
Modelkalibratie

Modelkalibratie

Het automatisch ijken van grondwatermodellen

Bundel van lezingen die op 7 november 1996 gehouden zijn tijdens
een bijeenkomst van de Nederlandse Hydrologische Vereniging

© 1997 Nederlandse Hydrologische
Vereniging

Alle rechten voorbehouden. Niets uit
deze uitgave mag worden verveelvou-
digd, opgeslagen in een geautomatiseerd
gegevensbestand, of openbaar gemaakt,
in enige vorm of op enige wijze, hetzij
elektronisch, mechanisch, door foto-
kopieën, opnamen, of op enige andere
manier, zonder voorafgaande schrifte-
lijke toestemming van de uitgever.

CIP-GEGEVENS

Modelkalibratie

Modelkalibratie: Het automatisch ijken
van grondwatermodellen / M.R. van der
Valk en H. Boukes. — Utrecht:
Nederlandse Hydrologische Vereniging
Met referenties, illustraties.
ISBN 90 803565 1 4
NUGI 671, 816, 833
Trefwoorden: hydrologie,
modelkalibratie, grondwater

Eindredactie:

H. Boukes en M.R. van der Valk

Lay-out:

M.R. van der Valk – Amsterdam

Oplage: 750 exemplaren

Secretariaat NHV

Postbus 8064

9702 KB Groningen

Voorwoord

Als een werkgroep meent een boodschap te hebben voor een grotere groep mensen, moet er gezocht worden naar een manier om die boodschap te presenteren. De Werkgroep Modelkalibratie van de Nederlandse Hydrologische Vereniging heeft in eerste instantie besloten haar bevindingen tijdens een lezingendag naar buiten te brengen. Deze lezingendag heeft op 7 november 1996 plaatsgevonden in De Reehorst in Ede. De verhalen van die dag zijn ook schriftelijk vastgelegd, en in deze bundel uitgebracht. Het doel hiervan is mensen te informeren die op deze dag niet aanwezig konden zijn, maar tevens dient het als blijvende herinnering voor degenen die de lezingen wel bij konden wonen.

Nu is een lezing een ander medium dan een boekje en stelt een figuur op een overhead sheet andere eisen dan een plaatje in een boek. Zo is een uniforme vormgeving van een boekje van belang, onder meer om de eenheid in boodschap te benadrukken.

Op basis van onze ervaringen met STROMINGEN, het vakblad van de Nederlandse Hydrologische Vereniging, zijn de bijdragen van de Werkgroep verwerkt. In de eerste plaats is voor een uniforme vormgeving zorg gedragen. Daarnaast hebben we de teksten geredigeerd. Deze redactie was erop gericht om spel- en typfouten uit de teksten te verwijderen, de artikelen inhoudelijk op elkaar af te stemmen en de formuleringen zo helder mogelijk de boodschap te laten weergeven. Daarnaast zijn aanwijzingen gegeven om de figuren duidelijk en voor zich zelf sprekend te laten zijn.

De uitgangspunten hierbij waren dat de auteur de eindverantwoordelijkheid voor de eigen tekst en figuren blijft dragen, en dat de Werkgroep Modelkalibratie zorg draagt voor de onderlinge afstemming.

Het was voor ons een zeer plezierige ervaring om zo inhoudelijk met de bijdragen bezig te mogen zijn, en we hopen oprecht dat onze inspanningen de boodschap van de Werkgroep Modelkalibratie ten goede komen.

Amsterdam, januari 1997

Michael van der Valk
Harry Boukes

Inhoud

T.N. Olsthoorn	Toelichting op de Werkgroep Modelkalibratie en deze lezingenbundel	1
H.J.M. Rolf	Hoezo... 'een goed model'	7
W.J. Zaadnoordijk A. Stein	Doelfunctie en parameters	21
C.J. Hemker	De betrouwbaarheid van parameters bij automatische kalibratie	39
J.W. Kooiman	Een strategie voor het kalibreren	53
T.N. Olsthoorn	Kalibratiegereedschappen	67
P.T.W.J. Kamps T.N. Olsthoorn	Optimalisatie van een stationair model met MODINV	75
J.H. Hoogendoorn B. Minnema C.B.M. te Stroet	Kalibratie met behulp van Monte Carlo en MODFLOWP: enkele ervaringen	89
P.E.V. van Walsum A.A. Veldhuizen	Gestructureerde kalibratie van een geïntegreerd model (SIMGRO): praktijkvoorbeeld (Fochteloërveen en omgeving)	101
A. Leijnse T.N. Olsthoorn	Sluiting en follow-up	117
	Terminologie	121
	Adressen	123

Toelichting op de Werkgroep Modelkalibratie en deze lezingenbundel

Theo Olsthoorn is als hoofd
van de sector Hydrologie
werkzaam bij
Gemeentewaterleidingen
Amsterdam.

T.N. Olsthoorn

Waarom deze Werkgroep?

De NHV-Werkgroep Modelkalibratie heeft bestaan in de periode 25 januari 1995 tot en met 7 november 1996. Zij is voortgekomen uit een zekere mate van ongerustheid over de manier waarop wij hydrologen grondwatermodellen plegen te ijken, of — om een ander woord te gebruiken — te kalibreren. Het merendeel van de ijkingen van grondwatermodellen vindt op dit moment nog altijd plaats via een methode die kan worden samengevat in de uitdrukking ‘trial and error’ of, in goed Nederlands: ‘gissen en missen’. Het is echter zeer de vraag of het eigenlijk wel mogelijk is om een complex model via deze ‘methode’ op verantwoorde en reproduceerbare wijze te ijken. We doen in elk geval maar al te vaak alsof dit als vanzelfsprekend het geval is. In onze rapporten wordt dan ook vaak gesproken van een ‘geslaagde ijking’, die binnen enkele tientallen runs zou zijn bereikt.

Het spreekt vanzelf dat een model met de hand kan worden verbeterd en dat een ervaren hydroloog daar beter toe in staat zal zijn dan één die net begint. Het blijft echter de vraag in hoeverre zo’n ijking eenduidig is. Een ijking via de methode ‘proberen’, ook al gebeurt dit met een grote dosis inzicht, is zelden systematisch; nog minder vaak is zij reproduceerbaar. In elk geval zullen we via deze methode er achteraf niet zeker van kunnen zijn of we het best mogelijke resultaat hebben behaald, laat staan dat we kunnen zeggen wat de betrouwbaarheid van de verkregen parameters is.

Een klein voorbeeld wat mezelf betreft. Uit een modelstudie uit het begin van de jaren tachtig, waarin moest worden uitgerekend hoe groot de verlaging van de grondwaterstanden aan de Nederlandse grens zou zijn als gevolg van de bruinkoolwinning in Noordrijn-Westfalen, kwam ca. een halve meter als antwoord naar voren; uiteraard verkregen na uitvoerige ijking van het model. Vervolgens werd ook van Duitse zijde een grondwatermodel gemaakt, van hetzelfde gebied. Dit model berekende echter aan de landsgrens een verlaging van ca. vijf meter; uiteraard eveneens na uitvoerige ijking. Wie had het nu bij het rechte eind? Ik wil hier nu niet verder op ingaan, maar duidelijk is wel dat ijking meer is dan een tiental runs uitvoeren met een model. De consequenties van een niet adequaat geijkt model kunnen klaarblijkelijk aanzienlijk zijn. Het geeft op zijn minst te denken, dat twee handgeijkte modellen van hetzelfde gebied zulke verschillen kunnen geven bij voorspellingen. Zouden we vaker op onafhankelijke wijze modellen van eenzelfde gebied maken, dan zouden

frappante verschillen, naar mijn stellige overtuiging, vaker aan het licht komen.

De conclusie is dan ook, dat ijking van modellen systematischer moet. In elk geval moet zij reproduceerbaar zijn. Tevens dient de betrouwbaarheid van de geoptimaliseerde parameters aan objectieve criteria te worden getoetst en beoordeeld. De volgende vraag is of het ijken van grondwatermodellen systematischer, reproduceerbaarder en objectiever kan, en zo ja, of dit ook in de dagelijkse hydrologische praktijk mogelijk en haalbaar is.

Deze vragen staan in dit boek centraal. We zullen daarbij mathematische kalibratiepakketten te hulp roepen, als zijnde de (vermoedelijk) enige mogelijkheid om objectiviteit en reproduceerbaarheid van onze ijkingen te bereiken. Het moment van deze lezingendag is daarvoor goed gekozen, aangezien goede en bruikbare kalibratiesoftware inmiddels in ruime mate op de markt voor hydrologen beschikbaar is. We zullen er in de praktijk echter ook mee moeten leren omgaan. Wat dat betreft is er weinig verschil met de grondwatermodellen die vandaag de dag worden gebruikt. Ook deze hadden hun tijd nodig om ingeburgerd te raken.

Waarom, zo kan men zich afvragen, maken we tot nu toe nog niet op grote schaal gebruik van deze pakketten? Hierop plegen hydrologen uit de praktijk verschillende antwoorden te geven, zoals:

- er zouden geen dan wel geen goede of geen toereikende (kalibratie-) gereedschappen beschikbaar zijn;
- de theorie achter de mathematische kalibratie zou onbegrijpbaar zijn, hoogstens iets voor knappe wiskundigen, die verder weinig kaas hebben gegeten van de hydrologische praktijk;
- de gereedschappen zouden zo wiskundig zijn; als hydroloog heb je dan geen idee meer wat er gebeurt. Het resultaat is dan ook niet te vertrouwen;
- de gereedschappen zouden niet praktisch inzetbaar zijn.

Deze argumenten zijn onzes inziens inmiddels niet meer geldig. Dit zal hopelijk aan de hand van dit boekwerkje duidelijk worden. Naar onze overtuiging is de gangbare ijkmethode inmiddels achterhaald. Wanneer de hydroloog bij modelkalibratie de hulp inroept van dit soort pakketten, zijn er wat de kwaliteit van onze modellen betreft, grote verbeteringen te bereiken, die doorwerken in de voorspellingen die er vervolgens mee moeten worden gedaan. Uit de inmiddels opgedane ervaring blijkt, dat het hydrologische modelleringswerk door deze pakketten allerm minst verdwijnt; het wordt er juist beduidend interessanter van. Gebleken is, dat kalibratiesoftware niet zonder een deskundige hydroloog kan. Omgekeerd kunnen we met evenveel recht de vraag stellen of de hydroloog straks nog zonder kalibratiesoftware kan.

Doelstelling van de werkgroep

Als Werkgroep Modelkalibratie hebben we ons ten doel gesteld goed toepasbare moderne kalibratiehulpmiddelen onder de aandacht van de hydrologen te brengen. We veronderstellen dat de kwaliteit van de grondwatermodellering in dit land zou kunnen verbeteren door een meer verantwoorde kalibratie van onze grondwatermodellen. Hiervoor lijkt het ons noodzakelijk, dat wij als hydrologen er straks als vanzelfsprekend gebruik van gaan maken. Als Werkgroep Modelkalibratie zijn we ervan overtuigd dat deze pakketten inmiddels zo goed zijn dat eerder het niet gebruiken daarvan onverantwoord zou moeten worden geacht.

We hebben op geen enkele manier het veld van de modelkalibratie volledig willen bestrijken. Het gaat er ons veel meer om een brede inzet van deze relatief nieuwe hulpmiddelen en verwerving van het daarbij behorende inzicht. We laten dan ook gaarne allerlei nog zeer prille ontwikkelingen die hun waarde voor de praktijk nog moeten bewijzen over aan de onderzoeksinstituten en universiteiten.

Het is niet de bedoeling van de werkgroep geweest om zelf kalibratiemethoden, laat staan -software te ontwikkelen. Noch waren we van plan beschikbare methoden te vergelijken en te toetsen. Wel is aandacht besteed aan de plaats van de kalibratie in het modelleringsproces, de interpretatie en betrouwbaarheid van de verkregen parameters en de vraag hoe om te gaan met de restfouten en de verificatie/validatie. Deze en andere zaken zullen in dit boekje aan de orde komen.

Ofschoon dezelfde problematiek ook speelt op andere vakgebieden, hebben we ons beperkt tot grondwatermodellering. Binnen de grondwatermodellering hebben we ons voorts beperkt tot kalibratie op grond van gemeenten stijghoogten en volumestromen. De uitdaging om dit uit te breiden naar grondwaterkwaliteit ligt voor de hand, en is belangrijk, maar is niet door ons opgepakt. Het is uit de literatuur bekend dat de combinatie van stijghoogten, volumestromen en waterkwaliteit in een kalibratie belangrijke modelverbeteringen kan opleveren. Zo'n gecombineerde ijking is wellicht zelfs vereist alvorens verantwoord voorspellingen te kunnen doen van transport van verontreinigingen. Kortom hier ligt nog een groot terrein open voor invulling in de nabije toekomst.

Samenstelling van de werkgroep

De Werkgroep is samengesteld uit leden met een diepgaande belangstelling voor het verantwoord kalibreren van grondwatermodellen, die zich daadwerkelijk inhoudelijk met deze problematiek bezig houden en deze modernere methoden (willen) toepassen in hun projecten. De samenstelling is in onderstaande tabel gegeven:

Samenstelling NHV-Werkgroep Modelkalibratie

Drs. C.J. Hemker	VU, Amsterdam
Drs. J.H. Hoogendoorn	Tauw/Milieu, Deventer
Ir. J.W. Kooiman	Kiwa, Nieuwegein
Dr.Ir. W.J. de Lange	RIZA, Lelystad
Prof.Dr.Ir. A. Leijnse	RIVM / LUW, Bilthoven/Wageningen
Ir. T.N. Olsthoorn	Gemeentewaterleidingen Amsterdam, Vogelenzang (voorzitter)
Ir. H.J.M. Rolf	PWN, Bloemendaal
Prof.Dr.Ir. A. Stein	LUW, Wageningen
Ir. J.M.A. Streng	Gemeentewerken Rotterdam
Dr.Ir. C.B.M. te Stroet	TNO / TUD, Delft
Ir. P.E.V. van Walsum	DLO, Wageningen
Dr.Ir. W.J. Zaadnoordijk	IWACO, Rotterdam

Vergaderingen van de werkgroep

De Werkgroep is tussen 25 januari 1995 en 22 augustus 1996 in totaal 8 keer bijeen geweest. Tijdens vijf van de acht bijeenkomsten zijn voordrachten gehouden over een case-studie dan wel meer specifieke zaken van kalibratie (zoals bijvoorbeeld verificatie) of een stuk theorie. Deze voordrachten waren steeds aanleiding tot uitgebreide inhoudelijke discussies. Dit heeft veel wederzijds begrip opgeleverd en een aanzienlijke overeenstemming over de wijze waarop tegen kalibratie en kalibreren aangekeken zou moeten worden. Wij hebben daar zelf veel van geleerd en de betreffende zaken zullen dan ook uitgebreid aan de orde komen.

De uitgereikte informatie

Graag vraag ik uw aandacht voor de twee bijlagen: de eerste bevat een lijst met termen die bij de kalibratie van modellen worden gebruikt, samen met hun toelichting. Deze termen zullen in de gegeven betekenis door ons worden gebezigd. Met name ten aanzien van de termen 'verificatie' en 'validatie' bestaat in de praktijk soms verwarring. Hun definitie is dan ook na veel discussie tot stand gekomen, en volgt met name de betekenis die in de Amerikaanse praktijk wordt gehanteerd.

De tweede bijlage is een schema getiteld 'Stappenplan Modelleren'. De kalibratie vormt een deel van dit stappenplan. Zij is daarmee een integraal onderdeel van de modellering. De kalibratie bevat belangrijke interne en externe terugkoppelingen, die in het schema tot uiting zijn gebracht. Met name de laatste maken de inzet van de hydroloog tijdens het kalibreren onontbeerlijk. Hierop wordt verderop in dit boekje nader ingegaan. Het schema zal uitvoerig worden toegelicht door Jan Willem Kooiman. Het zal als rode draad dienen bij de gegeven praktijkvoorbeelden.

Indeling van dit boek

De eerste bijdrage, van Harry Rolf, kan gezien worden als probleemstelling. Hij geeft een overzicht van de huidige praktijk van het kalibreren en vraagt zich af wanneer en zo ja in hoeverre daarin van een goed model kan worden gesproken.

De twee volgende bijdragen ligt de nadruk op begripsvorming en theorie. Willem-Jan Zaadnoordijk zoomt in op doelfuncties en de keuze van de te optimaliseren parameters. Hierna geeft Kick Hemker een uitgebreide uiteenzetting van de achtergronden van de moderne, wiskundig gestoelde kalibratie. Zijn verhaal mondt uit in een oordeel over de betrouwbaarheid van de geijkte parameters.

Jan-Willem Kooiman rijgt vervolgens de aangedragen theorie aaneen tot een overzichtelijke strategie voor het kalibreren. Hij geeft het kalibratieproces zijn plaats binnen het modelleringsproces. Het stappenplan vormt tevens de rode draad door de praktijkvoorbeelden die in het tweede blok van dit boek aan de orde komen.

Dit tweede blok begint met een kort overzicht van standaard softwaregereedschappen voor modelkalibratie, gevolgd door een aantal praktijkvoorbeelden. Eerst licht Pierre Kamps de kalibratie toe van het grondwatermodel van de Amsterdamse Waterleidingduinen voor de stationaire situatie, waarvoor gebruik is gemaakt van het standaardpakket MODINV. Dan geven Jan Hoogendoorn en Bennie Minnema een toelichting op de kalibratie van het grondwatermodel Wierden voor een niet-stationaire situatie, gebruik makend van onder meer het standaardpakket MODFLOWP. Ab Veldhuizen en Paul van Walsum, tenslotte, geven uitleg van een wel heel complex model van het Fochteloërveen. Dit is een voorbeeld dat niet met een standaard kalibratieprogramma kan worden aangepakt. Dat men desondanks, door een zeer systematische aanpak, een heel eind kan komen zal door hen duidelijk worden gemaakt. Aan het einde van het boekje wordt getracht een aantal samenvattende conclusies te geven en vragen we ons af hoe verder te gaan. Toon Leijnse zal daarbij ingaan op de mogelijke follow-up.

Hoezo... 'een goed model'

Harry Rolf is als hydroloog
werkzaam bij N.V. PWN
Waterleidingbedrijf Noord-
Holland

H.L.M. Rolf

Inleiding

In deze bijdrage zal ik een beeld schetsen van de gangbare manier waarop grondwatermodellen in de Nederlandse praktijk worden gekalibreerd. Om een heldere referentie te bieden, doe ik dat nogal chargerend en generaliserend. Het doel van mijn verhaal is aan te geven hoe de huidige situatie is en wat daarbij de belangrijkste valkuilen zijn. De overige artikelen zullen aangeven op welke punten de kalibratie van modellen langs de gedachtenlijn van de Werkgroep Modelkalibratie kan worden verbeterd.

De titel van mijn bijdrage weerspiegelt de centrale vraag:

is de huidige manier van werken voldoende om te kunnen stellen dat het gekalibreerde model goed (genoeg) is voor de beoogde toepassing?

Eerst wil ik kort en in algemene termen de huidige werkwijze beschrijven. Daarna zal ik aan de hand van een zeer vereenvoudigd synthetisch voorbeeld laten zien hoe het modelleren en kalibreren in de praktijk kan verlopen en hoe de hydroloog daarbij zijn overwegingen en keuzen maakt. De belangrijkste knelpunten worden tenslotte in de conclusies genoemd.

Huidige werkwijze in algemene termen

Min of meer intuïtief worden de volgende stappen genomen:

- 1 globale modelkeuzen (omvang, rekenprogramma, dimensies) voortvloeiend uit het doel van het model;
- 2 schematisering (opbouw, aantal lagen);
- 3 parameters en parameterwaarden;
- 4 randvoorwaarden, voeding, onttrekkingen;
- 5 kalibratie-periode;
- 6 kalibratie (parameterwaarden aanpassen eventueel gesteund door gevoeligheidsanalyse);
- 7 soms: 'valideren' op andere rekenperiode;
- 8 toepassing, voorspelling (effect-berekeningen).

Globale modelkeuzen

Uitgaande van het doel van de modelstudie bepaalt de hydroloog de omvang van het gebied. Hij (of zij) kiest het gebied tenminste zo groot dat de te berekenen effecten van de ingreep niet tot aan de rand van zijn model zullen reiken. In de meest voorkomende gevallen kiest hij voor een zogenoemde 'quasi' 3-dimensionale modelstructuur en hij beslist dat hij stationair gaat rekenen tenzij het doel van de studie nadrukkelijk vraagt om de berekening van tijdafhankelijke effecten. Hij kiest een rekenprogramma dat dit probleem aankan. Vrijwel altijd is dit het programma waar hij het meeste ervaring mee heeft. In willekeurige volgorde is dit MODFLOW, MICRO-FEM of TRIWACO, of — als hij eens wat bijzonders wil — MLAEM.

Schematisering

Hij bekijkt (al dan niet vluchtig) aan de hand van bestaande rapporten (voorgaande studies, TNO Grondwaterkaart, REGIS) de geologische opbouw, neemt de gangbare geohydrologische schematisering over en kiest daarop het aantal modellen (watervoerende pakketten en slecht doorlatende lagen). Hij neemt aan dat de Tertiaire ondergrond, dan wel het scherpe zoet-zout-grensvlak de ondoorlatende basis is. Als hij een ondiep probleem heeft dan wil hij nog wel eens besluiten om een van de ondiepere slecht doorlatende lagen als 'ondoorlatend' te beschouwen.

Hij beslist welk deel van het ontwaterings/afwateringsstelsel hij als 'rivieren' in het model zal opnemen en welk deel een 'gebiedsdekkende' drainageweerstand vertegenwoordigt.

Tenslotte genereert hij een netwerk, uiteraard lokaal verdicht in het gebied waar de ingrepen zijn gepland.

Ik geef toe dat de bovenstaande opsomming nogal gechargeerd is. De bedoeling is om duidelijk te maken dat de hydroloog gedurende het gehele modelleringsproces veel essentiële keuzen (zoals stationair rekenen, ondoorlatende basis etc.) maakt en dat hij, vaak gedwongen door gebrek aan tijd, nauwelijks nagaat of deze keuzen terecht zijn en wat de consequenties zijn voor de modelresultaten.

Parameters en parameterwaarden

Hij kiest voor alle parameters (topstelsel, watervoerende pakketten en slecht doorlatende lagen) initiële waarden uit voorgaande studies of uit de Grondwaterkaart. Waarden uit pompproeven worden zonder nuances als 'harde' gegevens beschouwd.

Met het toenemend gebruik van GIS-systemen gaat hij uit van het ruimtelijke verloop van de dikte van watervoerende en slecht doorlatende lagen als een 'hard' gegeven. De kD - en c -waarden worden vervolgens verkregen door deze dikte te vermenigvuldigen met een k -waarde en een c -

waarde per meter dikte, of door gebruik te maken van een kwadratische relatie tussen c-waarde en dikte.

Voor het topsysteem denkt hij (van kaarten) te weten waar alle waterlopen liggen; ook de kleinere, de greppels en buizendrainages. Al dan niet met hulp van analytische formules bepaalt hij de waarden van de drainageweerstand en hij kiest een intreeweerstand voor de 'rivieren'.

Randvoorwaarden, voeding en onttrekkingen

Voor de (beheerste) peilen neemt hij het gemiddelde van het door het Waterschap opgegeven winter- en zomerpeil.

Uit bestaande isohypsenkaarten bepaalt hij de vaste stijghoogte langs de modelrand en uit opgaven van Provincie en Waterleidingbedrijf weet hij de hoeveelheden gewonnen water voor de verschillende onttrekkingslocaties. Kleinere onttrekkingen, bemalingen en winningen voor berekening laat hij buiten beschouwing.

Voor de grondwateraanvulling (de term nuttige neerslag gebruikt hij uiteraard niet meer) neemt hij een vaste waarde, al dan niet gedifferentieerd naar het bodemgebruik en soms zelfs naar grondwaterstandsdiepte (natte, droge bossen) en hij prijst zichzelf gelukkig dat hij op deze manier een modellering van die 'lastige' onverzadigde zone heeft kunnen omzeilen.

