

Langjarige fluctuaties in residureeksen van tijdreeksmodellen van grondwaterstandsfluctuaties

BTO 2010.051(s)
December 2010

KWR Watercycle Research Institute

BTO

KWR Watercycle Research Institute

Langjarige fluctuaties in residureeksen van tijdreeksmodellen van grondwaterstandsfluctuaties

BTO 2010.051(s)
December 2010

© 2010 KWR
Alle rechten voorbehouden.
Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen, of enig andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever.

Colofon

Titel
Langjarige fluctuaties in residureeksen van tijdreeksmodellen van grondwaterstandsfluctuaties

Opdrachtnummer
B111644

Onderzoeksprogramma
Verbetering en verbreding Tijdreeksanalyse

Projectmanager
Ir. Jan Willem Kooiman

Opdrachtgever
CvO

Kwaliteitsborger
Dr.Ir. Cees Maas

Auteur
Dr. Luit Jan Slooten

Verzonden aan
Dit rapport is verspreid onder BTO-participanten en is openbaar

Samenvatting

Voor u ligt het BTO-rapport over een onderzoek naar oorzaken van langjarige fluctuaties die vaak aangetroffen worden in residureeksen van tijdreeksmodellen van grondwaterstandsfluctuaties. Onder residureeks verstaan we het verschil tussen het gemeten en het berekende verloop van de grondwaterstand in een peilbuis.

Een voor de hand liggende oorzaak van langjarige fluctuaties zijn fouten in de "verklarende" reeksen van neerslag, verdamping, etc. Vaak zijn de gegevens die men daarvan heeft niet geheel representatief voor de plaats waar een peilbuis staat. Zo kan het meest nabije meteostation vele kilometers verderop staan. Gemiste regenbuien of ten onrechte in rekening gebrachte regenbuien werken in de berekende grondwaterstand net zo door als de buien die wel gevallen zijn, maar ze zijn in de gemeten grondwaterstand natuurlijk niet terug te vinden. Als het grondwatersysteem een geheugen heeft van meer dan één jaar - wat gemakkelijk voor kan komen - werken zulke fouten langjarig door in de residureeks en leiden ze dus tot langjarige fluctuaties.

Voor volledig gemiste verklarende reeksen geldt iets vergelijkbaars. In de praktijk wordt altijd wel rekening gehouden met neerslag en verdamping, dus gemiste reeksen zijn waarschijnlijk onttrekkingen of peilfluctuaties. De grondwaterstand reageert daar vaak ook traag op, zodat er inderdaad bij het missen van zulke reeksen trage fluctuaties in de residureeks kunnen optreden.

Trage fluctuaties kunnen ook een gevolg zijn van een fout in het tijdreeksmodel zelf. De impulsresponsfuncties die gebruikt worden voor neerslag, verdamping, onttrekkingen en peilfluctuaties zijn benaderingen van de werkelijke reactie van de grondwaterspiegel op een plotselinge kortdurende stress. Berekende pieken en dalen zijn daardoor soms wat te klein en dan weer wat te groot. Ze komen vaak ook wat te vroeg of te laat.

Als bij het opstellen van een tijdreeksmodel alleen neerslag en verdamping als verklarende reeksen zijn onderscheiden, dan kan op basis van het opgestelde tijdreeksmodel uitgerekend worden hoe snel de fluctuaties van de residureeks zouden moeten zijn. (Een eenvoudige en eenduidige maat voor de snelheid van fluctueren van een reeks is zijn autocorrelatie.) In de praktijk blijkt vaak dat een residureeks sneller fluctueert. Een aannemelijke verklaring is dan dat er nog andere oorzaken van de grondwaterstandsfluctuaties bestaan, die dus door de tijdreeksanalist gemist zijn. In het kader van dit onderzoek is een tool ontwikkeld om deze test uit te voeren. (De tool zelf komt straks ter sprake).
Als er bij het opstellen van een tijdreeksmodel naast neerslag en verdamping nog andere verklarende reeksen onderscheiden zijn, wordt het helaas te ingewikkeld om te voorspellen hoe snel de residureeks hoort te fluctueren. Voor die situatie hebben we geen diagnosemiddel gevonden.

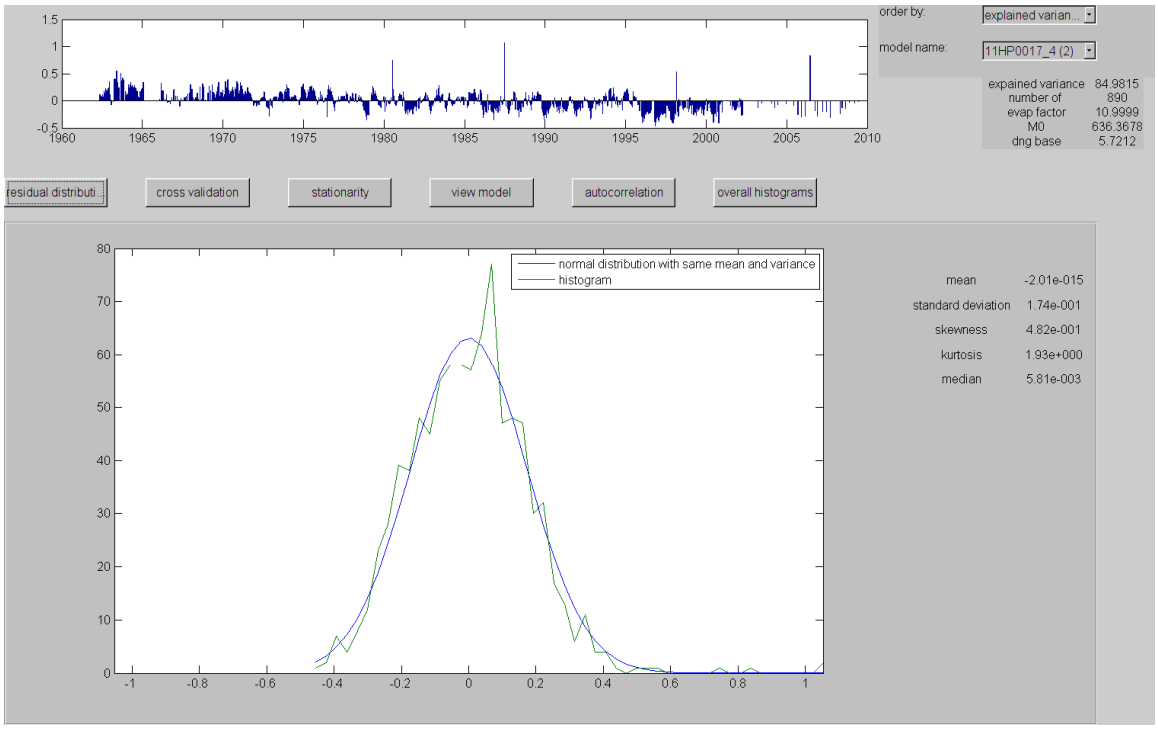
Zoals gezegd kunnen gemiste verklarende reeksen tot langjarige fluctuaties van de residureeks leiden. Als het gedrag van een gemiste verklarende reeks enigszins lijkt op dat van reeksen die wel onderscheiden zijn, dan kunnen de modelparameters die bij de wel onderscheiden reeksen gevonden worden onwaarschijnlijke waarden aannemen. Dit gebeurt met name als er een trend gemist wordt, wat vaak voorkomt. Een gemiste stijgende trend leidt vaak tot onrealistisch hoge waarden van het zogenaamde nulde moment van het model voor neerslag en verdamping. Tegelijk neemt dan de zogenaamde drainagebasis een onwaarschijnlijk lage waarde aan. Een gemiste dalende trend leidt doorgaans tot een te kleine waarde van het nulde moment van het model voor neerslag en verdamping, maar dit valt minder op. Niettemin is het scannen van tijdreeksmodellen op onwaarschijnlijke waarden van het nulde moment en van de drainagebasis een belangrijk hulpmiddel om gemiste trends op te sporen. De tool waarover we zojuist spraken biedt daarom de mogelijkheid om modellen te sorteren op de grootte van deze parameters. In trage systemen leiden gemiste trends eveneens tot langjarige fluctuaties van de residureeks, tenzij ze volledig correleren met
één van de reeksen die wel onderscheiden zijn (of een met een lineaire combinatie daarvan).
Als de gemiste trend een sprong vertoont wordt de residureeks niet-stationair, wat wil zeggen dat hij een stijgende of dalende trend laat zien. De tool biedt een elementaire test op stationariteit.

De afzonderlijke residuen van een residureeks hebben een gemiddelde waarde en daar omheen een zekere spreiding. Als een tijdreeksanalist alle relevante verklarende reeksen heeft meegenomen zal de kansverdeling van de residuen vrijwel normaal zijn, en dus symmetrisch. Is de verdeling scheef, dan is het erg waarschijnlijk dat er een verklarende reeks gemist is. Een gemiste onttrekking, bijvoorbeeld, leidt gemakkelijk tot pieken in de residureeks, met als resultaat een positieve scheefheid. Zulke gemiste reeksen blijken ook aanleiding te geven tot langjarige fluctuaties van de residureeks. De genoemde tool bevat een optie om de frequentieverdeling van de residuen te beoordelen. Als de verdeling niet scheef is, is helaas nog niet gezegd er geen verklarende reeksen gemist zijn.

Langjarige fluctuaties van een residureeks kunnen versterkt worden door een onregelmatige waarnemingsfrequentie. Door de komst van drukopnemers worden de recente delen van grondwaterstandsreeksen doorgaans veel vaker bemonsterd. Als het optimalisatiealgoritme alle waarnemingen even zwaar laat wegen kunnen de residuen in het minder frequent bemonsterde deel van de reeks onevenredig groot worden, wat ook weer tot langjarige fluctuaties kan leiden. Een optie is dan om aan de hoogfrequente waarnemingen minder gewicht toe te kennen. Als op ruis geoptimaliseerd wordt (in plaats van op residuen) doet dit probleem zich overigens niet voor.

Een algemene test om de bruikbaarheid van een model te beoordelen is kruisvalidatie. De tool heeft een optie om deze test uit te voeren. Daarbij worden de reeksen die gemodelleerd zijn gesplitst in twee gedeelten en per deel opnieuw gemodelleerd. In het ideale geval levert dat dezelfde modellen op. Als de twee deelreeksen duidelijk verschillende modellen opleveren is het systeemgedrag in de loop der tijd veranderd of zijn er verklarende reeksen gemist. Deze test staat min of meer los van de vraag of er langjarige fluctuaties optreden. (Omdat er opnieuw gemodelleerd moet worden vergt deze optie wat tijd).

De onderstaande figuur toont het gebruikersinterface van de tool, die ResidualAnalyser genoemd is. De ResidualAnalyser werkt op een bestaande Menyanthes projectfile. De knoppen geven aan welke tests uitgevoerd kunnen worden. Er is ook een mogelijkheid (helemaal rechts boven) om de modellen op allerlei kenmerken te sorteren.



Inhoud

Samenvatting **1**

Inhoud **3**

1 Introductie **5**

2 Langjarige fluctuaties in residureeksen **9**

2.1 Een statistische beschrijving van langjarige fluctuaties 9

2.2 Achtergrond Pirfict en Marquardt Levenberg 9

2.3 Mogelijke bronnen van fouten 10
2.3.1 Fouten in de invoer 10
2.3.2 Fouten in het model 10
2.3.3 Fouten in de parameters 11

2.4 Fouten in de invoer 11
2.4.1 Voorbeeld meetfouten in de verklarende reeks 12

2.5 Fouten in het model: ontbrekende verklarende reeks 15
2.5.1 De onbrekende reeks bevat een lineaire stijgende trend. Synthetisch voorbeeld 16
2.5.2 De onbrekende reeks bevat een lineaire dalende trend. Synthetisch voorbeeld 19
2.5.3 De ontbrekende reeks bevat een sprong. Synthetisch voorbeeld. 20
2.5.4 De onbrekende reeks bevat korte pieken. Synthetisch voorbeeld. 23

2.6 Fouten in de optimalisatie: een verkeerde weging van observaties kan tot langjarige fluctuaties leiden 24

3 Hulpmiddel voor analyse residureeksen **30**

4 Het Noordhollands Duinreservaat **34**

4.1 Geologie 34

4.2 Hydrologie 35

4.3 Meteorologie 38

5 Modellering Noordhollands Duinreservaat **40**

5.1 Stap 1: Modellering met neerslag en verdamping 40

5.2 Stap 2: het gebruik van de statistische indicatoren in het Noordhollands Duinreservaat 42
5.2.1 Identificeren van trends in het gebied op basis van extreme parameter-waarden 42
5.2.2 Scheefheid 45
5.2.3 Stationariteit 48

5.3 Autocorrelatie 49

6 Samenvatting en conclusies **54**

6.1 Samenvatting kort 54

© KWR

6.2 Conclusies 54

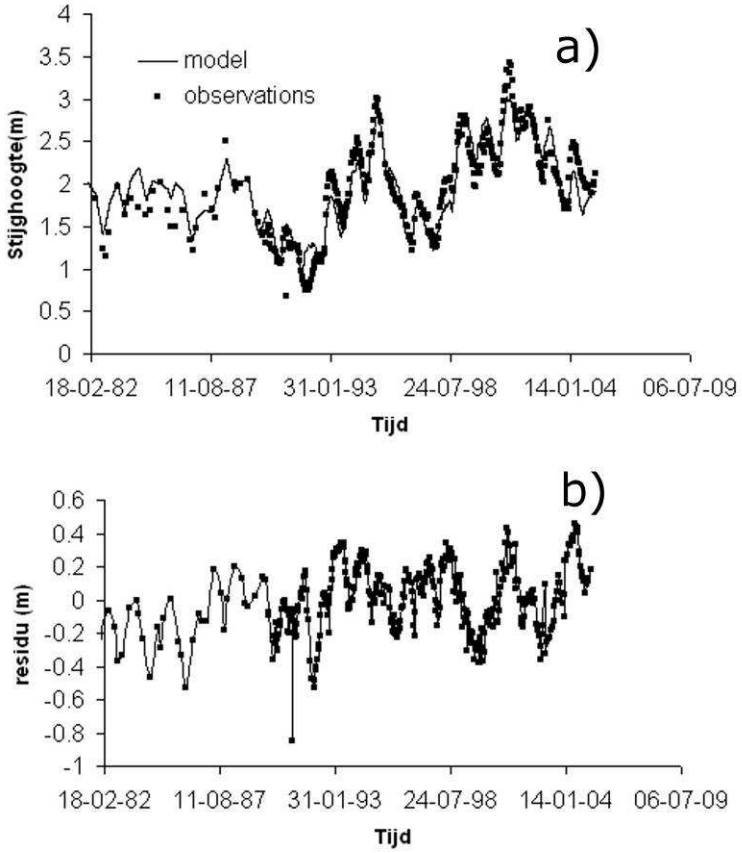
7 Referenties 56

I Appendix A: Statistische achtergrond 58

II Appendix B: Trends in het NH duinreservaat 61

III Appendix C: Technische documentatie Residual Analyzer 64

1 Introductie



Figuur 1 a) Als modelvoorspellingen en metingen samen geplot worden, kan men zien dat het model vaak niet precies klopt. De verschillen tussen de metingen en de voorspellingen worden residuen genoemd; deze zijn apart geplot in b) . Men kan in b) zien dat de residuen door de tijd heen "schommelingen" vertonen waarbij ze soms maandenlang of zelfs jarenlang positief of negatief zijn voor ze weer van teken veranderen.

Iedereen die wel eens een model gemaakt heeft, weet dat modeluitkomsten zelden of nooit precies met de werkelijkheid overeenkomen. Bijna altijd zijn er bij het modelleren aannamen gedaan en vereenvoudigingen doorgevoerd. De fouten in de modeluitkomsten (residuen) roepen ook vragen op: zijn ze onbelangrijk, of duiden ze juist op een structureel probleem in het model? Welke factoren hebben deze fouten veroorzaakt? In het algemeen kunnen deze vragen niet precies of met zekerheid beantwoord worden (de residuen zijn in het algemeen immers het gezamenlijk resultaat van veel verschillende onbekende factoren). Toch kan bestudering van de grootte van de residuen en van hun verdeling in ruimte en tijd waardevolle hypothesen opleveren over de oorzaken van de residuen. Dit geldt voor deterministische grondwater modellen, maar ook voor tijdreeksmodellen. In dit rapport wordt er dieper ingegaan op de relatie tussen modelfouten in tijdreeksmodellen, en de daaruit volgende patronen in de residuen. De vraagstelling werd geformuleerd naar aanleiding van de observatie dat er in de tijdreeksmodellen van veel peilbuizen in het Noordhollands Duinreservaat een specifiek patroon in de residuen waarneembaar is: langjarige fluctuaties. Langjarige fluctuaties zijn perioden van verschillende jaren waarin de residuen van een tijdreeksmodel van een grondwaterstandsreeks niet van teken veranderen. De in dit rapport geformuleerde hypothesen over de relaties tussen modelfouten en residupatronen worden dan ook getest op de modellen van het Noordhollands Duinreservaat.

De modelleertechniek waarmee gewerkt werd was Pirfict. Dit is, net als Box-Jenkins en MA, een goedkope en veelgebruikte manier om bijvoorbeeld inzicht te krijgen in hydrologische systemen, of om voorspellingen te doen betreffende gevolgen van geplande ingrepen.

Pirfict modellen hebben als uitvoer een gesimuleerde tijdreeks die de te verklaren, geobserveerde reeks voorstelt. Ook als invoer voor het model worden tijdreeksen gebruikt, zodanig gekozen door de gebruiker dat ze betrekking hebben op fysische fenomenen die van invloed kunnen zijn op de te modelleren reeks. Als men bijvoorbeeld de stijghoogte in een meetput wil modelleren, kan men als invoer tijdreeksen gebruiken van neerslag, verdamping, nabijgelegen onttrekkingen en de waterhoogte in rivieren en meren in de buurt.

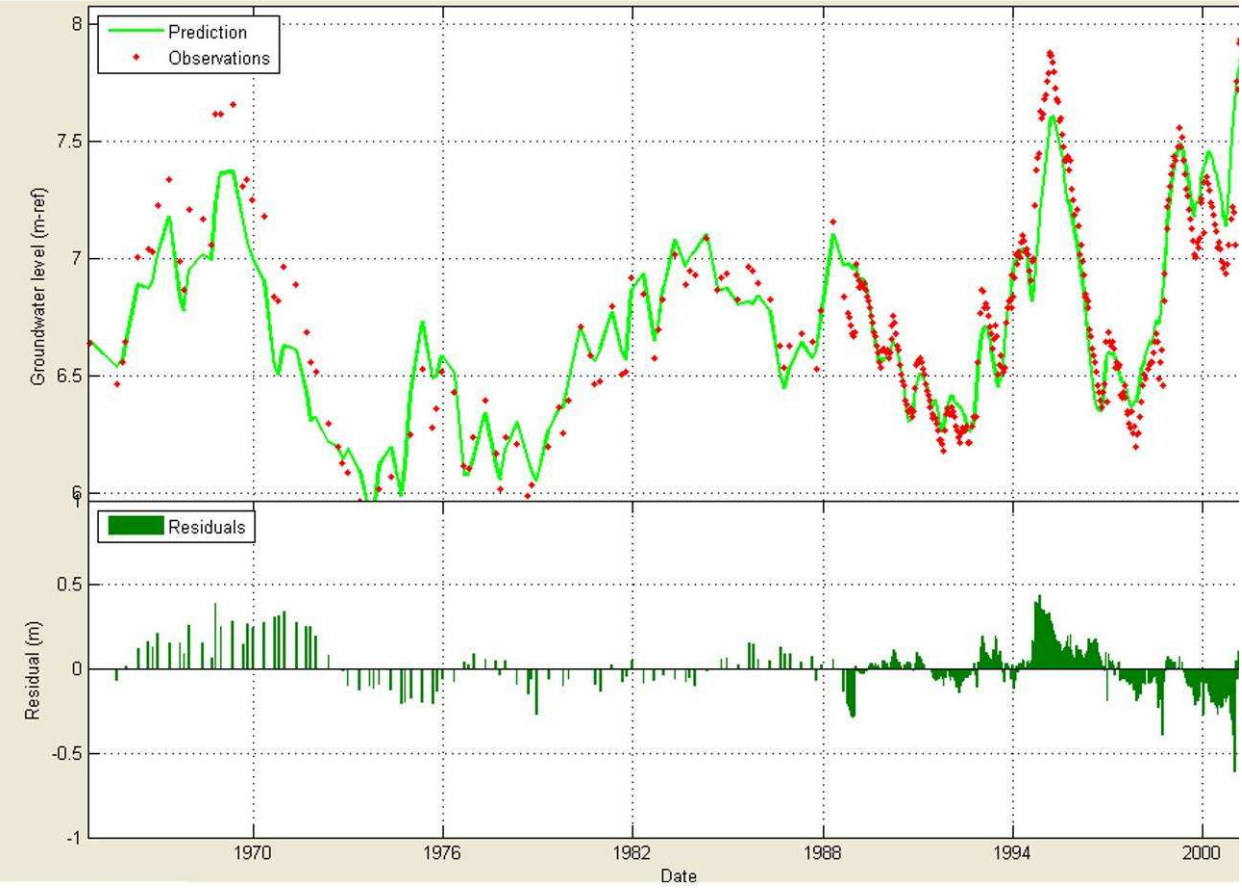
De residuen (het verschil tussen de gesimuleerde en de geobserveerde stijghoogtes) vormen natuurlijk ook een tijdreeks (Figuur 1) .

Het is belangrijk zich te realiseren dat de residuen niet gezien moeten worden als een 'post-processing' resultaat dat na het modelleerwerk berekend wordt. Integendeel, tijdens het modelleerproces worden de residuen veelvuldig berekend en geanalyseerd. Ze vertellen ons immers waar en wanneer het model goed functioneert en waar en wanneer niet. Dit geeft inzicht in de sterke en zwakke plekken van het model. Ook als de modelkalibratie automatisch gebeurt, spelen de residuen er een rol bij. De meest gebruikte automatische modelkalibratiemethoden kijken naar twee statistieken van de gehele residu-populatie: ten eerste, de som van de kwadraten van de residuen (dit minimaliseren ze) en ten tweede, het gemiddelde van alle residuen (het model wordt zo gekalibreerd dat dit 0 is).

Dit betekent onder andere dat modelfouten, residuen en de gevonden optimale parameters onderling verband houden. Als we bijvoorbeeld een systeem met neerslag en verdamping alleen met neerslag modelleren, ontstaan er residuen. Het optimalisatie algoritme probeert dan de aan neerslag gerelateerde parameters zo aan te passen dat deze residuen geminimaliseerd worden. Het resultaat is een serie residuen en een fout in de gevonden neerslagparameters.

In dit rapport wordt eerst getracht een relatie te leggen tussen verschillende mogelijke modelfouten enerzijds, en de eruit voortvloeiende patronen in de residuen en de gevonden modelparameters anderzijds. Hierbij wordt speciale aandacht besteed aan de verdeling van de residuen in de tijd. Vervolgens worden tests ontwikkeld om te kijken of deze patronen aanwezig zijn in een residureeks. Ten slotte wordt geprobeerd om deze relatie om te draaien: kunnen we, gegeven een patroon in de residuen, ontdekken welke modelfout eraan ten grondslag ligt? Om dit te testen werd een dataset van grondwaterstanden van het Noordhollands Duinreservaat gebruikt. Er werd geprobeerd om hier, met behulp van de ontwikkelde tests, modelfouten te vinden en modellen te verbeteren.

De reden dat juist het Noordhollands Duinreservaat werd gebruikt is dat bij eerdere pogingen dit gebied te modelleren, er in veel modellen patronen van langjarige fluctuaties in de residu-tijdreeksen werden gevonden. Langjarige fluctuaties zijn periodes van verschillende jaren waarin de residuen geen tekenwisseling ondergaan (met andere woorden, de modeluitkomsten onder- of overschatten de werkelijkheid structureel gedurende een periode van meerdere jaren). Een voorbeeld hiervan is te zien in Figuur 2.



Figuur 2 Langjarige fluctuaties. Merk op dat in de periode 1966-1973 alle modelvoorspellingen te laag uitvielen. In de periode 1973-1976 vielen de modelvoorspellingen juist te hoog uit.

2 Langjarige fluctuaties in residureeksen

2.1 Een statistische beschrijving van langjarige fluctuaties

Een eerste stap naar een beter begrip van langjarige fluctuaties is de kwantificering ervan: het beschrijven van de langjarige fluctuaties met enkele statistieken. Dit is echter niet eenvoudig: zoals Figuur 2 laat zien, bevat de getoonde residureeks zowel korte als lange fluctuaties, en varieert ook de amplitude van de fluctuaties aanzienlijk.

In deze studie werden residureeksen beschreven met 2 statistieken. De eerste hiervan is de verklaarde variantie. De verklaarde variantie is het relatieve verschil tussen de variantie van de observaties en de variantie van de residuen, en wordt berekend als

$$EVP = \frac{\sigma^2_{obs(t)} - \sigma^2_{resi(t)}}{\sigma^2_{obs(t)}} * 100\%$$

Hierin zijn $\sigma^2_{resi(t)}$ en $\sigma^2_{obs(t)}$ respectievelijk de varianties van de residureeks en van de geobserveerde reeks. Merk op dat een constante afwijking tussen metingen en de voorspellingen geen invloed heeft op de verklaarde variantie. Daarmee beschrijft de verklaarde variantie vooral de amplitude van de fluctuaties van de residureeks. Hoe groter de amplitude van de fluctuaties, hoe lager de verklaarde variantie.

De tweede soort beschrijvende statistieken zijn de *runs statistics*. *Runs statistics* wordt gebruikt om reeksen te vereenvoudigen. In plaats van het hele scala aan waarden te bekijken, wordt er alleen gekeken of de waarde positief of negatief is. Een interval begrensd door 2 tekenwisselingen word een *run* genoemd. Er wordt dan gekeken hoe lang de runs zijn.

De volgende runs-statistieken werden gebruikt:

- De lengte (in dagen) van de langste run van de reeks.
- De gemiddelde lengte (in dagen) van de runs van de reeks, om de langste run in een context te plaatsen.

De in Figuur 2 getoonde reeks heeft een verklaarde variantie van 91%, een langste run van 2450 dagen en een gemiddelde run-lengte van 251 dagen.

2.2 Achtergrond Pirfict en Marquardt Levenberg

Om inzicht te krijgen in het proces dat leidt tot residuen is het belangrijk te begrijpen hoe optimalisatie en model werken en op elkaar inwerken. We beperken ons hier tot één type model (Pirfict, beschreven in Asmuth et al, 2002, en in Asmuth en Bierkens, 2005) en één formulering van het kalibratieprobleem.

