY SYSTEM  
by: Bent Sørensen
- 331/96 Viskøse fingre  
Specialerapport af:  
Vibeke Orlien og Christina Specht  
Vejledere: Jacob M. Jacobsen og Jesper Larsen
- 
- 332/97 ANOMAL SWELLING AF LIPIDE DOBBELTLAG  
Specialerapport af:  
Stine Sofia Korremann  
Vejleder: Dorthe Posselt
- 333/97 Biodiversity Matters  
an extension of methods found in the literature on monetisation of biodiversity  
by: Bernd Kuemmel
- 334/97 LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM  
by: Bernd Kuemmel and Bent Sørensen
- 335/97 Dynamics of Amorphous Solids and Viscous Liquids  
by: Jeppe C. Dyre
- 336/97 PROBLEM-ORIENTATED GROUP PROJECT WORK AT ROSKILDE UNIVERSITY  
by: Kathrine Legge
- 337/97 Verdensbankens globale befolkningsprognose - et projekt om matematisk modellering  
af: Jørn Chr. Bendtsen, Kurt Jensen, Per Pauli Petersen  
Vejleder: Jørgen Larsen
- 338/97 Kvantisering af nanolederes elektriske ledningsevne  
Første modul fysikprojekt  
af: Søren Dam, Esben Danielsen, Martin Niss, Esben Friis Pedersen, Frederik Resen Steenstrup  
Vejleder: Tage Christensen
- 339/97 Defining Discipline  
by: Wolfgang Coy
- 340/97 Prime ends revisited - a geometric point of view -  
by: Carsten Lunde Petersen
- 341/97 Two chapters on the teaching, learning and assessment of geometry  
by Mogens Niis
- 342/97 LONG-TERM SCENARIOS FOR GLOBAL ENERGY DEMAND AND SUPPLY  
A global clean fossil scenario discussion paper prepared by Bernd Kuemmel  
Project leader: Bent Sørensen