Kalibratieperiode

Hij gaat er van uit dat hij met het stationaire grondwatermodel de gemiddelde grondwaterstand zal berekenen van ofwel een langjarige periode ofwel van een 'meteorologisch gemiddeld' jaar. Bij de keuze voor een langjarige periode neemt hij aan dat er in die periode niet teveel structurele veranderingen zijn geweest. Omdat dit in Nederland nogal dubieus is kiest hij toch voor een 'gemiddeld jaar', gebaseerd op de jaarlijkse neerslag. Hij beschouwt de over dat jaar uit tijdreeksen gemiddelde grondwaterstanden als 'gemeten' waarden waarna de kalibratie kan beginnen.

Kalibratie

Hij rekt het model door en kijkt in hoeverre de berekende grondwaterstand overeenkomt met de (in meetpunten) gemeten grondwaterstanden. Hij gebruikt hierbij kentallen zoals de gemiddelde afwijking, het gemiddelde van de absolute afwijkingen, de kwadratensom van de afwijkingen of de wortel daaruit (de 'RMSE'). Er schijnen ook nog hydrologen te zijn die een 'berekend isohypsenpatroon' vergelijken met een 'gemeten isohypsenpatroon'. Soms kan ook een vergelijking worden gemaakt tussen berekende en 'gemeten' afvoeren.

Al dan niet gesteund door een gevoeligheidsanalyse past hij parameterwaarden aan. Meestal kijkt hij alleen naar KD en c -waarden en de drainageweerstand en intreeweerstand van waterlopen. Andere grootheden van het model zoals de grondwateraanvulling, de peilen, de onttrekkingen en de diktes van watervoerende en slecht doorlatende lagen worden van begin af aan als bekende 'vaste' gegevens beschouwd, meestal zonder daar later nog op terug te komen.

Voor al die parameters worden aangepast, die veel effect hebben op het gebied waar de grootste afwijkingen worden gevonden. Lokaal wordt voor dat (deel)gebied bijvoorbeeld de gevoelige drainageweerstand aangepast en al doende worden de afwijkingen in dat deelgebied goeddeels weggewerkt. Opmerkelijk is dat de grondwateraanvulling (die lang niet zo 'hard' is als verondersteld) vaak niet bij deze kalibratie wordt betrokken.

Opvallende resterende afwijkingen in enkelvoudige meetpunten worden nogal eens afgedaan onder het argument 'lokaal afwijkende omstandigheden' of worden zonder verdere verklaring buiten beschouwing gelaten. Parameters die bij de kalibratie niet gevoelig bleken worden uiteraard niet veranderd, maar betekent dat ook automatisch dat hun waarden juist zijn?

Deze handmatige en ad hoc manier van parameter-aanpassing kan (afhankelijk van beschikbare tijd, geld en energie) zeer lang worden voortgezet. Vaak is het een kwestie van 'lange adem' en beschikbare hoeveelheid geld en tijd. Het is een onduidelijke, nauwelijks reproduceerbare en zeer tijdrovende manier van werken. De methode kan worden gekenmerkt als 'gissen en missen' en wordt, verwijzend naar "Op hoop van zeghen" ook wel de 'methode Heyermans' genoemd.

Het lijkt wel alsof het enige doel is om (desnoods kunstmatig) een prachtige overeenstemming te krijgen tussen berekende en gemeten waarden, met als automatisch gevolg dat het model vervolgens het stempel 'goed' verdient.

Uiteindelijk besluit de hydroloog 'dat het zo wel goed genoeg is' en hij schrijft in zijn rapport dat de berekende en de gemeten stijghoogten (afvoeren) 'goed', dan wel 'redelijk', 'zeer goed', 'afdoende' of 'acceptabel' overeenkomen. Het model is 'gekalibreerd' of (de eerlijke hydroloog) 'het is in staat gebleken om de werkelijkheid in redelijk betrouwbare mate na te bootsen'. Impliciet wordt gesuggereerd dat het model 'goed' is, in de zin dat het goede voorspellingen kan doen.

'Validatie'

Soms bevindt de hydroloog zich in de luxueuze omstandigheid dat hij het model (ter 'validatie') nog kan doorrekenen voor een andere (afwijkende?) rekenperiode, om daarbij, al dan niet na een nieuwe parameter-aanpassing tot de conclusie te komen dat ook voor deze periode er een acceptabele (goede, zeer goede) overeenstemming is bereikt.

Toepassing

Uiteindelijk worden met het model effecten doorgerekend van verschillende varianten van voorgenomen maatregelen. Meestal betreft de toepassing dus een voorspelling.

De berekende effecten worden door de opdrachtgever als eenduidige antwoorden gebruikt waarop hij belangrijke beslissingen kan baseren (de berekeningen zijn immers met *een model* gemaakt?)

In uitzonderingsgevallen wordt nog onderzocht in hoeverre de effectberekeningen gevoelig zijn voor bepaalde (onbetrouwbare) parameters ('gevoeligheidsanalyse', 'spreidingsanalyse'). In de 70'er jaren vermeldde het rapport nogal eens de klassieke opmerking dat het een 'indicatief model' betrof.

Voorbeeld

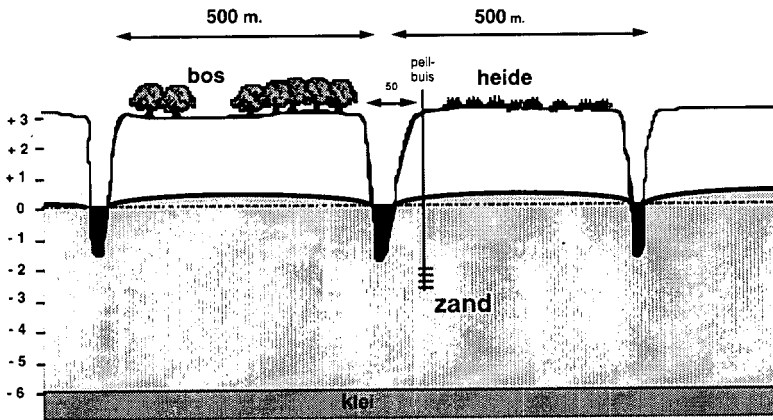
Ter illustratie van de bovenstaande algemene werkwijze is een uiterst eenvoudig, synthetisch voorbeeld gemaakt met Excel. De omvang van het voorbeeld is uiteraard totaal anders dan die van een gangbare modelstudie, maar de aanpak en de problemen zijn in beginsel vergelijkbaar.

Het betreft een landstrook in een wegzijgingsgebied met drie parallelle waterlopen (natte omtrek 5 m, peil NAP + 0 m) op een onderlinge afstand van 500 m in een 8 meter dik zandpakket boven een kleilaag. Links is een bosgebied en rechts een heidegebied.

De vraag zou kunnen zijn:

wat gebeurt er met de grondwaterstand als we het peil van de middelste waterloop met 20 cm zouden verhogen of als we de middelste waterloop zouden dempen?

Er wordt een uiterst eenvoudig model gemaakt. De schematisering is hierna aangegeven.



Figuur 1: Schematische opbouw van het rekenvoorbeeld.

Model 1

Concept:

- benaderen als oneindige landstrook
- quasi tweedimensionaal, stationair
- een watervoerend pakket met constante dikte
- kleilaag als ondoorlatende basis
- waterlopen volledig insnijpend

Parameters en randvoorwaarden:

- grondwateraanvulling 45% van de neerslag
- peil waterlopen NAP + 0 meter
- $kD = 60 \text{ m}^2/\text{dag}$ (k -waarde ca. 10 m/dag)

Kalibratieperiode:

- 1990 gemiddeld jaar, Neerslag 800 mm
- een peilbuis, gem. grondwaterstand NAP + 0,29 m

Kalibratieresultaat:

- $kD = 33,6 \text{ m}^2/\text{dag}$

Toepassing:

- slootpeilverhoging: 20 stijging, lineair verlopend
- slootdemping: stijging 3,69 m lineair verlopend

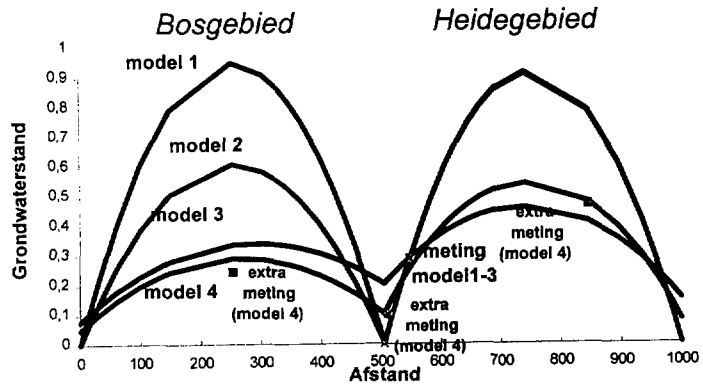
Doorrekenen van het model geeft (afgezien van numerieke onnauwkeurigheden) een parabolisch grondwaterstandsverloop tussen de waterlopen met een opbolling, die uiteraard gelijk is aan:

$$H = NL^2/8kD, \text{ waarin } L = 500 \text{ meter}$$

Vóór de kalibratie heeft de hydroloog de beschikking over slechts een meetpunt op 50 meter rechts van de middelste waterloop. Uit de jaarlijkse neerslag blijkt dat de jaren 1990 en 1995 'gemiddelde jaren' zijn (neerslag 800 mm). Overigens blijkt dat de gemiddelde grondwaterstand in 1990 NAP

Figuur 2:

Simulatie van de grondwaterstand bij de verschillende gekalibreerde modellen.



+ 0,29 is en in 1995 NAP + 0,49. Dit (merkwaardige?) feit verklaart hij uit de extreme neerslaghoeveelheid in de winter van 1994–1995, waarop hij kiest voor 1990 als ‘gemiddeld jaar’. De grondwateraanvulling in het model is dus 1 mm/dag (45% van de neerslag).

Hij kalibreert het model op de kD -waarde, vindt uiteraard snel (na 7 runs) een oplossing waarbij de berekende en gemeten grondwaterstand perfect overeenstemmen bij $kD = 33,6$ m/dag (figuur 2, bovenste lijn).

Als hij met dit model een slootpeilverhoging van 20 cm zou doorrekenen dan krijgt hij het (ook zonder model voorspelbare) resultaat van figuur 4 (bovenste lijn), namelijk een grondwaterstandsverhoging van 20 cm bij de middelste sloot, lineair afnemend naar 0 cm bij de buitenste sloten. Met dit modelconcept is het resultaat volledig onafhankelijk van de parameterwaarden.

Een demping van de middelste sloot geeft met dit model een verhoging van de grondwaterstand van maar liefst 3,69 meter (figuur 4).

Los van het probleem dat de grondwaterstand dan boven het maaiveld zou komen is hier wel een relatie met de parameterwaarde: de verhoging bij dit modelconcept is lineair evenredig met de kD -waarde en de afvoer van de middelste sloot.

Is dit model (model 1) nu goed?

We laten eerst even in het midden of het modelconcept goed is. Voor de slootpeilverhoging lijkt het model goed genoeg, immers welke parameterwaarde we ook kiezen: het antwoord blijft hetzelfde. Voor het tweede probleem echter is het nodig dat (het quotiënt van) de slootafvoer en de kD waarde goed is. Dit hoeft niet het geval te zijn, immers: de grondwateraanvulling van 1 mm/dag (45%) is ongetwijfeld niet exact juist. In het model kan bijvoorbeeld voor het bosgebied een kleinere aanvulling van 30% worden aangenomen en voor het heidegebied een grotere aanvulling van 50 % (model 2).

Model 2

Concept:

- als model 1

Parameters en randvoorwaarden:

- grondwateraanvulling bosgebied 30% van de neerslag
- grondwateraanvulling heidegebied: 50% van de neerslag

Kalibratieperiode:

- als model 1

Kalibratieresultaat:

- $kD = 37 \text{ m}^2/\text{dag}$

Toepassing:

- slootpeilverhoging: idem, 20 stijging, lineair verlopend
- slootdemping: stijging 3,07 m lineair verlopend

Na 'kalibratie' wordt als 'goede' kD waarde gevonden: $37 \text{ m}^2/\text{dag}$. Het effect van een slootpeilverhoging wordt met dit model niet anders, maar de berekende grondwaterstandsverhoging bij slootdemping zou duidelijk kleiner zijn: 3,07 m.

Als we randvoorwaarden zoals de grondwateraanvulling keihard bekend veronderstellen (wat vaak gebeurt) dan zou het model nu al 'goed' zijn, maar in werkelijkheid hangt het er dus maar wat de werkelijke 'hardheid' van dat soort vaste randvoorwaarden is. Bovendien blijkt dat de gevoeligheid van de toepassing erg verschillend kan zijn. De effecten van slootpeilverhoging worden ook met een 'fout' model goed berekend, terwijl de effecten van slootdemping sterk afhankelijk zijn van zowel de modelparameters als van de randvoorwaarden.

Zonder verdere metingen kan hierover geen uitsluitsel worden gegeven: het model is 'goed', uitgaande van de geldigheid van de randvoorwaarden en gegeven het modelconcept.

Het model valt of staat met een goed concept:

- mag de kleilaag werkelijk als ondoorlatende basis worden beschouwd?
- is de aanname van volledig insnijdende sloten juist?
- het is niet beter om met een freatisch pakket te rekenen met een variërende dikte?
- het is niet beter om voor het bosgebied (net als in model 2) systematisch een kleinere grondwateraanvulling aan te houden dan voor het heidegebied?

(De geldigheid van het stationair rekenen en de representativiteit van de, over een jaar gemiddelde, grondwaterstand laten we hier maar buiten beschouwing.)

Het model wordt omgebouwd met een c -waarde voor de kleilaag, een pakketdikte die afhankelijk is van de grondwaterstand en de sloten worden als rivieren beschouwd met een natte omtrek van 5 meter en een intree-weerstand van 3 dagen (model 3).

Model 3

Concept:

- kleilaag als c-waarde
- randvoorwaarden onder de kleilaag: links vaste potentiaal, rechts 'geen stroming'
- freatisch watervoerend pakket
- waterlopen als gedeeltelijk insnijdende 'rivieren'
- verdamping bosgebied systematisch hoger dan verdamping heide

Parameters en randvoorwaarden:

- grondwateraanvulling bosgebied 30% van de neerslag
- c-waarde kleilaag uniform, initiële waarde 2000 dagen
- initiële k-waarde 15 m/dag
- natte omtrek waterlopen 5 meter, intreeweerstand $R = 3$ dagen

Kalibratieperiode:

- als model 1

Kalibratieresultaat (als een van de mogelijkheden):

- $c = 2000$ dagen
- $k = 16$ m/dag
- $R = 3$ dagen

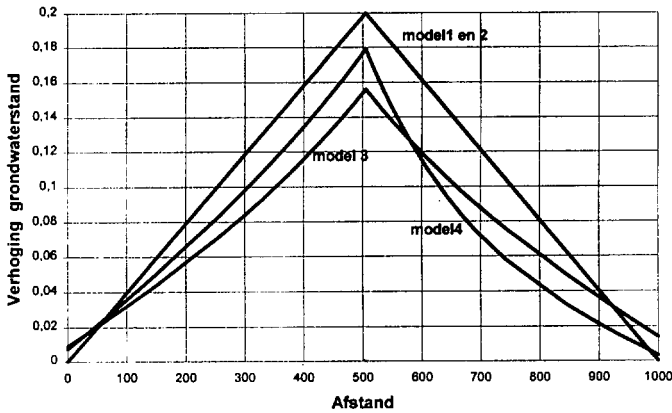
Toepassing:

- slootpeilverhoging: 15 cm logaritmisches verloop
- slootdemping: stijging 68 cm logaritmisches verloop

Als we de grondwateraanvulling en de peilen als bekenden beschouwen (!) dan hebben we drie parameters om op te kalibreren (c , k en R). Uitgaande van slechts één meting is het nog steeds eenvoudig om een 'goed' model te vinden: verschillende combinaties van c -waarde, k -waarde en intreeweerstand geven immers een 'goede overeenkomst' (namelijk een exacte overeenkomst) met de gemeten grondwaterstand. Het is maar net welke combinatie je kiest, ze zijn allemaal 'goed'.

Bij grote modelstudies komt deze situatie ook veel voor. De hydroloog heeft (of kiest) veel meer parameters dan metingen en loopt de kans dat hij heel veel tijd besteedt om verschillende combinaties van parameters te onderzoeken om telkens tot de conclusie te komen dat de overeenkomst tussen berekende en gemeten grondwaterstand 'keigoed' is.

In het voorbeeld wordt voor een van de mogelijke combinaties ($c = 2000$, $k = 16$ en $R = 3$) bij een slootpeilverhoging een verhoging van 15 cm grondwaterstand gevonden en een duidelijk niet-lineair verloop door de aanwezigheid van de slechtdoorlatende laag. Demping van de sloot zou bij dit model een verhoging geven van 68 cm, aanzienlijk minder dan de 3,07 meter bij het vorige model.

**Figuur 3:**

Effect van slootpeilverhoging (middelste sloot, 20 cm) bij de verschillende gekalibreerde modellen.

We zien dus dat een ander (iets complexer) concept bij weinig metingen ook goed 'gekalibreerd' kan worden terwijl het resultaat van de effectberekening sterk verschilt.

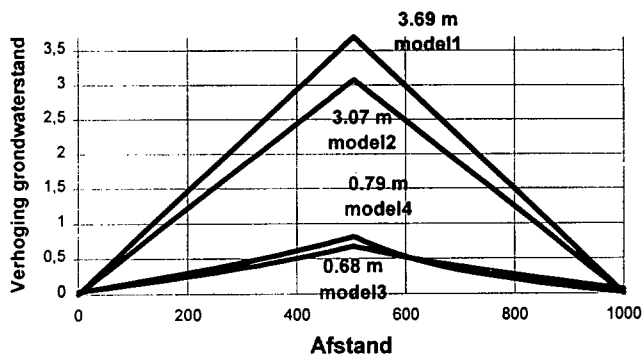
Als we over meer metingen beschikken wordt het veel lastiger om het model te kalibreren. Stel we beschikken over 4 metingen in het freatische pakket (twee in het heidegebied, een in het bosgebied en een dicht bij de middelste sloot) en we passen het vorige model toe, dan zien we duidelijk dat de vorige modellen niet goed waren (vergelijk in figuur 2 het resultaat van model 3 met de extra metingen).

Kijkend naar de gemiddelde afwijking en/of naar de kwadraten van de afwijkingen kunnen we nu een zeer groot aantal berekeningen maken, en constateren dat we voor een aantal combinaties van parameters een redelijk kleine afwijking voor de meetpunten kunnen simuleren. De vraag wat we bedoelen met 'redelijk kleine afwijkingen'? Het lukt niet meer om alle meetpunten 'passend' te krijgen, het ene punt is een paar centimeter te hoog en het andere meetpunt is een decimeter te laag etc, maar het lijkt best een 'goed model'. Het is niet duidelijk hoe lang we hiermee door moeten gaan, het aantal combinaties van parameters is immers zeer groot geworden.

Dit typische proces van handmatig 'gissen en missen' is uiterst tijdrovend. Als we ook nog beschikken over een afvoermeting (met terzijde de vraag of de afvoermeting representatief is voor de gemiddelde jaarafvoer) dan wordt het vrijwel onmogelijk om het patroon 'passend' te krijgen.

Figuur 4:

Effect van slootdemping bij de verschillende gekalibreerde modellen.



Altijd is er wel iets mis: we kunnen de afvoer kloppend krijgen, maar dan wordt het gemiddelde verschil van de grondwaterstanden weer veel groter. Is het kloppend krijgen van de afvoer net zo belangrijk als de simulatie van de grondwaterstand? We kunnen vrijwel alle grondwaterstanden 'kloppend' krijgen, maar houden voor een meetpunt een forse afwijking over (laten we die dan maar buiten beschouwing?). Tellen de twee metingen in het heidegebied even zwaar mee? Moeten we per se de meting dicht bij de middelste sloot kloppend krijgen omdat daar tenslotte de toepassing ligt?

Om het model nog beter kloppend te krijgen kunnen we ook besluiten om nog meer parameters toe te voegen: aparte c - en k -waarden voor het linker- en rechtergebied (model 4). Een onbeantwoorde vraag is echter of deze inhomogeniteit in de geohydrologie te verantwoorden is.

Model 4

Concept:

- als model 3

Parameters en randvoorwaarden:

- als model 3
- echter: aparte c -waarde en kD -waarde voor linker en rechterdeel

Kalibratieperiode:

- als model 3

Kalibratieresultaat:

- 4 metingen + gemeten afvoer beschikbaar
- $c_{\text{links}} = 3000$ dagen; $c_{\text{rechts}} = 1000$ dagen
- $k_{\text{links}} = 16$ m/dag; $k_{\text{rechts}} = 8$ m/dag
- $R = 2$ dagen

Toepassing:

- slootpeilverhoging: 18 cm logaritmisches verloop
- slootdemping: stijging 79 cm logaritmisches verloop

Na een zeer groot aantal simulaties wordt een 'acceptabele overeenkomst' gevonden. De afvoer klopt. De meting in het bosgebied (links) 'klopt' weliswaar niet helemaal, maar misschien is daar wel een meetfout gemaakt?

Is dit model nu goed of moeten we bijvoorbeeld onder de rechtermeting een gat in de kleilaag aanbrengen (weer een extra parameter), of moeten we de grondwateraanvulling voor een deel van het model aanpassen of ...?

Overigens komt uit het laatste model een verhoging van de grondwaterstand van 18 cm en 79 cm respectievelijk bij slootpeilverhoging en slootdemping, beide met een duidelijk logaritmisch verloop naar de buitenste sloten.

De hydroloog besluit om het hier maar op te houden en rapporteert zijn bevindingen.

Conclusies

Duidelijk is dat er bij de praktijk van het modelleren een groot aantal keuzen en vooronderstellingen moet worden gedaan die niet of nauwelijks zijn te controleren, vooral als het aantal metingen klein is in verhouding tot de (vaak grote) complexiteit van het model (veel parameters en 'harde' randvoorwaarden).

De tot dusver gangbare procedure van kalibratie is zeer tijdrovend, ad hoc en nauwelijks reproduceerbaar en de beoordeling van het model geschiedt op onduidelijke criteria. De huidige manier van werken wordt daarom soms gekenschetst als 'gissen en missen' of als 'methode Heyermans'.

Uiteindelijk lukt het vrijwel altijd om met het model in een bepaalde mate overeenstemming te krijgen tussen de gemeten en berekende grondwaterstanden en afvoeren. Hoewel een goede overeenstemming uiteraard een voorwaarde is, geeft het nog geen garantie dat het model 'goed' is in de zin dat de combinatie van modelconcept, parameterwaarden en randvoorwaarden voldoende dicht bij de werkelijkheid ligt om betrouwbare antwoorden te geven op de gestelde vragen (de toepassing, voorspelling van effecten).

Validatie van het model via het doorrekenen van een tweede (afwijkende?) meetperiode geeft soms wat meer vertrouwen in het model maar biedt geen oplossing voor de bovenstaande problemen.

Over het geheel genomen moeten we concluderen dat er bij de huidige, zeer tijdrovende manier van werken geen overtuigend, objectief bewijs kan worden geleverd dat de modellen 'goed' zijn.

Desondanks zullen de meeste modellen ook niet echt 'fout' zijn. Zeker als er voldoende metingen zijn en als er geen grote twijfels meer zijn over het gehanteerde concept mag men er op vertrouwen dat de modelvoorspellingen een redelijke schatting zijn van de werkelijk optredende effecten. Bovendien is het zo dat een 'fout' model de effecten van sommige ingrepen toch behoorlijk betrouwbaar kan berekenen.

Het mag tenminste worden verwacht dat de hydroloog binnen zijn mogelijkheden (tijd, geld, ervaring) zijn uiterste best heeft gedaan. De kwaliteit van het model is afhankelijk van de ervaring, het conceptueel inzicht en de gebiedskennis van de hydroloog en het besef dat hij heeft (gekregen) van de mogelijke fouten in parameters, randvoorwaarden en modelconcept. Deze kwaliteit is echter strikt genomen niet uit te drukken in een keiharde maat voor de betrouwbaarheid of in termen van 'goed' of 'fout'.

Het is, nogmaals, niet mijn bedoeling om de huidige werkwijze te veroordelen. Ik kalibreer zelf op deze manier. Ik hoop dat het werkt als er een aanzet om te komen tot een efficiëntere, meer gestructureerde werkwijze, waarbij een 'gekalibreerd model' tenminste aan een aantal procedurele voorwaarden voldoet.