Het Pirfict model heeft als invoer één of meer (verklarende) tijdreeksen, en als uitvoer één tijdreeks. Het verkrijgen van de uitvoer vertrekkend van de invoer gebeurt in 2 stappen.
Eerst wordt iedere invoerreeks p_i geconvolueerd met een transferfunctie R_i (ook wel impulsrespons genaamd). Dit levert de component $h_i^*(t)$ van de stijghoogte op die toe te schrijven is aan de betreffende verklarende reeks (vergelijking 1) . Daarna worden de verschillende componenten opgeteld (vergelijking 2) en wordt ook een constante d toegevoegd.

$$h_i^*(t) = \int_{-\infty}^{t} p_i(\tau) R_i(t-\tau) d\tau \quad (1)$$

$$h(t) = \sum_i h_i^*(t) + d \quad (2)$$

De transferfuncties (impulsrespons functies) R hebben een van te voren gekozen wiskundige vorm, bijvoorbeeld

$$R = A \frac{a^n t^{n-1} e^{-at}}{\Gamma(n)} \quad (3)$$

waarbij A, n, en a modelparameters zijn en Γ de gamma functie. De parameters worden zo gekozen dat de fit tussen geobserveerde stijghoogten en gemodelleerde stijghoogten zo goed mogelijk is. Het vinden van de geschikte parameters is in dit onderzoek een optimalisatieprobleem, dat als volgt geformuleerd is:

Laat F een doelfunctie zijn, die berekend wordt als de verklaarde variantie:

$$F = \frac{\sigma^2_{obs(t)} - \sigma^2_{resi(t)}}{\sigma^2_{obs(t)}} * 100\% \quad (4)$$

Aangezien F gemaximaliseerd moet worden en op het minimum van een functie diens afgeleide 0 is, zoeken we een punt waar

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad (5)$$

In deze uitdrukking is **x** de vector van modelparameters. De methode van Marquardt-Levenberg, die in Menyanthes gebruikt wordt, past een combinatie van Newton's methode en de methode van het steilste pad toe op vergelijking (5) om het maximum van (4) te vinden.

2.3 Mogelijke bronnen van fouten

Er zijn verschillende oorzaken te noemen die ervoor kunnen zorgen dat de in de vorige paragraaf besproken methodologie tot de vorming van residuen, eventueel met langjarige fluctuaties, kan leiden. Grofweg kunnen we deze fouten indelen als fouten in de invoer, fouten in het model en fouten in de optimalisatie, dus in de parameters.

2.3.1 Fouten in de invoer

Er kunnen meetfouten in de invoerreeksen zitten. Als de invoerreeksen bijvoorbeeld neerslag en verdamping zijn die kilometers verderop gemeten zijn, dan kan het zijn dat de gegevens van het meetstation niet precies de daadwerkelijke neerslag en verdamping in het veld weergeven. Deze fouten kunnen incidenteel en onafhankelijk, maar ook gecorreleerd zijn.

2.3.2 Fouten in het model

Het kan zijn dat niet alle invoerreeksen die in werkelijkheid van belang zijn, zijn geïdentificeerd en in het model zijn opgenomen. Het kan dus zijn dat we een of meer invoerreeksen missen. Een voorbeeld hiervan kan een niet-gedocumenteerde onttrekking zijn die wel de stijghoogte beïnvloedt.

Een andere modelfout betreft de generische vorm van de impulsresponfunctie. Het kan zijn dat deze voor geen enkele parametervector een goede benadering oplevert van de werkelijke reactie van het systeem. Dit kan bijvoorbeeld optreden in systemen met meerdere lagen, gescheiden door aquitards van

variërende dikte. Het effect van een onttrekking komt dan met verschillende vertragingen en langs verschillende verbindingen bij een meetput aan. Dan is er een impulsrespons functie nodig met verschillende maxima. Alle functies die te maken zijn door verschillende parameters in vergelijking (3) te stoppen, hebben echter maar 1 maximum[1].
Nog een foutenbron niet-lineair gedrag van het systeem. Er zijn tal van geohydrologische situaties waarin de relatie tussen invoer en uitvoer ingewikkelder wordt dan vergelijkingen (1) en (2) toelaten. Voorbeelden zijn de relatie tussen verzadiging en neerslag in de onverzadigde zone, en de relatie tussen neerslag en stijghoogte in een systeem waarin verschillende afvoermechanismen in werking treden bij verschillende stijghoogten (de zogenaamde drempel-niet-lineariteit). Ook komt het voor dat afwateringmiddelen niet plotseling maar geleidelijk droogvallen.

Een andere modelfout wordt veroorzaakt door verandering in de tijd van de aard van het gemodelleerde systeem. Het is mogelijk dat de impuls response van het systeem verandert als bijvoorbeeld door aanleg van een tunnel het hydraulisch contact tussen een put en een grote aquifer afgesneden wordt, of als de hydraulische eigenschappen van de bodem veranderen door samendrukking veroorzaakt door bebouwing. In dat geval heeft men verschillende impulsrespons functies nodig om het systeem voor en na de verandering te modelleren.

Deze laatste drie mogelijke modelfouten (verkeerde IR functie; niet lineariteit en tijdsveranderlijke IR functies) werden echter niet onderzocht in dit rapport; wat fouten in het model betreft *ging de aandacht uit naar het effect van ontbrekende reeksen*.

2.3.3 Fouten in de parameters
Fouten in de parameters kunnen wederom verschillende oorzaken hebben. Ten eerste kan het zijn dat het optimalisatiealgoritme niet naar de optimale oplossing geconvergeerd is. In de praktijk lijkt dit echter niet vaak te gebeuren, omdat het systeem vaak zeer over-gedetermineerd is (er zijn vaak veel meer gegevens dan parameters, bijvoorbeeld 400 stijghoogtes en 4 parameters). Bovendien worden eventuele gevoeligheidsproblemen voorkomen door de logaritmes van de parameters te schatten in plaats van de parameters zelf.

Een tweede, subtieler probleem treedt op als aannames gemaakt in de uitdrukking voor de doelfunctie (vergelijking 4) niet opgaan. Deze aannames zijn dat alle waarnemingen even betrouwbaar zijn; en dat alle eventuele meetfouten onafhankelijk zijn.

2.4 Fouten in de invoer
Fouten in de verklarende reeksen kunnen incidenteel of structureel zijn, en men kan in feite al in vergelijking (1) zien hoe zulke fouten kunnen doorwerken in de uiteindelijke berekende stijghoogte. Om dit te illustreren schrijven we vergelijking 1 uit, voor een model met één verklarende reeks. Deze keer bevat de verklarende reeks een tijdsafhankelijke meetfout $e(t)$.

$$h_i^*(t) = \int_{-\infty}^{t} (p_i(\tau) + e_i(\tau)) R_i(t-\tau) d\tau = \int_{-\infty}^{t} p_i(\tau) R_i(t-\tau) d\tau + \int_{-\infty}^{t} e_i(\tau) R_i(t-\tau) d\tau \quad (6)$$

Net zoals eventuele scherpe pieken in de verklarende reeks door het gebruik van convolutie uiteindelijk hele brede pieken in de stijghoogte kunnen opleveren, zo kunnen incidentele fouten (pieken in e) door diezelfde convolutie brede pieken in de residuen opleveren.

Een belangrijke vraag is of er een relatie is tussen de autocorrelatie van e en die van de residuen. Men kan aantonen dat als e een stationaire reeks is met een autocorrelatiefunctie K_x, en het model is een convolutie van één reeks, dan is de autocorrelatie K_r van de residuen gelijk aan (Gray en Davisson, 2004):

[1] *Menyanthes bevat ook andere families van impulsrespons functies, maar ze kennen alle maar één piek*.

$$K_h(\Delta t) = \int\int K_x(\Delta t - a + b)R(a)R(b)dadb \qquad (7)$$

Hierin is R weer de transferfunctie of impulsrespons functie. Met andere woorden, de autocorrelatie van de uitvoer is gelijk aan de autocorrelatie van de invoer, die *dubbel geconvolueerd* is met de IR functie. Dit betekent dat we, zodra we de IR functie gekalibreerd hebben, de theoretische autocorrelatie van de uitvoer kunnen berekenen als we de autocorrelatie van de invoer weten.

Zoals gezegd kan men ook tijdreeksanalyse toepassen op de residureeksen. Ook hiervan kan een autocorrelatie functie berekend worden met vergelijking 4 , als de reeks stationair is.
Om te kijken of de verklaring van de aanwezigheid van de residuen gezocht kan worden bij meetfouten van de invoerfunctie, kan men berekenen wat het effect van zulke meetfouten zou zijn op de autocorrelatie van de residuen. Vergelijking 7 leert ons dat de kleinste autocorrelatie in de residuen optreed als de autocorrelatie van de foutenreeks e ook minimaal is (met andere woorden, als het een Dirac Delta-functie is). De Dirac Deltafunctie vereenvoudigt convoluties, waardoor de dubbele convolutie van (7) een enkele wordt:

$$K_h(\Delta t) = \int R(t)R(t - \Delta t)dt \qquad (8)$$

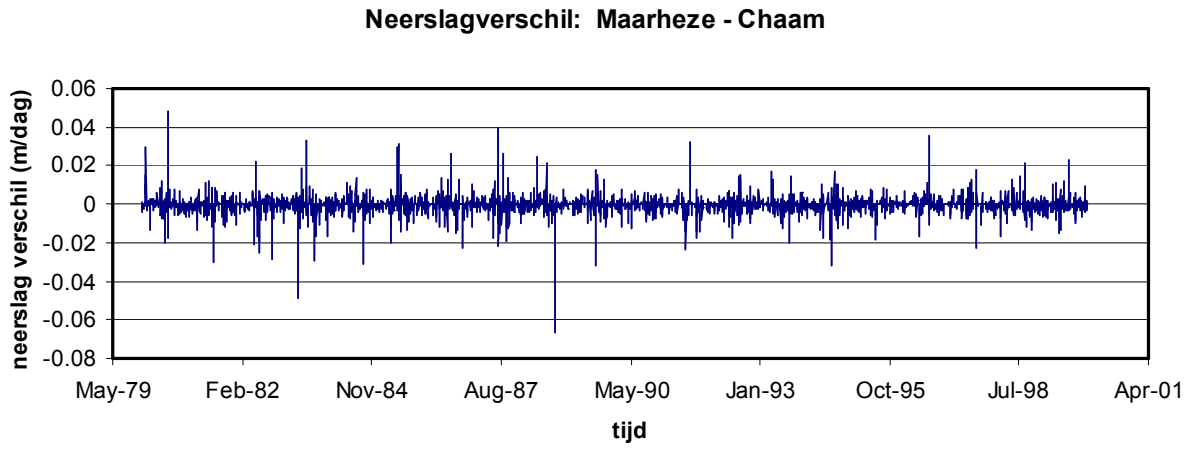
Ofwel: als de verklarende reeks een Dirac Delta-functie is, is de autocorrelatie functie van de uitvoerreeks de convolutie van de IR functie met zichzelf.

Als de functie R overal positief is, zoals gebruikelijk is bij IR functies van neerslag, dan is ook de autocorrelatie berekend met (8) overal positief, en in dat geval levert iedere ruis op de invoer een positieve autocorrelatie van de residuen op.

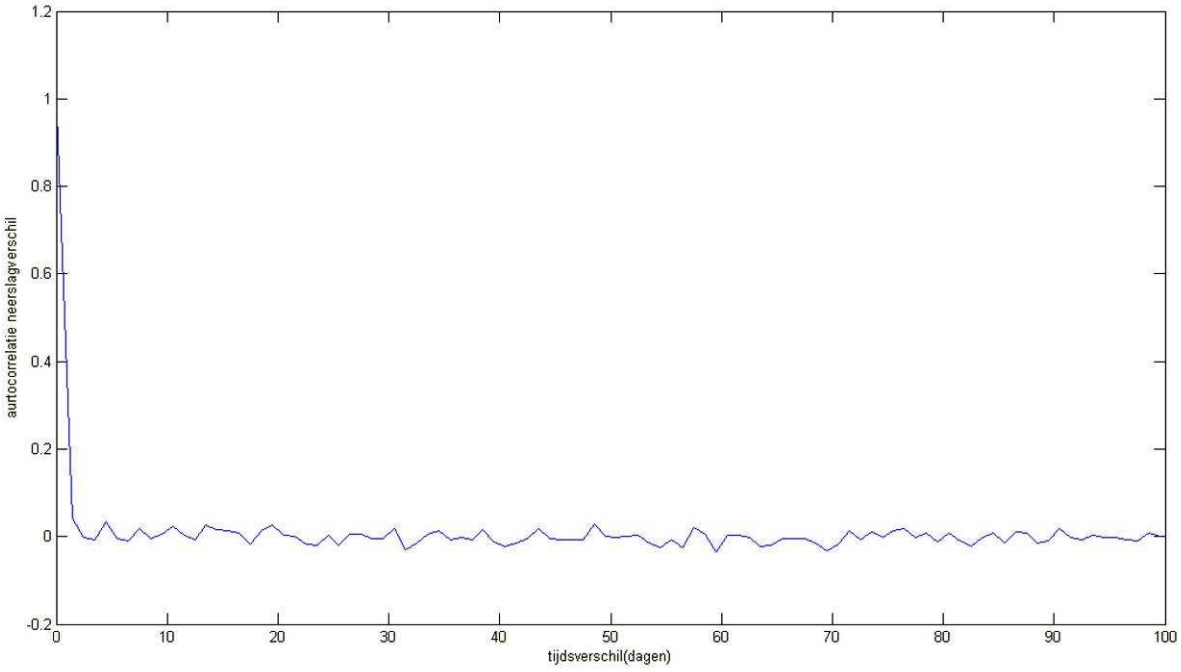
2.4.1 Voorbeeld meetfouten in de verklarende reeks

Om te illustreren hoe meetfouten in de neerslag zich vertalen in modelresiduen beschouwen we een experiment waarin er kunstmatig fouten worden toegevoegd aan een verklarende reeks. Het experiment bestaat uit 2 stappen:

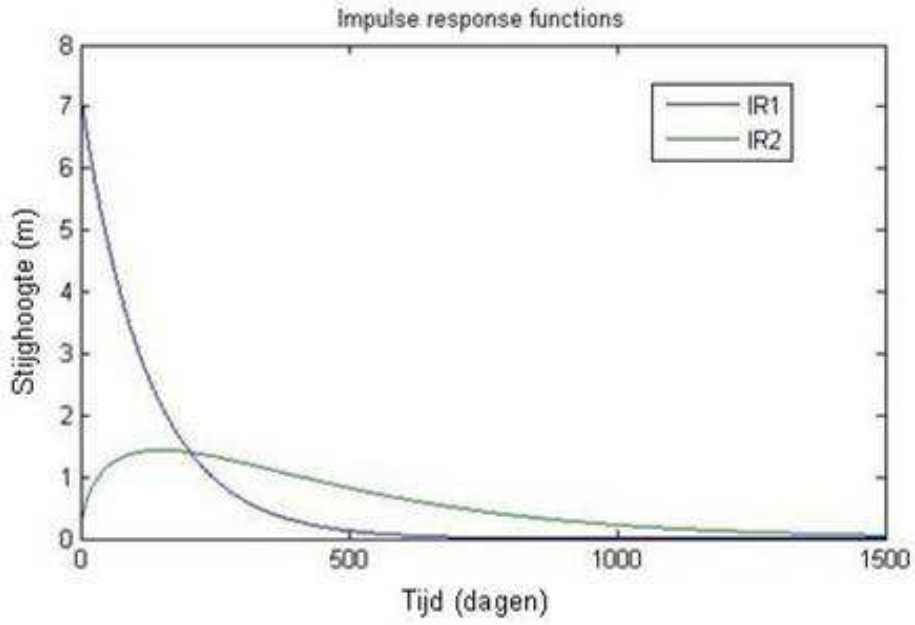
1. De neerslagreeksen van de KNMI neerslagstations Maarheze en Chaam werden van elkaar afgetrokken. Het resultaat is een serie die de fout bevat, die gemaakt zou worden als we de reeks van Chaam zouden gebruiken terwijl eigenlijk de serie van Maarheze correct is. De serie staat afgebeeld in Figuur 3.
2. Vervolgens werd de convolutie van deze verschillen-serie met een IR functie berekend, voor een systeem met een trage respons en voor een systeem met een snelle respons. Het resultaat is het residu dat veroorzaakt zou worden door een dergelijke foutenbron, getoond in Figuur 6. De langzame en snelle respons IR functies zijn beiden Pearson 3 functies met de parameters van Tabel 1. De functies zelf staan afgebeeld in Figuur 5.



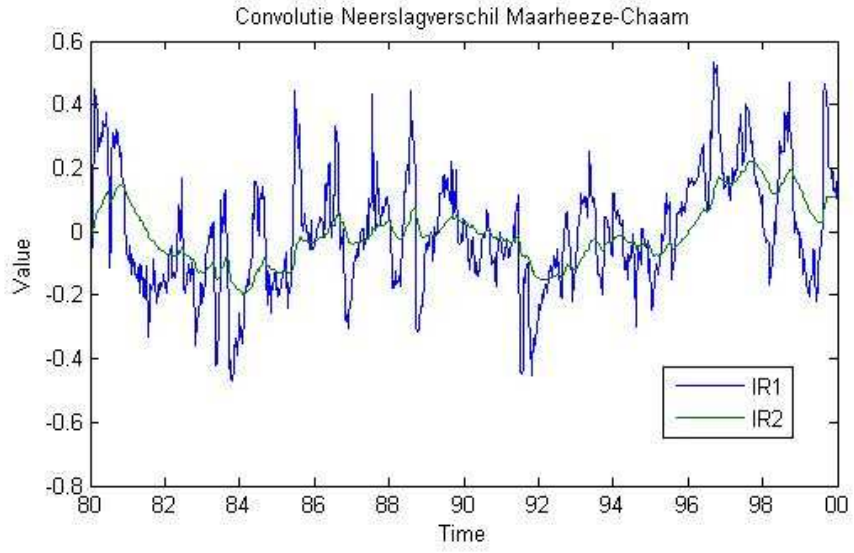
Figuur 3: het verschil tussen de neerslagstations Chaam en Maarheze. Dit is de tijdreeks van de fout die gemaakt zou worden als de neerslag in Chaam gebruikt zou worden om een peilbuis in Maarheze te modelleren.



Figuur 4 : autocorrelatie van het neerslagverschil. Het is bijna een dirac-delta functie!



Figuur 5: Deze twee IR functies waren uitgekozen om een langzaam systeem (IR2) en een snel systeem (IR1) mee te modelleren. De IR functie geeft het verloop van de stijghoogte na een plotselinge toediening van een waterschijf van 1 meter.

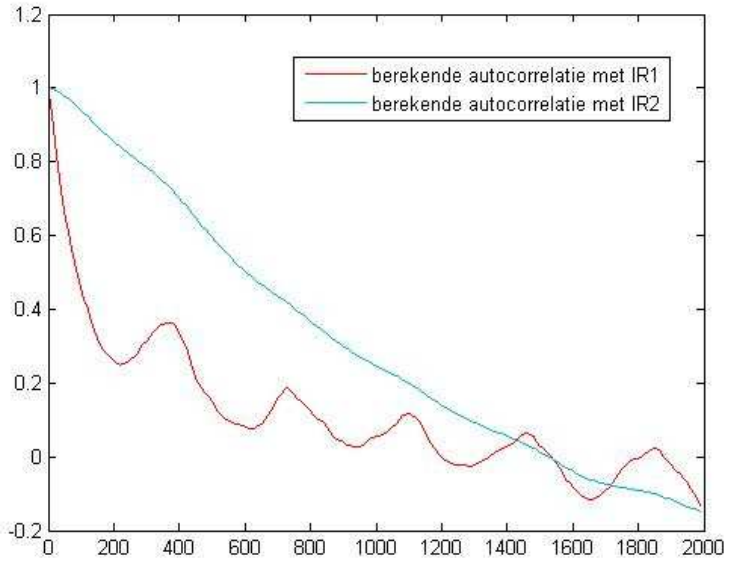


Figuur 6 Het resultaat van de convolutie van het neerslagverschil tussen Maarheeze en Chaam met 2 IR functies, waarvan er één (IR2) een langzaam systeem voorstelt en één een snel systeem (IR1). Deze convolutie is direct het residu dat ontstaat door de fout getoond in figuur 1.

Tabel 1 De parameters van de IR functies die gebruikt werden

Parameter	IR1	IR2
M0	900	900
A	0.0033	0.008
N	1.5	1

De autocorrelatie curven die behoren bij de residuen worden getoond in de volgende figuur:



Figuur 7 de berekende autocorrelatie van de residureeksen die verkregen warden met IR1 en IR2. Vergelijk dit met de autocorrelatie van Figuur 4.

In Figuur 7 is te zien dat de autocorrelatie functie van het "snelle" systeem eerder een lage waarde bereikt dan die van het "trage" systeem. Wel kunnen we oscillaties zien in de autocorrelatie functie van IR1, en wordt de autocorrelatie functie van IR2 negatief aan het einde. Mogelijk is dit omdat het aantal punten dat gebruikt werd om de curve te berekenen zeer groot moet zijn om betrouwbare autocorrelatie curven te verkrijgen. Dit probleem wordt geïllustreerd in appendix A.

Het experiment laat zien dat alleen al door fouten in de neerslag langjarige correlatie in de residuen kan ontstaan. Als een IR functie een groter gewicht geeft aan oudere elementen van de invoerreeks (dus als de neerslag meer tijd nodig heeft om geheel afgevoerd te worden), komt dit tot uitdrukking in de autocorrelatie van de residuen. In "snelle" systemen zijn ook de residuen minder gecorreleerd.

2.5 Fouten in het model: ontbrekende verklarende reeks

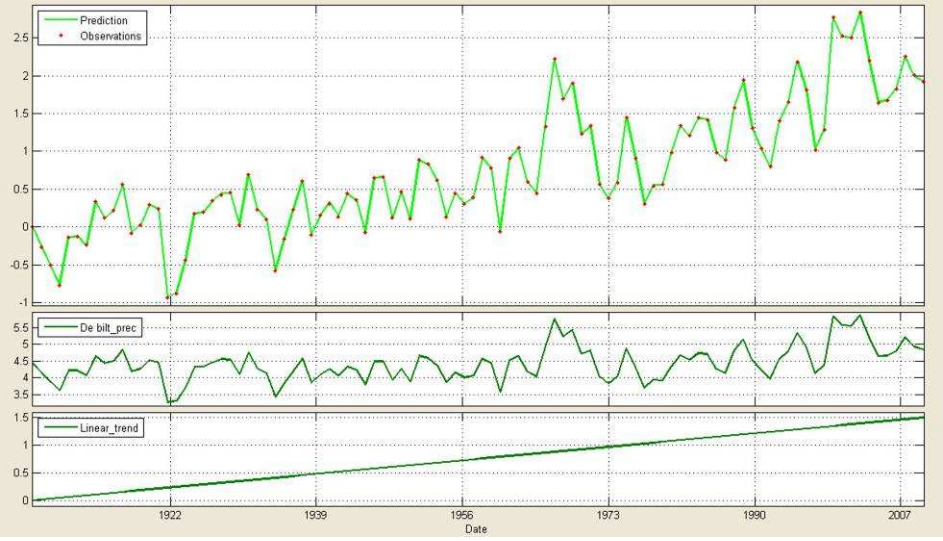
Als in een pirfict model een verklarende reeks ontbreekt die in het werkelijke systeem van belang is, ontstaan er model-residuen. Het is belangrijk zich te realiseren dat het optimalisatiealgoritme dan automatisch probeert deze residuen te minimaliseren door de impuls responsfuncties van de wél gebruikte verklarende reeksen zodanig aan te passen dat het effect van de ontbrekende reeks zo goed mogelijk gereproduceerd wordt. Deze impuls responsfuncties verliezen dan een stuk van hun fysische betekenis, en het model boet in aan voorspellend vermogen. Zoals we zullen zien, kan dit zelfs gebeuren als de ontbrekende reeks geen enkele correlatie heeft met de wel aanwezige invoerreeksen.

Juist door dit corrigerend gedrag door het optimalisatiealgoritme kan het zijn dat de verklaarde variantie van een model hoog is, de fit visueel aantrekkelijk, en dat de voorspellende waarde van het model toch laag is.

In deze sectie wordt de interactie tussen optimalisatie, residuen en parameters stap voor stap bestudeerd aan de hand van enkele simpele voorbeelden. Eerst wordt er gekeken naar wat er gebeurt als een aanwezige stijgende trend niet wordt gemodelleerd; daarna volgen een dalende trend, een sprong en een reeks met korte, scherpe pieken.

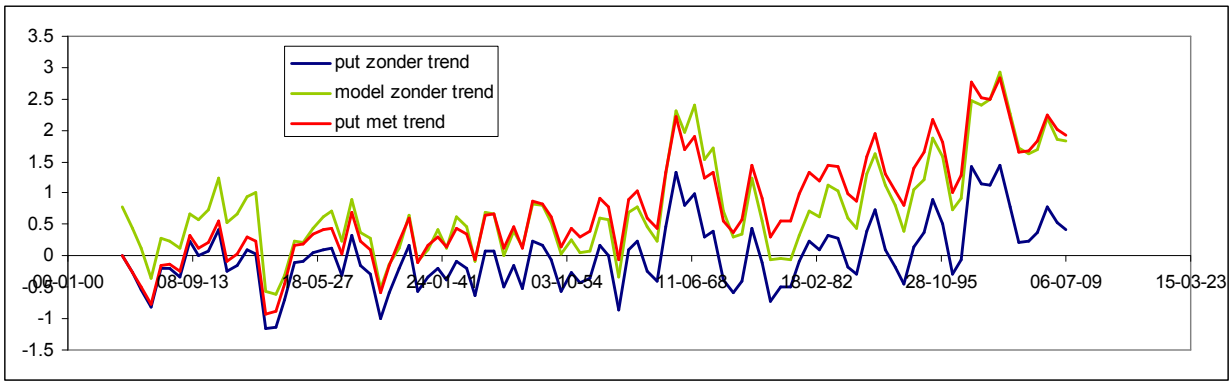
2.5.1 De onbrekende reeks bevat een lineaire stijgende trend. Synthetisch voorbeeld

Het volgende experiment bestudeert wat er gebeurt als een aanwezige stijgende trend niet gemodelleerd wordt. De uitgangssituatie is een put waarvan de stijghoogte bepaald wordt door een regionale stijgende tendens, en door de reactie op neerslag, zoals aangegeven in Figuur 8.



Figuur 8 een synthetisch gegenereerd voorbeeld van een put die beïnvloed wordt door neerslag en door een stijgende regionale trend. De bovenste lijn is de totale stijghoogtetijdreeks. De middelste serie is de component door de neerslag en de onderste, de regionale trend component.
Uit de bovenste tijdreeks zijn een aantal observaties genomen. Deze zijn, zonder toevoeging van ruis, gebruikt voor het kalibreren van een model zonder deze lineaire trend.

Als men nu een model van deze put kalibreert zonder de lineaire trend te gebruiken, krijgt men de stijgende tendens toch enigszins te zien (zie de lijn "model zonder trend" in Figuur 9).

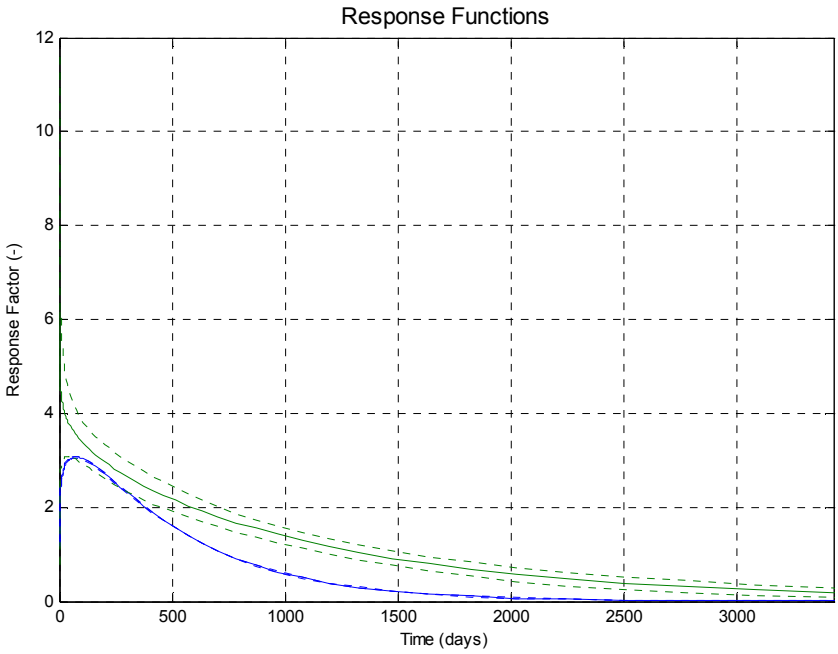


Figuur 9 De rode lijn is de "werkelijke " situatie. Het is de oplossing die eerder in Figuur 8 te zien was. Als de lineair stijgende trend niet aanwezig zou zijn, zou de stijghoogte in de put de blauwe lijn volgen. Echter, als we een model kalibreren met de observaties van de rode lijn maar zonder een lineaire trend te gebruiken, krijgen we niet de blauwe maar de gele lijn. Het model neemt dus tevens de trend voor zijn rekening.