Doelfunctie en parameters

Willem Jan Zaadnoordijk is als geohydroloog werkzaam bij IWACO B.V., adviesbureau voor water en milieu. Zijn werkzaamheden houden verband met de modelmatige beschrijving van grondwaterstroming en de vertaling naar afgeleide effecten (bijvoorbeeld zettingen).

Alfred Stein is als geostatisticus werkzaam aan de Landbouwniversiteit Wageningen, vakgroep bodemkunde en geologie, en als 'visiting professor for spatial statistics' aan het ITC te Enschede. Zijn werk richt zich op aspecten van ruimtelijke statistiek, GIS en de rol van modellen hierin.

Willem Jan Zaadnoordijk
Alfred Stein

Inleiding

Nadat de voorgaande artikelen het maken van een model en de rol van de kalibratie daarbij in algemene termen hebben belicht willen wij in deze bijdrage het ijkproces voor grondwaterstromingsmodellen in meer detail bespreken: het 'meten' van de verbetering van een model en het kiezen van de parameters waarmee het verbeterd wordt.

Beide aspecten hebben te maken met parameteroptimalisatie. Parameteroptimalisatie is een stap in het ijkproces, waarin optimale waarden van parameters worden gezocht binnen de modelschematisatie. Deze stap wordt afgewisseld met stappen waarin de modelschematisatie wordt aangepast.

Parameteroptimalisatie kan worden omschreven als het bepalen welke parameterwaarden het beste model opleveren. Om te kunnen beoordelen of het model beter wordt hebben we daarbij een maat nodig. Als maat kunnen we een functie van de verschillen tussen berekende en gemeten waarden nemen. Het verkleinen van zo'n functie is het doel van de ijking en daarom wordt deze maat ook wel de 'doelfunctie' genoemd.

Doelfunctie

Voorwaarde voor automatische parameteroptimalisatie is een doelfunctie die één getal geeft. De programma's kunnen niet werken met een aantal afzonderlijke criteria. Een veel gebruikte functie is de som van de kwadraten tussen de gemeten waarden g_i en de overeenkomstige door het model berekende waarden b_i :

$$D = \sum_{i=1}^n [(b_i - g_i)^2] \quad (1)$$

waarbij n het aantal meetwaarden is dat voor de kalibratie gebruikt wordt. Deze doelfunctie staat bekend als 'kleinste kwadraten som'. Deze doelfunctie voldoet in de praktijk goed. Veel gebruikte alternatieven zijn:

$$D_{\text{abs}} = \sum_{i=1}^n |b_i - g_i| \quad (2)$$

en

$$D_{\text{wortel}} = \sum_{i=1}^n \sqrt{|b_i - g_i|} \quad (3)$$

Het voornaamste verschil met de kwadratische vorm (1) is de eigenschap dat uitbijters minder zwaar meetellen, wat bij de vorm met een wortel (3) nog sterker geldt dan bij die met absolute waarden (2).

In het vaak voorkomende geval dat we alleen stijghoogtewaarnemingen als gemeten waarden hebben komen we hier een heel eind mee. Maar ook in dat geval is het soms zinvol om een aanpassing te doen. Stijghoogten op twee vlak bij elkaar gelegen punten zijn namelijk gecorreleerd. Als het model in het ene punt een te hoge stijghoogte voorspelt doet het dat ook in het andere. Als we dan formule (1) blijven gebruiken geven we die plek in het model in feite een groter belang. Als we dat niet willen kunnen we dit corrigeren met weegfactoren w_i :

$$D = \sum_{i=1}^n [w_i (b_i - g_i)^2] \quad (4)$$

Een simpel voorbeeld is de situatie waarbij alle waarnemingspunten op min of meer gelijke onderlinge afstanden liggen op twee na. Als deze twee punten zo dicht bij elkaar liggen dat ze in feite als één meetpunt beschouwd moeten worden, zouden deze de weegfactor 0,5 krijgen zodat ze samen voor 1 tellen. De twee waarnemingspunten leveren geen onafhankelijke gegevens, wat betekent dat ze minder informatie geven dan twee ver uiteen gelegen waarnemingspunten. In plaats van het gebruik van weegfactoren, kan de correlatie ook verdisconteerd worden met behulp van de covariantiematrix (zie bijvoorbeeld Carrera & Neuman, 1986).

Behalve verdisconteren van correlatie, kunnen gewichten ook rekening houden met verschil in nauwkeurigheid of verschil in toegestane afwijkingen.

Verder hebben we de gewichtsfactoren uit de doelfunctie (4) nodig als we naast stijghoogtemetingen bijvoorbeeld ook metingen van de hoeveelheid uitgeslagen water uit een polder hebben. Eén meter stijghoogte-afwijking is over het algemeen niet vergelijkbaar met één kubieke meter afwijking van de hoeveelheid uitgeslagen water. Een andere weegfactor voor de hoeveelheden uitgeslagen water corrigeert dit. De noodzaak tot correctie is ook duidelijk uit de eenheden. In doelfunctie (1) kunnen we geen stijghoogte- en fluxverschillen bij elkaar optellen omdat ze in verschillende eenheden gegeven zijn. Als we nu het verschil in eenheden corrigeren in de betreffende gewichten kunnen we de sommatie wel netjes uitvoeren in (4).

Zo hebben we gezien dat we de gewichten in de doelfunctie (4) wegens een aantal redenen kunnen toepassen:

- metingen van verschillende grootheden vergelijkbaar maken;
- metingen een belang geven in de parameteroptimalisatie dat rekening houdt met de *ruimtelijke verdeling* (onderlinge afhankelijkheid) en

nauwkeurigheid (bijvoorbeeld ondiepe landbouwbuizen en diepere peilbuizen).

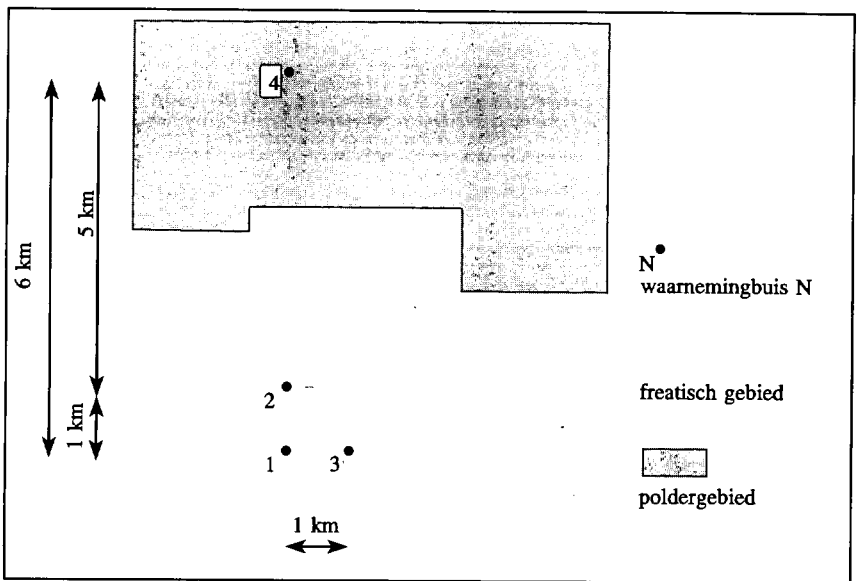
We hebben dus geohydrologisch inzicht nodig om gewichten te kiezen. Er zijn verschillende mogelijkheden voor het bepalen van de gewichten in de doelfunctie. Bij Kalmanfiltering kunnen ze berekend worden (Te Stroet, 1995). Het is mogelijk de varianties van de waarnemingen als gewichten te gebruiken, alhoewel het in de praktijk moeilijk is om deze te bepalen. We zullen hier vier 'handmatige' mogelijkheden bespreken:

I Gewichtstoekenning op basis van groepsindeling (statistische stratificatie)

Stap 1 Maak een indeling in k groepen van gelijksoortige waarnemingen op basis van a priori informatie: homogene eenheden, geohydrologisch verbonden, zelfde vereiste nauwkeurigheid. Veronderstel dat er n_j waarnemingen vallen in G_j .

Stap 2 Het gewicht van een waarneming binnen groep G_j is gelijk aan $w_j = 1/(n_j * k)$.

Voorbeeld. We gaan uit van de vier waarnemingsbuizen, die in figuur 1 zijn aangegeven. Drie buizen liggen in een freatisch gebied (de nummers 1, 2 en 3) en de vierde in een poldergebied (nummer 4). Als we de buizen per gebied als een groep beschouwen kunnen we de gewichten bepalen. De buizen 1, 2 en 3 krijgen een gewicht van $w_i = 1/(3 * 2) = 1/6$ en buis 4 krijgt een gewicht van $w_4 = 1/(1 * 2) = 1/2$.



Figuur 1: Ligging waarnemingspunten

II Gewichtstoekenning op basis van afstanden

Stap 1 Bepaal voor een waarnemingspunt de afstand d_i tot het dichtsbijzijnde punt.

Stap 2 Bepaal een macht $\alpha > 0$.

Stap 3 Dan is het gewicht $w_i = (1/D) * d_i^\alpha$, waarbij D een normalisatiefactor is, $D = \sum_i d_i^\alpha$. Een bijzonder geval ontstaat door enkele gewichten van zeer dicht bij elkaar liggende punten gelijk te stellen aan 0,5, en die van de overige punten aan 1.

Voorbeeld. Ga weer uit van de vier waarnemingsbuizen van I en kies $\alpha = 1$. De afstanden tot de dichtsbijzijnde buizen zijn 1, 1, 1 en 5 km voor de buizen 1, 2, 3 en 4 respectievelijk. De normalisatiefactor is dan gelijk aan $D = 1+1+1+5 = 8$ en de gewichten worden $w_1 = w_2 = w_3 = 1/8$, en $w_4 = 5/8$.

III Gewichtstoekenning op basis van kriging

Op basis van geostatistiek (zie bijvoorbeeld Isaaks & Srivastava (1989)) kunnen gewichten worden toegekend die de ruimtelijke afhankelijkheid expliciet meenemen. We kunnen in principe zowel de gemeten als de berekende stijghoogten gebruiken.

Stap 1 Bepaal een variogram van de stijghoogten.

Stap 2 Interpoleer met behulp van kriging de stijghoogten in het waarnemingspunt i , waarbij alle waarden gebruikt worden behalve die in het punt i zelf. Het verschil met de waarde van i geeft de voorspelfout e_i .

Stap 3 De gewichten w_i zijn gelijk aan een functie van e_i , bijvoorbeeld $w_i = |e_i|^\alpha / E$, waarin E een normalisatiefactor is, $E = \sum_i (1/e_i)^\alpha$. Gangbare waarden voor α zijn 1 (levert een absolute gewichtstoekenning op) en 2 (levert een kwadratische gewichtstoekenning op). Op deze manier krijgen die punten het grootste gewicht die in ruimtelijke zin het meest afwijken, d.w.z. waarvan de waarden het sterkst afwijken van de omliggende punten.

Voorbeeld. Stel dat interpolatie in de vier punten uit het vorige voorbeeld voorspelfouten ter grootte van $e_1 = 0,31$ m, $e_2 = -0,17$ m, $e_3 = 0,42$ m en $e_4 = -0,56$ m oplevert en dat we kiezen voor $\alpha = 2$. Dan is $E = 0,615$, en de gewichten zijn $w_1 = 0,156$, $w_2 = 0,047$, $w_3 = 0,287$ en $w_4 = 0,510$.

IV Combinatie met waarnemingen aan verschillende variabelen

Bij de voorgaande methoden werden gewichten bepaald voor gelijksoortige waarnemingen (in de voorbeelden steeds stijghoogten). De tweede en derde methode (afstanden en kriging) kunnen ook alleen maar voor gelijksoortige waarnemingen toegepast worden, die bovendien ruimtelijk gerealiseerd moeten zijn. De eerste methode (groepsindeling ofwel statistische

stratificatie) kan echter uitgebreid worden om ook verschillende typen waarnemingen te combineren in de doelfunctie.

Stap 1 Onderscheid een aantal m groepen G_j .

Stap 2 Bepaal binnen elke groep G_j de individuele gewichten w'_i . Dit kan op één van de voornoemde methodes gedaan worden. Als voor methode I gekozen wordt is er sprake van meervoudige stratificatie (groepen binnen een groep).

Stap 3 Neem een groep als uitgangspunt en geef deze de groepsweegfactor 1.

Stap 4 Bepaal voor de overige groepen een weegfactor w''_j zodanig dat een gemiddelde afwijking van 1 meeteenheid even zwaar telt als een afwijking van 1 eenheid van de groep die als uitgangspunt dient.

Stap 5 Bepaal de normalisatiefactor D_H die gelijk is aan de som van de groepsweegfactoren $D_H = \sum_{j=1,m} w''_j$.

Stap 6 Geef elk waarnemingspunt een weegfactor die gelijk is aan het product van de weegfactor binnen de groep w'_i (bepaald in stap 2) en de groepsweegfactor w''_j (bepaald in stap 4), gedeeld door de normalisatiefactor $w_i = w'_i * w''_j / D_H$.

*Voorbeeld: drie groepen H_1 10 stijghoogtewaarnemingen in het 1e watervoerend pakket, H_2 5 stijghoogtewaarnemingen in het 2e watervoerend pakket en H_3 hoeveelheden uitgeslagen water uit een tweetal polders. Bepaal de gewichten binnen elke groep met methode 1, waarbij de drie groepen niet onderverdeeld worden in kleinere groepen. De individuele gewichten zijn dan $1/10$, $1/5$ en $1/2$ binnen de groepen H_1 , H_2 en H_3 respectievelijk. Neem groep H_1 als uitgangspunt en geef H_2 en H_3 de groepsweegfactoren 0,3 en 0,00001 (zodat 1 m stijghoogte verschil in het eerste wvp (watervoerend pakket) even zwaar telt als $1/0,3 \text{ m} = 3,3 \text{ m}$ in het 2e wvp en $1/0,00001 \text{ m}^3/\text{d} = 100000 \text{ m}^3/\text{d}$ afwijking in de hoeveelheid uitgeslagen water. De normalisatiefactor D_H is gelijk aan $D_H = 1 + 0,3 + 0,00001 = 1,30001$ en de gewichten zijn gelijk aan $w_i = (1/10) * 1/1,30001 = 0,0769$ voor elke stijghoogte in het eerste pakket, aan $w_i = (1/5) * 0,3/1,30001 = 0,0462$ voor elke stijghoogte in het tweede pakket, en $w_i = (1/2) * 0,00001/1,30001 = 0,00000385$ voor de beide uitgeslagen hoeveelheden.*

Met de aldus bepaalde weegfactoren kunnen we doelfunctie (4) gebruiken voor een automatische parameteroptimalisatie waarin optimale waarden worden bepaald van een aantal kalibratieparameters. De resulterende waarden kunnen we toetsen aan geohydrologisch inzicht en kennis van de marges in de betreffende parameter. Een grote afwijking of een systematische fout is een indicatie dat we de situatie niet goed beschrijven met de huidige schematisatie. We kunnen dan de schematisatie gericht onderzoeken en aanpassen.

Het kan voorkomen dat de meetgegevens te weinig sturing geven voor een automatische parameteroptimalisatie, en dat het programma niet convergeert. De meest voor de hand liggende oplossing is een betere keuze van

kalibratieparameters te maken. We kunnen echter ook het kalibratieprogramma meer sturing geven door middel van een boetefunctie S , zodat het wel convergeert, en we meer informatie krijgen voor de volgende modelaanpassing. De boetefunctie wordt toegevoegd aan de doelfunctie:

$$D = \sum_{i=1}^n [w_i (b_i - g_i)^2] + S \quad (5)$$

De boetefunctie is afhankelijk van de kalibratieparameters en is groter naarmate deze meer afwijken van de initiële waarde. Een vorm als (4) kan worden gebruikt, waarbij de berekende en gemeten waarden worden vervangen door de geoptimaliseerde waarde en de vooraf geschatte waarde. Het gebruik van een boetefunctie vereist wel een beter inzicht in de achterliggende wiskunde en statistiek, en leidt bij het ontbreken daarvan tot grote onzin. Verder kan het gebruik fouten in het model maskeren. We besteden hier verder geen aandacht aan de boetefunctie.

Kalibratieparameters

Een kalibratieparameter is een parameter die we in het ijkproces (automatisch) optimaliseren. Hierbij verstaan we onder een parameter een waarde in de modelschematisatie. Elk getal dat moet worden ingevoerd in het simulatieprogramma, kan dus worden gebruikt als parameter. Ook kunnen groepen (identieke) getallen of de waarde in een zone als parameter worden gebruikt.

De schematisatie en indeling in parameters wordt enerzijds bepaald door de geohydrologie en hangt anderzijds nauw samen met het doel van de modellering. Het vereiste detailniveau, of de schaal van het model, is sterk gerelateerd aan het aantal parameters. De keuze van de parameters is een zeer belangrijke stap in de modellering. De parameters moeten aan de volgende eisen voldoen:

- passen in de schematisatie;
- overeenstemmen met de schaal van het model;
- geohydrologisch betekenisvol zijn;
- samen met de andere parameters zorgen voor een wiskundig correct geformuleerd model;
- bruikbaar zijn voor de simulaties die met het model uitgevoerd moeten worden.

De keuze van parameters was altijd al een punt van aandacht, ook voordat automatische parameteroptimalisatie gebruikt werd. Er is al heel wat literatuur aan gewijd (zie bijvoorbeeld Anderson en Woessner, 1992). De keuze kan alleen goed uitgevoerd worden met voldoende geohydrologisch inzicht.

Voorbeelden van parameters:

- *doorlatendheid in een deelgebied;*
- *dikte van een laag in een punt (die samen met andere diktes geïnterpo- leerd wordt);*
- *waterstand in een kanaalpand;*
- *stijghoogte op een segment van de modelrand;*
- *debiet van een grondwateronttrekking;*
- *grondwateraanvulling in het hele modelgebied.*

In het algemeen is het niet mogelijk om alle parameters te meten of te bepalen voordat het model gemaakt wordt. Daarom voeren we een modelka- libratie uit, waarin we het model en waarnemingen gebruiken om een aantal parameters te optimaliseren. De kalibratieparameters zijn een selectie uit de modelparameters. Een kalibratieparameter moet aan extra eisen voldoen:

- van invloed zijn op de doelfunctie;
- niet volledig afhankelijk zijn van de andere kalibratieparameters;
- samen met de andere kalibratieparameters kleiner in aantal zijn dan de onafhankelijke meetgegevens.

De onderlinge onafhankelijkheid van de kalibratieparameters wil zeg- gen dat elke kalibratieparameter te bepalen moet zijn. De twee factoren k (doorlatendheid) en D (dikte) van de transmissiviteit (kD) kunnen we niet beide optimaliseren. Naast de onderlinge afhankelijkheid van de parameters is ook die van de waarnemingen van belang. Hoe sterker de onderlinge af- hankelijkheid tussen de waarnemingen, des te kleiner is het aantal parame- ters dat ermee geoptimaliseerd kan worden.

Overigens geeft de uitvoer van een programma voor automatische pa- rameteroptimalisatie veel informatie over de keuze van de kalibratieparame- ters. Daarmee kunnen we die keuze verbeteren, zoals blijkt uit het volgende verhaal in deze bundel.

Voorbeelden van kalibratieparameters gerelateerd aan verticale hy- draulische weerstand:

- *constante c -waarde in hele modelgebied;*
- *c -waarde in deelgebied;*
- *deel van c -waarde: $c = dikte / kv$, waarbij $kv(x,y)$ de kalibratieparameter is;*
- *factor van c -waarde: $c = fc * ci$, waarbij fc de kalibratieparameter is en de basiswaarde ci een functie van x en y kan zijn);*
- *waarde van dikte in een punt voor interpolatie.*

De bovengenoemde eisen van onafhankelijkheid, relevantie en invloed maken dat er geen oneindig aantal parameters gebruikt kan worden bij de parameteroptimalisatie. Bovendien beperkt het aantal waarnemingen het aantal parameters dat geoptimaliseerd kan worden. Op grond van de wis- kunde kan het aantal parameters niet groter zijn dan het aantal onafhanke- lijke waarnemingen. Stijghoogtewaarnemingen hebben meestal een zekere

ruimtelijk correlatie, en de correlatie tussen waarnemingen uit een tijdreeks is vrijwel altijd hoog. Zodoende moet in de praktijk het aantal kalibratieparameters veel kleiner zijn dan het totaal aantal waarnemingen.

Daarnaast zijn er praktische overwegingen van inzichtelijkheid, interpreterbaarheid van resultaten en rekentijden die beperkingen stellen aan het aantal parameters.

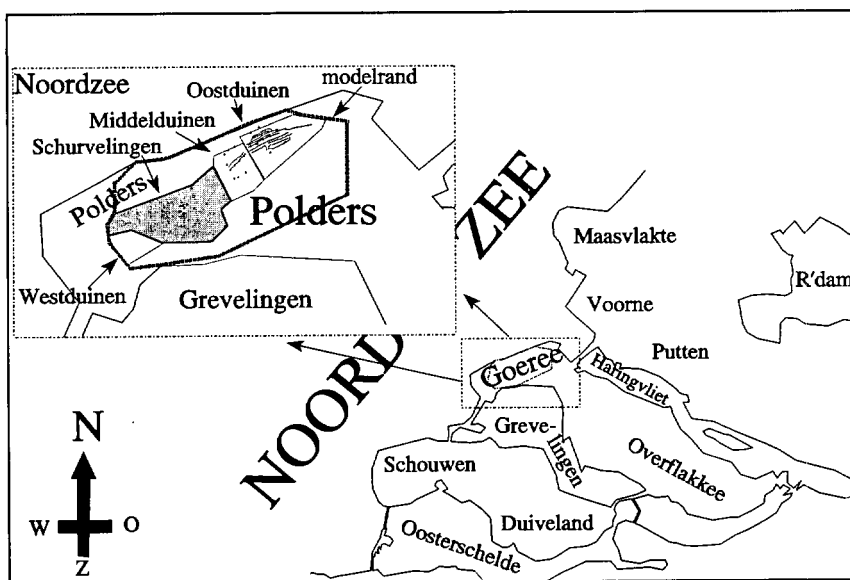
Toepassing

We illustreren in dit hoofdstuk het kiezen van weegfactoren in de doelfunctie. Hiervoor gebruiken we een model van de grondwaterstroming op het Zuid-Hollandse eiland Goeree (zie figuur 2) (Zaadnoordijk, 1990). Het model is gemaakt met het simulatieprogramma TRIWACO (IWACO (1995), gebaseerd op eindige elementen). Het model is in diverse studies gebruikt voor het waterleidingbedrijf WMZ (intussen opgegaan in de Delta Nutsbedrijven) en de provincie Zuid-Holland.

Inmiddels is er voor TRIWACO een kalibratiemodule ontwikkeld, waarmee hier een paar exercities zijn uitgevoerd.

In de destijds opgezette modelschematisatie zijn de initiële parameterwaarden verbeterd in een handmatige ijking. De verbeterde waarden vormen het uitgangspunt voor de automatische parameteroptimalisaties die we in het navolgende beschrijven.

Het model omvat Goeree van de Westduinen tot de Oostduinen. Hiertussen liggen de Schurvelingen (een vergraven duingebied) en de Middelduinen. Deze strook met freatisch (duin)gebied wordt aan de noordwest-



Figuur 2: Modelgebied.

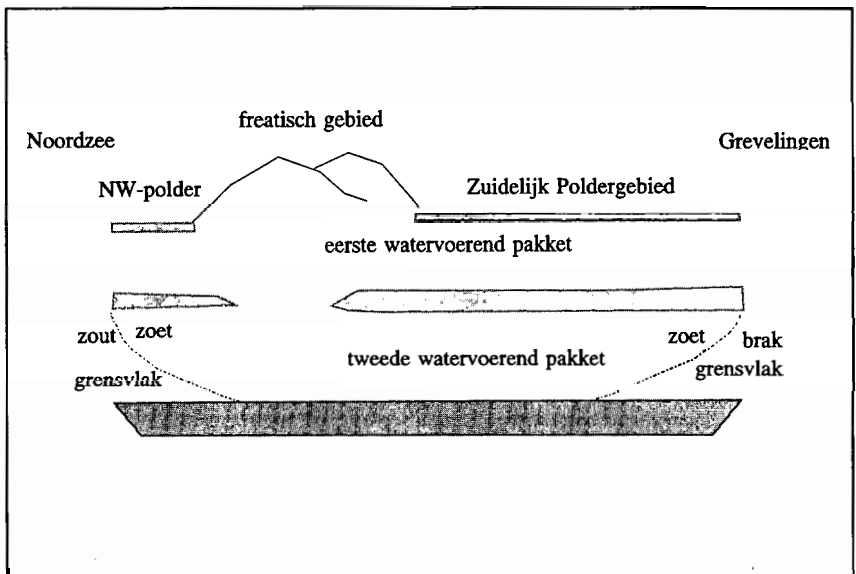
kant en zuidkant ingeklemd door polders. In het freatische gebied is de grondwateraanvulling gegeven, terwijl in het poldergebied een eenvoudig topsysteem is gedefinieerd met een polderpeil en een constante weerstand.

Er zijn twee watervoerende pakketten onderscheiden waarvan het eerste freatisch is en het tweede een scherp grensvlak tussen zoet en zout grondwater bevat. De noord- en zuidrand van het model worden gevormd door resp. de Noordzee (buitenkantharingvliet) en de Grevelingen. In beide pakketten is een vaste randstijghegthe gegeven (zie figuur 3).

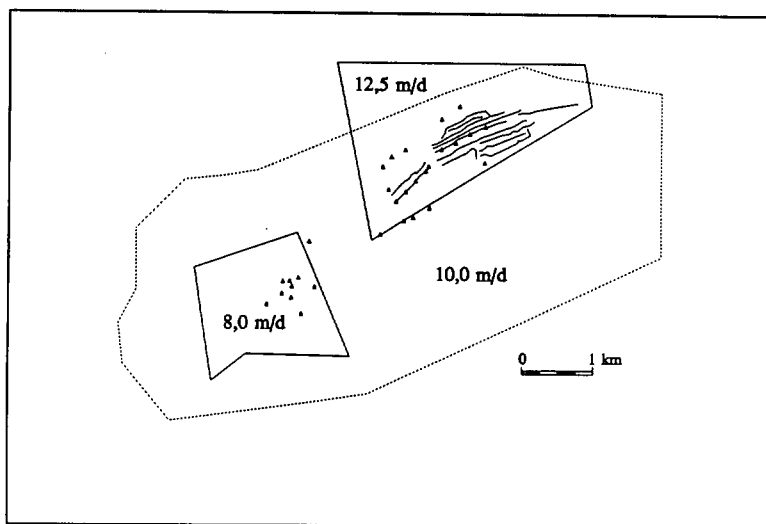
Indertijd werd zowel in de Oost- en Middelduinen als in de Kleistee (in het Schurvelingengebied) water gewonnen voor de drinkwatervoorziening. In het model zijn er infiltratie- en onttrekkingskanalen in de Oost- en Middelduinen en zijn er putten in het tweede watervoerend pakket in Oost- en Middelduinen en de Kleistee.

Het gebruik van de doelfunctie zal worden geïllustreerd met twee exercities:

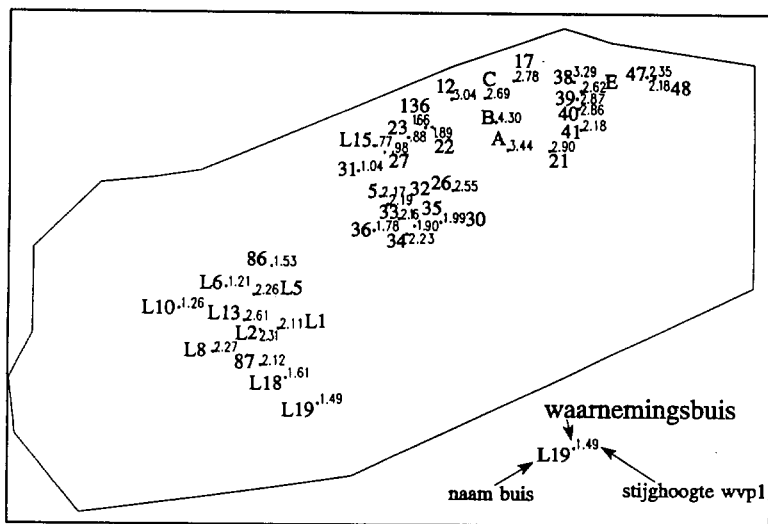
- optimaliseren van de doorlatendheid van het eerste watervoerend pakket in drie deelgebieden met behulp van in het eerste pakket gemeten stijghegthen;
- optimaliseren van een factor voor de polderweerstand en een factor voor de weerstand van de scheidende laag, waarbij stijghegthen in het eerste en tweede pakket en hoeveelheden uitgemalen polderwater de waarnemingen vormen.



Figuur 3: Dwarsdoorsnede modelschematisatie.



Figuur 4: Doorlatendheid eerste watervoerend pakket.



Figuur 5: Stijghoogte-waarnemingen in het eerste watervoerend pakket.

Doorlatendheid 1^e watervoerend pakket (drie deelgebieden)

De uitgangswaarden voor de doorlatendheid in het eerste watervoerend pakket zijn 10, 12,5 en 8 m/d (zie figuur 4). We berekenen nieuwe waarden met TRICALB, de kalibratiemodule van TRIWACO. Hoewel we het beste alle meetwaarden kunnen gebruiken, beperken we ons ter wille van de overzichtelijkheid tot de stijghoogten in het eerste watervoerend pakket. We gebruiken 38 stijghoogten (zie figuur 5).

We voeren de automatische parameteroptimalisatie uit met verschillende gewichten in doelfunctie (4):

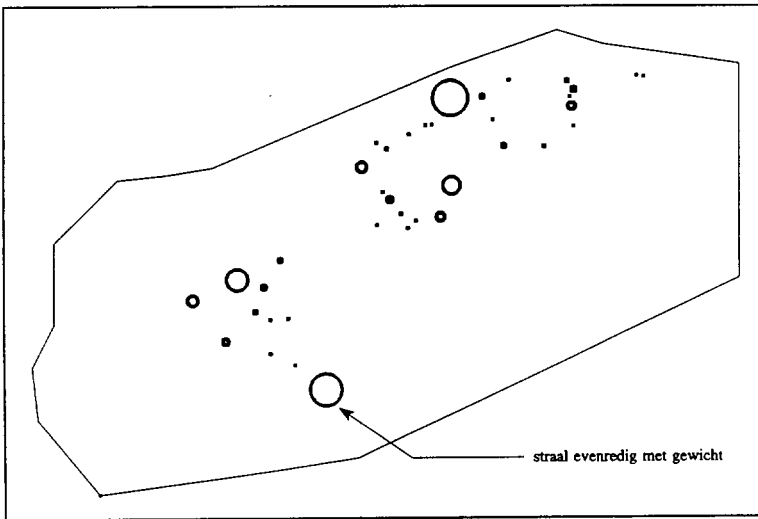
- gelijk gewicht voor alle stijghoogten;
- gewicht omgekeerd evenredig met afstand tot dichtstbijzijnde;
- totaal gewicht gelijk per deelgebied (statistische stratificatie);
- gewichten gebaseerd op kriging van de stijghoogten.

Uitleg over de verschillende wegingen is eerder in dit artikel gegeven. De weegfactoren zijn gegeven in tabel 1, waarin de gewichten groter dan 0,05 (die alleen bij de krigingvorm voorkomen) vet zijn afgedrukt.

Tabel 1: Weegfactoren.

Doelfunctie					Doelfunctie				
Buis	1	2	3	4	Buis	1	2	3	4
A	0,0263	0,0358	0,0256	0,0182	39	0,0263	0,0103	0,0256	0,0000
B	0,0263	0,0318	0,0256	0,0011	40	0,0263	0,0118	0,0256	0,0390
C	0,0263	0,0318	0,0256	0,0175	41	0,0263	0,0255	0,0256	0,0001
E	0,0263	0,0103	0,0256	0,0255	47	0,0263	0,0088	0,0256	0,0005
12	0,0263	0,0399	0,0256	0,1917	48	0,0263	0,0088	0,0256	0,0025
17	0,0263	0,0400	0,0256	0,0003	5	0,0263	0,0131	0,0238	0,0008
21	0,0263	0,0446	0,0256	0,0058	L15	0,0263	0,0148	0,0238	0,0049
22	0,0263	0,0081	0,0238	0,0006	136	0,0263	0,0081	0,0238	0,0022
23	0,0263	0,0233	0,0238	0,0004	L10	0,0263	0,0614	0,0303	0,0552
26	0,0263	0,0412	0,0238	0,0932	L19	0,0263	0,0492	0,0303	0,1718
27	0,0263	0,0148	0,0238	0,0084	86	0,0263	0,0400	0,0303	0,0176
30	0,0263	0,0316	0,0238	0,0444	L13	0,0263	0,0216	0,0303	0,0159
31	0,0263	0,0353	0,0238	0,0537	87	0,0263	0,0335	0,0303	0,0006
32	0,0263	0,0131	0,0238	0,0301	L1	0,0263	0,0219	0,0303	0,0001
33	0,0263	0,0204	0,0238	0,0064	L2	0,0263	0,0216	0,0303	0,0028
34	0,0263	0,0135	0,0238	0,0000	L5	0,0263	0,0326	0,0303	0,0235
35	0,0263	0,0135	0,0238	0,0001	L6	0,0263	0,0345	0,0303	0,1155
36	0,0263	0,0334	0,0238	0,0021	L8	0,0263	0,0531	0,0303	0,0324
38	0,0263	0,0136	0,0256	0,0134	L18	0,0263	0,0335	0,0303	0,0016

De gewichten van de eerste drie doelfuncties zijn vrij regelmatig verdeeld. Bij doelfunctie 4 zijn er echter grote verschillen en een paar punten met een relatief groot gewicht. De verdeling van de gewichten over het gebied is gegeven in figuur 6. De resulterende waarden voor de doelfunctie en de doorlatendheid zijn gegeven in tabel 2 en 3, terwijl de statistische kentallen van de ongewogen afwijkingen tussen gemeten en berekende stijghoogten gegeven zijn in tabel 4.



Figuur 6: Gewichten op basis van kriging.

Tabel 2: Initiële waarden doelfuncties en waarden na optimalisatie.

Doelfunctie	1	2	3	4
Initiële waarde	0,124	0,131	0,121	0,0924
Waarde na optimalisatie	0,113	0,122	0,111	0,0729

Tabel 3: Waarden voor doorlatendheid in m/d.

Waarde voor optimalisatie	Waarde na optimalisatie met doelfunctie nummer:			
	1	2	3	4
10,0	18,25	16,64	17,90	4,35
12,5	12,32	12,70	12,25	15,29
8,0	7,27	7,47	7,31	4,99

Tabel 4: Statistische kentallen voor afwijkingen tussen berekende en gemeten stijghoogten.

Omschrijving	orig	1	2	3	4
Gemiddelde verschil	0,032	-0,033	-0,025	-0,030	-0,078
Gemiddelde van absolute verschil	0,229	0,214	0,216	0,214	0,237
Minimale verschil	-1,277	-1,278	-1,279	-1,277	-1,272
Maximale verschil	0,943	0,652	0,702	0,662	0,607

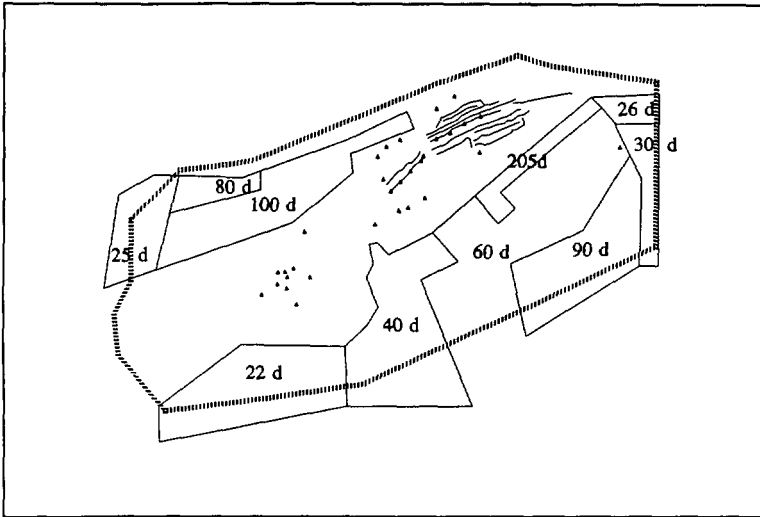
In tabel 2 is te zien dat de doelfunctie in alle vier gevallen verbeterd is. De afwijkende waarde bij doelfunctie 4 wordt veroorzaakt door de andere gewichten. Dit uit zich ook in de geoptimaliseerde parameterwaarden (tabel 3). Kijken we naar het ongewogen gemiddelde van de absolute afwijkingen (tabel 4) dan zien we dat dit bij doelfunctie 4 groter is geworden. De sterke variatie van de gewichten en het kleine aantal uitschieters geeft een specifiek resultaat. Dit illustreert het feit dat als er goede (geohydrologische) gronden zijn om aan sommige waarnemingen een groter belang toe te kennen, dit van belang is voor de parameteroptimalisatie.

In tabel 3 valt op dat de eerste waarde van de doorlatendheid na de optimalisatie sterk afwijkt van de oorspronkelijke waarde van 10 m/d. Dit geldt voor alle doelfuncties. Bij de eerste drie doelfuncties is de eerste waarde van de doorlatendheid veruit de grootste geworden, terwijl de tweede en derde waarde wel in de buurt van de oorspronkelijke waarde gebleven zijn. Dit duidt erop dat er in het model of in ons begrip van het systeem nog iets niet in orde is of dat we onvoldoende gegevens hebben om de eerste waarde te bepalen. De eerste waarde betreft immers het buitengebied, waar zich nauwelijks waarnemingen bevinden. We zouden dus het model nog eens goed onder de loep moeten nemen voordat we verder gaan met automatische parameteroptimalisatie.

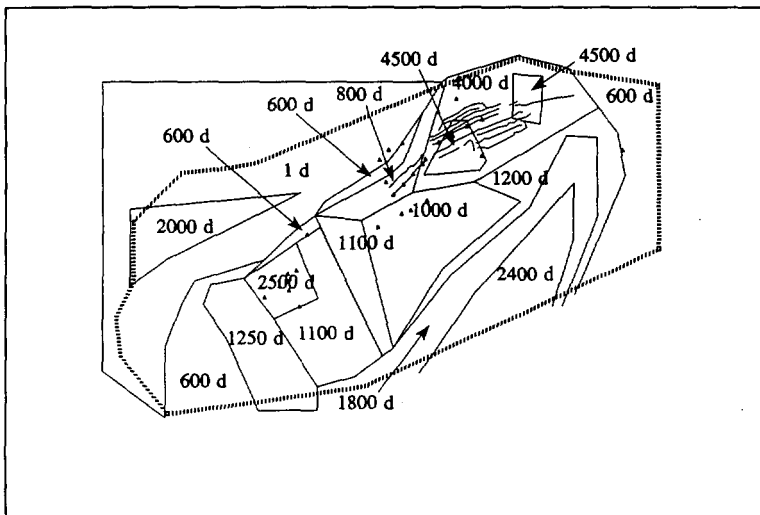
Uit de eerste optimalisatie hebben we gezien dat doelfuncties met een tamelijk gelijkmatige verdeling van gewichten vergelijkbare resultaten opleveren, terwijl een doelfunctie met uitschieters veel nadruk op een paar punten legt, wat alleen verantwoord is als er goede (geohydrologische) redenen voor zijn, die bij aanvang vaak nog niet bekend zijn. Het is aan te bevelen om te beginnen met gelijke gewichten of eenvoudige stratificatie en de aandacht meer te richten op de modelaanpassingen.

Polderweerstand en weerstand scheidende laag (twee factoren)

Voor de tweede optimalisatie gebruiken we een factor voor de polderweerstand (zie figuur 7) en een factor voor de weerstand van scheidende laag (zie figuur 8) als kalibratieparameters. Dezelfde stijghoogten in het eerste watervoerend pakket worden gebruikt (figuur 5) alsmede stijghoogten in het tweede watervoerend pakket en hoeveelheden kwelwater in de poldergebieden (zie figuren 9 en 10).



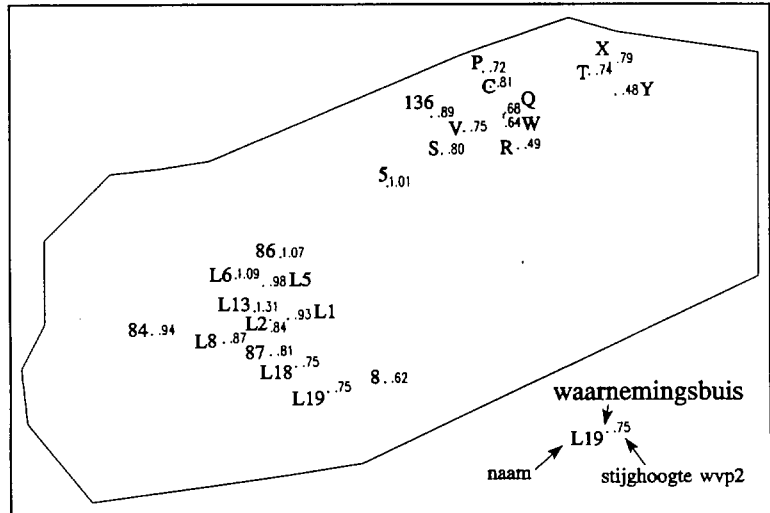
Figuur 7: Polderweerstand.



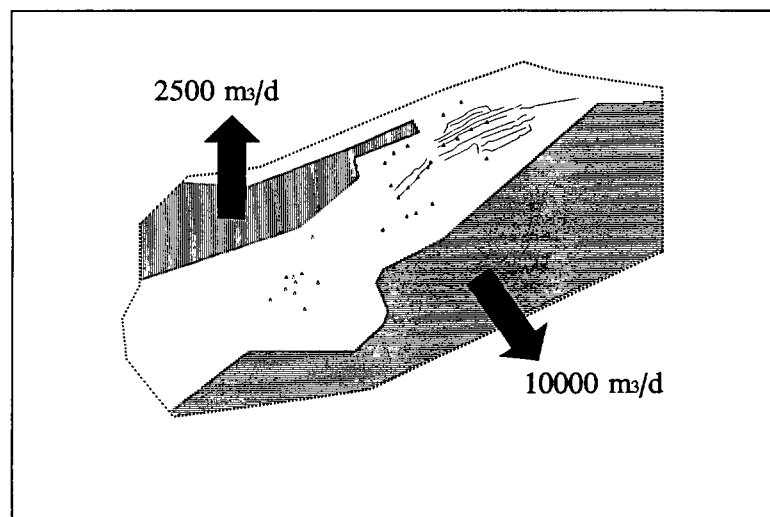
Figuur 8: Weerstand scheidende laag.

We gebruiken het principe van statistische stratificatie (methode IV) om deze drie groepen van waarnemingen onderling te wegen. Binnen elke groep gebruiken we constante waarden die gelijk zijn aan het omgekeerde van het aantal waarnemingen (1/38 voor de stijghoogten in het eerste watervoerend pakket, 1/24 voor die in het tweede en 1/2 voor de kwelffluxen).

Er zijn parameteroptimalisaties uitgevoerd met drie doelfuncties met verschillende gewichten. Doelfunctie 5 heeft gelijke gewichten voor de drie groepen, waarbij voorbij gegaan wordt aan het verschil in dimensie. Bij



Figuur 9: Stijghoogtewaarnemingen in het tweede watervoerend pakket.



Figuur 10: 'Gemeten' fluxen van grondwater naar poldergebied.

Tabel 5: Gewichten voor waarnemingen binnen groepen.

Doelfunctie	5	6	7
Stijghoogte wvp 1	0,0463	0,387	0,387
Stijghoogte wvp 2	0,0734	0,613	0,613
Kwelflux naar polders	0,880	0,000735	0,00000074

Tabel 6: Initiële waarden doelfuncties en waarden na optimalisatie.

Doelfunctie	5	6	7
Initiële waarde	1200000	1006	3,5
Waarde na optimalisatie	2,7	18,83	2,6

Tabel 7: Waarden voor factoren met uitgangswaarde 1.

Factor van	Factor na optimalisatie		
	5	6	7
Polderweerstand	2,387	1,221	1,193
Weerstand 1 ^e scheidende laag	0,322	0,963	1,098

Tabel 8: Gemiddelden en standaardafwijkingen van de verschillen tussen gemeten en berekende waarden.

Omschrijving	Origineel	5	6	7
Gemiddelde verschil stijghoogte wvp 1	0,032	-0,549	0,022	0,077
Standaardafw. verschil stijghoogte wvp 1	0,351	0,522	0,350	0,361
Gemiddelde verschil stijghoogte wvp 2	0,050	0,581	0,062	0,048
Standaardafw. verschil stijghoogte wvp 2	0,214	0,804	0,218	0,203
Gemiddelde verschil kwelfluxen	-572	-0,044	92,6	98,3
Standaardafwijking verschil kwelfluxen	634	0,006	136,6	134,3

doelfunctie 6 is een fout in de fluxen van 1000 m³/d gelijk gewogen met een fout van 1 m in stijghoogte. Doelfunctie 7 tenslotte weegt de groepen naar verhouding van de betrouwbaarheid van de groepen. De betrouwbaarheid is geschat als het omgekeerde van de variantie in de vorm van de gemiddelde gekwadrateerde verschillen in het initiële model. De resulterende gewichten voor de individuele waarnemingen zijn gegeven in tabel 5. De resultaten van de automatische parameteroptimalisaties zijn gegeven in tabel 6 (waarden van de doelfuncties voor en na de optimalisatie), tabel 7

(geoptimaliseerde factoren van de polderweerstand en de weerstand van de eerste scheidende laag) en tabel 8 (kentallen van de verschillen tussen berekende en gemeten waarden).

Uit de resultaten blijkt dat het bij elkaar optellen van verschillende groepen met gelijke weging (doelfunctie 5) geen goede resultaten geeft. De fluxen zijn weliswaar zeer precies bepaald, maar de stijghoogten vertonen zeer grote afwijkingen. Betrouwbaarheidsanalyse zou bovendien een grote standaardafwijking voor de fluxen opleveren, zodat ook niet gesteld kan worden dat doelfunctie 5 een model met betere fluxen oplevert (in scenario's). Dit hadden we tevoren natuurlijk al kunnen voorspellen omdat de meters van stijghoogten niet zonder meer vergelijkbaar zijn met de kubieke meters per dag van de kwelfluxen. Als er wel gewichten gebruikt worden (doelfunctie 6 en 7) is het resultaat wel bruikbaar. De doelfuncties 6 en 7 doen qua resultaten niet voor elkaar onder, en zijn ook beide eenvoudig, zodat in de praktijk beide gebruikt kunnen worden.

Slotopmerkingen

Voor de doelfunctie gebruiken we alle metingen, met een onderlinge weging. De weging moet er voor zorgen dat de metingen gecombineerd kunnen worden en het geohydrologisch belang van de metingen doorklinkt in de parameteroptimalisatie. Het verdient aanbeveling om de keuze van de weegfactoren simpel en overzichtelijk te houden zodat de resultaten van de parameteroptimalisatie goed te interpreteren zijn. Parameter-optimalisatie met behulp van kriging levert duidelijk afwijkende resultaten. Verdere studie is nodig om te zien in welke omstandigheden deze methode succesvol kan worden toegepast.

Een belangrijk aspect van de modelschematisatie is de parameter-keuze. Een beperkt aantal van deze parameters kan geoptimaliseerd worden met behulp van de metingen. Ongeacht of we een kalibratieprogramma gebruiken moeten we een goede verzameling van kalibratieparameters kiezen uit de modelparameters. Ook bij deze selectie kan een kalibratieprogramma hulp bieden.

Referenties

- ANDERSON, M.P. EN W. W. WOESSNER (1992) Applied Groundwater Modeling Simulation of Flow and Advective Transport; Academic Press, San Diego.
- CARRERA, J. EN S.P. NEUMAN (1986) Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions: 1. Maximum Likeli-

- hood Method Incorporating Prior Information; in: *Water Resources Research*, jrg 22, pag 199–210.
- ISAAKS, E.H. EN R.M. SRIVASTAVA (1989) An introduction to applied geostatistics; Oxford University Press, Oxford.
- IWACO (1995) Manual for TRIWACO version 7.6 - october 1995, IWACO B.V., Rotterdam.
- STROET, C.B.M. TE (1995) Calibration of stochastic groundwater flow models: Estimation of System Noise Statistics and Model Parameters; proefschrift, Technische Universiteit Delft.
- ZAADNOORDIJK, W.J. (1990) An Analytic Element Model of Goeree compared with a Finite Element Model, in: *Volume of poster papers ModelCARE '90: Conference on calibration and reliability in groundwater modelling*; Den Haag, RIVM/IAHS, Bilthoven.