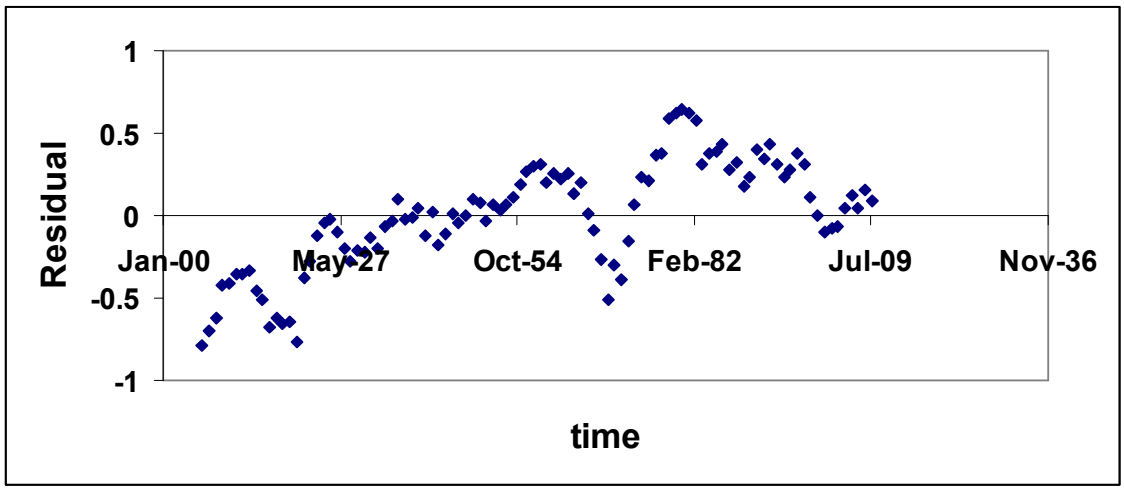
Het kalibratiealgoritme heeft de drainagebasis en de impuls responsfunctie van de neerslag dus zodanig aangepast dat de stijgende tendens die in werkelijkheid geobserveerd wordt min of meer terug te vinden is in de gesimuleerde waarden. De ontstane residuen laten langjarige fluctuaties zien (Figuur 11).

Het is leerzaam om te bestuderen hoe het optimalisatie-algoritme hierin is geslaagd. Menyanthes heeft een IR functie gekozen met een grotere massa, die ook meer gewicht geeft aan oudere neerslagen. Dit zou normaal gezien tot veel te hoge stijghoogtes leiden, maar om dat te voorkomen is de drainagebasis naar beneden bijgesteld(van -4.4 m naar -8m in dit voorbeeld), waardoor het gemiddelde residu 0 blijft. Zoals we in het laatste hoofdstuk zullen zien zijn er nog veel extremere voorbeelden van dit effect te vinden in enkele modellen in het Noordhollands Duinreservaat. (Het limietgeval is een IR functie die een horizontale lijn wordt. Een altijd positieve grootheid zoals neerslag convolueren met een dergelijke IR functie levert een eeuwig stijgende trend op. De drainagebasis wordt dan een extreem laag getal).[2]

[2] *M.i. is het ook als volgt te verklaren: als een invoerreeks een trend bevat, kan die trend misbruikt worden om een eventueel gemiste trendmatige invoerreeks te compenseren. (Kees Maas)*



Figuur 10: De blauwe lijn laat de goede IR functie zien; de groene lijn is de IR functie verkregen door het kalibreren van de stijghoogte in de betreffende put zonder de lineaire trend te gebruiken.



Figuur 11. De residuen van ons model zonder de trendlijn. Hoewel het gemiddelde over de hele tijdreeks 0 is, is het gemiddelde over kortere stukken van de tijdreeks niet 0. Zoals we later zullen zien is dit het kenmerk van een niet-stationaire verdeling. Deze residuen vertonen langjarige fluctuaties en een hoge autocorrelatie.

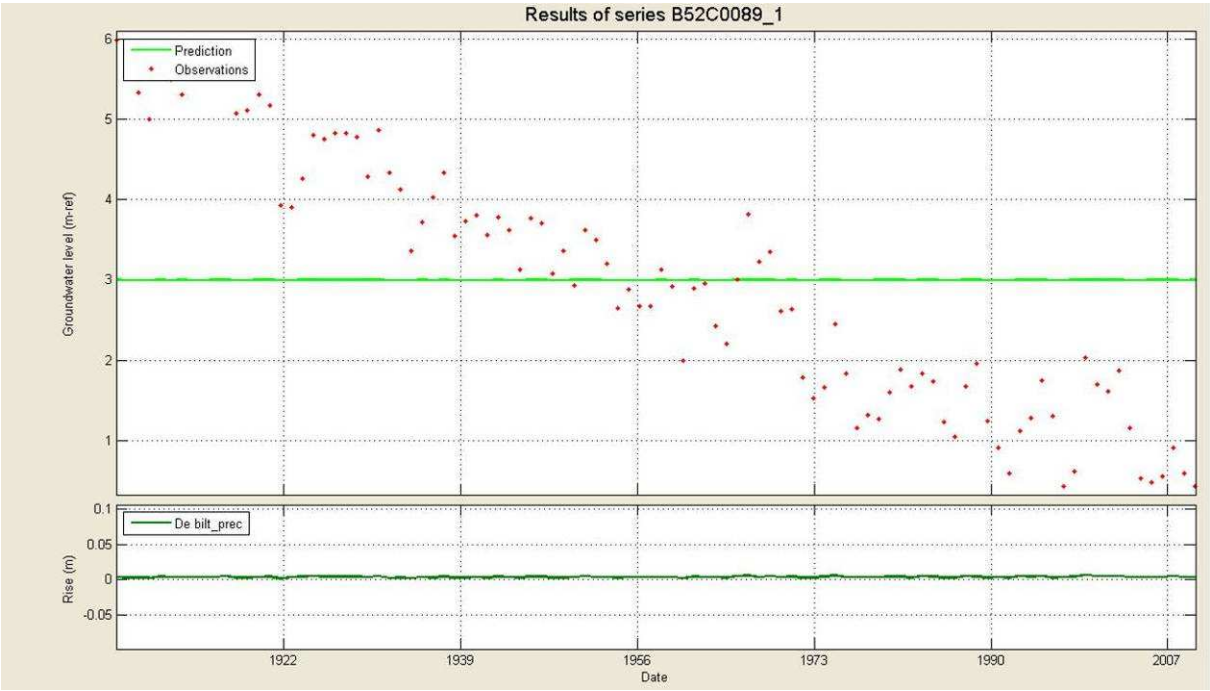
Het belangrijkste kenmerk van Figuur 11 is echter de verdeling van de residuen. Om ervoor te zorgen dat ze gemiddeld 0 zijn, is de voorspelde reeks zo gekozen dat hij de werkelijke reeks ongeveer in het midden kruist. De residuen zijn daarom de eerste helft van de reeks negatief en de tweede helft positief.

Het blijkt dus dat een ontbrekende trend aanleiding kan geven tot:

- langjarige fluctuaties in de residuen
- een niet-stationaire verdeling van de residuen (wat wil zeggen dat ze een trend vertonen)
- een te grote massa in de impuls- respons functie en een te lage drainagebasis. [3]

2.5.2 De onbrekende reeks bevat een lineaire dalende trend. Synthetisch voorbeeld

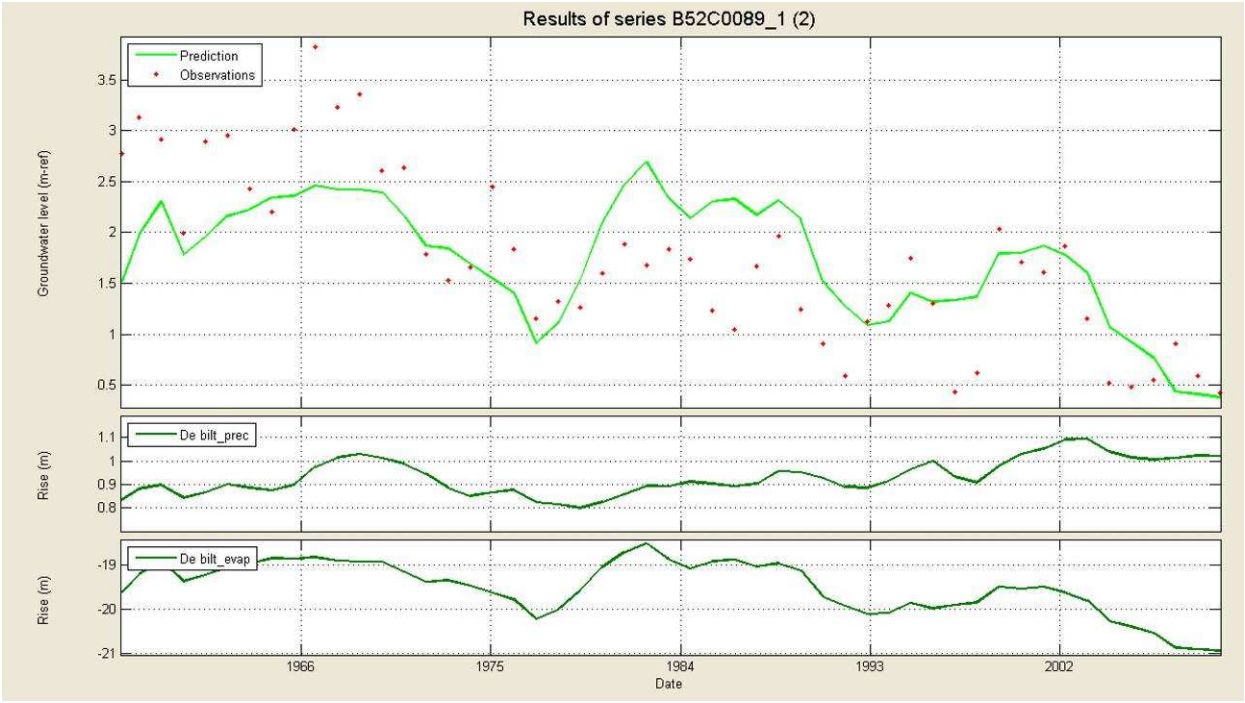
In het vorige experiment zagen we dat het soms mogelijk is om een IR functie voor neerslag zo te kiezen dat er een stijgende trend ontstaat in het resultaat. Het creëren van een dalende trend door een gepaste IR functie te kiezen is echter meestal niet mogelijk, omdat neerslag per definitie positief is en men vanuit fysisch oogpunt alleen positieve IR functies toestaat voor neerslag. Alleen als de neerslag zelf een dalende trend vertoont, kan men een dalende trend reproduceren met een geschikte IR functie.
De reactie van het optimalisatie algoritme op een dalende trend is daarom anders van aard.



Figuur 12 het is vaak niet mogelijk om een dalende trend te reproduceren met alleen neerslag. De optimale oplossing is dan een IR functie die overal nul is. Het gevolg is een vlak stijghoogte patroon. De drainagebasis wordt zo gekozen dat de vlakke lijn ongeveer in het midden van de tijdreeks de trendlijn kruist.

Als men echter ook verdamping gebruikt, kan het gebeuren dat er een betere oplossing gevonden wordt door de invloed van verdamping zeer groot te maken. Zo komen er toch jaarlijkse fluctuaties in de gesimuleerde stijghoogtelijn. De IR functie van verdamping is gelijk aan die van neerslag, keer een verdampingsfactor. Om het gewenste effect te bereiken kan de IR functie van de neerslag daarom niet nul zijn. Als verdamping meespeelt, wordt de IR functie van de neerslag dan zeer klein geschat en de verdampingsfactor zeer groot. *In beide gevallen kunnen er langjarige fluctuaties in de residuen ontstaan.*

[3] *M.i. kan een ontbrekende trend ook leiden tot een verkeerde verdampingsfactor.*



Figuur 13 een dalende trend in de stijghoogten, gemodelleerd met alleen neerslag en verdamping. De verdampingsfactor is 34, en M0 van neerslag 404 dagen.

2.5.3 De ontbrekende reeks bevat een sprong. Synthetisch voorbeeld.

In dit voorbeeld beschouwen we een systeem waarin de stijghoogte bepaald wordt door neerslag en door een onttrekking met een debiet dat eerst constant en verschillend van 0 is, en vanaf een zeker tijdstip 0 wordt en daarna constant 0 blijft, zoals getoond in Figuur 14.



Figuur 14 Deze figuur toont de uitgangssituatie: een stijghoogteverloop (bovenste grafiek) met 2 componenten: een neerslag-component (onderste grafiek) en een component afkomstig van een onttrekking (midden).

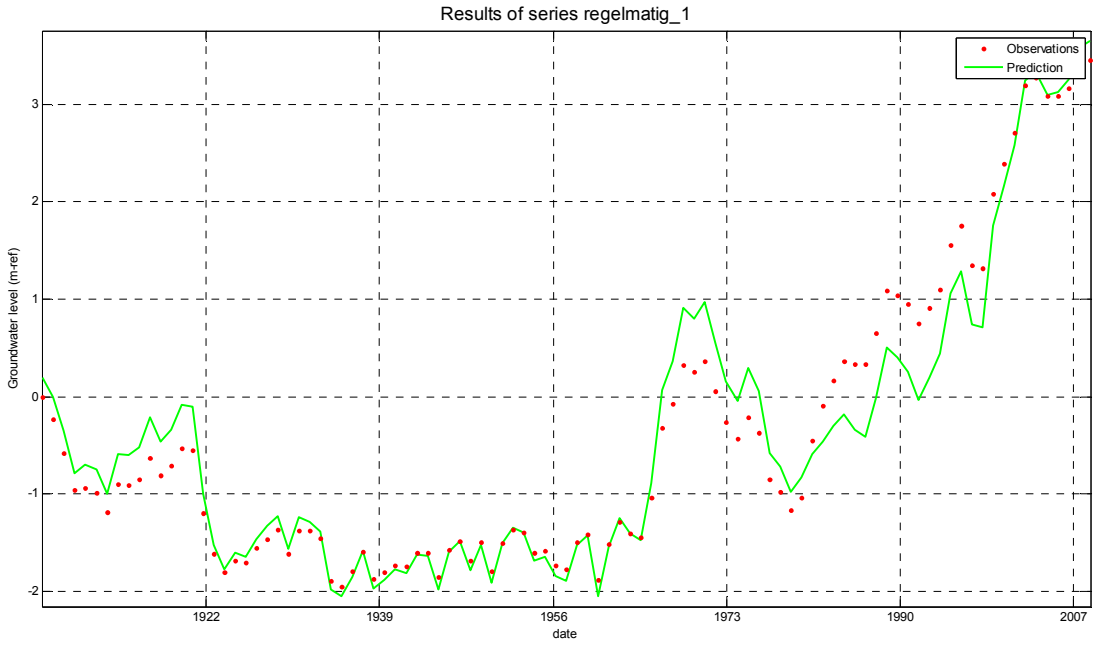
We halen wederom observaties uit de stijghoogtereeks en gebruiken deze om een model van dit systeem te kalibreren waar alleen de neerslag werd gebruikt als verklarende reeks.

Het resultaat wordt getoond in Figuu 15, terwijl de residuen getoond worden in Figuur 16. Ten slotte laat Figuur 17 de impulsresponsfuncties zien. De drainagebasis van het werkelijke systeem was -27 m; de drainagebasis van het gekalibreerde model met neerslag was -38 m.

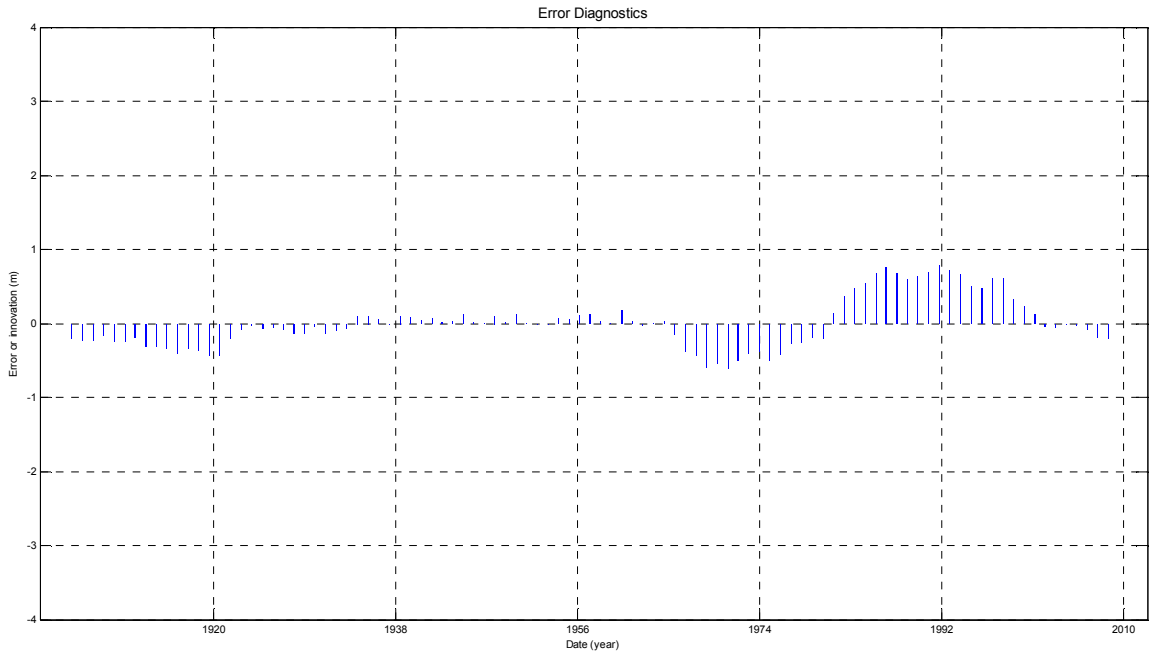
Wederom is de M0 van de neerslagreeks verhoogd, en de drainagebasis verlaagd, om het effect van de ontbrekende onttrekkingsreeks zo goed mogelijk te maskeren.

In de residuen zijn langjarige fluctuaties ontstaan, en ze zijn niet-stationair geworden. Hoewel het gemiddelde van alle residuen 0 is, zijn de residuen zo verdeeld dat het gemiddelde van alle residuen voor de sprong in het onttrekkingsdebiet gelijk is aan het gemiddelde van de residuen van na deze sprong.
Het blijkt dus dat een ontbrekende reeks met een uitgesproken sprong aanleiding kan zijn voor:

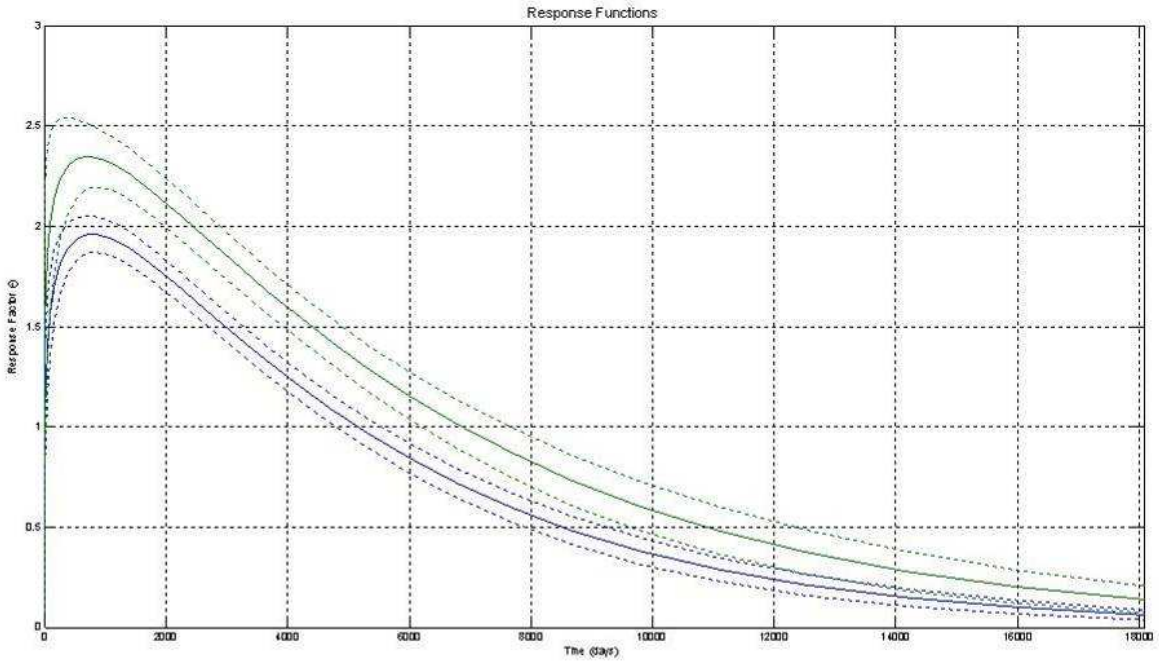
- langjarige fluctuaties in de residuen
- een niet-stationaire verdeling van de residuen
- een fout in de impuls- respons functie en in de drainagebasis.



Figuur 15 Model met alleen neerslag van een systeem met neerslag en onttrekking.



Figuur 16 Residuen van het in Figuur 15 getoonde model. Merk op dat er langjarige fluctuaties zijn ontstaan en dat de residuen niet stationair zijn.



Figuur 17 De impuls response functies behorend bij neerslag voor het 'werkelijke' systeem met neerslag en onttrekking (blauw) en voor een model van dit systeem waarin alleen neerslag zit (groen).

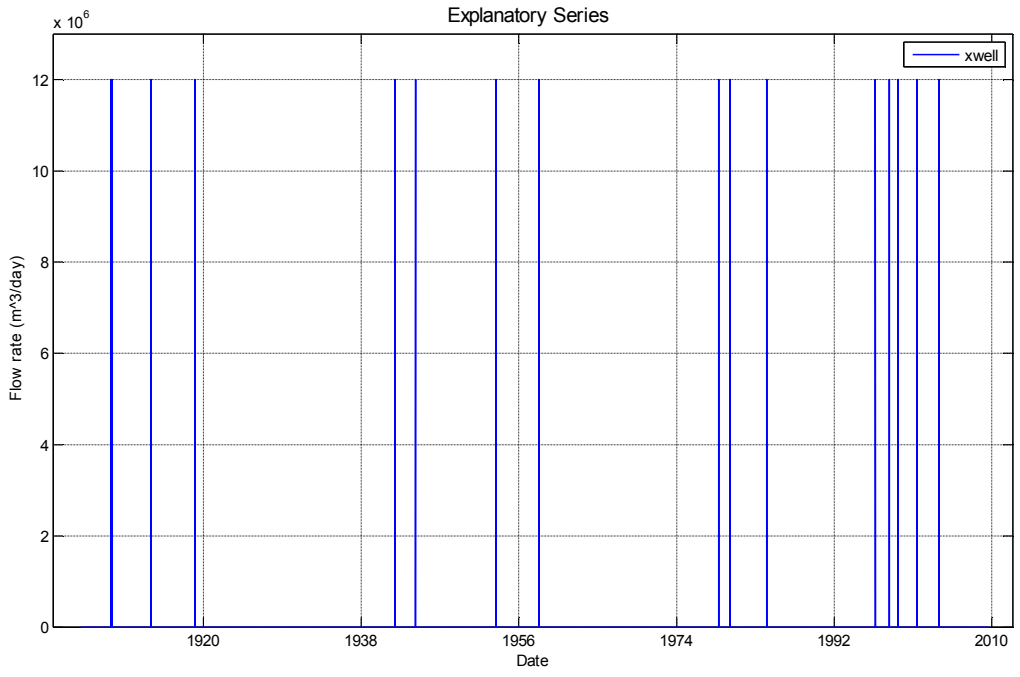
2.5.4 De onbrekende reeks bevat korte pieken. Synthetisch voorbeeld.

In dit laatste synthetische voorbeeld gaan we uit van een systeem waarin de stijghoogte bepaald wordt door neerslag en door een onttrekking met een debiet dat meestal 0 is, maar af en toe korte pieken heeft. De tijdreeks van de debieten van deze onttrekking is te zien in Figuur 18. Uit de stijghoogten in dit systeem werden wederom observaties genomen, die daarna gebruikt werden om dit systeem te modelleren met alleen neerslag als verklarende reeks.
De hierdoor ontstane residuen worden getoond in Figuur 19. De pieken van de onttrekkingsreeks zijn duidelijk terug te vinden in de residureeks. Ertussenin zijn de residuen vrij constant.

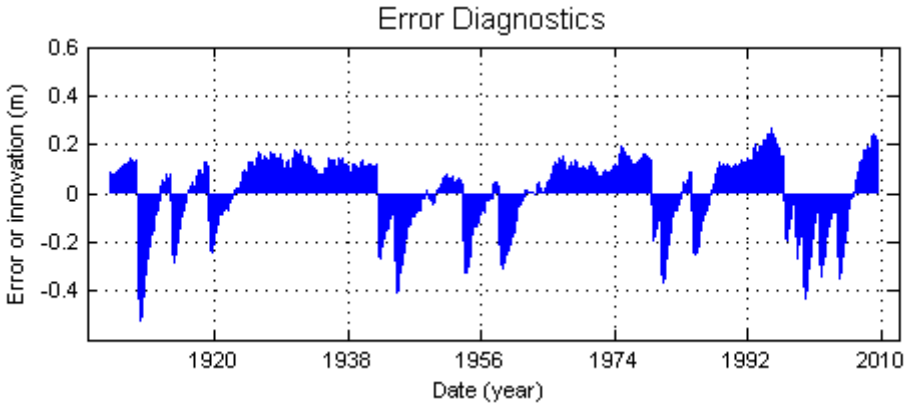
Er zijn dus ook residuen ontstaan op momenten dat er geen onttrekking van invloed is in het systeem. Dit komt omdat het gemiddelde van alle residuen 0 moet zijn. Voor de residuen veroorzaakt door het niet meenemen van de onttrekkingen moeten dus ook residuen van tegengesteld teken geproduceerd worden. Het algoritme is hierin geslaagd door de drainagebasis te verhogen van -24 naar -22. Dit verklaart ook waarom de residuen zo constant zijn tussen de pieken in. Hier ontstaan dus lange periodes van kleine residuen zonder tekenwisseling, afgewisseld met korte periodes van grotere residuen met een tegengesteld teken.

De frequentieverdeling van de residuen wordt getoond in Figuur 20. Hierop is te zien dat er een scheve kansverdeling is ontstaan. De eerder genoemde plateaus van positieve residuen veroorzaken een oververtegenwoordiging van residuen van die grootte, terwijl de negatieve pieken zorgen voor een relatieve oververtegenwoordiging van extreme negatieve waarden.