De betrouwbaarheid van parameters bij automatische kalibratie

C.J. Hemker

Kick Hemker doceert in deeltijd grondwatermodelleren en hydraulica aan de Vrije Universiteit in Amsterdam. Daarnaast ontwikkelt hij computerprogramma's voor de modellering van grondwaterstroming, waaronder het pakket Micro-Fem.

Inleiding

Bij het kalibreren worden veldmetingen gebruikt om een zo goed mogelijk model te maken. Meestal kunnen deze metingen ook worden gebruikt om een indruk van de betrouwbaarheid van het model te krijgen. Hierbij moet echter niet worden gedacht aan exact berekende waarden, zoals statistici die voor sommige problemen kunnen berekenen. Een eenvoudige vraag als: "Hoe goed is het gekalibreerde model?" of zelfs: "Hoe goed is het model gekalibreerd?" kan niet op een eenduidige manier worden beantwoord. Dit geldt ook indien gebruik wordt gemaakt van een automatisch kalibratieprogramma dat als resultaat van de berekeningen vele statistische waarden produceert. Een deel van deze resultaten is namelijk op niet-geheel-juiste aannamen gebaseerd.

Ondanks deze beperking zijn de resultaten van een automatische kalibratie wel goed bruikbaar. Dit geldt met name voor de berekende waarde en de nauwkeurigheid van de geoptimaliseerde parameters. Daarnaast geven de resultaten echter ook een zekere controle op de juiste werking van het model. Niet alleen bij het modelleren, maar ook bij het kalibreren moeten namelijk nogal subjectieve keuzen worden gemaakt die het resultaat belangrijk kunnen beïnvloeden. Bij een goede interpretatie van de (statistische) resultaten kunnen betere keuzen worden gemaakt, zodat de kalibratie niet alleen geoptimaliseerde parameters oplevert, maar ook in bredere zin tot een beter model leidt.

Juist bij gebruik van een automatisch kalibratieprogramma is het van belang om te weten:

- hoe de automatische berekening van parameters in het totale kalibratieproces past;
- hoe de resultaten van een berekening kunnen worden gebruikt om modelfouten te verkleinen;
- hoe kan worden beoordeeld of een geschikte combinatie van geoptimaliseerde parameters is gevonden en
- hoe de statistische resultaten inzicht geven in de betrouwbaarheid van de berekende parameters.

In het hiernavolgende zullen deze aspecten van de kalibratie nader worden toegelicht. Voor meer informatie over het schatten van parameters en de bijbehorende wiskundige statistiek wordt verwezen naar Bard (1974).

Optimalisatie (het interne zoekproces)

Ruwweg kan het gehele kalibratieproces worden gesplitst in drie delen, namelijk 1) de keuze van de te optimaliseren parameters, 2) het berekenen van deze parameters en 3) het analyseren van de resultaten van de optimalisatie. Meestal wordt vervolgens een nieuwe keuze van parameters gemaakt, dan weer stap 2 en stap 3, enzovoort.

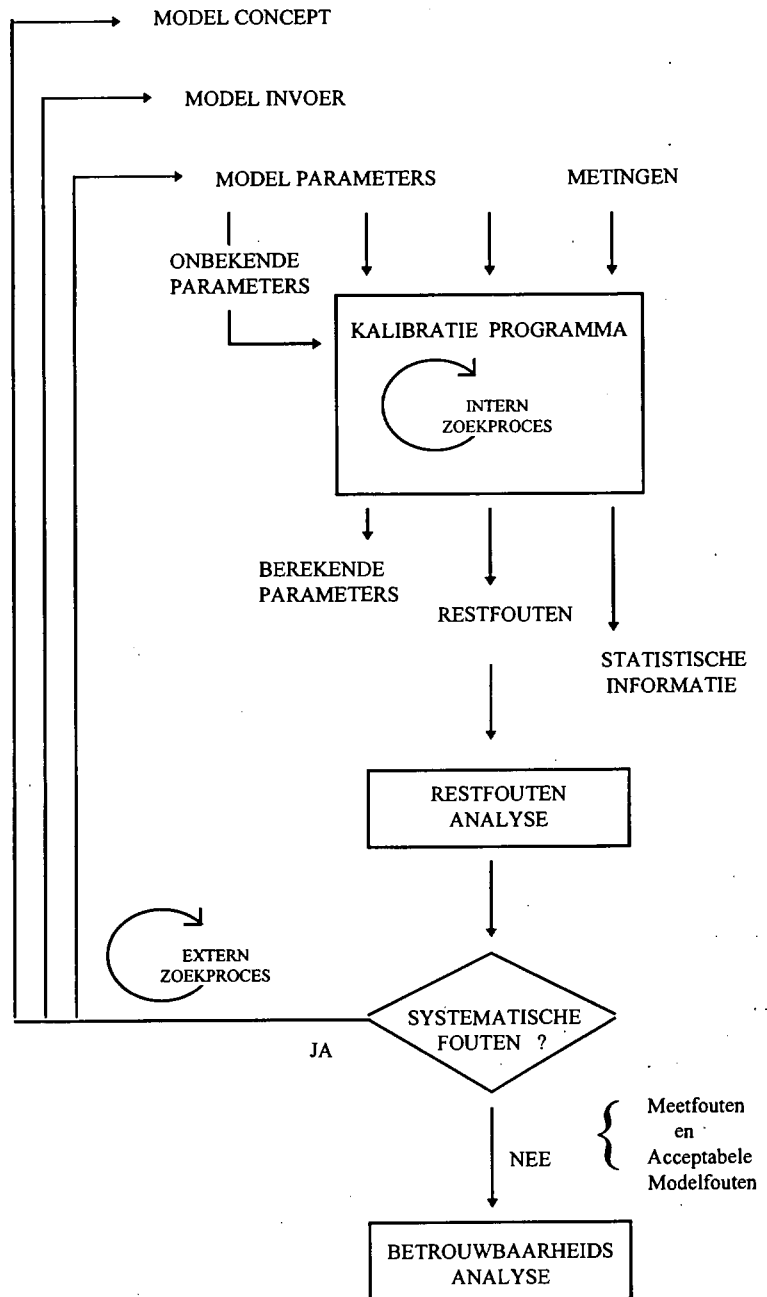
Bij een 'trial and error' manier van kalibreren kost vooral stap 2, de parameter-optimalisatie, veel tijd. Gelukkig kan juist dit onderdeel worden geautomatiseerd met een geschikt computerprogramma. Op de werking van een dergelijk automatisch kalibratieprogramma zal hier niet worden ingegaan. Voor beschrijvingen van een veel gebruikte optimalisatie-methode (Levenberg-Marquardt-algoritme) en eenvoudige toepassingen op analytische en numerieke grondwatermodellen, wordt verwezen naar Hemker (1985) en Olsthoorn (1995). We gaan er nu vanuit dat het programma bij de gegeven invoer de (of in ieder geval een) optimale combinatie van parameterwaarden kan berekenen.

De invoer van een kalibratieprogramma bestaat uit (fig. 1):

- het gehele grondwatermodel,
- een lijst van te optimaliseren parameters (groepen grondconstanten en/of randvoorwaarden),
- de veldmetingen,
- enkele stuurparameters voor het optimalisatieproces.

Alle metingen en modelwaarden bevatten natuurlijk fouten en alle invoer is voor verbetering vatbaar, maar de grootste onzekerheid bestaat meestal bij de keuze van de te optimaliseren parameters. Veel ingevoerde waarden in het model zijn schattingen en over de nauwkeurigheid is weinig bekend. Om de automatische kalibratie uit te kunnen voeren moet er echter een subjectieve scheiding worden gemaakt tussen bekende en onbekende modelwaarden. Met behulp van de beschikbare veldmetingen kan slechts een klein deel van alle waarden worden berekend, terwijl alle overige eigenschappen van het model als juist en nauwkeurig bekend worden verondersteld. Het maximaal aantal te berekenen parameters is afhankelijk van het aantal veldmetingen maar ook van het model zelf, van hoe goed het model met al zijn vereenvoudigingen de werkelijkheid kan nabootsen.

Om het aantal te optimaliseren waarden klein te houden, kunnen groepen grondconstanten of randvoorwaarden tegelijkertijd worden berekend. Omdat dit groeperen (zoneren) bij een numeriek model op geweldig veel manieren mogelijk is, blijft het vaak onzeker hoe deze stap het beste gedaan kan worden. Wanneer er een redelijk beeld bestaat van de ruimtelijke verdeling van bepaalde invoergegevens (bv. de dikte van een laag of de KD-waarde) is het handig als het automatische kalibratieprogramma alleen een factor hoeft te optimaliseren waarmee alle waarden worden vermenigvuldigd.



Figuur 1:
Iteratieve zoekprocessen
vormen de kern van de
kalibratie.

De lastige keuze van de te berekenen parameters en de onterecht veronderstelde juistheid van alle andere modeleigenschappen leiden ertoe dat het automatisch kalibratieproces vaak opnieuw en steeds met andere invoergegevens zal worden uitgevoerd. De beste aanwijzingen voor het aanpassen van de invoer worden verkregen bij het analyseren van de uitvoer van het kalibratieprogramma.

Restfouten-analyse en het externe zoekproces

De uitvoer van een automatisch kalibratieprogramma bestaat uit (figuur 1):

- de geschatte waarden van de onbekende parameters (groepen grondconstanten en/of randvoorwaarden),
- een lijst met restfouten, de verschillen tussen de veldmetingen en de hiermee overeenkomende resultaten van het gekalibreerde model,
- statistische informatie over de betrouwbaarheid van de gevonden oplossing.

De belangrijkste vraag die moet worden beantwoord nadat de parameters zijn berekend, is of het model bij de metingen past. De restfouten geven de afwijking aan tussen de meetwaarden (meestal stijghoogtes) en het beste (isohypse)vlak dat er doorheen kan worden gepast. Het zijn dus de fouten die het model niet kan verklaren. Als het model volledig juist zou zijn, zouden de restfouten de meetfouten zijn. Deze restfouten moeten worden onderzocht om te kijken of ze aanwijzingen bevatten dat het model niet-passend is. De beste methode is om de restfouten te plotten in de ruimte (bv. kaarten per watervoerend pakket) en bij niet-stationaire modellering ook plotten tegen de tijd (bv. grafieken met gemeten en berekende tijd-stijghoogtelijnen). Ook als de grootte van de restfouten redelijk is, moeten we zoeken naar mogelijke trends en andere systematische afwijkingen.

De restfouten zouden geen aanwijzingen mogen bevatten dat ons model op een of andere manier onjuist is. Dus bij de restfouten-analyse vragen wij ons af of de restfouten ons de indruk geven dat er bij de modellering ergens verkeerde aannames zijn gedaan of dat er verkeerde waarden zijn gebruikt. Als de fouten erg groot zijn, of niet-random, dan past het model niet en moeten we het model aanpassen. Andersom geldt niet dat als het model past, het model ook deugt. We kunnen niet bewijzen dat het model goed is; in het gunstigste geval zijn er geen aanwijzingen dat het model niet deugt.

Wanneer er grote of systematische afwijkingen zijn, en het model dus slecht bij de metingen past, hebben we weinig vertrouwen in het model en we proberen uit het patroon van de restfouten de meest waarschijnlijke modelfout te vinden (het externe zoekproces). Meetfouten blijven bij grondwatermodellen bijna altijd buiten beschouwing omdat ze in het algemeen klein en niet-systematisch zijn. De modelfouten kunnen in drie klassen worden ingedeeld:

- acceptabele modelfouten,
- verkeerde parameter-keuze,
- invoerfouten en conceptuele modelfouten.

Modelleren is vereenvoudigen en we weten dat het model niet alle details van de complexe werkelijke stroming hoeft weer te geven. Dicht bij een onttrekking zullen bijvoorbeeld systematische afwijkingen bestaan als gevolg van de discretisatie. Lokale heterogeniteiten worden niet gemodelleerd maar ze zullen de werkelijke stijghoogte wel beïnvloeden, waarbij dicht bij elkaar gelegen peilbuizen systematisch zullen afwijken. Dergelijke fouten treden altijd op. Het zijn de belangrijkste fouten in een goed model; ze zijn verklaarbaar en acceptabel.

Wanneer niet alle belangrijke parameters worden gekalibreerd, kan het model bij de automatische kalibratie niet passend worden gemaakt. Het aantal parameters moet groter, of de parameters moeten handiger worden gekozen. Wanneer een parameter of een combinatie van parameters niet (of niet goed) met de beschikbare metingen kan worden berekend, blijkt dat niet uit de restfouten, maar later bij de betrouwbaarheidsanalyse. Het zoeken naar de juiste parameters is de belangrijkste reden waarom de automatische kalibratie vaak opnieuw wordt uitgevoerd.

De analyse van de restfouten kan ook aanwijzingen geven dat er fouten zijn gemaakt bij het maken van het model. Een duidelijk voorbeeld hiervan is een belangrijke onttrekking die niet of onjuist is ingevoerd. Op grond van de restfouten zou men bijvoorbeeld ook kunnen besluiten dat het aantal lagen moet worden uitgebreid, dat het netwerk moet worden verfijnd, dat de modelranden anders moeten worden gekozen, of iets dergelijks. Het is zelfs mogelijk dat de modelfout conceptueel is: zo zou uit de restfouten kunnen blijken dat door het voorkomen van brak water de dichtheidsstroming misschien niet meer mag worden verwaarloosd of gaat de veronderstelling niet op dat de gemiddelde situatie in een bepaalde periode met een stationair model kan worden benaderd.

Pas nadat we met de restfouten-analyse een passend model hebben gevonden, heeft het zin om naar de statistische informatie te kijken die het kalibratieprogramma bij de gevonden kleinste-kwadraten-oplossing heeft berekend. Wanneer nu ook blijkt dat alle parameters goed kunnen worden bepaald, dan is de kalibratie geslaagd.

Betrouwbaarheidsanalyse

Stel we hebben een kleinste-kwadraten-oplossing gevonden, m.a.w. we hebben een schatting van de waarden van alle (n) geoptimaliseerde parameters, zodanig dat de som van de kwadraten van de restfouten minimaal is, wat is dan de betrouwbaarheid van de oplossing? We gaan er vanuit dat het model goed is omdat de restfouten klein en niet-systematisch zijn. Bij de optimale waarden van de parameters hoort de kleinste-kwadratensom; bij elke

andere combinatie van parameterwaarden kan een kwadraten-som worden berekend die groter is. Voor het gegeven model en met de gebruikte waarnemingen is de kwadraten-som uitsluitend een functie van de waarden van de verschillende parameters.

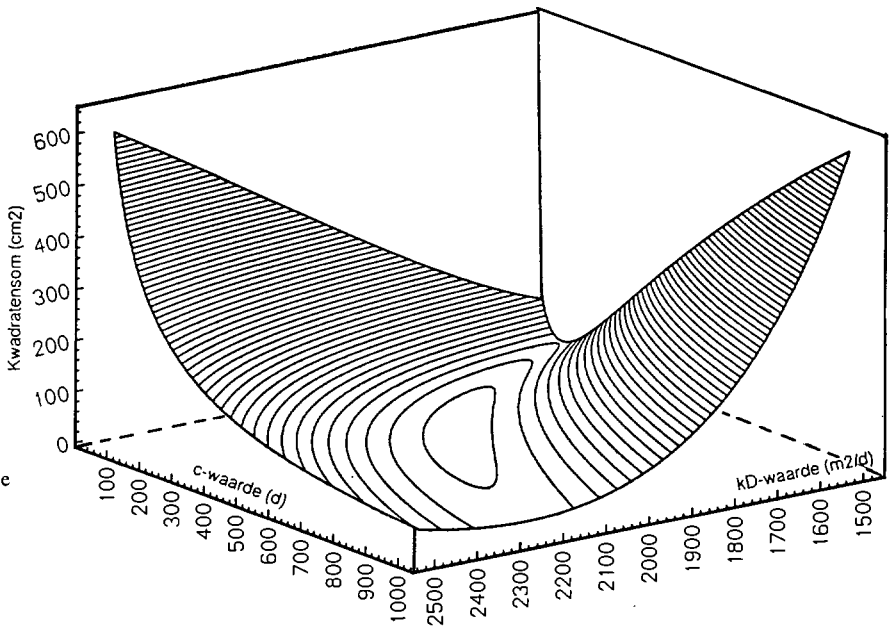
In de parameter-ruimte (de n -dimensionale ruimte waarin de waarden van alle parameters langs de assen zijn uitgezet) kan de kwadraten-som worden voorgesteld door middel van de contouren van een oppervlak (fig. 2 en 3). Als het model lineair (in de parameters) zou zijn, zouden de contouren ellipsoïden zijn rond één minimum. Met lineair wordt hier bedoeld dat wanneer een parameter groter of kleiner wordt gekozen, de verandering van alle stijghoogtes (of andere bij de kalibratie gebruikte waarden) altijd evenredig met de verandering van de parameter is. Grondwatermodellen zijn in het algemeen niet-lineair, maar als de verandering van de parameter klein is, is het model wel bij benadering lineair. (Zoals een klein stukje van een kromme lijn bijna recht is.) Omdat het model niet-lineair is, zijn de concentrische contouren rond het minimum vervormde ellipsoïden ('banaanvormig'). Op grotere afstanden van het minimum wordt de vorm onregelmatiger en kunnen zelfs lokale minima voorkomen.

Wanneer we over een andere serie waarnemingen zouden beschikken, met andere meetfouten en andere (acceptabele) modelfouten, dan zou de kleinste-kwadraten-oplossing ook andere parameterwaarden en een andere kwadraten-som opleveren. Hieruit volgt dat andere combinaties van parameterwaarden dan de gevonden optimale oplossing, die een vrijwel even lage kwadraten-som laten zien, ook aannemelijke oplossingen zijn. Rond de berekende optimale oplossing ligt een gebied waarbinnen de echte oplossing waarschijnlijk ligt: dit is het betrouwbaarheidsgebied.

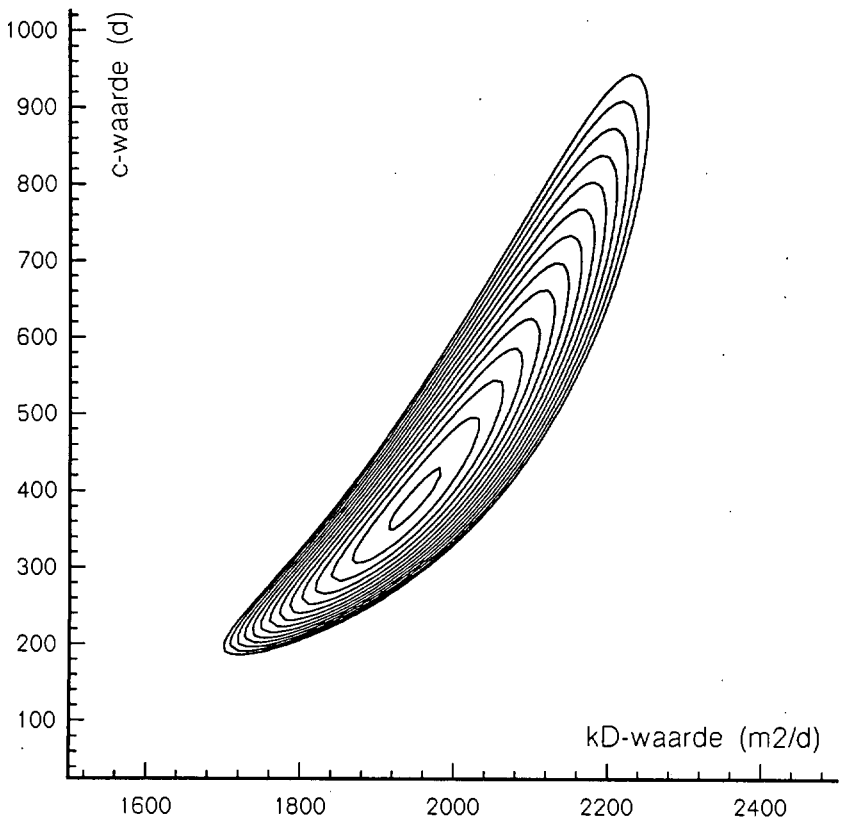
Voor twee parameters kunnen we alle mogelijke combinaties van aannemelijke oplossingen tekenen als een gebied rondom de optimale oplossing, waarvoor de zelfde lage kwadraten-som geldt. Wanneer het gebied klein wordt gekozen is de oplossingsruimte een ellips. Als we de grootte, vorm (verhouding lange as korte as) en oriëntatie (richting lange as) van de ellips weten, volgt hieruit alle interessante informatie over de onzekerheid van de parameters. De ellips wordt bepaald door het model, de gekozen parameters (ook een eventuele schaling van de parameters) en de veldmetingen.

Wanneer de assen van de ellips evenwijdig zijn aan de parameterassen, dan zijn de parameters onafhankelijk. Dat wil zeggen, voor elke aangenomen waarde van de ene parameter, vinden we dezelfde waarde voor de andere. Wanneer de assen een hoek maken zijn de parameters van elkaar afhankelijk. De vorm van de ellips zegt iets over de relatieve nauwkeurigheid waarmee de parameters geschat kunnen worden.

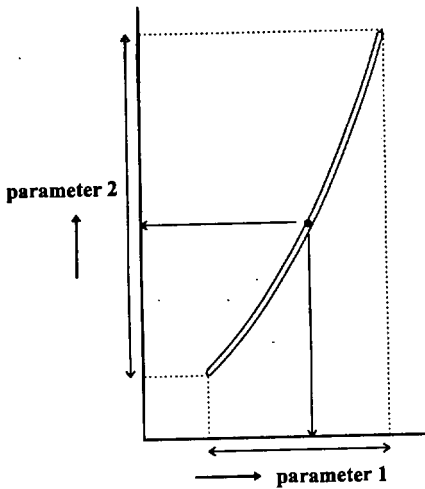
Wanneer de contouren rond het minimum zeer sterk uitgerekt zijn (soms is de ellips oneindig lang), zijn er (oneindig) veel combinaties van parameterwaarden even goed als de gevonden oplossing (fig. 4). De contouren zijn uitgerekt in de richting van de parameter(s) met een grote onzekerheid.



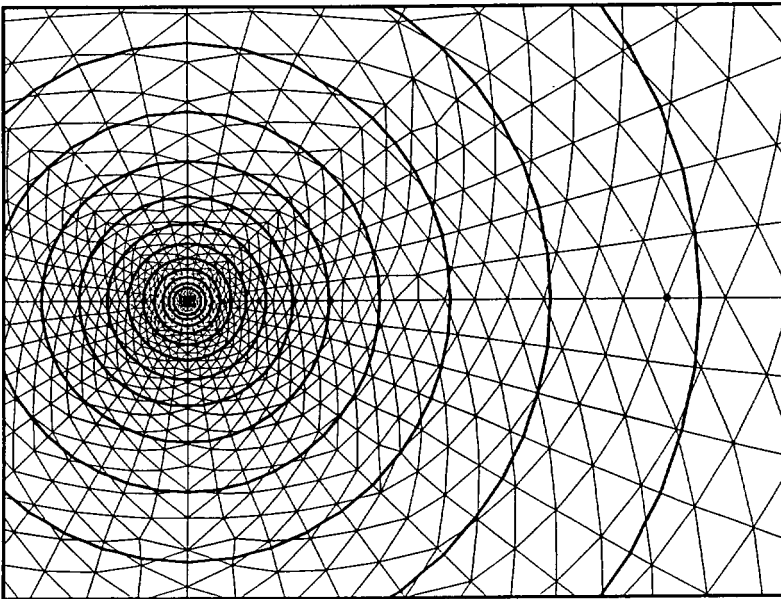
Figuur 2:
De kwadratenom van het
Dalem-probleem als functie
van het doorlaatvermogen
en de verticale weerstand.



Figuur 3:
Twee-dimensionale para-
meterruimte van het Dalem-
probleem met contouren
van de kwadratenom: 21,
21,5 ... 27,5 cm^2 .