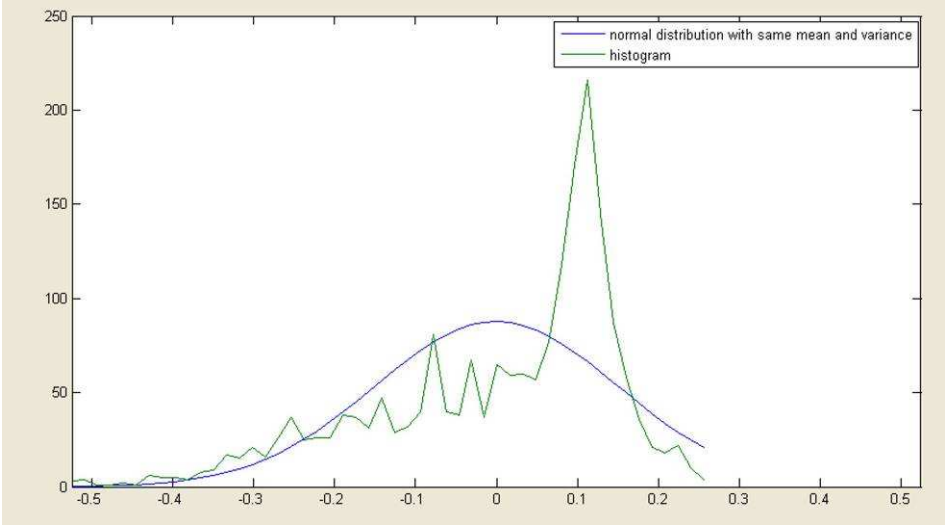
Het blijkt dus dat een ontbrekende reeks met een pieken aanleiding kan zijn voor:
- langjarige fluctuaties in de residuen
- een scheef histogram van de residuen
- een fout in de drainagebasis.



Figuur 18 Een verklarende reeks met korte pieken. Deze reeks werd gebruikt als onttrekkingsdebiet van een pompstation.



Figuur 19 residupatroon ontstaan door de in Figuur18 getoonde verklarende reeks niet te gebruiken.



Figuur 20 Verdeling van de residuen getoond in Figuur 19. De 'plateaus' van constante positieve residuen afgewisseld met korte pieken van negatieve residuen hebben een scheef verdeeld histogram opgeleverd.

2.6 Fouten in de optimalisatie: een verkeerde weging van observaties kan tot langjarige fluctuaties leiden

In veel meetnetten verandert de meetfrequentie van de peilbuizen af en toe, bijvoorbeeld door veranderingen in het beschikbare budget voor waterbeheer, of door de plaatsing van automatische druksensoren.

Dit kan ertoe leiden dat er in eenzelfde tijdreeks tijdsintervallen kunnen zijn met zeer veel metingen terwijl andere intervallen van dezelfde reeks veel minder metingen bevatten. Aangezien het optimalisatie algoritme een doelfunctie minimaliseert (vergelijking 9) waaraan de residuen van alle observaties in gelijke mate aan bijdragen, betekent dit dat het goed fitten van de intervallen met veel metingen een grotere reductie van de doelfunctie oplevert dan het fitten van een interval met weinig metingen.

Dit is een nadeel, omdat de hoeveelheid informatie over de modelparameters die in de reeks zit hierdoor kan afnemen. De waarde van de doelfunctie hangt in dit geval vooral af van de fit in de periodes met veel metingen. Daardoor daalt de capaciteit om parameters te schatten die in deze perioden van de

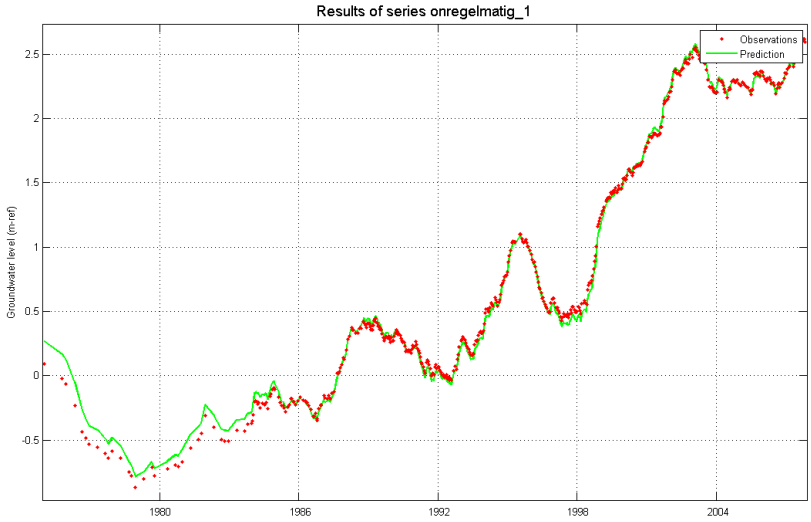
tijdreeks niet veel invloed zijn.

Er zijn verschillende mogelijke oplossingen voor dit probleem. Men kan het deterministische model aanvullen met een ruismodel, zoals in detail is beschreven in Asmuth en Bierkens , 2005. Het ruismodel introduceert een autocorrelatie parameter van de residuen, die er onder andere voor zorgt dat perioden met een grote meetfrequentie niet overdreven belangrijk worden in het optimalisatieproces.
Echter, in de modelcode die gebruikt werd in dit onderzoek (Menyanthes ®) wordt het ruismodel niet gebruikt daar het vaak convergentieproblemen oplevert.

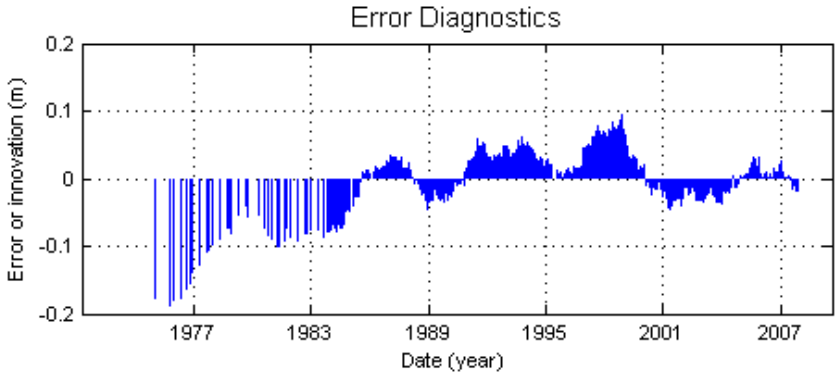
Een andere mogelijkheid is het veranderen van de definitie van het residu. In plaats van residuen te berekenen als $\mathbf{r} = \left(\mathbf{h}^{sim} - \mathbf{h}^{obs}\right)$, kan men ze wegen voor de betrouwbaarheid van de metingen, en hun onderlinge correlatie.

$$\mathbf{r} = \left(\mathbf{h}^{sim} - \mathbf{h}^{obs}\right)\mathbf{C}^{-1} \qquad (9)$$

Waarin de vierkante diagonale matrix $\mathbf{C}^{-1}$ gewichten bevat voor de verschillende observaties. Deze gewichten kunnen dan zo gekozen worden dat ze groot zijn voor observaties met weinig andere observaties in de buurt, en klein voor observaties met veel andere observaties in de buurt.

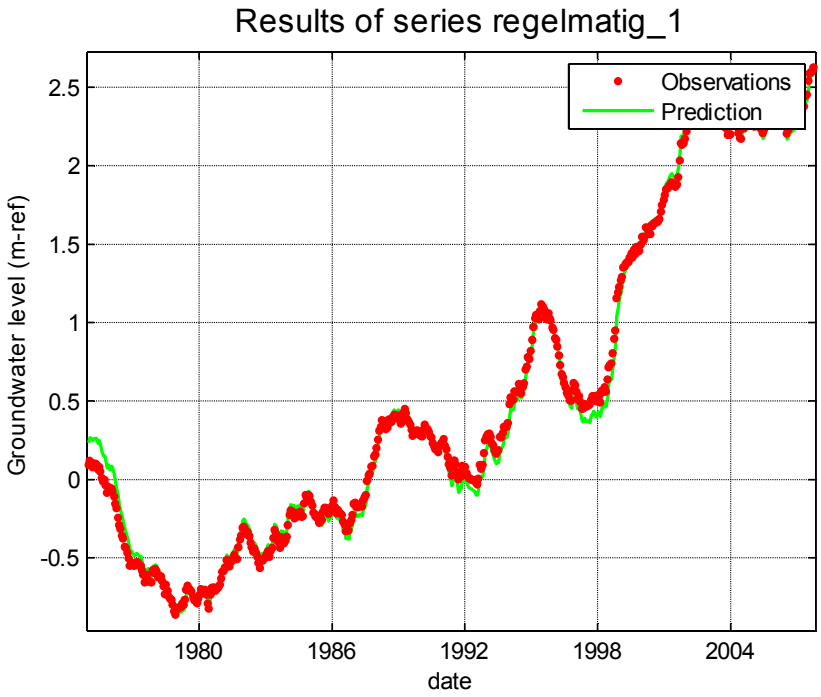


Figuur 21 Metingen en modelvoorspelling voor een tijdreeks met onregelmatig verdeelde observaties.

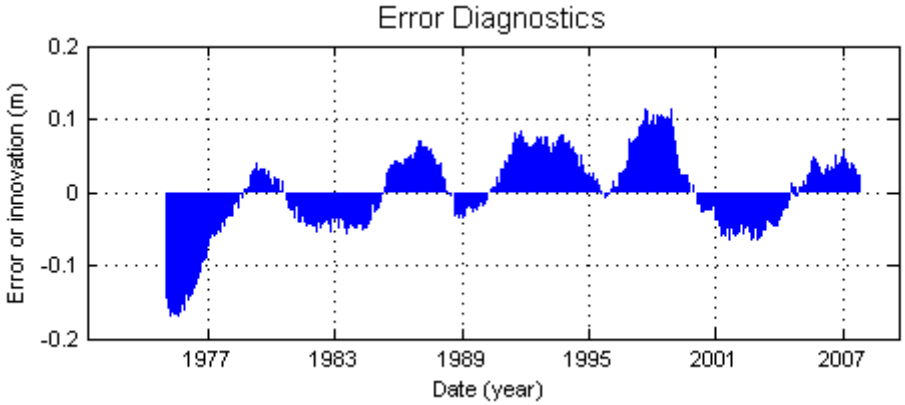


Figuur 22 Residuen van het in Figuur 21 getoonde model. Merk op dat de residuen van het gedeelte van de reeks met weinig observaties groter zijn dan de residuen van het gedeelte met veel observaties.

Een voorbeeld van deze problematiek is getoond in Figuur 21. Deze tijdreeks wordt gekalibreerd op onregelmatig verdeelde observaties. In Figuur 22 is het residupatroon te zien dat het model oplevert. De meest in het oog springende bijzonderheid is de lange serie relatief grote negatieve residuen in het begin van de simulatie, overeenkomend met het interval waarin er minder metingen voorhanden zijn. Figuur 23 laat een gekalibreerd model zien van hetzelfde systeem, maar deze keer met overal evenveel metingen. Figuur 24 toont de residuen voor dit model. De residuen zijn nu beter verdeeld.



Figuur 23 Metingen en modelvoorspelling voor dezelfde tijdreeks als getoond in Figuur 21. Deze keer zijn de observaties regelmatig verdeeld.



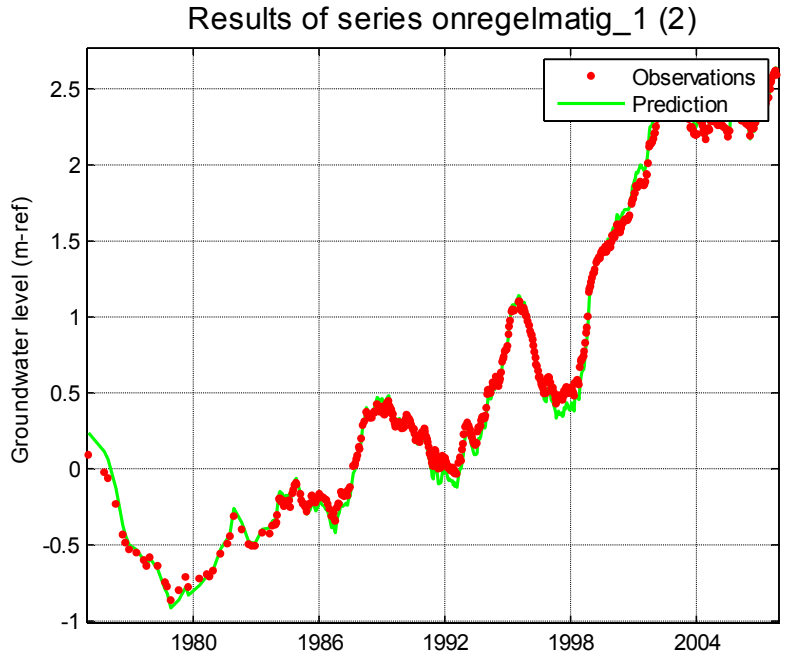
Figuur 24 Residuen van het in Figuur 23 getoonde model. Merk op dat de residuen nu regelmatiger verdeeld zijn in de tijd dan in Figuur 22.

De fit van het model is nu overal ongeveer even goed. Vergeleken met Figuur 22 zijn de residuen in de tweede helft van het tijdreeksmodel wat groter geworden. De fit van het vroegere gedeelte van de tijdreeks gaat gedeeltelijk ten koste van de fit in dit laatste gedeelte.

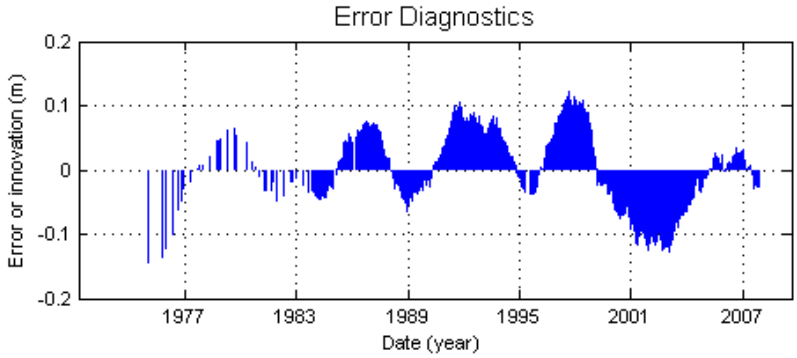
Hoewel dit als een nadeel gezien kan worden is het een voordeel. De robuustheid van het model is toegenomen nu het over een langere periode een redelijke fit oplevert.
In Figuur 25 tenslotte is er een gewogen kleinste kwadraten norm gebruikt als doelfunctie. De gewichtenmatrix $\mathbf{C}^{-1}$ is zo gekozen dat alle niet-diagonale elementen 0 zijn en de diagonale elementen

$$\mathbf{C}_{ii}^{-1} = \min\left(10, \frac{(t_{i+1} - t_{i-1})}{\Delta t_{\min}}\right) \qquad (6)$$

waarbij t_{i+1} en t_{i-1} respectievelijk de tijdstippen van de meting juist vóór en juist na meting i zijn, en $\Delta t_{\min}$ de laagste waarde van $(t_{i+1} - t_{i-1})$ in de dataset is. De metingen worden dus steeds zwaarder gewogen naarmate er minder nadere metingen in de buurt zijn, maar de zwaarst gewogen metingen worden niet meer dan 10 keer zwaarder gewogen dan de minst zwaar gewogen observatie. In Figuur 26 kunnen we het resultaat zien van deze weging. De gevonden fit en het residupatroon lijkt nu sterk op wat er in Figuur 23 en Figuur 24 te zien is.
Dit voorbeeld illustreert dat een juiste weging van observaties kan bijdragen aan het verkorten van lange runs.



Figuur 25 Metingen en modelvoorspelling voor dezelfde tijdreeks als getoond in Figuur 21. De observaties zijn onregelmatig verdeeld in de tijd, maar er is een doelfunctie gebruikt die residuen verschillend weegt naargelang de frequentie van de metingen.



Figuur 26 residuen behorend bij het model van Figuur 25. Merk op dat de residuen nu regelmatiger verspreid zijn dan in Figuur 22.

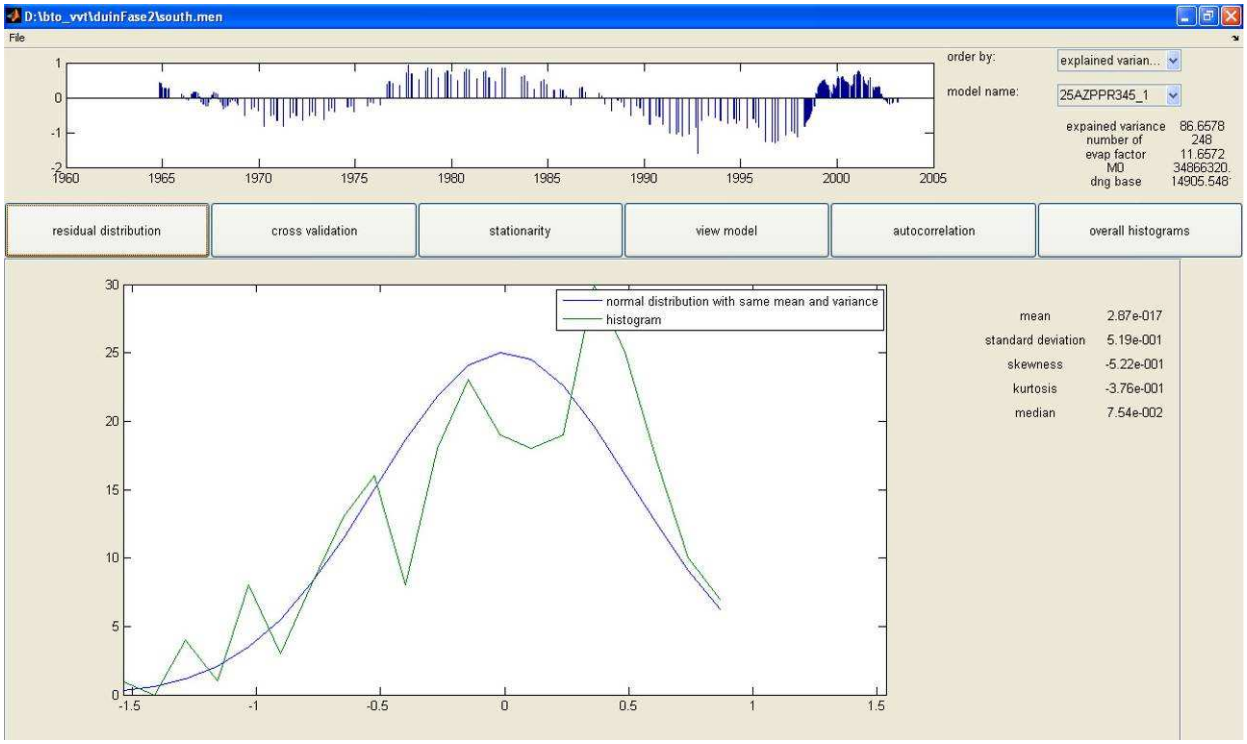
3 Hulpmiddel voor analyse residureeksen

In het vorige hoofdstuk werd aan de hand van voorbeelden het effect getoond van enkele typische modelfouten. Er werd aangetoond dat deze modelfouten kunnen leiden tot fouten in de gevonden parameters, in niet-stationaire residureeksen, langjarige fluctuaties in de residuen en soms in een scheve verdeling van de residuen.
Om dergelijke patronen te kunnen opsporen is er in het kader van dit BTO-project een computerprogramma ontwikkeld voor de analyse van residureeksen, de *Residual Analyzer*. Het heeft twee basistaken: *beschrijven* en *ordenen*.

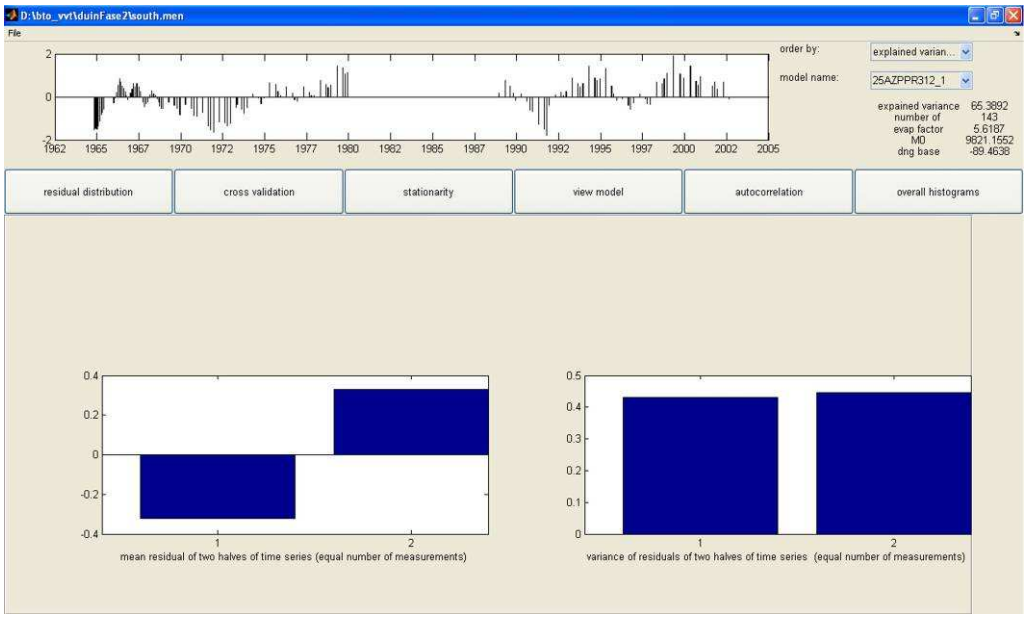
Bij het beschrijven worden er statistische of andere berekeningen gedaan met een residureeks. De resultaten van deze tests worden gepresenteerd als grafiek of als tabel.
Bij het ordenen gaat het erom de modellen onderling te vergelijken en te ordenen naar een bepaald criterium.

De volgende tests zijn ingebouwd:

- **Verdeling van de residuen**: Het programma berekent de scheefheid, kurtosis, gemiddelde en variantie van een residuenreeks. Tevens toont het een histogram van de residuen, met daarover een gaussiaanse kansverdeling met dezelfde variantie en hetzelfde gemiddelde. Deze test is bedoeld voor het zoeken naar ontbrekende reeksen met korte pieken, zoals besproken in het vorige hoofdstuk.



Figuur 27: de beschrijving van de verdeling van de residuen.



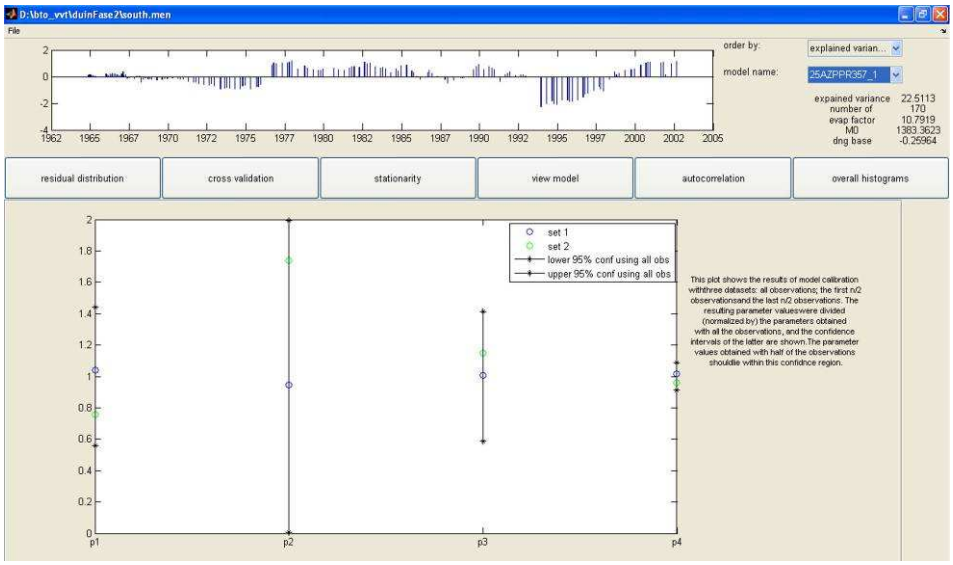
Figuur 28: de uitvoer inzake stationariteit. De getoonde reeks lijkt niet erg stationair, omdat de eerste helft van de reeks vooral negatieve residuen bevat en de laatste helft voornamelijk positieve residuen.

- **Kruis-validatie**: Het splitsen van een dataset in twee delen om met allebei de delen hetzelfde kalibratie resultaat te halen is een bekende test om de waarde van een gekalibreerd model te onderzoeken. Het programma kan een model van een systeem twee keer kalibreren: eenmaal met de eerste helft van de observaties en eenmaal met de tweede helft van de observaties. De parameters die in beide gevallen gevonden worden moeten min of meer overeenkomen met de parameters die gevonden zijn met de gehele dataset (technisch gezien moeten ze in het 95% confidence interval liggen). Als dit niet het geval is, kan dit komen door ingrepen die het grondwatersysteem van karakter veranderd hebben, of door ontbrekende verklarende reeksen met een sprong.

NB: omdat de reeks (tweemaal) opnieuw geanalyseerd moet worden duurt het vaak even voordat er na het indrukken van de knop Cross Validation een resultaat verschijnt.

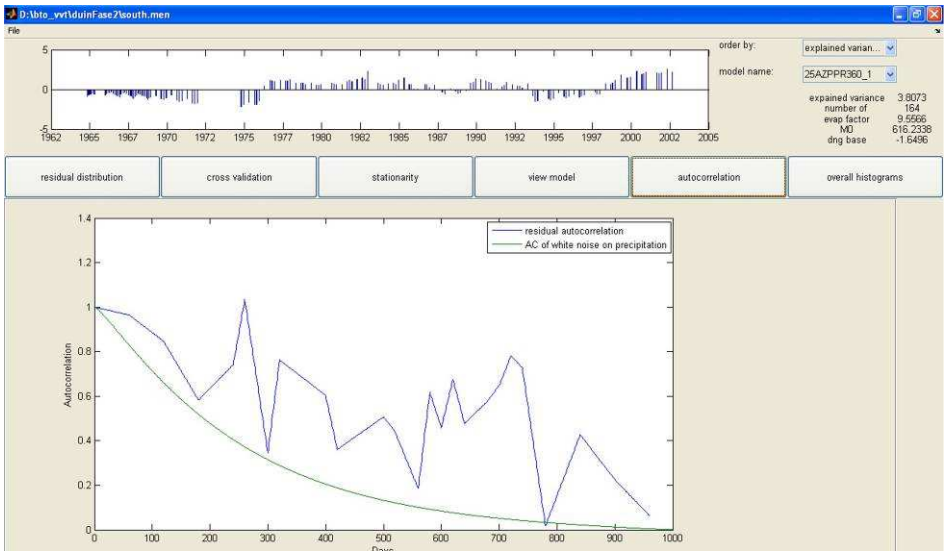
NB2: Let op de verticale schaal van het linker diagram. De schaling verloopt automatisch, waardoor een klein verschil in gemiddelde residuen op het oog veel groter kan lijken dan het is. (In dit voorbeeld is er echter duidelijk sprake van niet-stationairiteit).

De grafiek toont de waarden van de parameters voor de modellen van de eerste resp. de tweede helft van de tijdreeks, gedeeld door de waarden die gevonden werden door de gehele reeks te modelleren. De getoonde betrouwbaarheidsintervallen horen bij de modellen van de gehele reeks.



Figuur 29: de uitvoer van een kruis-validatie test. In dit voorbeeld vallen de berekende parameters door alleen de eerste en alleen de tweede helft van de observaties te gebruiken, keurig in het onzekerheidsinterval van de parameters die berekend werden door alle observaties te gebruiken.

- **Stationariteit**: Het programma beoordeelt de stationariteit van de residuen in de tijd. Niet-stationaire residureeksen kunnen duiden op een gemiste verklarende reeks, met name met een sprong. De stationariteit wordt hier beoordeeld door de residuen-tijdreeks in tweeën te knippen, zodanig dat beide helften evenveel residuen bevatten. Daarna wordt het gemiddelde berekend van beide residu-populaties. Als de reeks stationair is, en beide helften verschillende correlatie lengen bevatten, zouden beide gemiddelden (zo goed als) nul moeten zijn. Merk op dat beide gemiddelden aan elkaar gelijk moeten zijn maar tegengesteld van teken, teneinde het gemiddelde residu over de hele populatie nul te laten zijn. Het volstaat dus, één gemiddelde te berekenen. Ook de variantie van de twee stukken reeks zou vergelijkbaar moeten zijn als de residuen stationair zijn.
- **Autocorrelatie:** Het programma berekent de daadwerkelijke autocorrelatie van de residuen, en de autocorrelatie die toe te schrijven is aan witte ruis op de invoerreeks. Door deze twee te vergelijken kan men een inschatten of eventuele langjarige fluctuaties te wijten kunnen zijn aan fouten op de invoer of noodzakelijkerwijs een andere verklaring moeten hebben.



Figuur 30: de uitvoer inzake autocorrelatie. In het getoonde voorbeeld is de gemeten autocorrelatie groter dan wat verwacht zou worden als de residuen alleen voortkwamen uit fouten in de neerslag reeks.

De verschillende modellen kunnen gesorteerd worden op:

- Scheefheid en kurtosis
- Stationariteit
- Verklaarde Variantie
- De lengte van de langste run
- De gemiddelde lengte van de runs
- De grootte van de gevonden M0 voor neerslag
- De grootte van de gevonden verdampingsfactor
- De grootte van de gevonden drainagebasis

Technische documentatie van de Residual Analyzer is opgenomen in Appendix C.

4 Het Noordhollands Duinreservaat

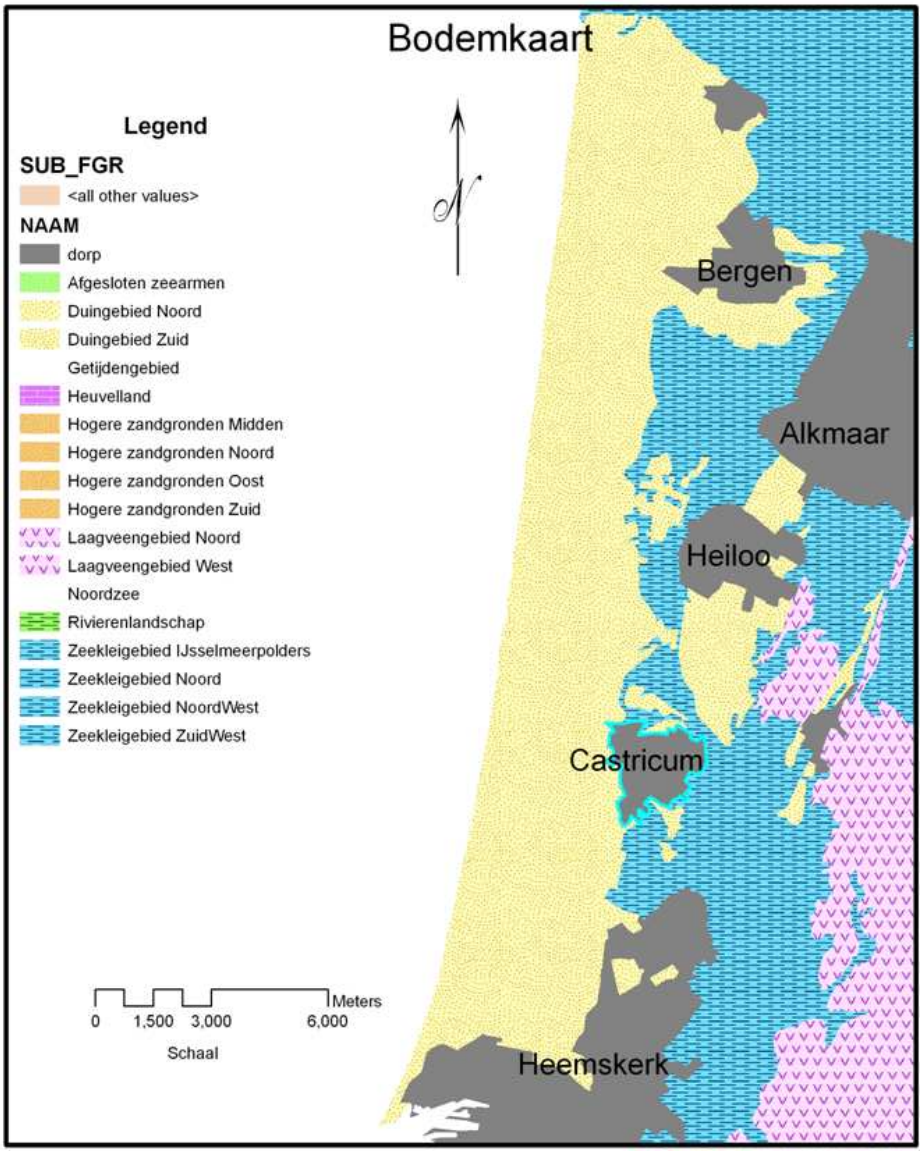
Het gebied waar de autocorrelatie van de residureeksen onderzocht werd, is gelegen bij de plaatsen Bergen, Velsen en Castricum aan de Noord-Hollandse Noordzeekust. Het betreft een duinreservaat dat door het waterleidingsbedrijf PWN gebruikt word als waterwingebied. De duinen zijn er tot bijna 25 m hoog en het gebied is in een natuurlijke staat, zonder bebouwing of landbouw. Figuur 31 toont een bodemkaart van het gebied.

4.1 Geologie

Figuur 31 toont een schematische representatie van een Oost-West sectie van het gebied, zoals vervaardigd voor het PWN model NHD (Koster, 1997). In dit rapport is ook een gedetailleerdere beschrijving van het gebied te vinden, gebaseerd op voorgaande karteringen en nieuwe gegevens. Aangezien de standaard lithostratigrafische indeling van Nederland in 2003 veranderd is, zijn de formatienamen die in de Figuur 31 voorkomen niet meer allemaal in gebruik.

Tabel 2 beschrijving van de belangrijkste lithologische eenheden in het gebied volgens Koster, 1997

Naam	**Beschrijving**
W1.1	Jong en oud duinzand
W1.2	Oude duinzanden
W1.3	Strandzanden
W2.1	Fijn tot matig grof zand, behorend tot de Eemformatie
W2.2	Matig fijne tot grove zanden, behorend tot de formatie van Drenthe
W3.1	Matig fijne tot grove zanden
W3.2	Matig grove tot zeer grove grindhoudende zanden (formatie van Enschede)
S1.1	Oer-IJ afzettingen: met sedimenten gevulde getijdegeulen.
S1.2	Oer-IJ afzettingen
S1.3	Kleilagen en Veenlagen.
S2.1	Eemklei
S2.2	Keileem, warvenklei
S3.1	Klei- en /of slibhoudend zand c.q. leem aan top van de formatie van Enschede
S3.2	Klei en /of slibhoudend zand c.q. leem aan basis van de formatie van Enschede



Figuur 31: Bodemkaart van het duingebied

In de schematisering worden drie lagen onderscheiden: een bovenpakket (de Westlandformatie), een Middenpakket (de formaties van Twente en Eem) en een diep pakket met de formaties van Drenthe en Urk. Op grotere diepte (meer dan 100m diep) ligt de formatie van Harderwijk. De verschillende lithologische eenheden worden nader verklaard in Figuur 32. De formaties waarvan de naam begint met een W zijn goed doorlatend, terwijl de formaties waarvan de naam met een S begint slecht doorlatend zijn

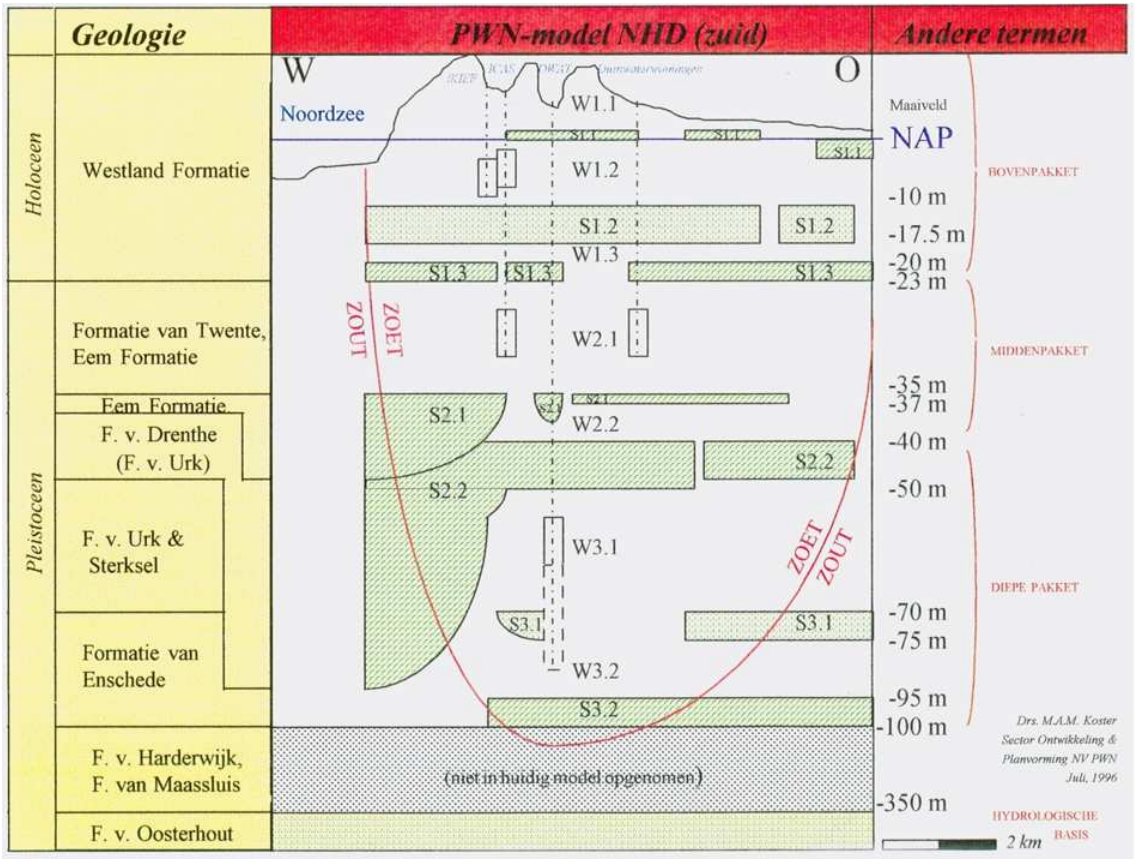
Zoals te zien in Figuur 32 is er in het duingebied een zoetwaterlens aanwezig met een maximale dikte van ongeveer 100m.

4.2 Hydrologie

De westelijke rand van het gebied wordt gevormd door de Noordzee. De getijdenverschillen op deze locatie zijn ongeveer 1m bij dood tij en 3,5m bij springtij.

De menselijke ingrepen in het gebied zijn veelvuldig. Al eind 19de eeuw werden er grote onttrekkingen gerealiseerd, hetgeen tot verzilting leidde. Daarom werd in de jaren 50 gekozen voor een

infiltratiesysteem waarbij voorgezuiverd gebiedsvreemd water geïnfiltreerd werd in infiltratiepanden, om na een kort verblijf in de ondergrond te worden opgepompt. De infiltratiepanden werden geleidelijk aan uitgebreid tot 1972; in dat jaar bereikten ze een oppervlakte van 150 ha met een wateroppervlak van 25 ha. Om de infiltratiepanden heen waren randbronnen geplaatst waarmee het gebied hydrologisch geïsoleerd kon worden.

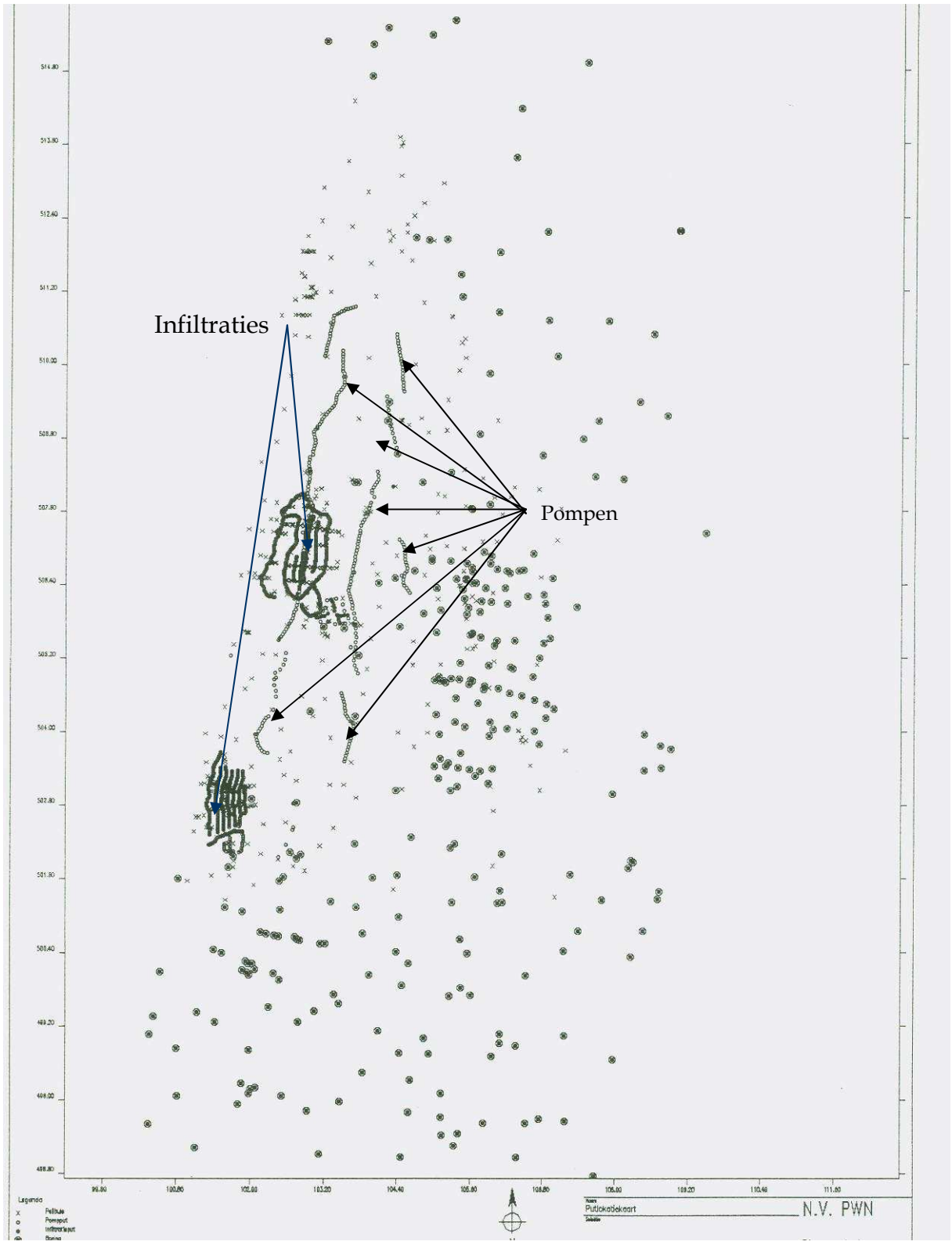


Figuur 32: een Oost West doorsnede van een conceptueel model van de ondergrond van het duingebied. Bron: PWN (Koster,1997)

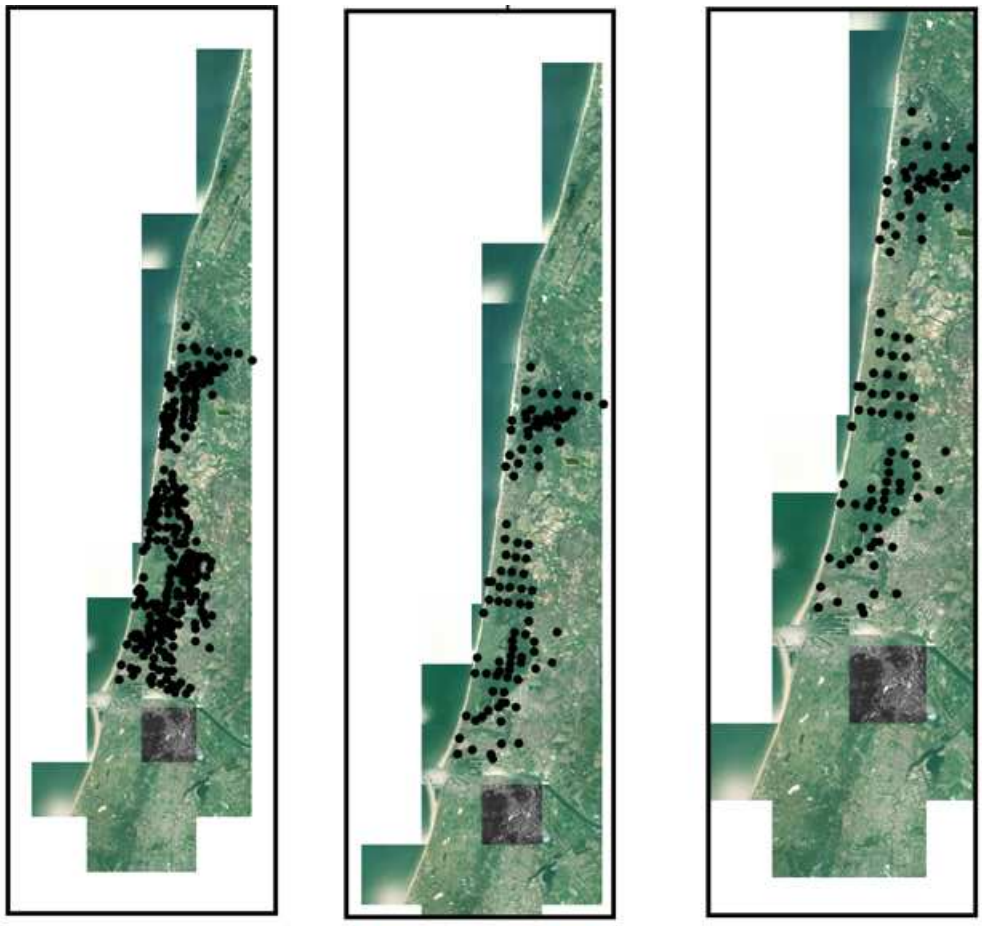
Begin jaren 90 werden de infiltratiegebieden grondig gerenoveerd, zoals beschreven in Peters et al, 1992, naar aanleiding van problemen met verstopping van zowel putten als infiltratiepanden (Peters et al, 1989). Deze renovatie had niet alleen ten doel de verstoppingsproblemen op te lossen, maar ook om het gebied ecologisch beter te beheren dan tot dan toe was gedaan. De huidige locatie van de infiltratiegebieden is aangeduid in Figuur 33.

Verder is bekend dat de infiltratiepanden bij hun ingebruikname netto infiltreerden, zodat de grondwaterstand in het gebied steeg. Ten tijde van de reorganisatie begin jaren 90 was de situatie echter omgedraaid en werd er netto onttrokken. De totale onttrekking bedroeg in die tijd ongeveer 23 miljoen m^3/jaar.
In Figuur 33 worden ook onttrekkingsputten weergegeven. Hoewel er eigenlijk honderden onttrekkingsputten zijn, zijn deze aan elkaar geschakeld in zogenaamde secundairs. Onttrekkingsdebieten zijn bekend per secundair; het is niet bekend hoeveel de putten onafhankelijk van elkaar pompten.

Er is een zeer grote hoeveelheid peilbuizen aanwezig in het gebied. De belangrijkste ervan zijn aangegeven in Figuur 33.



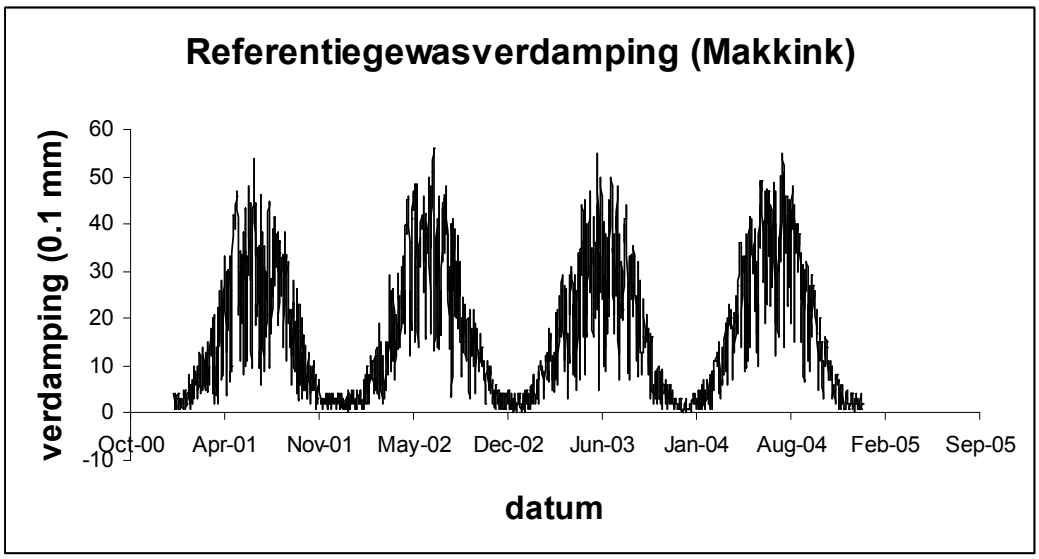
Figuur 33: Er zijn twee infiltratiegebieden en een aantal onttrekkingen in het gebied. De onttrekkingsputten zijn gerangschikt in lange slierten. Behalve de pompen die nu nog actief zijn, is er ook een aantal pompen die uitgezet zijn.



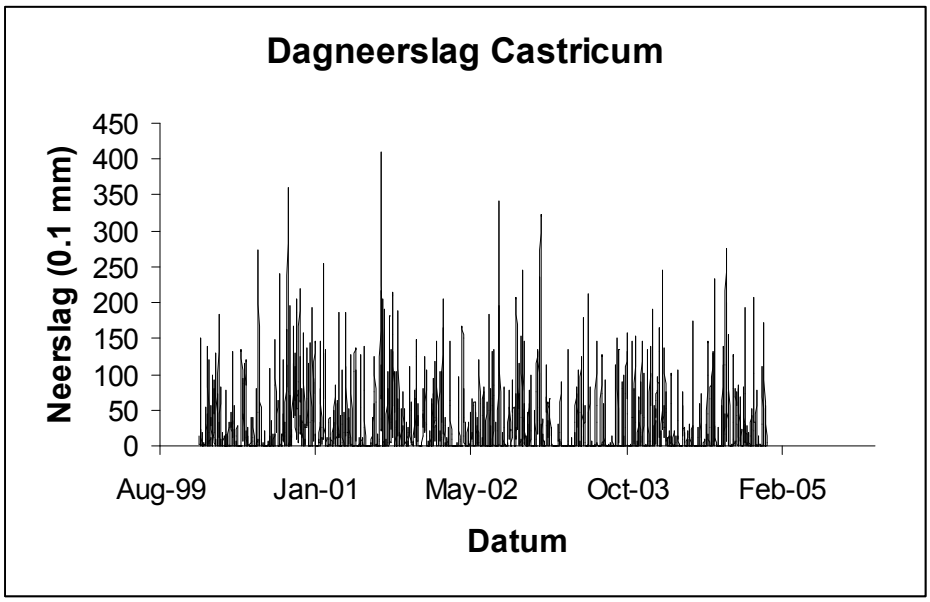
Figuur 34: Locaties van de meetputten in het duinreservaat. Links: putten met filter op minder dan 20 m diepte; midden: putten met filter tussen de 30 en de 40 m diep: rechts: putten met filters dieper dan 40 m. Sommige van deze putten hebben verschillende filters op verschillende dieptes. Het aantal tijdreeksen dat verzameld werd is daarom nog hoger dan het aantal putten dat staat aangegeven op deze kaarten.

4.3 Meteorologie

Hoewel er in het modelgebied zelf geen neerslag en verdamping werden gemeten, zijn er wel nabijgelegen KNMI meetstations, namelijk de neerslagstations van Lisse, Heiloo, Castricum en Heemstede. Evapotranspiratie werd gemeten in het weerstation De Kooy, enkele tientallen kilometers ten Noorden van het modelgebied. Figuur 35 en Figuur 36 tonen respectievelijk de evapotranspiratie van De Kooy en de neerslag te Castricum over enkele jaren.



Figuur 35: *Verdamping voor weerstation De Kooy berekend volgens Makkink. Deze methode levert een "referentie-verdamping" op, dat is de verdamping die theoretisch zou plaatsvinden op een veld met 12 cm hoog gras, een vaste oppervlakteweerstand van 70 s m^{-1} en een albedo van 0.23. Gegevens: KNMI*



Figuur 36: Neerslag gemeten op KNMI weerstation te Castricum. Gegevens: KNMI

De jaarlijkse neerslag ligt rond de 930 mm terwijl de jaarlijkse referentieverdamping ongeveer 610 mm bedraagt; dit leidt naar een jaarlijkse aanvulling van 320 mm.

5 Modellering Noordhollands Duinreservaat

Vanuit het perspectief van de modelbouwer zijn er twee gebiedsspecifieke moeilijkheden in het Noordhollands Duinreservaat. Ten eerste, het gebrek aan verklarende reeksen bruikbaar voor tijdreeksanalyse, en ten tweede het grote aantal stijghoogtemeetpunten.
Het gebrek aan verklarende reeksen komt door het feit dat PWN alleen onttrekkingsgegevens heeft voor reeksen aan elkaar geschakelde onttrekkingsputten. Het onttrokken debiet per onttrekkingsput is dus niet bekend, terwijl dit voor tijdreeksanalyse juist is wat men nodig heeft, omdat onttrekkingen gemodelleerd worden met de Hantush Well functie als impuls responsfunctie voor de onttrekking in één put. Als men alleen de totale onttrekking van een groot aantal putten kent, kan men geen unieke impuls responsfunctie vinden voor de verklarende reeks.
Met de infiltratiepanden treedt in wezen hetzelfde probleem op: beschikbare gegevens hebben vaak betrekking op meerdere aaneengesloten panden.
Het grote aantal meetpunten betekent dat het praktisch onmogelijk wordt om alle meetpunten handmatig te modelleren, of zelfs om handmatig de 'fit' te beoordelen in ieder meetpunt.

Toch is dit gebied zeer geschikt om de te testen of de in hoofdstuk 2 gevonden relaties tussen ontbrekende reeksen en residupatronen van pas kunnen komen. Het meetnet is zeer groot, en vele peilbuizen hebben lange meetreeksen met een hoge meetfrequentie. Doordat er zowel onttrekkingen als kunstmatige infiltratie plaatsvinden, is het aannemelijk dat verschillende van de in hoofdstuk 2 besproken modelfouten optreden als men *alleen met neerslag en verdamping* modelleert.