**Figuur 4:**

Extreem uitgerekt betrouwbaarheidsgebied bij overparameterisatie.

**Figuur 5:**

Deel van het Dalem-model met het eindige-elementen netwerk en enkele isohypsen rond de pomput.

Er is geen unieke oplossing te berekenen. Men noemt dit een slecht-geconditioneerd probleem.

Een parameter is moeilijk te bepalen als de berekende waarde sterk beïnvloed wordt door geringe veranderingen in de metingen. Als één parameter, of een combinatie van parameters, slecht te bepalen is en de restfouten zijn klein, dan kan het model wel goed zijn, maar zit het probleem in de keuze van de parameters. Er wordt dan geprobeerd meer parameters te bere-

kenen dan mogelijk is (overparameterisatie). Hierbij moet worden gedacht aan:

- a sommige parameters kunnen niet (of nauwelijks) worden bepaald met de beschikbare metingen;
- b twee of meer parameters kunnen niet onafhankelijk worden bepaald.

Bij kalibratie met uitsluitend stijghoogtes (grondwaterstanden) kan overparameterisatie gemakkelijk voorkomen, zoals uit de volgende voorbeelden blijkt.

- a1 Het doorlaatvermogen (KD-waarde) kan niet worden berekend in een gebied waar de grondwaterstroming uitsluitend door de vaste stijghoogtes op de modelranden wordt bepaald.
- a2 De verticale weerstand van een scheidende laag kan niet worden berekend indien er geen stijghoogteverschil over de laag is.
- b1 In een freatisch gebied met uitsluitend stroming ten gevolge van afvoer van het neerslagoverschot N , kan de KD-waarde niet onafhankelijk van N worden berekend.
- b2 In een situatie met oeverinfiltratie en polderkwel bepaalt alleen de spreidingslengte het stijghoogteverloop en kunnen de KD-waarde en de weerstand van de deklaag niet afzonderlijk worden bepaald.

Deze voorbeelden zijn triviaal, maar soortgelijke omstandigheden doen zich altijd wel min of meer voor. Eén van de voordelen van modelleren is dat het model ook vóór het meten kan worden gebruikt om deze problemen te onderzoeken.

Een rekenvoorbeeld

Voor twee of drie parameters kunnen we het betrouwbaarheidsgebied rond de optimale oplossing tekenen en zo een indruk krijgen van de afhankelijkheid tussen de parameters en van de zekerheid waarmee de parameters konden worden bepaald. Bij grotere aantallen parameters gaat dat echter niet en de resultaten kunnen alleen in de vorm van tabellen worden gegeven. Tussen deze getallen en de vorm, oriëntatie en grootte van de n -dimensionale ellipsoïde bestaat echter een duidelijk verband. Deze relatie kan het best aan de hand van een zeer eenvoudig voorbeeld worden gedemonstreerd.

Stel we willen de twee ($n = 2$) parameters KD en c bepalen van een uitgestrekt homogeen watervoerend pakket met een homogene deklaag. De stationaire stroming wordt uitsluitend veroorzaakt door een enkele onttrekking, terwijl op acht plaatsen de stijghoogte is gemeten. Als getallen-voorbeeld worden hier enkele gegevens van de pompproef bij Dalem gebruikt (Kruseman en De Ridder, 1990, p. 73–80) in een Micro-Fem-model. De onttrekking bedraagt $761 \text{ m}^3/\text{dag}$ en de stijghoogteverlaging neemt af van 31 cm tot 5,9 cm in acht ($m = 8$) peilbuizen op 10 tot 400 m van de pompput.

Figuur 5 toont een deel van het eindige-elementen netwerk en enkele concentrische isohypsen.

De analyse van de resultaten van de automatische kalibratie wordt in drie stappen uitgevoerd, waarbij achtereenvolgens wordt gekeken naar:

- stap 1 – het centrum van de ellips,
- stap 2 – de vorm en oriëntatie van de ellips,
- stap 3 – de grootte van het betrouwbaarheidsgebied.

Stap 1 : Bij het centrum van de ellips behoren de kleinste kwadraten som en de optimale waarden van de parameters (fig. 3):

kleinste kwadraten som $S = 20,88 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

parameter 1 KD-waarde = $1946 \text{ m}^2/\text{d}$

parameter 2 c-waarde = 386 d

Bij deze oplossing worden de volgende stijghoogtes en restfouten berekend:

peilbuis afstand (m)	stijghoogte (cm)		restfout
	gemeten	berekend	
10	-31,0	-28,5	-2,5
10	-25,2	-28,5	3,3
30	-23,5	-21,7	-1,8
30	-21,3	-21,7	0,4
60	-17,0	-17,4	0,4
90	-14,7	-14,9	0,2
20	-13,2	-13,1	-0,1
400	-5,9	-6,2	0,3

Uit de tabel komt heel duidelijk een systematische fout naar voren: de op korte afstand van de pompput gelegen peilbuizen laten namelijk grotere restfouten zien. Dit is verklaarbaar omdat in werkelijkheid een onvolkomen put is gebruikt in combinatie met peilfilters op verschillende dieptes. Daarnaast zullen ook heterogeniteiten de grootste fouten veroorzaken bij de grootste verlagingen. De restfouten bevatten hiermee aanwijzingen hoe een beter model zou kunnen worden gemaakt, maar uitgaande van een (conceptueel) model met een volkomen putfilter en een homogeen watervoerend pakket is er geen reden om een modelfout te vermoeden. Alleen met een passend model is de volgende stap zinvol.

Stap 2 : De uitgerekttheid van de ellips wordt uitgedrukt in het conditiegetal en meer precieze informatie over de vorm en de oriëntatie van de ellips kan worden gehaald uit de eigenwaarden en eigenvectoren. Bij de berekening van deze waarden wordt van een lineair model (in de parameters) uitgegaan. De basis van de berekeningen wordt gevormd door een matrix (tabel) met gevoeligheden: de Jacobiaan. De Jacobiaan (J) bevat voor elke berekende parameter en voor elke meting de gevoeligheid van de berekende

verlaging voor een verandering van de parameter. Omdat bij een grotere doorlatendheid de stijghoogtes minder negatief zijn, en bij een grotere weerstand van de deklaag meer negatief, zijn alle waarden in de eerste kolom van J positief en in de tweede kolom negatief. Wanneer bijvoorbeeld de KD-waarde niet 1946 maar 1947 m²/d zou zijn, wordt de stijghoogte op 10 meter afstand van de onttrekking 0,00012921 meter groter.

J = Jacobiaan	1,2921	$-0,8018 * 10^{-4}$
	1,2921	-0,8018
	0,9449	-0,8002
	0,9449	-0,8002
	0,7273	-0,7958
	0,6016	-0,7896
	0,5138	-0,7821
	0,1806	-0,6789

Met de Jacobiaan worden vervolgens enkele eenvoudige matrix-bewerkingen uitgevoerd.

J ^T J	6,312	$-5,162 * 10^{-8}$
	-5,162	4,896
(J ^T J) ⁻¹	1,151	$1,214 * 10^{+8}$
	1,214	1,485

Van deze laatste matrix worden de eigenwaarden en eigenvectoren berekend:

Eigenwaarden	9,247	$254,4 * 10^{+6}$
Eigenvectoren	0,754	0,657
	-0,657	0,754

De eigenvectoren komen overeen met de richtingen van de assen van de ellips, terwijl de lengte van de assen zich verhouden als de wortels uit de eigenwaarden (figuur 3). De verhouding van de grootste tot de kleinste eigenwaarde is het conditiegetal.

Conditiegetal	27,5
---------------	------

De vorm van de ellips is niet erg langgerekt zodat de ligging van het centrum goed kan worden bepaald. De keuze van de parameters leidt niet tot overparameterisatie; er is een unieke oplossing gevonden en we kunnen doorgaan naar de laatste stap van de analyse.

Stap 3 : De betrouwbaarheid van de gevonden oplossing kan slechts bij benadering worden aangegeven. Er zijn namelijk geen exacte statistische berekeningen mogelijk omdat het model niet-lineair is en omdat niet bekend is hoe de modelfouten verdeeld zijn. Voor de berekening van het betrouwbaarheidsgebied gaan we er echter vanuit dat het model wel lineair is in de omgeving van het minimum en dat de modelfouten zodanig verdeeld zijn (gemiddeld nul, niet-gecorrleerd, etc.) dat de variantie van de restfouten kan worden geschat met $S/(m-n)$, de kwadratensom gedeeld door het aantal vrijheidsgraden. De covariantie matrix kan dan eenvoudig worden berekend door de matrix $(J^T J)^{-1}$ met $S/(m-n)$ te vermenigvuldigen.

Covariantie-	4,005	$4,225 \cdot 10^{-4}$
matrix	4,225	5,168

De varianties van de parameters liggen op de diagonaal, de covarianties daarbuiten. De standaardfouten van de parameters worden uit de varianties berekend:

parameter 1	KD-waarde = $1946 \pm 200 \text{ m}^2/\text{d}$
parameter 2	c-waarde = $386 \pm 227 \text{ d}$.

Uit de covariantiematrix kan verder de correlatiematrix worden gerekend door alle kolommen en alle rijen door de bijbehorende standaardfout te delen, zodat alle diagonaal-elementen 1 worden:

Correlatie-	1	0,93
matrix	0,93	1

De tamelijk grote positieve correlatie tussen de parameters (correlatiecoëfficiënt 0,93) betekent dat wanneer de werkelijke KD-waarde duidelijk groter is dan de berekende waarde, de c-waarde hoogstwaarschijnlijk ook veel groter is. In de parameterruimte zal de werkelijke waarde waarschijnlijk vallen binnen de ellips die door de betrouwbaarheidsintervallen wordt begrensd. (De kwadratensom van deze ellips is $24,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$). Kruseman en De Ridder vinden grafisch een oplossing die juist binnen de betrouwbaarheidsintervallen ligt, maar ook binnen de ellips valt: $KD = 2126 \text{ m}^2/\text{d}$ en $c = 569 \text{ d}$.

In geval van overparameterisatie zullen sommige elementen van de correlatiematrix (bijna) 1 of -1 zijn. De bijbehorende slecht-te-bepalen parameters krijgen dan een grote standaardfout. Wanneer alle parameters echter goed kunnen worden bepaald, kunnen de statistische resultaten worden gebruikt om uitspraken te doen over de te verwachten betrouwbaarheid van de voorspellingen met het model.

Literatuur

- BARD, Y. (1974) Nonlinear Parameter Estimation; Academic Press, London en New York.
- HEMKER, C.J. (1985) A General Purpose Microcomputer Aquifer Test Evaluation Technique, in: *Ground Water*, jrg 23, pag 247–253.
- KRUSEMAN, G.P. EN N.A. DE RIDDER (1990) Analysis and Evaluation of Pumping Test data, Publication 47, ILRI, Wageningen.
- OLSTHOORN, T.N. (1995) Effective Parameter Optimization for Ground-Water Model Calibration, in: *Ground Water*, jrg 33, pag 42–48.

Een strategie voor het kalibreren

Jan Willem Kooiman is als senior-projectleider hydrologie werkzaam bij Kiwa N.V. Onderzoek en Advies te Nieuwegein.

J.W. Kooiman

1 Inleiding

In de bijdrage van Rolf komt duidelijk naar voren dat een hydroloog bijna als vanzelf een aantal stappen doet. Als werkgroep Modelkalibratie hebben we daar een aantal keren over gesproken, en veel van die stappen zijn uiteraard zeer goed te verdedigen. De willekeur van die stappen staat ons tegen, en daarom wil ik in mijn bijdrage structuur aanbrengen in het modelleren, middels het 'Stappenplan Modellerings' (zie hoofdstuk 2 en figuur 1).

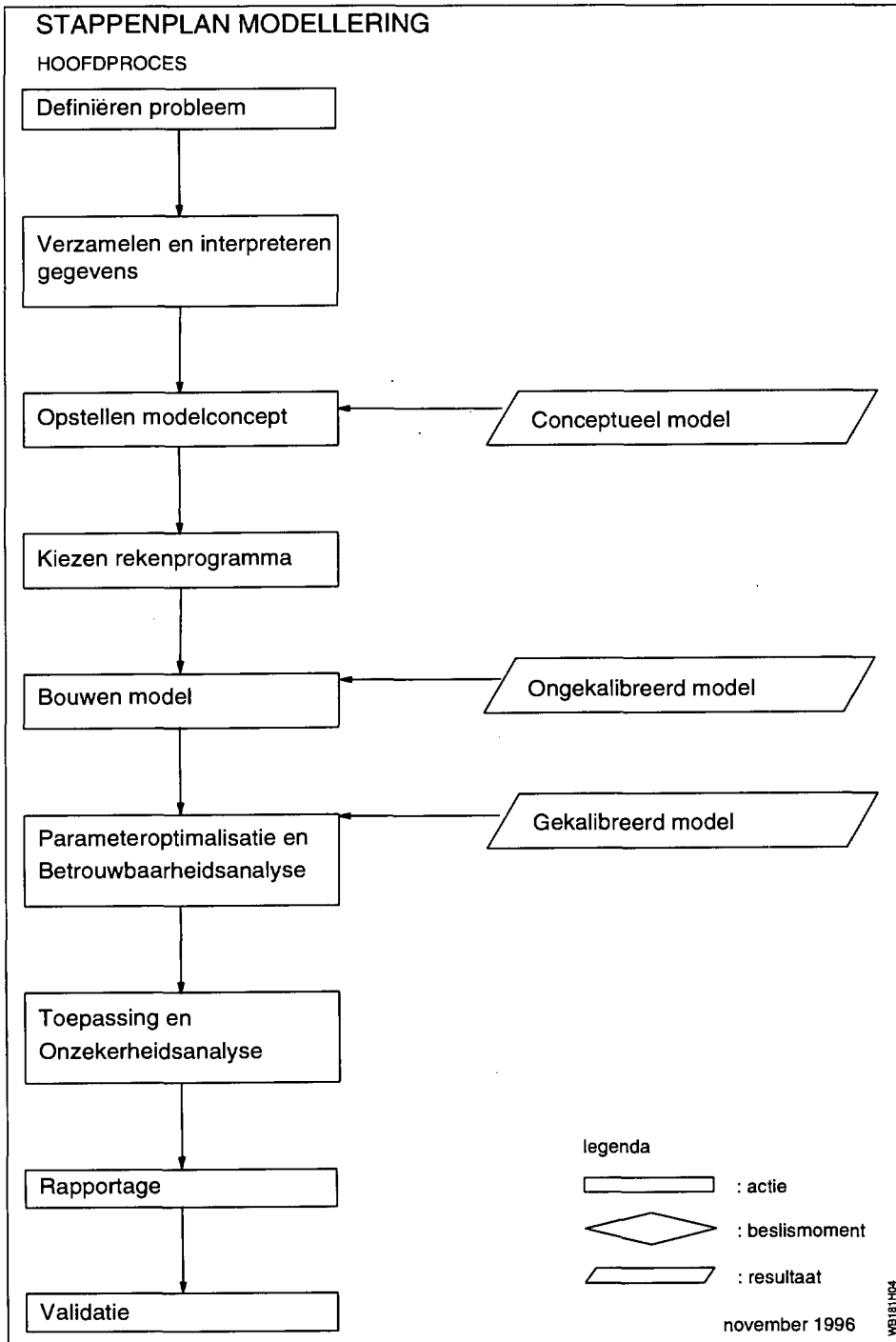
Eén van de stappen in dat stappenplan is 'Parameteroptimalisatie en Betrouwbaarheidsanalyse', die in de vorige twee bijdragen nader uitgewerkt wordt. Uiteraard kan het optimaliseren van parameters niet los gezien worden van voorgaande stappen die gedaan zijn in het modelleerproces. Daarom wordt in hoofdstuk 3 de 'Strategie voor het kalibreren' gepresenteerd, als onderdeel van het complete stappenplan.

In het stappenplan staan in hoofdlijnen de stappen die een modelleur moet zetten om goede modelresultaten te krijgen. Het hoofdproces bestaat uit 9 stappen. Dat hoofdproces zal voor de meeste modelgebruikers geen echt nieuwe dingen bevatten. Bij het opstellen is onder andere gebruik gemaakt van bestaande literatuur, zoals Anderson en Woessner (1992), Bear e.a. (1992) en IAHS (1988). De verschillende auteurs volgen weliswaar een iets verschillende aanpak, maar de hoofdlijn is altijd dezelfde.

Elke stap in het hoofdproces kan weer worden onderverdeeld in stappen in het zogenaamde subproces. Een dergelijke onderverdeling wordt niet door alle bovengenoemde auteurs beschreven. Daarover heerst dus op dit moment minder eenduidigheid.

De 'Strategie voor het kalibreren' omvat naast de 'Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse' tevens de stappen 'Opstellen modelconcept' en 'Bouwen model', en in bijzondere gevallen ook de stap 'Kiezen rekenprogramma' (zie hiervoor ook de woordenlijst, bijlage 1). De bestaande literatuur komt veelal niet verder dan een onderscheid in 'trial and error' en 'automatische kalibratieprogrammatuur'.

De onderverdeling bij 'Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse' is het resultaat van de werkzaamheden van de NHV-werkgroep Modelkalibratie. Hoofdstuk 3 geeft een korte beschrijving van de stappen tijdens de parameteroptimalisatie en de betrouwbaarheidsanalyse. Voor een meer gedetailleerde beschrijving en een verdere onderbouwing wordt verwezen naar de bijdragen van Hemker en Zaadnoordijk in deze bundel.



Figuur 1: Stappenplan modellering.

2 Stappenplan modellering

Definiëren probleem

Het probleem en de doelstelling van het project worden helder omschreven. Dat voorkomt in het vervolgtraject dat de modelleerinspanning en de gevraagde resultaten niet met elkaar in overeenstemming zijn. De volgende vier vragen kunnen hierbij behulpzaam zijn:

- 1 Welke vragen willen we met het model beantwoorden? Wat willen we van een model leren? Is het model bedoeld voor voorspellingsberekeningen of bijvoorbeeld een systeemanalyse?
- 2 Hoe nauwkeurig willen we antwoord op onze vragen?
- 3 Op welke schaal willen we antwoord op onze vragen?
- 4 Kan met eenvoudige analytische formules of bijvoorbeeld met een waterbalansstudie onze vraag beantwoord worden, of moet een meer complex model¹ worden opgesteld?

Aan het eind van deze stap is duidelijk hoe het probleem moet worden opgelost. In deze bundel gaan we ervan uit dat voor een complex model gekozen wordt.

Verzamelen en interpreteren gegevens

Bij de probleemdefinitie is vanzelfsprekend gebruik gemaakt van bestaande gegevens, maar in de tweede stap gebeurt dat meer systematisch. Ook vindt nu interpretatie van de gegevens plaats, nodig voor het analyseren van het systeem. Een moeilijkheid is wel tot hoever hierbij gegaan moet worden. Wanneer hebben we 'genoeg' gegevens om verder te gaan naar de volgende stap? Daar zijn geen algemene richtlijnen voor te geven, het is mede afhankelijk van de vragen die beantwoord moeten worden. Veelal worden zoveel mogelijk gegevens gebruikt, en vaak blijkt dat nog onvoldoende te zijn.

Direct gemeten veldgegevens worden gebruikt, maar ook informatie over de waterbalansen en andere gegevens die nodig zijn om de aquiferparameters van het hydrologische systeem te bepalen.

In deze stap is een veldbezoek door de modelleur zeer aan te bevelen. Het zorgt ervoor dat de modelleur met beide voeten op de grond blijft staan, en het zal een positieve invloed uitoefenen op de (subjectieve) beslissingen die gedurende de modelstudie moeten worden gemaakt, en op de conclusies die worden getrokken.

¹ Onder een meer complex model verstaan we elk model, zowel volgens een (numerieke) Eindige Elementen Methode (EEM) en Eindige Differentie Methode (EDM) als een Analytische Elementen Methode (AEM).

Opstellen modelconcept

De achtergrond van deze stap is dat een rekenmodel een vereenvoudiging van de werkelijkheid is. Het conceptueel model geeft een schematisatie van de werkelijkheid. Het bestaat uit de set van aannames die het systeem, de optredende processen, de mechanismen en de relevante (pakket)eigenschappen beschrijft. Te denken valt bijvoorbeeld aan de geohydrologische data (pakketdiktes, kD-waarden, maaiveldhoogten, etc) en aan de processen (Dupuit, water boven maaiveld, etc).

Kiezen rekenprogramma

De onderverdeling van deze stap is weergegeven in figuur 2.

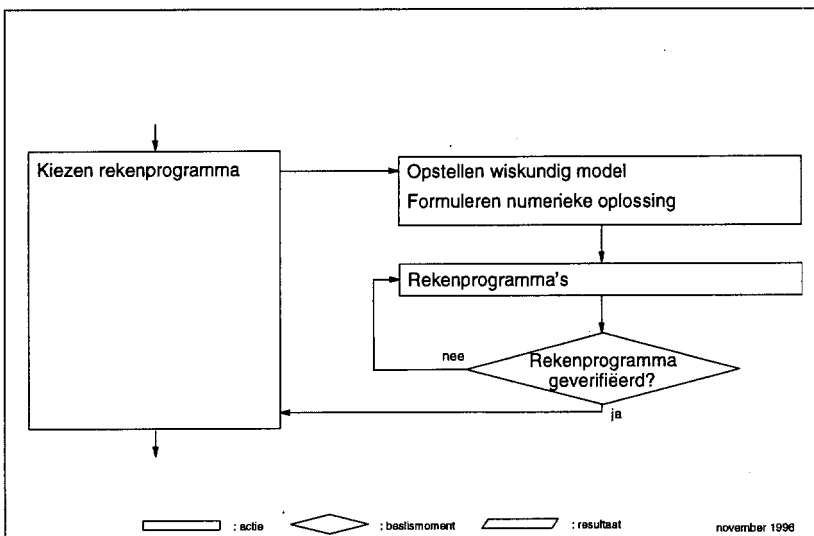
Wiskundig model en numerieke formulering

Op grond van het conceptueel model worden de bepalende wiskundige vergelijkingen opgesteld, resulterend in het wiskundig model. Een verificatie van het wiskundig model moet laten zien dat het op een juiste wijze de fysische processen beschrijft die in de ondergrond optreden.

De te beschouwen rekenprogramma's bevatten elk een algoritme om de wiskundige vergelijkingen op te lossen. Uit deze programma's wordt een keuze gemaakt.

Verificatie gekozen rekenprogramma

De verificatie van het gekozen rekenprogramma is een vergelijking van de numerieke oplossing van het rekenprogramma met één (of meerdere) analytische oplossingen of andere numerieke oplossingen. Deze verificatie



Figuur 2: Kiezen rekenprogramma.

verzekert ons ervan dat het rekenprogramma op een juiste wijze de wiskundige vergelijkingen oplost.

In de huidige situatie hoeft de verificatie meestal niet te worden uitgevoerd, omdat er een aantal rekenprogramma's te koop is dat inmiddels zijn (wiskundige) waarde heeft bewezen. Een goed rekenprogramma heeft ook een goede handleiding, waarin de wiskundige vergelijkingen staan beschreven. Als voorbeeld voor de Nederlandse situatie noemen we de volgende rekenprogramma's voor stijghoogten en stromingen (dus geen grondwaterkwaliteit): Micro-Fem, MLAEM, MODFLOW, SIMGRO en TRIWACO.

Bouwen model

Het conceptuele model wordt nu omgezet in een vorm die geschikt is om berekeningen uit te voeren. Dat houdt onder andere in het ontwerp van het elementennetwerk, het selecteren van de tijdstappen, het vaststellen van de rand- en beginvoorwaarden, en het vaststellen van de (voorlopige start-) waarden van de aquifer-parameters en van andere hydrologische parameters per netwerkcél. Voor een AEM wordt geen elementennetwerk ontworpen, maar wordt bepaald welke analytische elementen worden opgenomen. Aan deze elementen worden eveneens pakket- en andere hydrologische parameters gekoppeld.

Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse

De stap 'Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse' wordt in hoofdstuk 3 verder uitgewerkt. Hieronder wordt volstaan met een korte toelichting.

Parameteroptimalisatie

Het doel van de parameteroptimalisatie is om een model te krijgen waarvan de resultaten zo goed mogelijk overeenkomen met gemeten waarden. Dat gebeurt door het aanpassen van de voorlopige startwaarden van aquifer-parameters en van andere hydrologische parameters. Daarmee wordt de zogenaamde modelfout geminimaliseerd. Deze modelfout is van tevoren in de doelfunctie vastgelegd.