De eerste stap in de analyse van het gebied *was het selecteren van peilbuizen met meer dan 40 metingen*. Dit werd gedaan om ervoor te zorgen dat er steeds genoeg metingen zijn om de verschillende modelparameters te schatten. Deze peilbuizen werden daarna gemodelleerd met neerslag en verdamping. De dichtstbijzijnde neerslag- en verdampingsstations met metingen vanaf ten laatste 1960 werden hiervoor gebruikt.

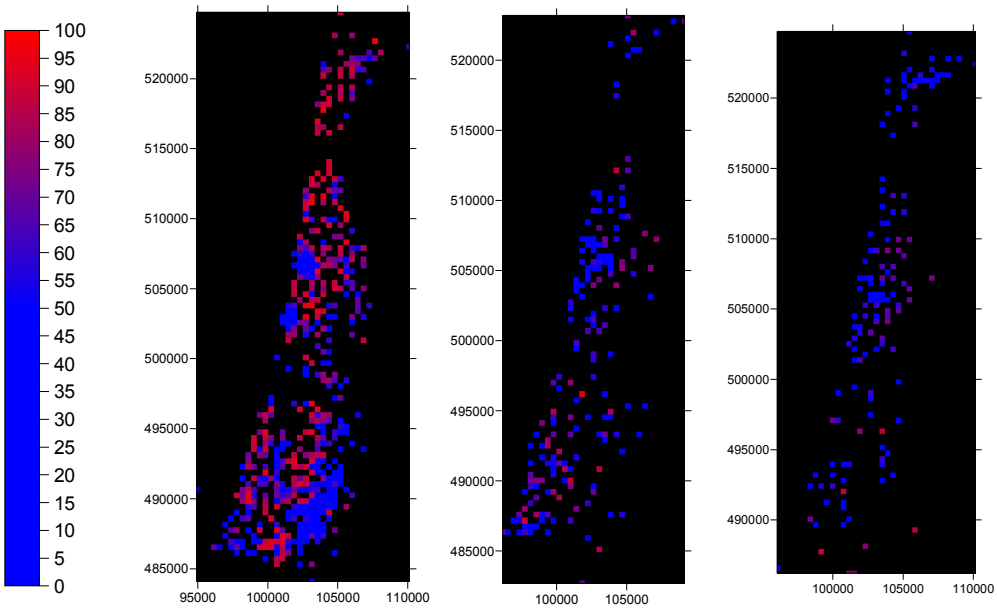
De tweede stap was het zoeken naar ontbrekende (lineaire of bijna lineaire) stijgende ***trends*** die een vergelijkbaar effect hebben op een groot aantal putten. Dit werd gedaan door te zoeken naar modellen met een grote M0 van neerslag en een lage drainagebasis. Na het identificeren van deze trends werden de meetpunten die erdoor beïnvloed zijn opnieuw gemodelleerd, deze keer met een toegevoegde lineaire trend. Dit leverde in de meeste gevallen modellen op met realistische parameter waarden.

Vervolgens werd de ***scheefheid*** *van de residureeksen in het gebied berekend*. Er werd gekeken of deze indicator modellen kon opsporen waarin de gevolgen van de onttrekkingen merkbaar zijn. Daarna werd de stationariteit van de residureeksen berekend.

Als laatste werd de ***autocorrelatie*** *van de residureeksen vergeleken met de theoretische autocorrelatie* van de residureeksen om te kijken of de (langjarige) fluctuaties in de reeksen groter of kleiner zijn dan te verwachten zou zijn op basis van fouten in (in dit geval) neerslag.

5.1 Stap 1: Modellering met neerslag en verdamping

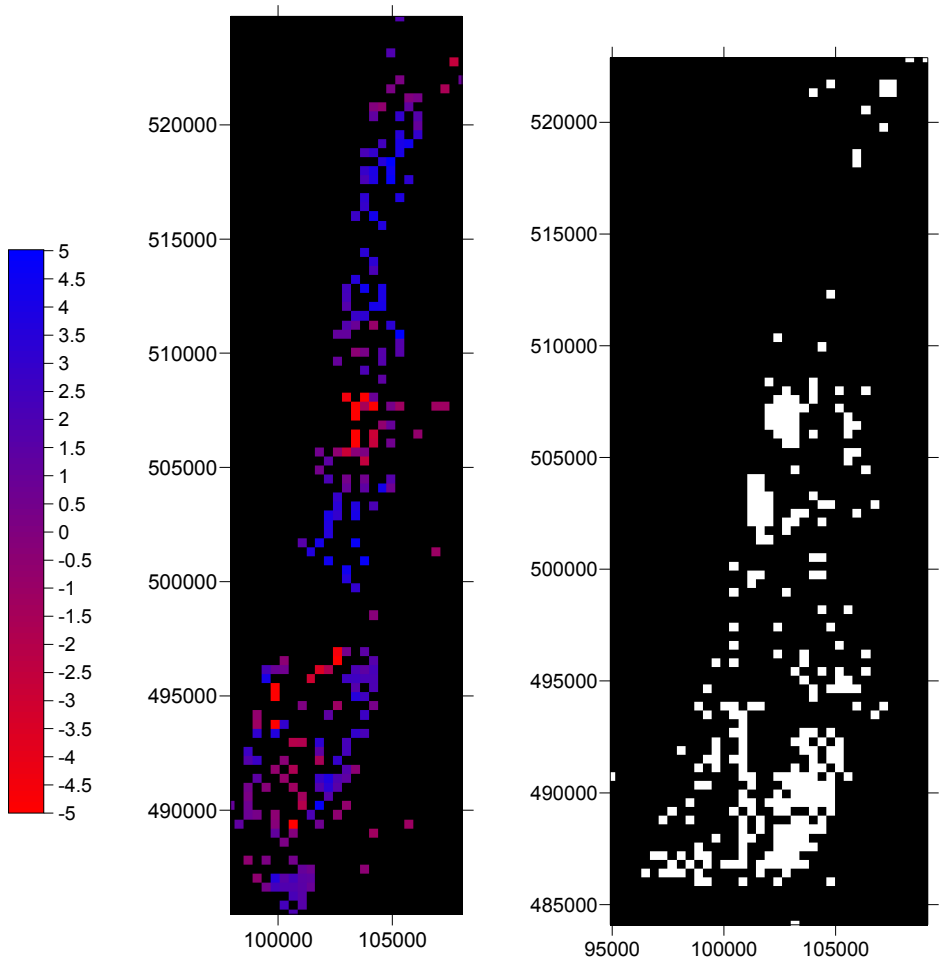
De eerste stap betrof het verwijderen van de stijghoogtetijdreeksen met minder dan 40 metingen. De overblijvende reeksen werden gemodelleerd met neerslag en verdamping van de dichtstbijgelegen meetstations met metingen teruggaand tot ten minste 1960.



Figuur 37: verklaarde variantie van de peilbuizen in het Noordhollands duinreservaat na stap 1. Links, filters tot 20 meter diep. Midden filters tussen 20 en 40 m diep. Rechts, peilbuizen dieper dan 40 meter.

Globaal kan men stellen dat de verklaarde variantie hoger is in de bovenste laag dan in de middelste en onderste lagen. In de bovenste laag zijn duidelijk gebieden te onderscheiden waarin de verklaarde variantie consequent hoog of juist laag is. Zo zijn de infiltratiegebieden duidelijk te herkennen als gebieden met een lage verklaarde variantie. Ook het zuidoostelijke hoekpunt van het modelgebied wordt gekenmerkt door een lage verklaarde variantie.

Zoals bekend levert tijdreeksanalyse méér op dan alleen gesimuleerde stijghoogten. Een ander resultaat is bijvoorbeeld de hoogte van de drainagebasis. Door de resultaten van modellen van alle stijghoogtebuizen te combineren kan een ruimtelijk beeld verkregen worden van het verloop van de drainagebasis.
Hiertoe moet echter wel gekozen worden, bij welke modellen men vertrouwen heeft in de resultaten. Het is bijvoorbeeld niet te verwachten dat modellen met een slechte fit of zeer onzekere parameters, nuttige informatie over het gebied opleveren.
Daarom werden de betrouwbare modellen gescheiden van de onbetrouwbare modellen. Een dergelijke scheiding heeft nog een ander voordeel: ook de positie van onbetrouwbaar gemodelleerde meetpunten kan ons iets leren over het gemodelleerde gebied. Het vertelt ons in welke gebieden er nog factoren aanwezig zijn die niet goed gemodelleerd zijn.
Figuur 38 toont de drainagebasis berekend met de modellen met meer dan 80% verklaarde variantie. Ook wordt getoond waar de modellen liggen met minder dan 60% verklaarde variantie.
De figuur laat echter ook zien dat de berekende drainagebasis consequente trends bevat: er zijn gebieden te vinden met hoge en lage drainagebasissen, gescheiden door gebieden met tussenliggende waarden voor de drainagebasis. Dit is ook wat men verwachten zou en sterkt daarom het vertrouwen in het verkregen resultaat.



Figuur 38: Links, drainage basis t.o.v. NAP, zoals berekend met de modellen met meer dan 80% verklaarde variantie van putten met een filter van minder dan 20 m diep. Rechts, de ligging van modellen van putten met een filter van minder dan 20 m diep met minder dan 60% verklaarde variantie.

5.2 Stap 2: het gebruik van de statistische indicatoren in het Noordhollands Duinreservaat

De tweede stap van het onderzoek was het gebruik van de in hoofdstuk 2 besproken indicatoren. Door de modellen van de putten in het Noordhollands duinreservaat steeds volgens andere criteria te ordenen, konden problemen geïdentificeerd en soms verholpen worden.

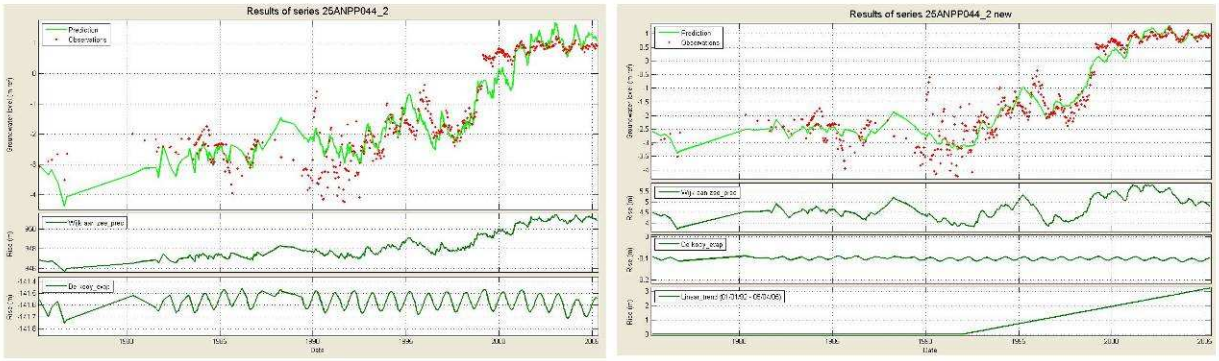
5.2.1 Identificeren van trends in het gebied op basis van extreme parameter-waarden

Zoals besproken in paragraaf 2.5.1 kunnen onrealistische waarden van zowel M0 als de drainagebasis duiden op een ontbrekende trend. Door de modellen te ordenen volgens de waarden van deze parameters kostte het weinig moeite om de modellen met extreme parameterwaarden te vinden.

Als voorbeeld beschouwen we de put 25ANP044, filter 2. Het neerslag- en verdampingmodel van deze put heeft een hoge verklaarde variantie (84%); dit is te zien in Figuur 39. De parameterwaarden zijn echter onrealistisch: een drainagebasis van -808 m en een M0 van 460000 dagen.
Dit zou er op kunnen duiden dat er een trend ontbreekt. Het is echter niet eenvoudig te zeggen wanneer deze trend moet beginnen en ophoudt. Door de geschiedenis van het gebied in overweging te nemen, met name de tijdstippen waarop ingrepen gedaan werden, en door de stijghoogtereeks zelf te bekijken, kan men wel hypotheses formuleren en testen. Zo lijkt het erop dat er een stijgende tendens in de

stijghoogten zit vanaf 1992; dit jaartal valt ook samen met de afronding van de werkzaamheden aan de infiltratiepanden.

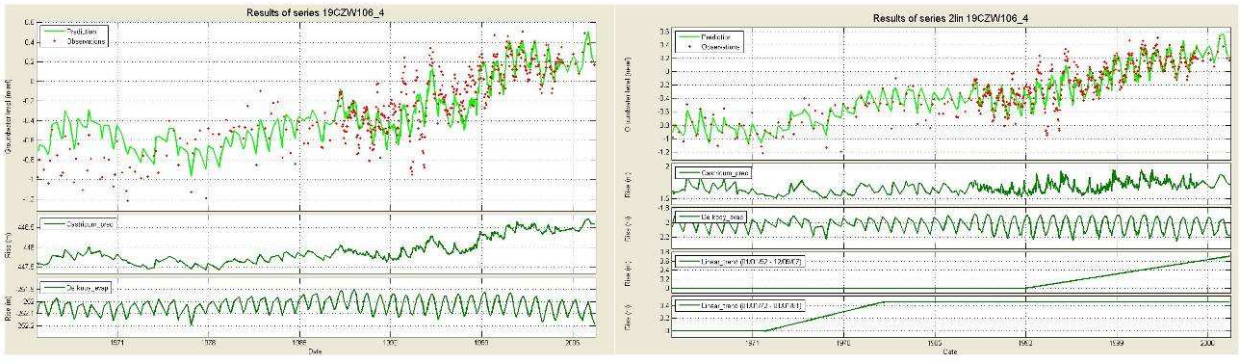
Door een lineaire trend vanaf 1992 toe te voegen aan het model, wordt een verklaarde variantie van 94% bereikt en zijn de M0 (2300 dagen) en de drainagebasis (-2.2 m) een stuk realistischer. Ondanks de onzekerheid over de oorsprong van deze trend en de precieze begindatum en einddatum, lijkt het model met trend geloofwaardiger dan het model zonder trend, omdat de gevonden modelparameters realistischer zijn. De voorspellende waarde van het model met trend is beperkt, omdat het niet te verwachten is dat de lineaire trend eindeloos doorgaat, terwijl voorspellingen met dit model hier wel van uit zullen gaan. De voorspellende waarde van het model zonder trend is echter nog lager, omdat de IR functie hier zo bepaald is dat ook hier de trend eindeloos zal doorgaan, terwijl de model parameters onrealistischer zijn.



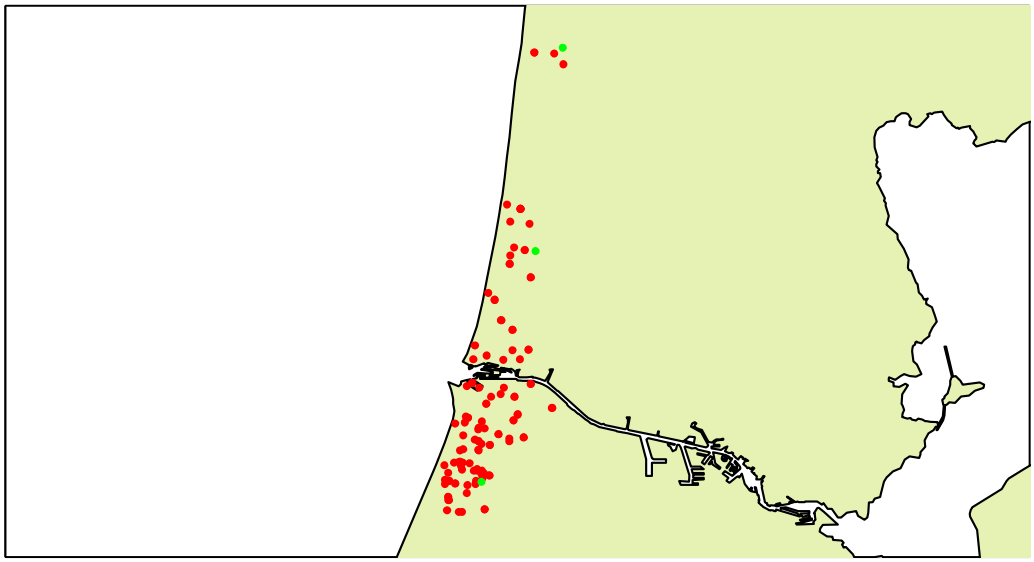
Figuur 39: links, de gemeten en gesimuleerde stijghoogten van put 25ANPP044, filter 2, met neerslag en verdamping. Rechts, met ook een lineaire trend toegevoegd vanaf 1992. Had het linkermodel een drainagebasis van -808 m en een M0 van 460000 dagen, het rechter heeft een drainagebasis van -2.2m en een M0 van 2300 dagen

In appendix B is een lijst opgenomen van de modellen waarin op deze manier trends gevonden werden, met de verklaarde variantie en de gevonden parameters met en zonder trend.

De gevonden trends kunnen in 2 groepen worden ingedeeld: putten met stijgende trends vanaf 1992 (zie Figuur 41, en putten met twee trends: een stijgende trend tussen 1972 en 1981, en een stijgende trend vanaf 1992 (zie figuur 42).



Figuur 40: modellen van put 19CZW106 filter 4. Links, met neerslag en verdamping levert het model een verklaarde variantie op van 73%, maar met onrealistische parameters: een drainagebasis van -196 m en een M0 van 205109 dagen. Rechts, een model met 2 lineaire trends. De verklaarde variantie is hier 85%, en de drainagebasis -0.5m. M0 is nu 739 dagen.

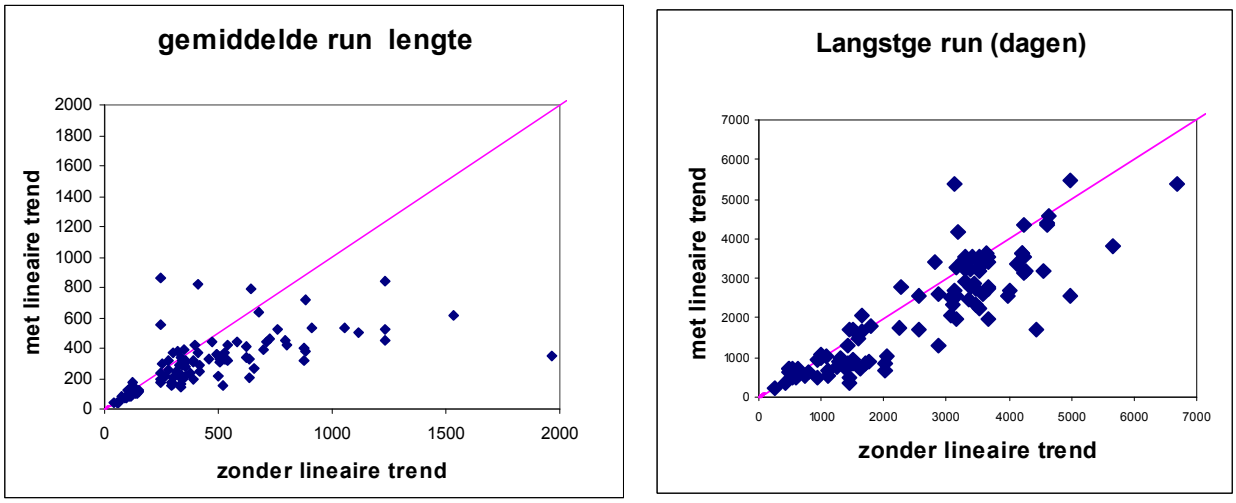


Figuur 41: de rode punten markeren de ligging van de stijghoogtemeetpunten die beter gemodelleerd werden met een lineaire trend van 01/01/1992 tot heden.



Figuur 42: de rode punten markeren de ligging van stijghoogtemeetpunten die beter gemodelleerd werden met 2 lineaire trends, één van 1972 tot 1981, en één van 1992 tot heden.

De invloed die het toevoegen van een ontbrekende lineaire trend heeft op de langjarige fluctuaties wordt getoond in Figuur 43.

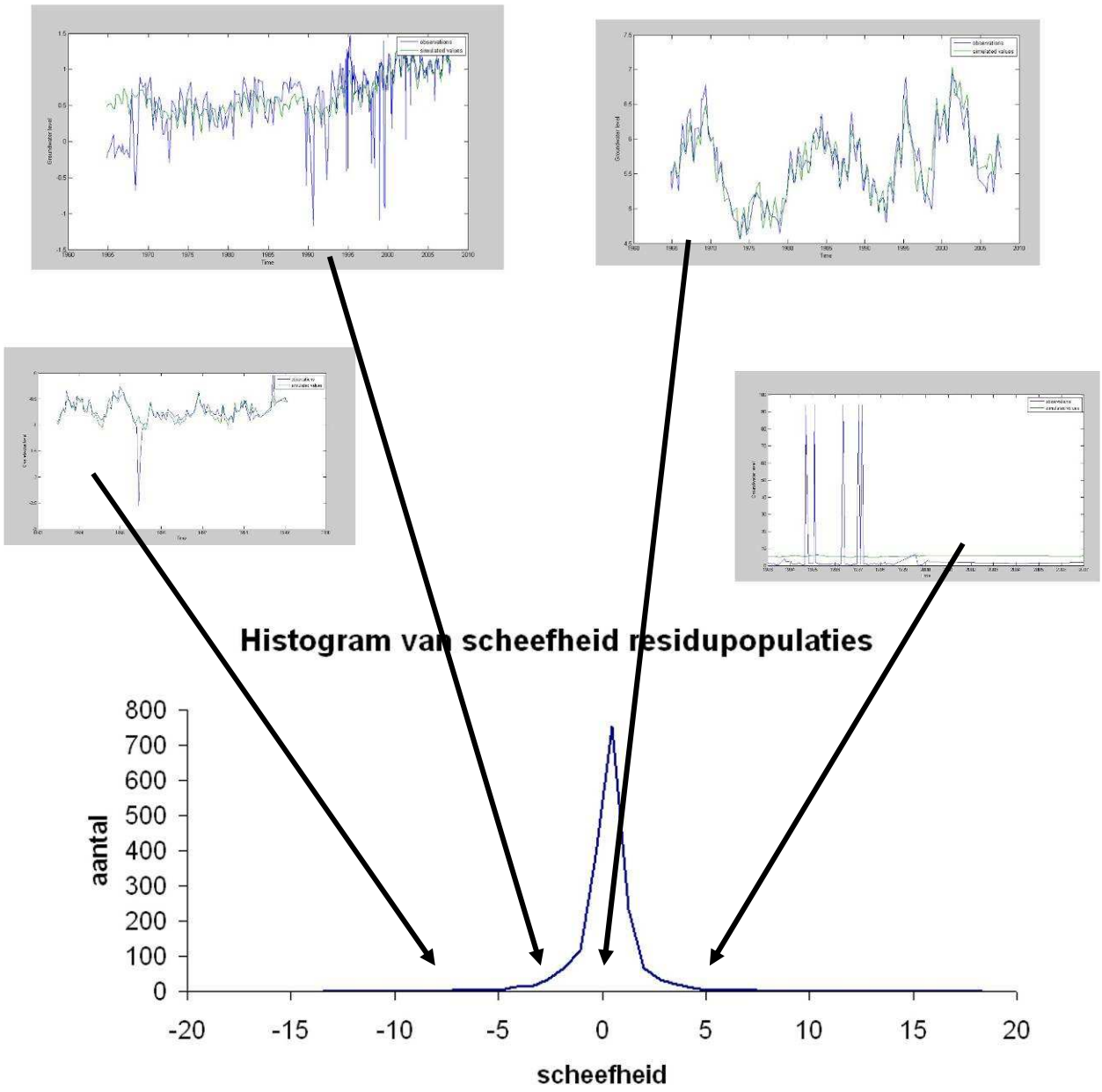


Figuur 43: de gemiddelde runlengte en de langste run voor alle modellen met lineaire trend ten zuiden van de monding van het Noordzeekanaal. Men kan zien dat in de meeste gevallen de toevoeging van een trend aan het model geleid heeft tot een iets kortere langste run en een flink kortere gemiddelde run lengte.

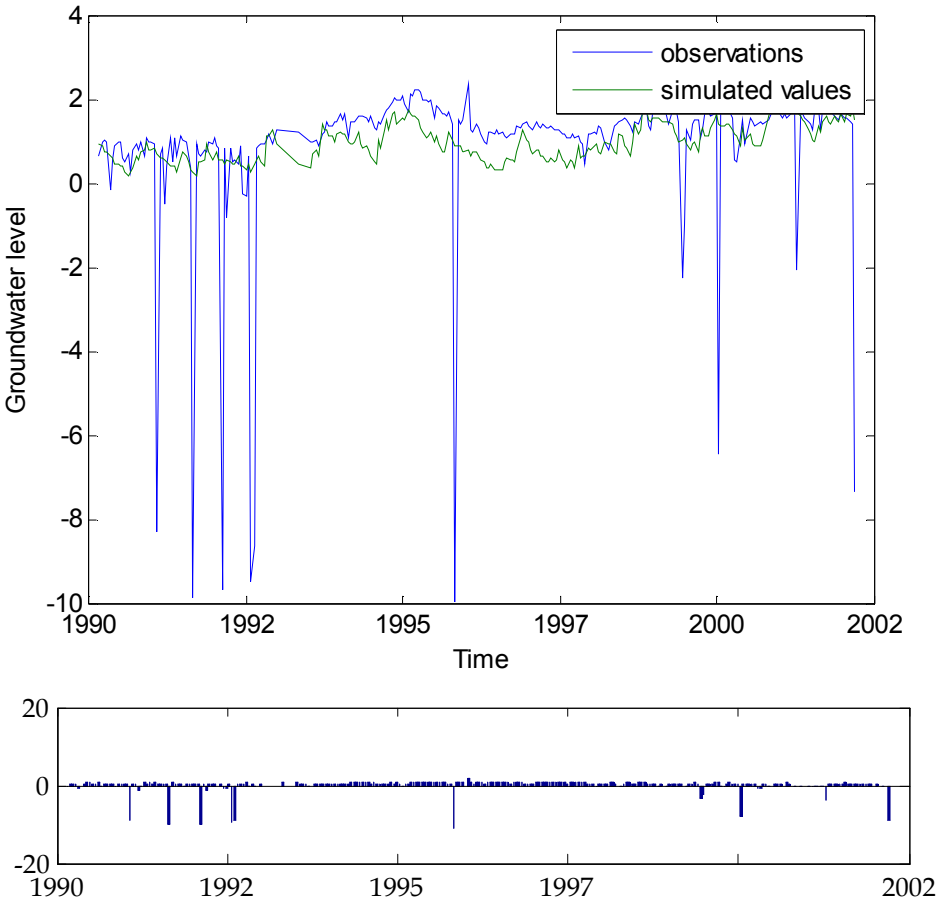
Een interessante eigenschap van Figuur 43 is dat in de meeste gevallen de gemiddelde runlengte sterker verandert dan de langste runlengte als we een ontbrekende trend toevoegen. Dit zou erop kunnen wijzen dat in veel gevallen de langste run nog onbekende oorzaken heeft en niet veel korter wordt als er een ontbrekende trend wordt toegevoegd. De andere runs worden blijkbaar wel korter, waardoor de gemiddelde runlengte sterk daalt.