De parameteroptimalisatie wordt tot op heden vaak uitgevoerd met de hand, maar het is beter dit met behulp van een automatisch kalibratieprogramma te doen. Het resulteert onder andere in een set 'gekalibreerde parameters'.

Betrouwbaarheidsanalyse

Om aan te geven wat die set 'gekalibreerde parameters' nu precies waard is wordt een betrouwbaarheidsanalyse uitgevoerd. Dit resulteert in een gekalibreerd model.

Toepassing en onzekerheidsanalyse

Toepassing

De toepassing bestaat uit één of meerdere simulaties (zie woordenlijst). In elke simulatie wordt een berekening uitgevoerd met het gekalibreerde model. De toepassing² is gericht op het beoogde doel, dat in de eerste stap (definiëren probleem) is vastgesteld.

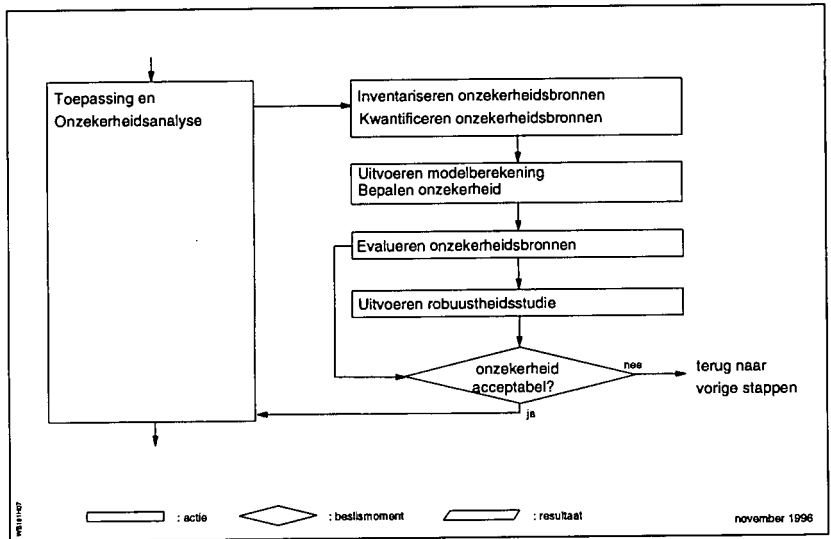
Onzekerheidsanalyse

De waarde van de toepassing wordt meestal bepaald door de onzekerheid in de modelresultaten. De 'modelonzekerheid' wordt gekwantificeerd met de 'Strategie voor onzekerheidsanalyse'. De strategieën die bij onzekerheidsanalyses worden gehanteerd hebben doorgaans veel overeenkomende kenmerken. Op basis van uitvoerig literatuuronderzoek konden Janssen e.a. (1990) dan ook een soort algemene strategie voor het uitvoeren van onzekerheidsanalyse formuleren, bestaande uit zeven stappen. In het stappenplan modellering is deze strategie verkort weergegeven (zie figuur 3). Een praktische toepassing is gegeven door Kooiman en Athmer (1995).

- Inventariseren en kwantificeren onzekerheidsbronnen
Bij de inventarisatie van de onzekerheidsbronnen worden de resultaten van de kalibratie gebruikt. Maar ook is het mogelijk dat parametergroepen worden gekozen die niet bij de kalibratie zijn betrokken. Omdat het vaak ondoenlijk is om alle onzekerheidsbronnen mee te nemen, worden de belangrijkste gekozen. Bij het kwantificeren wordt de onzekerheid (meestal) vertaald in een kansverdeling.
- Uitvoeren modelberekening en bepalen onzekerheid
Voor het bepalen van de onzekerheid moet een aantal simulaties worden uitgevoerd. Hiervoor zijn verschillende invoerfiles nodig, die worden gegenereerd met behulp van de vastgestelde kansverdeling van de onzekerheidsbronnen. Hiervoor is het programma UNCSAM (UNCertainty analysis by Monte Carlo SAMpling techniques) ontwikkeld (Janssen e.a., 1992).
- Evalueren onzekerheidsbronnen
Bij de evaluatie wordt nagegaan welke onzekerheidsbronnen belangrijke bijdragen leveren aan de totale onzekerheid. Tenslotte dient beslist te worden of de berekende onzekerheid acceptabel is. Als de onzekerheid in de modeluitkomsten onacceptabel groot is, moeten wegen worden gezocht om die te verminderen. Hiervoor wordt teruggesprongen naar eerdere stappen.

² De term 'Toepassing' kan verwarring geven. Sommigen verstaan onder toepassing het gebruik van de modelresultaten na afloop van de modelstudie, bijvoorbeeld in het maken van een ontwerp of het uitvoeren van maatregelen.

Figuur 3: Toepassing en onzekerheidsanalyse.



- **Robuustheidsstudie**

Een robuustheidsstudie gaat na of de resultaten wezenlijk anders worden als gebruikte veronderstellingen (bijvoorbeeld over de kansverdelingen) anders zouden zijn. De eerlijkheid gebiedt te zeggen dat deze stap, vanwege de vele tijd en kosten die ermee gemoeid zijn, nagenoeg nooit wordt gezet.

Rapportage

Als een modelstudie wordt uitgevoerd volgens het 'Stappenplan modellering', kan ook de rapportage van de modelstudie plaatsvinden volgens hetzelfde stappenplan. Bear e.a. (1992) geven ook al de suggestie om volgens een stappenplan te rapporteren. De lezer krijgt dan een goed beeld van de aanpak en de keuzen van de modelleur.

Validatie

Validatie is een controle achteraf in hoeverre een voorspelling is uitgekomen ('post-audit', 'post-validatie'). Dit wordt zeer aanbevolen, maar wordt in de praktijk, om velerlei redenen, zelden gedaan.

3 Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse

In dit hoofdstuk wordt de stap 'Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse' verder uitgewerkt (figuur 4). Deze stap stond tot nu toe bekend als de 'ijking'.

Kiezen te optimaliseren parametergroepen

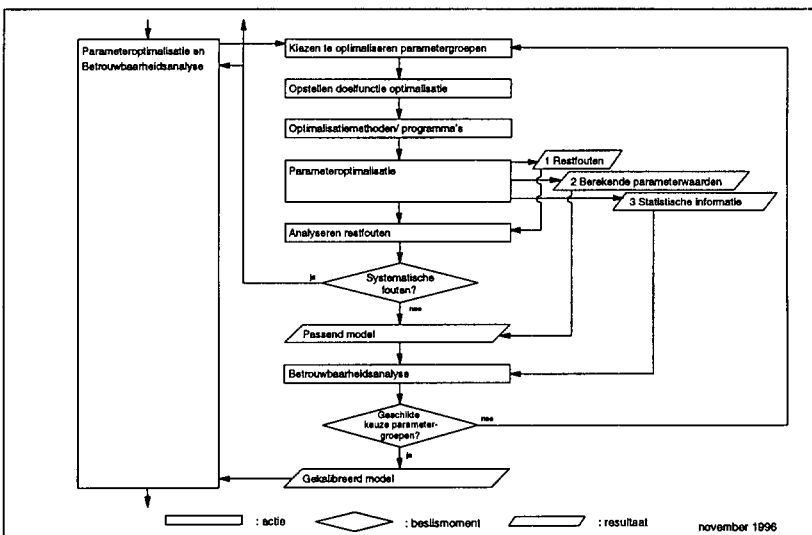
Het aantal vrijheidsgraden van een grondwatermodel (het aantal knoppen waaraan onafhankelijk gedraaid kan worden) is altijd kleiner dan het aantal fysische parameters dat als invoer nodig is. Dat komt omdat sommige parameters met elkaar samenhangen, dat wil zeggen dat ze onderling afhankelijk zijn. Hemker geeft een aantal triviale voorbeelden. Als er zogenaamde 'onafhankelijke parametergroepen' worden gekozen, vereenvoudigt dat het parameter-optimalisatieproces.

Bij de uiteindelijke keuze van de parametergroepen speelt ook de toepassing een rol: welke parametergroepen zijn daar naar verwachting belangrijk?

Er bestaan verschillende manieren om achter de afhankelijkheid van parameters te komen. Maas (1995) past met succes de dimensie-analyse toe.

Opstellen doelfunctie optimalisatie

Voorwaarde voor automatische parameter-optimalisatie is dat de verschillen tussen gemeten en berekende waarden in één waarde worden uitgedrukt. Met behulp van de doelfunctie wordt de waarde berekend. We moe-



Figuur 4:
Parameteroptimalisatie en
betrouwbaarheidsanalyse

ten kiezen hoe die doelfunctie er uit ziet. Gewichtsfactoren worden gebruikt als niet aan alle waarnemingen dezelfde zwaarte wordt toegekend, en/of als verschillende grootheden in de kalibratie worden betrokken (bijvoorbeeld stijghoogtemetingen én afvoeren).

Zaadnoordijk beschrijft in zijn bijdrage hoe zo'n doelfunctie kan worden opgesteld.

Optimalisatiemethoden/programma's

Voor de grotere rekenprogramma's zijn in de afgelopen jaren standaardgereedschappen voor kalibratie op de markt gekomen. Deze markt is momenteel sterk in ontwikkeling. Er worden meer gereedschappen gemaakt, de bestaande gereedschappen worden verbeterd en meer gebruikersvriendelijk gemaakt, en de afhankelijkheid van de rekenprogramma's zal verdwijnen. Via speciale interfaces zal de kalibratieprogrammatuur op meerdere rekenprogramma's toegepast kunnen worden.

Een overzicht van de ontwikkelingen wordt gegeven in de bijdrage van Olsthoorn. Hij geeft ook een vergelijking van vijf bestaande en veel gebruikte parameteroptimalisatiepakketten.

Parameteroptimalisatie

De parameteroptimalisatie³ wordt uitgevoerd met het gekozen (automatische) kalibratieprogramma. De uitvoer bestaat uit:

- een lijst met restfouten (verschillen veldmeting met berekende waarden);
- de geschatte waarden van de (te kalibreren) parametergroepen;
- statistische informatie over de betrouwbaarheid.

Hemker gaat globaal in op de werkwijze van deze programma's en op de wijze waarop met de uitvoer moet worden omgegaan.

Analyseren restfouten (systematische fouten aanwezig?)

Bij het analyseren van de restfouten is het de vraag of de restfouten een indruk geven dat er bij de modellering ergens verkeerde aannames zijn gedaan of dat er verkeerde waarden zijn gebruikt. Bij grote of systematische afwijkingen moet het model worden aangepast. Dat betekent één of meerdere stappen terug in het stappenplan.

³ Dit onderdeel kostte bij de 'trial and error'-methode relatief erg veel tijd. Door het gebruik van automatische kalibratieprogrammatuur kan de parameteroptimalisatie nu heel snel worden uitgevoerd. Daardoor is meer tijd beschikbaar voor het verwerken en interpreteren van de uitkomsten van die optimalisatieberekeningen (het 'echte hydrologische' werk).

Als geen systematische fouten meer worden gevonden is een passend model verkregen, met daarin opgenomen de berekende waarden van de gekalibreerde parametergroepen.

Een verdere beschrijving van de restfouten-analyse wordt gegeven door Hemker.

Betrouwbaarheidsanalyse (is kalibratie geslaagd?)

De statistische informatie die volgt uit de parameteroptimalisatie geeft een indruk van de betrouwbaarheid van de gevonden oplossing. Als een kleine verandering van de metingen een relatief grote verandering van berekende parameterwaarden geeft, is het model wel goed, maar zit het probleem in de keuze van de parametergroepen.

Als de betrouwbaarheid onacceptabel is, moeten andere parametergroepen worden gekozen. Als de parametergroepen goed zijn bepaald, is de kalibratie geslaagd: er is een gekalibreerd model.

Een verdere beschrijving van de betrouwbaarheidsanalyse wordt gegeven door Hemker.

Conclusies

Stappenplan modellering

De hoofdlijnen van het stappenplan modellering zullen in de praktijk (onbewust) al door vele modelleurs worden toegepast. Het gebruik van het stappenplan heeft toch z'n voordelen: het geeft overzicht, stappen worden bewust gezet, het kan als checklist fungeren, en het kan worden gebruikt bij de opzet van de rapportage.

Strategie voor het kalibreren

De strategie is in principe op alle kalibratieproblemen, van eenvoudig tot complex, toe te passen. Het resultaat is in de meeste gevallen een gekalibreerd model, waarmee de gewenste simulatieberekeningen kunnen worden uitgevoerd.

Het onderdeel 'Parameteroptimalisatie en betrouwbaarheidsanalyse' is in eerste instantie opgezet in de werkgroep Modelkalibratie op grond van theoretische beschouwingen en toepassingen op eenvoudige problemen. De case-studies verderop in deze bundel laten zien dat de gehele strategie ook werkt in meer complexe situaties.

Modelresultaat

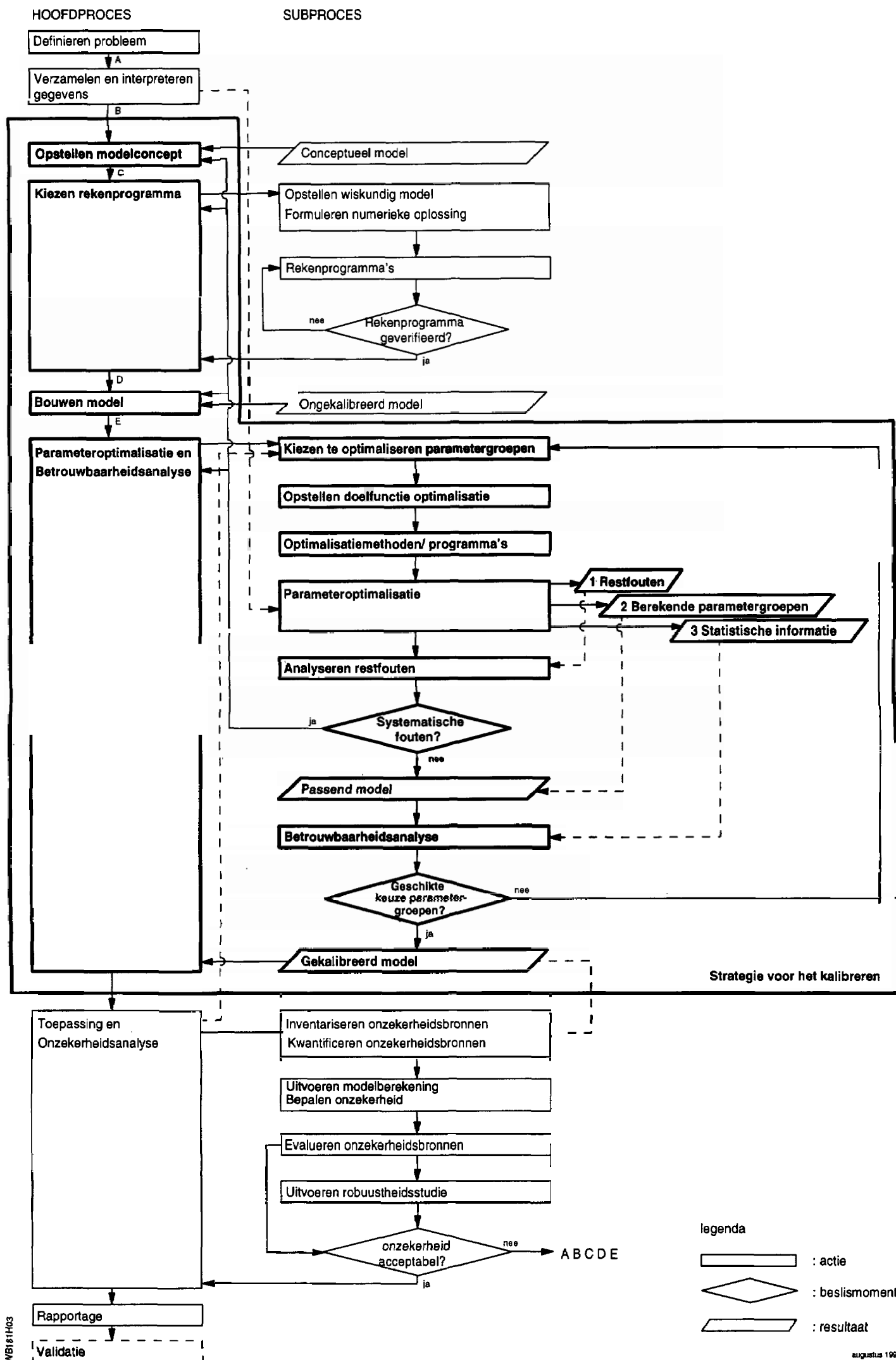
Het nauwgezet volgen van het stappenplan en de strategie is geen garantie voor een goede modelkalibratie en modelstudie. Daarvoor is in eerste en belangrijkste instantie toch de 'kwaliteit' van de modelleur/hydroloog verantwoordelijk. Maar het volgen van het stappenplan geeft wel meer in-

zicht in de gevolgde procedure, die daardoor ook voor anderen (de 'opdrachtgever') na te volgen/rekenen is. In die zin geeft het wel een 'beter' resultaat, namelijk dat het door een breder publiek gedragen kan worden. De kwaliteit is meer inzichtelijk gemaakt.

Literatuur

- ANDERSON, M.P. EN W.W. WOESSNER (1992) *APPLIED Groundwater Modeling. Simulation of Flow and Advective Transport*; Academic Press, Inc., San Diego.
- BEAR, J., M.S. BELJIN EN R.R. ROSS (1992) *Fundamentals of Ground-Water Modeling*; in: *EPA Ground Water Issue*, april 1992; EPA/540/S-92/005.
- IAHS (1988) Consequences of spatial variability in aquifer properties and data limitations for groundwater modelling practice; in: *IAHS Publication* nr 175.
- JANSSEN, P.H.M., P.S.C. HEUBERGER EN R. SANDERS (1992) *UNCSAM 1.1: a Software Package for Sensitivity and Uncertainty Analysis*; Report nr. 9591010041992, RIVM, Bilthoven.
- JANSSEN, P.H.M., W. SLOB EN J. ROTMANS (1990) *Gevoeligheidsanalyse en onzekerheidsanalyse: een inventarisatie van ideeën, methoden en technieken*; Rapportnr. 958805001, juli 1990 RIVM, Bilthoven.
- KOOIMAN, J.W. EN W.H.G.J. ATHMER (1995) *Spreiding in de verblijftijds-zones van grondwaterwinningen*; in: *H₂O*, jrg 28, nr 25, pag 760-762.
- MAAS, C. (1995) *Afhankelijkheid van parameters in grondwatermodellen*; in: *Stromingen*, jrg 1, nr 2.

STAPPENPLAN MODELLERING



Kalibratiegereedschappen

Theo Olsthoorn is als hoofd van de sector Hydrologie werkzaam bij Gemeentewaterleidingen Amsterdam.

T.N. Olsthoorn

Inleiding

Van het begin van de jaren tachtig herinner ik me, van voordrachten van Professor Neuman op het toenmalige RID, dat de geautomatiseerde parameteroptimalisatie van grondwatermodellen destijds nog uiterst beperkt toepasbaar was. In feite kon alleen het doorlaatvermogen worden geoptimaliseerd voor een aantal zones in een gebied (Neuman en Yakowitz, 1979; Neuman, 1980). In de loop van de jaren tachtig vond uitbreiding plaats naar meer lagen, zodanig dat ook de weerstand van scheidende lagen kon worden geoptimaliseerd (McElwee en Veling, 1985). De belangrijkste gebeurtenis in de ontwikkeling van de kalibratie van grondwatermodellen was wellicht de publikatie van het beroemde drieluik van artikelen van Carrera en Neuman in *Water Resources Research* in 1986 (Carrera en Neuman, 1986a, b, c). Beide heren geven hierin een volledig overzicht van de theorie van invers modelleren, zeg ijking van grondwatermodellen. De theorie was hiermee min of meer rond; kalibratie door middel van inverse modellering was mogelijk, ook in complexe situaties, stationair zowel als niet-stationair.

Sindsdien kwam de ontwikkeling van kalibratiesoftware in een stroomversnelling. Op verschillende plekken in de wereld is men toen blijkbaar begonnen met het ontwikkelen van standaardgereedschappen voor de hydrologische praktijk (zie overzicht achteraan dit artikel). Een aantal van deze softwarepakketten dat geschikt is voor de kalibratie van grotere grondwatermodellen is inmiddels op de markt verschenen. Zij zijn voor relatief weinig geld voor iedere hydroloog beschikbaar. Dat wil overigens niet zeggen dat er daarnaast niet nog een groot aantal eigen brouwsels bestaat, die in diverse stadia van ontwikkeling verkeren binnen de laboratoria van instellingen, universiteiten en ingenieurbureaus. Ongetwijfeld zal het aantal beschikbare gereedschappen in de komende jaren daarom toenemen. Enkele daarvan zijn TRICALB, de kalibratiemodule voor het grondwaterprogramma TRIWACO, van IWACO, en een kalibratiemodule voor het model MLAEM, van Strack Consulting in Minneapolis. Ik beperk me tot enkele kalibratiepakketten die momenteel voor iedereen beschikbaar zijn via bedrijven als de Scientific Software Group of het IGWMC (zie hieronder) tegen betaling van een redelijk bedrag, globaal tussen 500 en 1500 gulden.

De Scientific Software Group is waarschijnlijk 's werelds grootste distributeur van software op het gebied van de (geo)hydrologie. Van hun folder worden er 80.000 per jaar verspreid. Deze folder, waarvan elk jaar een bijgewerkte nieuwe versie verschijnt, is een must voor hydrologen, vanwege het bijzonder goede overzicht van wat er momenteel op het vakgebied aan software te koop is. Verder kan informatie over grondwatersoftware ook worden

opgezocht via het zogenoemde 'World Wide Web' van het Internet (zoek bijvoorbeeld onder "groundwater" of voor de Scientific Software Group direct bij <http://www.scisoftware.com>, waar u de gehele catalogus kunt raadplegen en waarvandaan demo's naar de eigen computer kunnen worden gehaald. Een andere interessante zogenoemde 'web site' is <http://www.waternet.com> van waaruit allerlei informatie over onder andere grondwatermodellen te vinden is. U kunt ook terecht bij het IGWMC (International Groundwater Modeling Center) dat gevestigd is in de Colorado School of Mines in Golden. Het internetadres (URL) is: <http://igwmc.mines.colorado.edu:3851/1s/igwmc>. MODFLOWP is gratis te downloaden via <ftp://brrcrftp.cr.usgs.gov/pub/mchill>. De demo FEMINVS is eveneens binnen te halen via <http://www.xs4all.nl/~microfem>

De kalibratiepakketten

We spreken veelal van 'kalibratiepakketten'. Zoals uit de voorgaande voordrachten reeds naar voren is gekomen, is kalibratie een ruimer begrip. Kalibratie is een proces dat onder meer model- en parameterkeuze en terugkoppelingen door de modelleur inhoudt. De kalibratiepakketten zijn in feite slechts parameteroptimalisatiepakketten. Zij optimaliseren de waarde van de parameters die door de gebruiker zijn gekozen. Het begrip kalibratiepakket is derhalve te ruim, beter zou zijn om uitsluitend te spreken van parameter-optimalisatiepakket.

De bekende, momenteel beschikbare gereedschappen voor kalibratie van grondwatermodellen zijn: PEST, MODINV, MODFLOWP en dichter bij huis FEMINVS en TRICALB. (De eerste vier zijn verkrijgbaar via de Scientific Software Group).

De meeste kalibratiepakketten zijn gebonden aan één bepaald computerprogramma. Dit geldt voor MODFLOWP en MODINV die beide voor het programma MODFLOW zijn gemaakt. Het geldt ook voor FEMINVS, dat is ontwikkeld voor het programma MICRO-FEM en voor TRICALB, horend bij het programma TRIWACO. Het zal eveneens gelden voor de meeste nieuwe, nog op de markt te verschijnen optimalisatiepakketten.

In dit rijtje neemt het programma PEST ('model independent Parameter ESTimation') een bijzondere plaats in. Het is geheel onafhankelijk van wat voor programma dan ook. Het runt in samenwerking met elk ander modelpakket, mits dat in de vorm van een zogenoemde 'batch-opdracht' zelfstandig kan draaien. In dat geval gebruikt PEST het andere modelprogramma voor het aanleveren van de voor de kalibratie benodigde gegevens. Het runt het andere programma (c.q. het model) zo vaak als nodig is voor de kalibratie. De gebruiker moet hiertoe aan PEST duidelijk maken hoe de invoer eruit ziet, zodat PEST de invoer van dat model onderweg kan wijzigen. De gebruiker moet tevens aan PEST duidelijk maken hoe de uitvoer van het andere model in elkaar zit, zodat PEST de benodigde informatie daaraan kan onttrekken.