5.2.2 Scheefheid

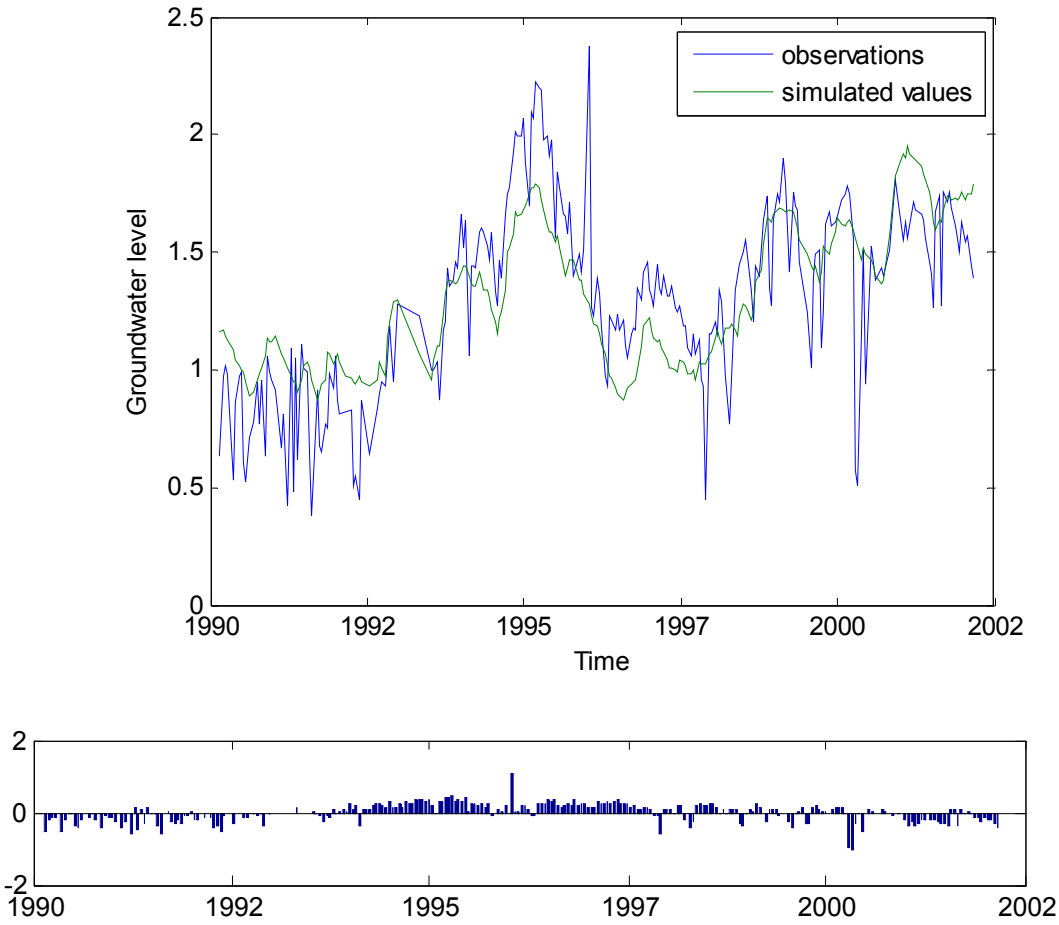
Scheefheid kan worden gebruikt om residureeksen met uitschieters te identificeren. Zulke uitschieters kunnen het effect zijn van niet gemodelleerde onttrekkingen of infiltraties. Figuur 44 toont een histogram van de scheefheid van de residupopulatie per model, en toont hoe *het sorteren volgens scheefheid kan helpen bij het opsporen van reeksen met gemiste pieken*.
Zoals besproken in sectie 2.5.4 kan de aanwezigheid van dergelijke korte, niet gemodelleerde pieken tot langjarige fluctuaties leiden, omdat het optimalisatie-algoritme de modelparameters zo kiest dat het gemiddelde residu nul is.
Een voorbeeld hiervan wordt gegeven in Figuur 45, die de gemeten en gemodelleerde stijghoogten bevat van meetput 19ANPBB 23_1. De gemeten stijghoogtereeks bevat enkele plotselinge dalingen die niet door neerslag en verdamping verklaard kunnen worden. Omdat deze dalen negatieve residuen opleveren, moeten deze gecompenseerd worden door positieve residuen. Men kan ook zien, dat alle andere residuen klein en positief zijn. Als we de betreffende dalingen niet als kalibratiedata gebruiken, en dan de modelparameters opnieuw schatten, krijgen we een andere fit met meer runs in de residuen (Figuur 46).



Figuur 44: een histogram van de scheefheid van de residupopulaties van het NH duinreservaat, met enkele representatieve voorbeelden met verschillende scheefheden (de peilen duiden de scheefheid van de residuverdeling van de getoonde modellen aan).



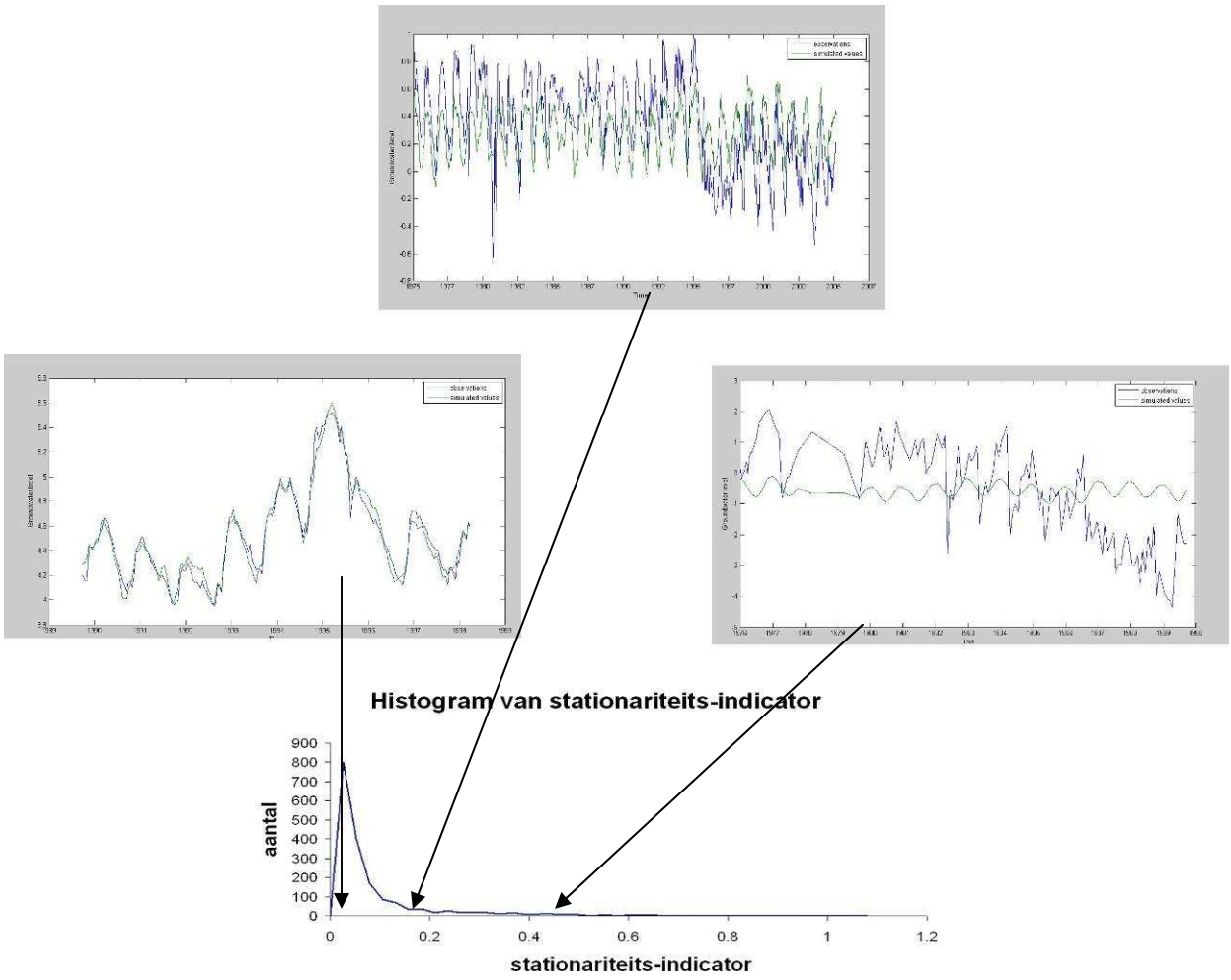
Figuur 45: boven) de gesimuleerde en gemeten stijghoogten in put 19ANPBB 23_1. De gemeten reeks bevat sterke piekerige dalingen die niet met neerslag of verdamping verklaard kunnen worden. Het model heeft een drainagebasis van -1.5 m en een M0 van neerslag van 848 dagen.
onder) de residuen die bij dit model horen zijn bijna allemaal klein en positief, om de paar grote negatieve residuen te compenseren.



Figuur 46: boven) een alternatief model van put 19ANPBB 23_1, waarin de kortstondige dalingen niet meer als kalibratiedata gebruikt zijn.
onder) de residuen van dit model. De fluctuaties zijn nog steeds lang, maar al wel korter dan in Figuur 45.

5.2.3 Stationariteit

Een niet-stationaire residureeks bemoeilijkt het gebruik van een model om voorspellingen te doen. De maat van de residuen uit het verleden zegt dan immers niets over de residuen die nog te verwachten zijn in de toekomst. Zoals vermeld in hoofdstuk 3, kan men het gemiddelde residu van de helft van de tijdreeks als een grove indicator van stationariteit opvatten. Niet-stationair gedrag kan veroorzaakt worden door het ontbreken van een verklarende reeks.
Deze grove stationariteits- indicator werd berekend voor alle modellen van het Noordhollands duinreservaat. Hiervan werd een histogram gemaakt (Figuur 47).



Figuur 47: indicator van stationariteit. Bij kleine getallen zijn de residuen stationair en heeft men bij modelvoorspellingen een idee van de mogelijke fout. Bij niet stationaire reeksen (hogere getallen) is dit niet het geval. Niet -stationair gedrag kan duiden op het ontbreken van een verklarende reeks.

De stationariteits-indicator bleek inderdaad problematische modellen op te sporen, maar de vermoedelijke reden voor het slechte resultaat was minder goed te duiden. Zoals in hoofdstuk 2 werd besproken, kunnen allerlei oorzaken tot niet-stationaire residureeksen leiden, waaronder ontbrekende stijgende en dalende trends (rechter voorbeeld in Figuur 47) en ontbrekende stap-functies (middelste voorbeeld in Figuur 47).

5.3 Autocorrelatie

Soms heeft een model langjarige fluctuaties, terwijl het niet duidelijk is waar dit door komt. Als de residuen stationair en normaal verdeeld zijn, en de parameters realistische waarden hebben, kan het zijn dat de langjarige fluctuaties uitsluitend te wijten zijn aan ruis in één of meerdere verklarende reeksen. Zoals besproken in hoofdstuk 2, geeft vergelijking (5) een verband tussen de autocorrelatie van fouten op de invoer en de daaruit volgende autocorrelatie van de fouten in de uitvoer.
Deze vergelijking is alleen geldig voor modellen die alleen uit neerslag en verdamping bestaan.

Voor het Noordhollands duinreservaat werd de autocorrelatie berekend voor een selectie van goed presterende modellen: dit waren de modellen met een verklaarde variantie van meer dan 75%, een scheefheid tussen -2 en 2 (Figuur 447) en een stationariteits-indicator van minder dan 0.1 (Figuur 47).

Van deze modellen werd de daadwerkelijk aangetroffen autocorrelatie van de residuen berekend: de berekende autocorrelatie (BAC). Vervolgens werd met vergelijking (5) de theoretische autocorrelatie (TAC) van de putten berekend.

Zoals al vermeld in Appendix A is de berekende autocorrelatie niet erg nauwkeurig voor een laag aantal punten, zeker niet waar de onderliggende autocorrelatie een lage waarde bereikt. Voor het vergelijken van de TAC en de BAC werd daarom alleen het gedeelte gebruikt waarin de TAC groter is dan 0.2
Over dit interval werd de oppervlakte onder de BAC afgetrokken van de oppervlakte onder de TAC.

Oftewel:

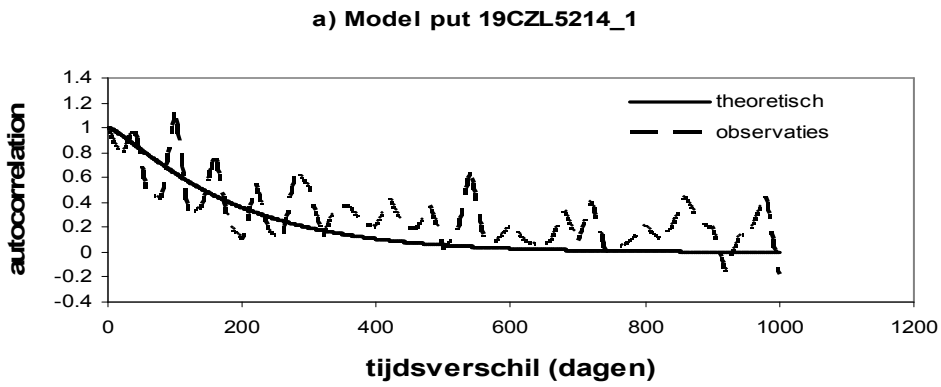
$$x_0 : TAC(x_0) = 0.2$$

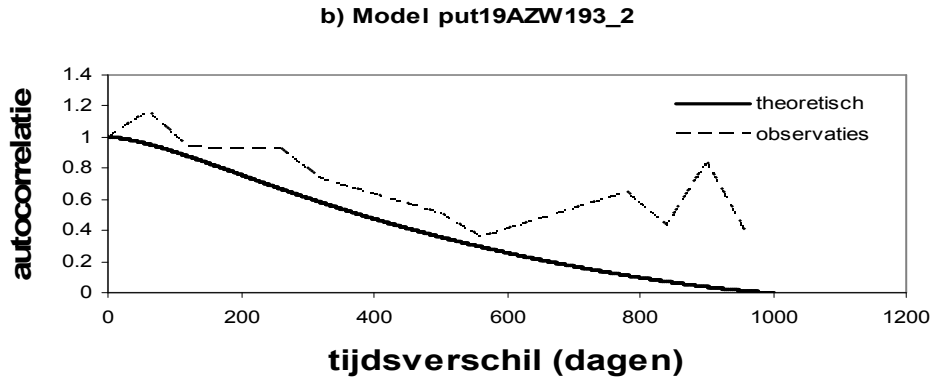
$$diff = \int_0^{x_0} \big(TAC(x) - BAC(x)\big)dx$$

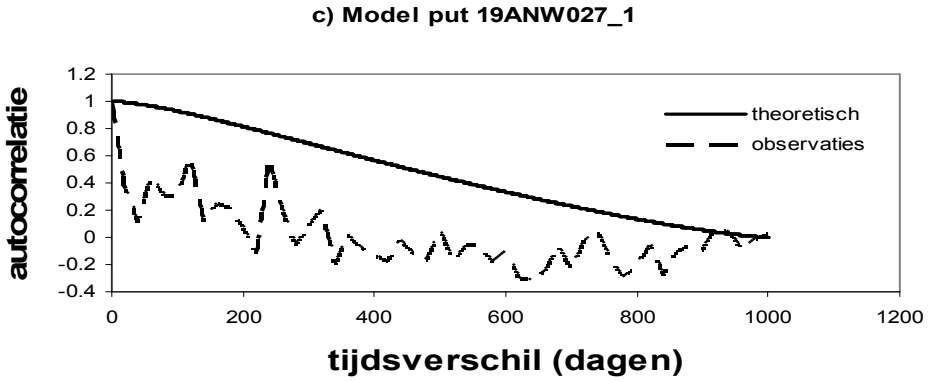
Deze integraal in (diff) werd numeriek geëvalueerd. Enkele voorbeelden van TAC en BAC worden getoond in Figuur 48. Er is een geval te zien waarin de TAC en BAC ongeveer overeenkomen (a), een geval waarin de TAC te laag is (b) en een geval waarin de TAC te hoog is (c).

Diff werd berekend voor alle putten. Als we diff tegen de verklaarde variantie uitzetten voor alle putten krijgen we Figuur 49.
Hieruit blijkt dat voor de 321 geselecteerde putten, er 25 zijn waarin de correlatie van de residuen hoger is dan de TAC. In de andere 296 gevallen is de correlatie van de residuen lager dan de TAC.
Van de putten met meer dan 90% verklaarde variantie is zelfs in alle gevallen de correlatie van de residuen lager dan de TAC.

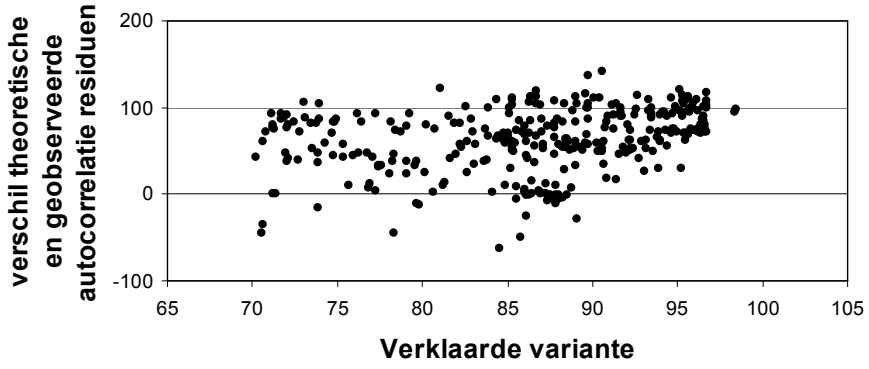
De meest plausibele verklaring hiervoor is dat ook niet gemodelleerde processen die slechts een kleine of eenmalige invloed hebben op het systeem de autocorrelatie van de residuen al flink kan doen dalen. Een te hoge autocorrelatie in de residuen is dan afwijkend gedrag dat een verklaring behoeft.







Figuur 48 vergelijking van de theoretische autocorrelatie van de residuen ten gevolge van ongecorreleerde ruis op de invoer, en de geobserveerde autocorrelatie van de residuen. In a) komen beiden redelijk overeen. In geval b) is de geobserveerde autocorrelatie hoger dan de theoretische. In geval c) is geobserveerde autocorrelatie lager dan de theoretische. Het geval c komt het vaakst voor.



Figuur 49 Ieder datapunt in de grafiek hoort bij een model van een put. Het verschil tussen de theoretische en de geobserveerde autocorrelatie van de residuen is in bijna alle gevallen positief; de daadwerkelijke autocorrelatie is lager dan de theoretische autocorrelatie die zou optreden als gevolg van ongecorreleerde ruis op de invoer.

6 Samenvatting en conclusies

6.1 Samenvatting kort

Een tijdreeksmodel is, zoals alle modellen, een vereenvoudigde weergave van een veel complexer systeem. Als gevolg van deze vereenvoudiging bevat ieder model fouten, en is het niet in staat om gemeten gegevens precies te reproduceren. De modelresiduen, gedefinieerd als het verschil tussen gemeten en gemodelleerde waarden, zijn het gezamenlijk resultaat van alle meetfouten en onterechte aannames.
Sommige specifieke aannames leiden echter tot karakteristieke patronen in de residuen. Als men bijvoorbeeld een nabijgelegen onttrekking niet modelleert, krijgt men vaak snelle en onverklaarbare dalingen in de grondwaterstand. *In dit rapport wordt dan ook een poging gedaan om door bestudering van de residuen inzicht te krijgen in welke factoren of processen niet goed gemodelleerd zijn.*
Een goed begrip van het modelleerproces is hierbij cruciaal, en vooral begrip van het calibratie-algoritme. Dit algoritme kiest alle modelparameters zodanig dat de grootte van de modelresiduen geminimaliseerd wordt. Modelleert men dan een systeem met neerslag, verdamping en een onttrekking met alleen neerslag en verdamping, dan worden de parameters van de neerslag en verdampingsprocessen zo gekozen dat het ontbrekende effect van de onttrekking zo goed mogelijk gereproduceerd wordt met alleen neerslag en verdamping.
Zo werkt het niet modelleren van een relevant proces ook door in de modelparameters van de processen die wél goed gemodelleerd zijn, *en zijn de uiteindelijke residuen niet precies ter grootte van de invloed van het ontbrekende proces.* Hier moet rekening mee gehouden worden bij het analyseren van de residuen.

In dit rapport werd het effect van verschillende eenvoudige verkeerde aannames en niet gemodelleerde processen bestudeerd door middel van synthetische experimenten. Bij deze experimenten werden er geen in het veld gemeten stijghoogten gemodelleerd, maar stijghoogten uit een niet bestaand, door ons zelf verzonnen systeem waarvan alle aspecten bekend verondersteld konden worden. Door dit perfect begrepen systeem op verschillende manieren te modelleren kon inzicht verkregen worden in welke aannamen tot welke residupatronen leiden.

6.2 Conclusies

Als eerste bleek, dat ontbrekende lineaire trends het gemakkelijkst kunnen worden opgespoord door naar de gevonden parameters te kijken, niet naar de residuen zelf. Voor met neerslag en verdamping gemodelleerde systemen leiden niet gemodelleerde *stijgende* trends tot een zeer groot nulde moment van de IR curve van neerslag. Deze curve wordt in essentie een horizontale lijn. Bij *dalende* trends wordt dit nulde moment bijna 0.
Door de modellen in het Noordhollands duinreservaat te ordenen volgens de grootte van de M0-parameter of volgens de drainagebasis konden er veel modellen waarin een lineaire trend ontbrak gemakkelijk opgespoord worden.
Dit type modelfout bleek ook langjarige fluctuaties in de residuen te veroorzaken.

In de synthetische experimenten bleek ook dat een ontbrekende verklarende reeks met pieken en uitschieters tot gevolg heeft dat de modelresiduen een scheve kansverdeling krijgen. Ook dit gegeven bleek van pas te komen bij het modelleren van het Noordhollands duinreservaat. Door de modellen van het gebied te ordenen volgens de scheefheid van de residuen werden er veel modellen gevonden waarin plotselinge dalingen zitten die waarschijnlijk aan onttrekkingen kunnen worden toegeschreven. Ook werd aangetoond aan de hand van voorbeelden dat het niet betrekken in het model van zulke verklarende reeksen tot langjarige fluctuaties in de residuen kan leiden.

Het bleek ook dat verschillende typen modelfouten tot een niet-stationaire verdeling van de residuen kunnen leiden. Maar juist omdat meerdere typen fouten tot dit resultaat leiden, geeft het niet-stationair zijn van een residureeks geen informatie over hoe dit komt. Hetzelfde geldt voor de aanwezigheid van langjarige fluctuaties in de residuen: omdat allerlei modelfouten tot langjarige fluctuaties kunnen leiden, geeft de aanwezigheid van langjarige fluctuaties geen informatie over wat de oorzaak is van deze fluctuaties. Daarom is het van belang om, als er niet-stationariteit of langjarige fluctuaties gevonden worden, te kijken of de andere indicatoren (extreme parameter waarden en scheefheid) wel uitkomst bieden.

Ten slotte is gebleken dat bij de best gemodelleerde meetpunten in het gebied, de autocorrelatie van de residuen steeds korter is dan te verwachten zou zijn als deze fouten uitsluitend door fouten in de invoerreeks zouden komen. Dit onderschrijft de veronderstelling dat langjarige fluctuaties op niet-gemodelleerde processen wijzen.

7 Referenties

Asmuth, J., Bierkens, M. , Maas, K., 2002: "Transfer function-noise modeling in continuous time using predefined impulse response functions", Water Resources Research 38(12)

Asmuth, J., Bierkens, M. , 2005: "Modeling irregularly spaced residual series as a continuous stochastic process", Water Resources Research 41

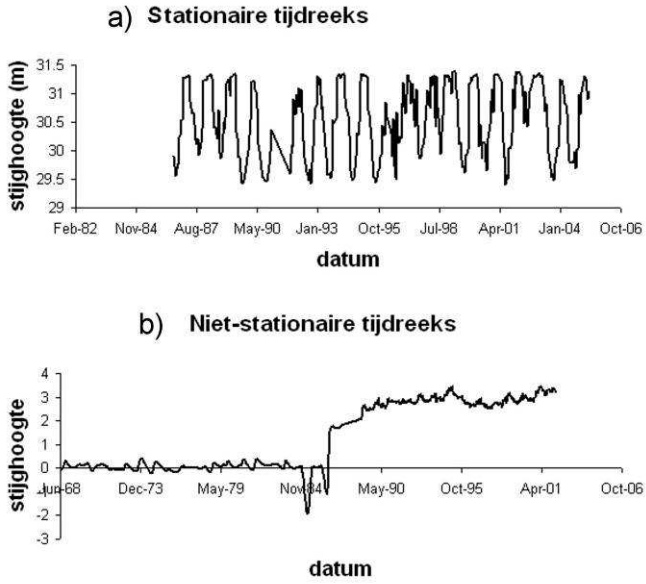
Gray R.M., Davisson L.D., 2004: "An introduction to statistical signal processing", Cambridge University press

Koster M.A.M., 1997: "De geohydrologische opbouw van het Noordhollands Duinreservaat tussen het Noordzeekanaal en Egmond aan Zee", NV PWN Waterleidingsbedrijf Noord Holland

Peters, J.H., Slings Q.L., Stakelbeek, A. ,1992: "Open infiltratie nieuwe stijl. Integrale ontwikkeling van natuur en techniek bij renovatie van een open infiltratiesysteem." H2O, 25 (19): 532-537.

Peters J.H. , Stakelbeek A., Kop M., Buscop J., Westerink H. (1989) : "Diagnoserapport infiltratiegebied Castricum". KIWA SWO 89.308

I Appendix A: Statistische achtergrond



Figuur A-1 a) een stationaire serie stijghoogten. Er zijn geen verschillen te zien in het gedrag van de tijdreeks over de hele lengte. Analyse heeft laten zien dat de stijghoogten op deze locatie bepaald worden door neerslag, en door het peil van de maas ter hoogte van Roermond.
b) een niet stationaire reeks. Het gemiddelde van de reeks verandert opeens omstreeks 1985. In dit geval kan het niet-stationaire gedrag toegeschreven worden aan het stilzetten van enkele onttrekkingsputten rond 1985.

Inleiding

In formele termen is een tijdreeks een serie metingen $x_t(t_i)$ van een variabele x op verschillende tijdtippen i. De variabele x zelf heeft een *kansruimte* (Ω, F, P) waarbij Ω de verzameling is van mogelijke waarden van x; F is de gebeurtenissen-set, de superset van Ω (de verzameling van deelverzamelingen van Ω). P is een kansmaat, een maat van de waarschijnlijkheid van de elementen van F, zodanig dat de waarschijnlijkheid van het vinden van één van de mogelijke waarden 1 is (vergelijking 1); zodanig gekozen dat alle elementen van F een positieve waarschijnlijkheid krijgen (vergelijking 2) en zodanig dat de waarschijnlijkheid van een aantal niet overlappende mogelijke uitkomsten gelijk is aan de som van de waarschijnlijkheden van de individuele uitkomsten (vergelijking 3).

$$P(\Omega) = 1 \qquad (1)$$

$$P(f) \geq 0 \text{ voor alle f} \in \text{F} \qquad (2)$$

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{n} f_i\right) = \sum_{i=1}^{n} P(f_i) \text{ voor alle niet - overlappende f} \in \text{F} \qquad (3)$$

Men kan informatie krijgen over de kansmaat van de kansvariabele door de tijdreeks van metingen te analyseren (bijvoorbeeld door het gemiddelde of de variantie van de metingen te berekenen). Hoe

langer de reeks is, hoe meer bijvoorbeeld de variantie en het gemiddelde van de metingen x_i zullen lijken op deze van x.

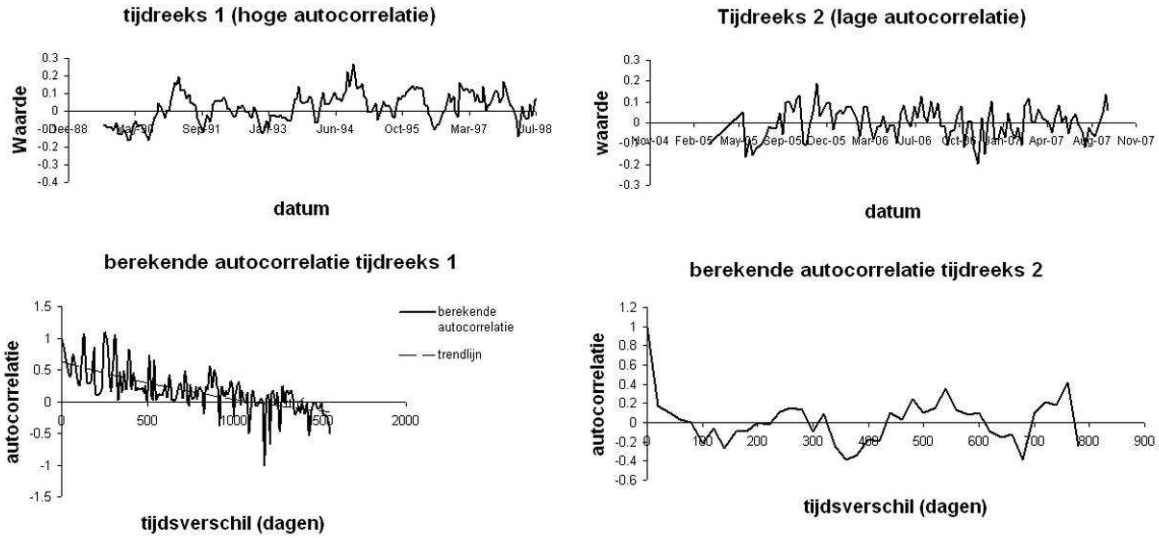
Stationariteit
Een tijdreeks wordt stationair genoemd als de kansmaat P niet verandert in de tijd; anders is het een niet-stationaire reeks (zie A-1 b). Bij een stationaire reeks zijn parameters als het gemiddelde en de variantie constant in de tijd.
In de hydrologie zijn er allerlei mogelijke redenen voor niet-stationair gedrag. Als x bijvoorbeeld de stijghoogte in een put is, zal de kansmaat P vóórdat het effect van een onttrekking merkbaar wordt, anders zijn dan erna. Daarentegen zal een put die aan het strand ligt en in feite alleen de waterhoogte van de zee meet over de jaren heen vrijwel dezelfde kansmaat houden.

Autocorrelatie
Een belangrijk aspect van de kansmaat P, dat ook door tijdreeksanalyse onderzocht kan worden is de autocorrelatie functie. Deze geeft informatie over hoe sterk de relatie is tussen 2 metingen op 2 verschillende tijdstippen. Als P bovendien stationair is, is alleen het tijdsverschil Δt tussen de metingen van belang en niet de precieze tijdstippen van de metingen. In dat geval kunnen we de autocorrelatie K uitdrukken in functie van Δt en schrijven als:

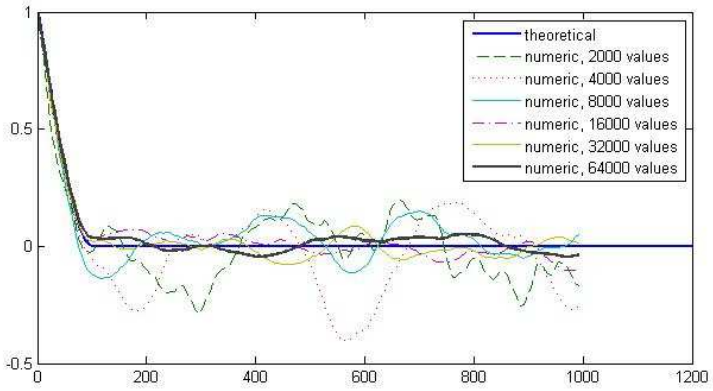
$$K(\Delta t) = \frac{E\left((X_t - \mu)(X_{t+\Delta t} - \mu)\right)}{\sigma^2} \qquad (4)$$

waarbij E( ) verwachtingswaarde betekent, μ het gemiddelde is van de reeks X, en σ de standaardafwijking van X. Als de reeks niet stationair is, is de autocorrelatie zoals in (4) niet gedefinieerd. Men moet dan de covariantie voor ieder paar van tijdstippen apart berekenen.
Als de autocorrelatie hoog is voor Δt , zullen 2 metingen $x(t_i)$ en $x(t_i+\Delta t)$ erg vergelijkbare waarden hebben. Figuur A-2 toont een reeks met een hoge en een met een lage autocorrelatie. Deze concepten zijn in hydrologisch opzicht ook belangrijk, omdat ze iets zeggen over de dynamiek van het systeem. Als de autocorrelatie van een stijghoogte reeks erg groot is, hebben we te maken met een zeer traag systeem, dat blijkbaar nauwelijks reageert op veranderingen in neerslag of verdamping. Hebben we een zeer korte hoge autocorrelatie, dan betekent dit dat het systeem snel reageert en dat het moeilijk wordt om kennis van het verleden te benutten om de toekomst te voorspellen.

Om de nauwkeurigheid van de berekende autocorrelatie functie te bekijken, werd een experiment gedaan waarbij een Gaussische witte ruis werd geconvolueerd met een functie f. Men kan aantonen dat de autocorrelatie van de uitvoer dan gelijk is aan de convolutie van f met zichzelf.
Verschillende reeksen witte ruis, allemaal met dezelfde kansverdeling maar met verschillende lengtes, werden gebruikt om uitvoer te berekenen. De autocorrelatie van de uitvoer werd vergeleken met de theoretische autocorrelatie (Figuur A-3). Het bleek dat pas als de serie 64000 punten bevatte, de berekende autocorrelatie een goede benadering was van de theoretische.



Figuur A-2 Linksboven een tijdreeks met hoge autocorrelatie: de schommelingen die de reeks vertoont duren maanden of zelfs jaren. De autocorrelatie functie die berekend werd voor deze reeks (linksonder) gaat dan ook langzaam naar 0. Rechtsboven een reeks met veel snellere schommelingen, van enkele weken tot enkele maanden. De autocorrelatie functie (rechtsonder) gaat dan ook snel naar 0.



Figuur A-3 Een autocorrelatie functie, berekend met datasets van verschillende groottes. Hoe meer punten van de tijdreeks gebruikt worden, hoe beter de berekende autocorrelatie lijkt op de theoretische. Vooral in het gebied waar de theoretische autocorrelatie 0 is, zijn de fouten groot wanneer korte reeksen gebruikt worden. In het gebied waar de theoretische autocorrelatie van nul verschilt, zijn de benaderingen veel beter.

II Appendix B: Trends in het NH duinreservaat

		Resultaten met neerslag en verdamping				Resultaten met neerslag, verdamping en een lineaire trend			
Naam	filter diepte (m)	verklaarde variantie	M0 neerslag (dagen)	verdamping sfactor	Drainage-basis	verklaarde variantie	M0 neerslag (dagen)	Verdampings-factor	Drainage-basis
19CZWP 305_2	-106.65	56.2042	1290955	10.3111	-1880.7817	62.2065	95.2282	15.6977	-1.1038
19CZWP 310_4	-60.23	56.6206	577071.8	10.8823	-316.1189	65.4511	75.3664	21.1365	-0.23072
19CZWP 310_5	-46.74	60.5166	463119.4	10.9201	-226.025	68.8823	146.7992	16.6587	-0.05045
19CZWP 310_6	-37.85	60.3143	400023.9	10.8913	-213.8313	68.5828	151.913	16.2623	-0.05955
19CZWP 310_7	-23.17	61.0218	433082.2	10.8901	-232.1664	69.0698	160.5798	16.1873	0.032678
24F069_5	-2.03	73.1414	226052	10.6287	-231.5469	82.7064	287.522	10.624	-0.46057
24F069_6	-30.5	66.0297	259135.3	10.7328	-221.7216	77.1576	219.2243	10.9572	-0.22483
25ANPP036_1	-1.42	85.0172	3636.734	10.5547	-0.94734	92.1635	2737.644	11.4138	3.9517
25ANPP037_1	-2.08	74.095	2336647	10.3787	-3839.6963	89.5976	1865.113	11.0863	0.076037
25ANPP037_2	-28.66	73.9241	12892142	10.5501	-17612.0877	89.2044	1125.836	10.5914	-1.8001
25ANPP043_2	-38.58	89.1349	187688	10.503	-218.2329	90.8092	2045.705	10.6837	-3.6948
25ANPP043_3	-54.67	87.7182	312063.8	10.7018	-262.8289	88.9583	999.2388	10.8464	-2.4448
25ANPP043_4	-101.68	56.4797	352677	11.0726	-88.3376	61.8379	8.0791	82.9638	-0.53218
25ANPP043_5	-111.67	56.4707	350136.3	11.0779	-84.7336	63.0041	16.0201	52.2758	-0.29315
25ANPP044_2	-26.08	84.4978	461650.3	10.1894	-808.3003	90.6364	2038.663	10.0308	-6.9615
25ANPP046_5	-81.09	72.6108	302686.2	10.8117	-201.0341	78.8961	339.4645	12.2441	-0.52347
25ANPP048_1	-22.01	65.4285	311202.1	10.7034	-244.9401	71.0066	298.3482	10.8074	-0.37761
25ANPP050_6	-86.66	62.4052	118263	10.4863	-145.4202	66.856	511.1993	11.5879	-0.83435
25ANPP051_6	-135.94	46.0995	166399.6	10.8247	-115.9846	52.4607	72.1107	18.377	-2.9881
25ANPP266_1	-30.96	85.3739	3399951	11.0095	-2115.8039	91.2881	1757.227	11.5682	-0.72571
25ANPP267_1	-48.25	53.9363	43464987	11.4269	2360.1095	85.6523	41.091	415.5738	24.9767
25ANPP270_2	-27.54	60.612	24832431	12.4032	40629.4373	83.2351	680.8934	10.3812	-1.3191
25ANPP271_2	-25.04	74.5152	883850.5	10.4315	-1248.6757	83.1713	327.0303	9.6966	-0.83771
25ANPP272_2	-27.41	85.1821	4902118	11.1212	-1595.6731	92.5603	479.5315	10.2738	-1.0275
25ANPP275_3	-55.38	60.5363	1385596	10.4841	-2042.5264	73.7856	1285.582	10.7942	-2.843
25ANPP277_1	-21.22	78.3284	828798.1	10.5773	-912.6036	86.071	316.3957	11.728	-0.6927
25ANPP277_2	-39.19	74.684	835278.2	10.5798	-916.612	84.6053	231.719	11.8384	-0.81621
25ANPP279_3	-22	47.2815	205784.3	11.1166	-13.2216	51.879	16.5491	68.1835	-0.19796
25ANPP405_2	-92.32	51.7172	542077.8	10.7102	-600.2038	75.3193	465.5587	11.1657	-0.54989
25ANPP451_2	-16.64	87.6881	2936816	170.1313	737370.0693	89.8708	610.3067	10.9778	-2.473
25ANPP452_5	-48.88	78.6294	702315.3	10.8167	-443.5967	83.9025	7.2245	84.725	-0.66774
25ANPP452_6	-69.91	78.9185	646053.6	10.7075	-520.6773	84.1067	4.8537	119.6909	-0.67591
25ANPP452_7	-79.97	78.3392	681707.3	10.9444	-291.8685	83.0335	208.7485	18.1433	0.73993

25ANPP452_8	-90.87	73.4146	668181.9	10.967	-261.8401	81.1784	2.9568	155.3798	-0.76189
25AZOP003_1	-6.38	91.7702	434365.5	10.5984	-516.0844	97.0904	1110.569	10.3489	-1.294
25AZPP002_2	-29.5	45.1978	321615	10.3463	-546.0468	66.659	438.7588	10.8994	-0.98951
25AZPP008_2	-25.04	50.4821	145913.5	10.5495	-199.4881	73.1172	381.2403	10.793	-0.4742
25AZPP014_1	-37.05	63.901	544416.5	10.7409	-575.698	80.0295	309.6006	10.5414	-0.62669
25AZPP027_2	-26.92	68.8439	2.16E+08	10.6008	-277066.0545	79.548	644.9882	10.677	-0.72144
25AZPP029_1	-4.69	65.8229	92595073242066	10.7005	-10394.1969	81.0927	1269.418	10.5345	-2.0647
25AZPP029_2	-27.05	67.6155	4	10.7377	-34434.3277	82.497	1069.768	10.5006	-2.3767
25AZPP035_2	-22.11	61.4482	5810464	10.3548	-9776.5495	83.1227	861.0638	10.9564	-1.5249
25AZPP052_3	-114.61	45.0563	1171351	10.5288	-1641.5234	56.4885	255.6909	11.9765	-0.77041
25AZPP054_2	-23.87	51.4643	1E+08	9.5763	-295158.6608	61.2594	343.1757	25.5745	6.2116
25AZPP055_1	-2.5	72.7483	267608.2	11.1754	-62.3997	85.5072	399.6975	10.5674	2.2794
25AZPP057_2	-29.78	62.1067	4440736	10.1074	-9252.3858	79.4555	470.6377	10.989	-1.4024
25AZPP203_1	-5.06	86.2226	261360.6	11.5072	74.2083	93.0909	579.1627	10.9573	0.25678
25AZPP203_2	-40.01	84.3748	241884	10.7833	-207.382	90.1502	349.1102	10.7446	0.057691
25AZPP204_1	-24.97	48.2263	153935.1	10.3363	-229.1711	54.9244	270.215	10.7435	0.022613
25AZPP208_3	-26.04	71.4576	405743.7	10.5506	-599.5497	82.0605	368.558	10.7751	0.38268
25AZPP209_2	-25.38	81.24	129878.1	11.0529	-55.86	86.8557	300.3703	10.8453	0.33298
25AZPP215_2	-15.24	75.0499	201524.3	10.9288	-166.1019	86.7362	469.751	10.8283	0.42659
25AZPP215_3	-29.99	75.1	589743.3	10.6584	-749.2212	86.5383	357.0324	10.879	0.37946
25AZPP216_1	-2.94	74.9483	861136.5	10.9161	-734.8072	88.4856	455.5849	10.8488	0.37087
25AZPP216_2	-11.91	76.1768	286379.5	10.7324	-327.799	87.828	418.6193	10.866	0.29409
25AZPP216_3	-29.9	76.0937	877712.2	10.5957	-1204.7925	87.3091	328.6947	10.9279	0.28279
25AZPP218_2	-11.03	71.5854	151250.5	10.9564	-117.7891	82.5634	357.296	10.9039	0.47401
25AZPP218_3	-31.03	67.914	232845.8	10.8198	-234.3083	81.5521	268.9047	11.034	0.53684
25AZPP221_2	-25.97	80.9808	812788.7	10.4951	-1067.2898	89.9188	197.6775	10.9145	-0.62536
25AZPP228_1	-9.44	84.3583	268415.7	10.6251	-301.1077	93.8188	671.3461	10.3613	-2.4795
25AZPP228_2	-12.62	84.0773	269659.2	10.419	-388.1673	91.73	448.5696	10.4205	-0.28163
25AZPP229_3	-28.51	64.3863	131103.4	10.9245	-99.4711	82.4292	276.2604	10.7487	0.32079
25AZPP232_2	-38.7	83.6858	3325487	10.9049	-2216.0806	89.6389	391.8304	10.2944	-0.8344
25AZPP233_1	-5.16	87.6033	171731.6	11.0841	-65.7056	96.2747	604.7799	10.632	-0.00063
25AZPP233_2	-40.19	84.6771	543471	10.6619	-570.4391	93.0072	328.881	10.4797	-0.32167
25AZPP234_2	-30	61.2444	539539.1	10.4328	-839.3075	82.8197	510.7567	10.761	-0.28177
25AZPP235_2	-30	57.8384	710726.8	10.4056	-1137.0083	81.2308	536.7126	10.9782	-0.24786
25AZPP237_1	-5	48.9901	606668.9	10.4711	-908.543	70.7483	439.8196	10.8192	-0.15876
25AZPP239_2	-30	54.1488	891453.9	10.1302	-1827.8265	76.5928	333.0409	10.6977	-0.29236
25AZPP240_1	-4.07	79.2541	1179472	11.3325	-116.0882	92.4332	568.3006	10.9511	-0.26335
25AZPP243_1	-3.51	79.5472	116681866.43E+08	11.1309	-495.3572	93.255	1599.317	10.9551	-0.37535
25AZPP254_1	-40.66	89.0583	4524613	11.097	-308713.527	95.0507	1137.172	10.5167	-3.7635
25AZPP255_2	-25.62	54.5155	42559423	11.0087	-2820.8365	80.8499	781.2897	11.0945	-1.4437
25AZPP256_1	-29.07	55.5014	27357891	11.345	-3332.6773	80.7402	1021.121	10.8691	-2.5372
25AZPP258_1	0.04	70.8542	1287917	11.9862	26276.1942	87.8465	1618.058	10.3764	-1.2787
25AZPP259_2	-25.56	86.1761	1452168	10.4016	-2070.0027	92.7546	712.7126	10.8423	-1.3825
25AZPP260_1	-28.59	50.2099	22094989	10.1521	-2921.2046	68.2286	708.5475	14.0904	1.9354
25AZPP264_2	-29.88	85.8977	1139253	11.1104	-10127.638	93.716	1003.986	10.6347	-2.2578
25AZPP401_2	-104.01	52.6032	220931.4	10.6907	-251.7963	74.9651	563.1126	11.1423	-0.56112
25AZPP401_3	-119.97	54.8455	444930.8	10.0877	-941.7766	68.9744	703.2154	10.5999	-1.6278
25AZPP402_2	-26.68	51.7127	5456923	12.2767	7809.8886	80.1124	463.1043	10.6248	-0.25234
25AZPP402_3	-61.71	52.3763	3706701	11.8703	2864.8215	79.3167	489.2477	10.8977	-0.08422
25AZPP402_4	-109.48	60.3567	4625652	11.5573	1229.1793	83.8235	470.577	10.72	-0.26395
25AZPP402_6	-124.79	70.2638	1139253	13.5018	38912.7893	78.2268	388.3414	10.6518	-2.5771

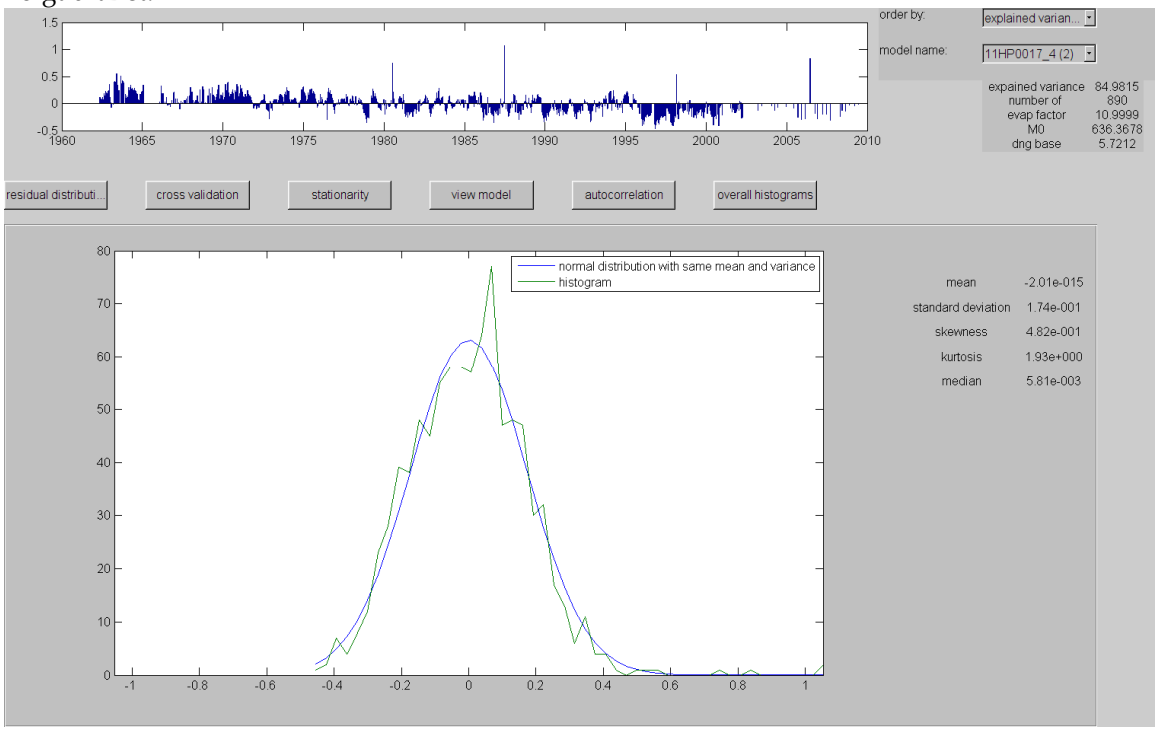
25AZPP409_1	-3.5	78.8262	1338474	10.5207	-1891.6761	95.6798	1061.164	10.5454	-0.85531
25AZPP409_2	-32.5	70.7578	1340726	10.3668	-2229.8263	87.036	601.2808	10.6112	-1.0236
25AZPP409_3	-60.5	74.1751	1879889	10.5045	-2707.2941	87.9044	641.4253	10.6778	-1.0397
25AZPP409_4	-98.5	72.864	2105062	10.5283	-2950.4221	87.5795	589.7756	10.6043	-1.0523
25AZPP415_2	-62.51	46.8194	446669.9	10.3713	-739.8539	66.2208	472.7591	11.1052	-1.1255
25AZPP415_4	-134.5	45.1219	895841.6	10.4722	-1343.5422	64.7439	377.9691	11.7059	-2.8413
25AZPP701_2	-34.2	73.7784	176170.4	10.5876	-196.269	82.0441	277.8767	11.1828	-0.74292
25AZPP701_3	-53.2	71.1235	145643.5	10.6992	-136.0019	81.5467	300.0534	10.9827	-0.85463
25AZPPR304_1	-4.5	42.0909	15077.91	10.0255	-31.7339	88.4943	1823.461	10.1771	-1.9924
25AZPPR309_1	-5.47	72.0293	2467732 4	11.4835	3607.3169	88.8755	1643.598	10.224	-1.3859
25AZPPR313_1	-3.81	61.5811	6576213 7	11.5621	17981.4851	82.6391	1918.609	10.2131	-2.3425
25AZPPR317_1	-3.2	67.3218	4080132 4	11.5061	7454.4872	85.9494	1464.809	10.2393	-1.2083
25AZPPR334_1	-4.5	60.9912	3793843 8	11.7693	23109.8023	91.8346	1277.708	10.2152	-1.7468
25AZPPR337_1	-4.5	76.1273	6545777 4	11.5491	16517.1569	92.4803	1245.274	9.9561	-2.0085
25AZPPR344_1	-4.14	71.3433	6096374 9	11.9363	53625.3116	94.641	1439.981	10.4711	-2.3147
25AZPPR345_1	-4.95	86.6578	3486632 0	11.6572	14905.5481	95.6902	1392.638	10.2278	-1.9582
25AZPPR356_1	-3.25	63.8829	9574466 9	11.9441	85433.1977	91.9129	1259.054	10.3306	-1.9392

III Appendix C: Technische documentatie Residual Analyzer

Structuur

Start

Het programma word gestart met het source-bestand ResidualAnalyserMain. Start Matlab, zorg dat de ResidualAnalyser in het pad staat en geef deze bestandsnaam op in het commandoscherm. Er verschijnt een File Selector. Selecteer daarmee op uw harde schijf een geldige Meyanthes-projectfile waarvan u de residuereeksen wilt analyseren. Op het schemr verschijnt het hoofdformulier, dat er (bijvoorbeeld) als volgt uitziet:



Formulieren en panelen

Het programma heeft een hoofdformulier. Dit formulier is grotendeels leeg, maar er staat wel een aantal knoppen op. Als men op een knop drukt, wordt de lege ruimte op het hoofdformulier gevuld met een paneel met specifieke informatie erop.

Source bestand	***Beschrijving***
MainPanel.m	Hoofdformulier
panelDistribution.m	Paneel dat de frequentie-verdeling van de residuen toont, zodat de residuen beoordeeld kunnen worden op scheefheid.
panelStationarity.m	Paneel dat het gemiddelde en de variantie van de eerste en tweede helft van een residureeks vergelijkt,zodat de residureeks beoordeeld kan worden op stationariteit.
panelHistogram.m	Paneel dat een histogram van de modelparameters toont, zodat de modellen beoordeeld kunnen worden op uitschieters.
panelAutocorrelation.m	Paneel dat de autocorrelatie van de residuen toont en vergelijkt met de theoretische autocorrelatie veroorzaakt door ruis op de neerslag, wat (ook) een aanwijzing kan opleveren over het missen van verklarende reeksen.
panelCrossvalidation.m	Paneel dat het beschouwde model 2x kalibreert: een keer met de

	eerste helft van de observaties, en een keer met de tweede helft van de observaties. De resultaten worden vergeleken met de parameters bepaald met alle observaties. Als ze statistisch gelijk zijn is het systeem gedurende de analyseperiode stationair geweest en zijn er geen onbekende verklarende factoren bijgekomen.
panelModelview	Paneel dat de modelresultaten en de observaties toont.

Data

De gegevens waarvan dit programma gebruik maakt worden uit een Menyanthes-file gehaald. De M-struct zelf (waarin Menyanthes normaal gesproken de tijdreeksmodellen opslaat) wordt echter niet gebruikt. In plaats daarvan wordt alle informatie opgehaald door de subroutne testset.m
Deze biedt get-functies aan waar de andere m-files in het programma gebruik van maken. Hierdoor is de rest onafhankelijk van de implementatie van de m-struct.

Menyanthes

Menyanthes zit ook verwerkt in dit programma. De optimalisatieroutine marqlev.m wordt aangeroepen vanaf dit programma, waardoor alle routines die hierdoor aangeroepen worden, dus ook gebruikt worden (tsmoptim, prec, enzovoort). Er is echter ook veel Menyanthes-code die niet gebruikt wordt.

GUI Tools

Een aantal m-files biedt functionaliteit aan die niet rechtstreeks verband houdt met residu-analyse, maar die ook buiten dit programma van nut kan zijn. In bijna alle gevallen gaat het om routines die uicontrols creeren, plaatsen of de data ervan inlezen of setten. Concreet gaat het om de volgende files:

Naam	***Beschrijving***
kwrWaitmouse.m	Verandert de muispointer in een soort van uurwerk.
kwrNormalMouse.m	Verandert de muispointer terug in het normale pijltje.
WriteCellarrayCVS.m	Schrijft een cell array als een cvs bestand. Iedere cell van de cell array wordt naar een cel van Excel vertaald.
Isfile	Controleert of een bestandsnaam geldig is.
kwrAddErrorBars	Voegt error bars toe aan plot.
kwrControlTable	Plaatst uicontrols op een paneel.
kwrGetUIcontrolData	Haalt user-input uit een editbox, en controleert of de data in de inputbox aan een bepaald formaat voldoet.
kwrLabelTable	Maakt een tabel van uilabels.

Statistische Tools

Deze routines bieden statistische functionaliteit aan.

kwrHistogram	Berekent de categorieën en telt het aantal samples per categorie voor het maken van een histogram.
RunsStatistics	Vindt de lengte van de kortste en langste run in een reeks, berekent de gemiddelde run lengte, enzovoort.