Het pakket PEST is daarom een interessante ontwikkeling die een bijzonder groot potentieel toepassingsgebied heeft en niet beperkt is tot grondwaterstroming. Met de nodige fantasie zullen met PEST ook hybride modellen kunnen worden gekalibreerd, zoals modellen waarin grond- en oppervlaktewater zijn gecombineerd. Een nadeel ten opzichte van specifiek voor een bepaald grondwaterprogramma ontwikkelde kalibratiesoftware is de benodigde rekentijd. Zo moet PEST, dat geen toegang heeft tot het inwendige van het gebruikte grondwaterprogramma, dit voor elk wisselwaskje laden, de gegevens laten inlezen, laten rekenen en de resultaten laten wegschrijven. Een invers model is in feite een parameteroptimalisatiepakket dat het simulatiepakket aan boord heeft. Het zal daardoor veel efficiënter rekenen. Dit geldt in nog sterkere mate wanneer zo'n model gebruik gaat maken van allerlei interne gegevens zoals de opbouw van de matrix en directe analytische differentieerbaarheid ter berekening van bijvoorbeeld gevoeligheidsmatrices (de zogenoemde Jacobiaan). Een tweede potentieel nadeel van de aanpak van PEST is een beperking van de nauwkeurigheid waarmee afgeleiden kunnen worden berekend die tijdens de kalibratie nodig zijn. Ook dit hangt samen met het tussendoor inlezen en uitschrijven van gegevens. Hierbij kan afronding van getallen een rol spelen en kan de kalibratie aanmerkelijk vertraagd worden of zelfs geheel spaak lopen. (De handleiding geeft echter richtlijnen hoe dit te voorkomen). Dit zijn in feite kleine nadelen voor een overigens prachtig pakket. PEST is het enige pakket dat gebruikt kan worden bij modellen waarvoor geen specifiek kalibratiepakket voorhanden is.

Overigens wordt door de makers van software in toenemende mate ingespeeld op het beschikbaar komen van kalibratiegereedschappen. Zij zorgen voor zogenoemde interfaces via welke hun programma direct aansluit op en samenwerkt met de kalibratiesoftware. Zo heeft de nieuwe versie van de MODFLOW-schil PM (Processing Modflow van Kinzelbach e.a.) inmiddels zo'n interface voor PEST meegekregen (zie catalogus van de Scientific Software Group). Een dergelijke interface maakt het voor de gebruiker veel gemakkelijker om met een dergelijk stuk kalibratiesoftware aan de slag te gaan. Het wordt nu veelmeer een kwestie van het beantwoorden van vragen die het programma stelt dan van doorworstelen van een dikke, min of meer taai handleiding.

In onderstaande tabel is een overzicht gegeven van hetgeen de vijf geselecteerde kalibratiepakketten kunnen. Het overzicht is niet uitputtend, noch ten aanzien van de opgenomen facetten van de pakketten, noch ten aanzien van het aantal pakketten zelf.

Uit het overzicht kan geconcludeerd worden dat alle pakketten in staat zijn de parameters van hun betreffende grondwatermodel stationair te optimaliseren, en dat voor meer lagen simultaan. Voor de meeste geldt dat ook niet-stationaire kalibratie mogelijk is. Het aantal faciliteiten dat de verschillende programma's bieden, wordt overigens per nieuwe 'release' van de pakketten groter.

De wiskundige techniek achter de parameteroptimalisatie blijkt inmiddels uitgekristalliseerd. Alle gebruiken één of andere 'gemodificeerde Gauss-Newton methode'. De verschillen zijn beperkt, bijvoorbeeld in de berekening van de gevoeligheidsmatrices. Bij goed gebruik van de pakketten heeft dit geen effect op het eindresultaat, hoogstens op de rekentijd.

Verschillen zijn er ten aanzien van de parameters die geoptimaliseerd kunnen worden. Uiteraard kunnen alle pakketten doorlatendheid of doorlaatvermogen optimaliseren. Hetzelfde geldt voor het neerslagoverschot. Anders ligt het ten aanzien van bijvoorbeeld randstijghoogten en intredeweerstand. In hoeverre één en ander van belang is voor een concrete kalibratie, hangt van de situatie af. Soms loop je als gebruiker tegen een beperking aan die niet vooraf uit de beschrijving van het programma in de folder kon worden afgeleid. Dit kan hinderlijk zijn. Vandaar dat het van belang is een overzicht te hebben van de specificatie van de parameters die met een pakket kunnen worden geoptimaliseerd.

Bij MODINV bijvoorbeeld, kunnen alle parameters worden geoptimaliseerd die in MODFLOW als tweedimensionale arrays kunnen worden ingelezen. Dit geeft een heel scala soms onvermoede mogelijkheden. Het legt tegelijk een aantal beperkingen op, waar het parameters betreft die niet als array worden opgegeven. Dit zijn bijvoorbeeld volumestromen, randstijghoogten en intredeweerstand. Kortom: alle parameters die in MODFLOW cel voor cel moeten worden opgegeven, kunnen niet worden gekalibreerd met dit pakket. Soms is dat ook niet nodig of is het via een omweg toch mogelijk. Zo kan MODINV alleen parameters optimaliseren die ruimtelijk zijn gespecificeerd in zones met per zone één waarde. Soms echter is een parameter als ruimtelijk variabel gegeven en wil men deze in evenredigheid met deze ruimtelijke verdeling optimaliseren. Dit verdraagt zich op het eerste gezicht slecht met zonering. Anderzijds staat het pakket toe zo'n parameter in een flink aantal, zeg 10, zones te splitsen van oplopende waarde (plakken) en kunnen deze vervolgens in onderlinge combinatie worden geoptimaliseerd. Het resultaat is dan nagenoeg hetzelfde als bij een continu-variabele parameter. Ook kan bijvoorbeeld een doorlaatvermogen worden opgesplitst in een ruimtelijk variabele dikte en een vast aantal zones voor de doorlatendheid, waarna de laatste worden geoptimaliseerd. Het resultaat leidt tot een ruimtelijk variabel doorlaatvermogen. In de praktijk is dit een uitstekend bruikbare en ook zinvolle methode. Hetzelfde geldt voor de weerstand van slechtdoorlatende lagen en bijvoorbeeld ook voor verdamping. Kortom, een op het eerste gezicht aanwezige beperking van een bepaald pakket hoeft allerm minst te betekenen dat het in de praktijk niet bruikbaar zou zijn.

Een cruciaal aspect van een pakket is de helderheid van de handleiding. Het behoeft nauwelijks betoog dat een kalibratieprogramma zonder handleiding in de praktijk volstrekt onbruikbaar is, zeker daar zulke pakketten een behoorlijke complexiteit kunnen hebben. Alle genoemde pakketten hebben gelukkig een gedegen en vaak zelfs een uitstekende, bovendien

didactisch verantwoorde handleiding. Uit eigen ervaring kan worden opgemerkt dat de handleiding van MODINV bijzondere vermelding verdient. Wellicht is het pakket wat beperkter dan MODFLOWP, maar een heldere handleiding is voor gebruik in de praktijk vaak van groter belang. Het is de reden geweest voor de keuze van MODINV voor de kalibratie van het grondwatermodel van de Amsterdamse Waterleidingduinen.

MODFLOWP is waarschijnlijk het meest uitgebreide parameteroptimalisatieprogramma dat momenteel op de markt beschikbaar is. Het kan nageenog alles wat je op kalibratiegebied voor het pakket MODFLOW zou kunnen bedenken. De begrijpelijkheid van de handleiding laat echter mijns inziens hier en daar te wensen over. Zelf ben ik tegen een aantal problemen aangelopen, zoals een niet gedocumenteerd maximum aan peilbuizen (750) en het veelvuldig crashen van het pakket nog voordat de optimalisatie geheel voltooid was. Dit zijn wellicht slechts kinderziektes en mogelijk tevens te wijten aan mijn onbekendheid met het programma. De nieuwe catalogus van de Scientific Software Group spreekt over inmiddels doorgevoerde verbeteringen aan het pakket. Dergelijke ervaringen kunnen hierdoor inmiddels achterhaald zijn.

FEMINVS is tijdens het bestaan van de werkgroep door Kick Hemker ontwikkeld. Het kan een groot aantal verschillende parameters optimaliseren van een stationair model. Het is waarschijnlijk het meest gebruiksvriendelijke parameteroptimalisatiepakket dat momenteel voorhanden is; een must voor alle MICRO-FEM-bezitters.

De praktijkvoorbeelden

Veel grondwatermodellen zijn uitermate gebaat bij ijking door middel van één van de beschikbare standaardpakketten. Deze boodschap is reeds in de voorgaande bijdragen duidelijk naar voren gekomen. Zij zal verder vorm krijgen door middel van de praktijkvoorbeelden die in de volgende bijdragen worden toegelicht.

Pierre Kamps bespreekt de ijking van een stationair model van de Amsterdamse Waterleidingduinen, waarbij gebruik is gemaakt van MODINV. De ijking leidde tot een grote verbetering van het grondwatermodel.

Bennie Minnema bespreekt de kalibratie van een niet-stationair model van het Wierdensed Veld met onder andere MODFLOWP en vergelijkt deze met andere kalibratiehulpmiddelen.

Paul van Walsum bespreekt het Fochteloërveen, waar allerlei schaalproblemen aan de orde zijn en waarbij oppervlaktewater en grondwater tegelijk worden gesimuleerd. Hoewel te complex voor een standaardpakket, wordt getoond dat door een systematische benadering toch een zinvolle ijking mogelijk is.

Vergelijking van enkele parameteroptimalisatiepakketten

	PEST	MODINV	MODFLOWP	FEMINVS	TRICALB
Algemeen					
Stationair	+	+	+	+	+
Niet-stationair	+	+	+	-	+
Meer lagen (2 ^{1/2} - of 3-D)	+	+	+	+	+
Metingen stijghoogten	+	+	+	+	+
Volumestromen	+	-	+	-	+
Randhoogten	+	-	+	+	-
Parameterschattingen	?	-	+	-	-
Kalibratieparameters					
Doorlatendheid (k en kD)	+	+	+	+	+
Weerstand scheidende lagen	+	+	+	+	+
Bergingscoëfficiënt	+	+	+	-	+
Neerslag	+	+	+	+	+
Intredeweerstand	+	-	+	+	+
Randstijghoogten	+	-	+	+	-
Afregeling van de kalibra- tie					
Weging van de gegevens	+	+	+	+	+
Parametertransformatie (log)	+	+	+	+	+
Parametergroepering	+	+	+	+	+
Parameterzonering	+	+	+	+	+
Evenredigheid met para- meterveld	?	-	+	+	+
Uitkomsten					
Optimale parameterwaar- den	+	+	+	+	+
Covariantiematrix	+	+	+	std. fout	+
Correlatiematrix	+	+	+	+	+
Eigenvectoren	+	+	+	+	+
Eigenwaarden	+	+	+	+	+

Hopelijk zullen complexe situaties zoals die in uit de twee laatste praktijkgevallen u er niet van afhouden zelf aan de slag te gaan met één van de uitstekende kalibratiepakketten die momenteel op de markt verkrijgbaar zijn. U zult zich er dan zelf van kunnen overtuigen, dat de oude methode van 'gissen en missen' weldra volstrekt achterhaald zal zijn.

Kalibratiepakketten

- FEMINVS (zie artikel van Kick Hemker): \$ 650,-; MICRO-FEM zelf \$ 995,-.
- MODFLOWP: A computer program for estimating parameters for transient three dimensional groundwater flow model using non-linear regression; by Mary C.Hill. USGS. \$250,-/Report Doc \$ 60,-.
- MODINV: Modflow Parameter Optimization. John Doherty, Australian Centre for Tropical Freshwater Research, James Cook University, Townsville, Australia (\$ 800,-)
- PEST: Model Independent Parameter Estimation. Watermark Computing. Trademarks, John Doherty, Lindsay Brebber en Peter Whyte, eveneens uit Australië (Kosten \$ 500,-; utilities for MODFLOW and MT3D Kalibratie: \$ 100,-.)

Referenties

- CARRERA J. EN S.P. NEUMAN (1986A, B, C) Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions.
- 1: Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information; in: *Water Resources Research*, jrg 22, nr 2, pag 199–210.
 - 2: Uniqueness, stability and Solution Algorithms; in: *Water Resources Research*, jrg 22, nr 2, pag 222–227.
 - 3: Applications of Synthetic and Field Data; in: *Water Resources Research*, jrg 22, nr 2, pag 228–242.
- MCELWEE, C.D. EN E.J.M. VELING (1985) LEAKINV, an inverse program for transmissivities and leakances, theory and user's guide; RIVM, Bilthoven, 1985, rapport 847244001.
- NEUMAN, S.P. (1980) A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology, III Improved solution method and added perspective; in: *Water Resources Research*, jrg 16, nr 2, pag 331–346.
- NEUMAN, S.P. EN S. YAKOWITZ (1979) A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology. I: Theory; in: *Water Resources Research*, jrg 15, nr 4, pag 845–860.
- SCIENTIFIC SOFTWARE GROUP (1996) Updated Product Guide 1996. PO Box 23041, Washington DC 20026-3041 USA, Tel. (703) 620-9214, Fax (703) 620-6793, e-mail: info@scisoftware.com.

Optimalisatie van een stationair model met MODINV

Pierre Kamps is sedert 1989 als hydroloog werkzaam bij Gemeentewaterleidingen Amsterdam.

Theo Olsthoorn is als hoofd van de sector Hydrologie werkzaam bij Gemeentewaterleidingen Amsterdam.

P.T.W.J. Kamps en T.N. Olsthoorn

Samenvatting

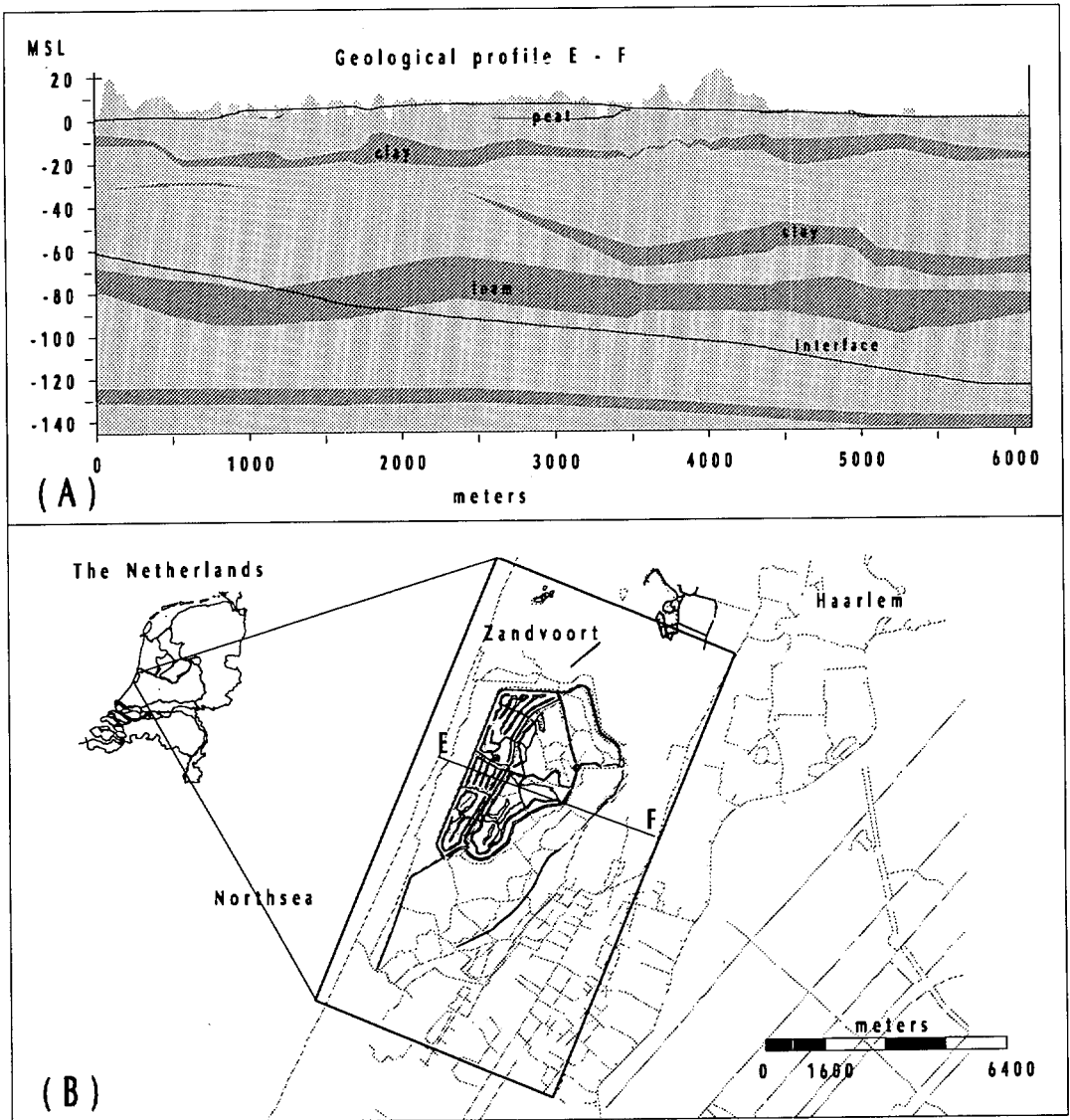
Het grondwatermodel van een 3600 ha groot duingebied ten zuiden van Zandvoort is stationair gekalibreerd met het softwarepakket MODINV. De kalibratie van het model nam twee maanden en 67 runs in beslag. De software verzorgt het optimaliseren van de parameters waardoor veel aandacht kon worden besteed aan het verwijderen van ruimtelijke correlatie tussen modelafwijkingen op basis van hydrologische redenen. Gedurende dit proces verbeterde het model sterk, wat uiteindelijk leidde tot een lage gemiddelde standaard-afwijking van 0,17 m in de bovenste twee freatische pakketten en 0,15 m voor de eerste drie pakketten samen, een resultaat dat niet mogelijk zou zijn geweest zonder een optimalisator.

Inleiding

Gemeentewaterleidingen (GW) gebruikt MODFLOW om de grondwaterstroming in de Amsterdamse waterleidingduinen te modelleren. Het eerste model was gereed in 1988 en gekalibreerd door middel van trial-and-error (Emke en Kooiman, 1988). Het model is gekalibreerd, enerzijds door vergelijking van berekende isohypsenkaarten met op metingen gebaseerde isohypsenkaarten en anderzijds door vergelijking van berekende met gemeten afvoeren van de kanalen. Tegenwoordig weet niemand meer welke stappen in het kalibratieproces zijn genomen; de betrouwbaarheden van de parameters zijn niet gekwantificeerd.

In 1992 is een verfijnde versie van het model gemaakt voor een ecohydrologische studie voor het zuidelijk deel van het duingebied. De kalibratie van dit model is uitgevoerd met de Monte-Carlo-methode. Er zijn vier parameters geoptimaliseerd voor een stationaire situatie. Er werden redelijke resultaten behaald, maar de methode is niet voldoende nauwkeurig en kan niet worden gebruikt indien het aantal parameters wordt uitgebreid (Olsthoorn, 1995).

In 1995 is een nog verder verfijnd model afgerond, bestaande uit 68 kolommen, 128 rijen en zeven watervoerende pakketten (zie fig. 1). De voorbereiding naar zeven lagen was noodzakelijk als gevolg van de complexere



Figuur 1:

(A): Geohydrologisch dwarsprofiel door het modelgebied.

(B): Locatie van het modelgebied.

geologie in het noordelijk deel van het duingebied waarop de studie ditmaal gericht is. Besloten werd om de kalibratie uit te voeren met een commercieel beschikbaar softwarepakket. Er werd een selectie gemaakt uit MODFLOW, PEST en MODINV. Deze pakketten kunnen dezelfde taken uitvoeren, gebruiken min of meer dezelfde techniek en geven vrijwel dezelfde resultaten. We hebben gekozen voor MODINV (Anonymus, 1995) omdat de software gemaakt is voor gebruik met MODFLOW en er een duidelijke handleiding beschikbaar is.

Modelinvoer

We hebben geprobeerd om via een systematische aanpak de modelinvoer te genereren. De meer dan 700 beschikbare boringen in het duingebied zijn (door een geoloog) opnieuw geïnterpreteerd volgens de landelijke coördinering zoals wordt gebruikt in REGIS (Koster, 1994) en opgeslagen in een Geografisch Informati-Systeem (GIS, ARC/INFO). Van alle geologische formaties tussen het maaiveld en de basis van het hydrologisch systeem (ca. NAP -150 m) zijn kaarten gemaakt. Ook zijn alle andere hydrologisch relevante gegevens (diepe winning, infiltratie-geulen, kanalen, waarnemingsputten, zoet-zout grensvlak, vegetatie en maaiveldshoogten) opgeslagen in het GIS. Het GIS is gekoppeld aan een ORACLE-database die metingen bevat onder meer stijghoogten, kanaal- en geulpeilen, neerslag en debiet. Door gebruik te maken van Arc/Info AML scripts en software in FORTRAN-code konden procedures worden vastgelegd waarmee automatisch de invoer voor het MODFLOW-model werd gegenereerd. Deze methodiek garandeert dat altijd de meest recente gegevens worden gebruikt voor het aanmaken van het grondwatermodel.

De modelparameters zoals doorlatendheid zijn buiten het GIS gehouden. Door de laagdikte te vermenigvuldigen met een doorlatendheid, die gemakkelijk gewijzigd kan worden, wordt de uiteindelijke modelinvoer verkregen. Het voordeel van deze aanpak is dat het model buiten de GIS-omgeving kan worden gekalibreerd met een softwarepakket zoals MODINV. Het GIS wordt na kalibratie weer gebruikt om de resultaten in detail te interpreteren en het model te verbeteren door aanpassing van de basiskaarten.

De kalibratie van het model is uitgevoerd voor een stationaire situatie waarbij gebruik is gemaakt van gemiddelde gegevens voor de periode 1974–1990. Tijdens deze periode is de hydrologische situatie in het duingebied vrijwel constant geweest. In het gebied zijn ca. 1200 observatiepunten aanwezig. Instationaire kalibratie is moeilijk omdat deze punten slechts vier maal per jaar worden gemeten.

Parameters

Modelparameters

Het hydrologisch model is ontwikkeld voor eco-hydrologisch onderzoek. Daarom ligt bij de kalibratie de nadruk op het freatische pakket. In grote delen van het modelgebied is in het bovenste holocene pakket op ca. NAP veen gevormd dat overstoven is met duinzand, waardoor het topsysteem uit twee lagen bestaat. Het veen heeft een geringe doorlatendheid en zorgt voor een extra 'opstuwing' van het freatisch water. Alhoewel bij de kalibratie de nadruk op het topsysteem wordt gelegd, wordt dit sterk beïnvloed door de weerstand van de kleilaag die de basis van het Holoceen vormt en het topsysteem scheidt van het volgende watervoerende pakket (WVP). Hieruit volgt dat bij de eerste kalibratiestap de horizontale doorlatendheid van de bovenste twee freatische lagen en de verticale doorlatendheid van de veenlaag en de weerstand van de onderliggende kleilaag simultaan moet worden meegenomen.

De uit metingen bekende stijghoogte van het derde WVP wordt als vaste randvoorwaarde ingebracht. Hiertoe zijn de gemeten stijghoogten van dit pakket gemiddeld voor de periode 1974–1990 waarna deze geïnterpoleerd zijn voor het gehele modelgebied. De kleilaag zorgt voor een sterke afvlakking van de stijghoogten in het onderliggende derde WVP en zijn er veel waarnemingspunten in dit pakket zodat deze methode verantwoord is.

Voor het gebruik van MODINV moest elke parameter in maximaal 10 ruimtelijke zones worden verdeeld. Door variatie van de laagdikte zijn de doorlatendheid en de laagweerstand ruimtelijk gevarieerd. De dikteklassen (zones) worden aan elkaar gekoppeld en met behoud van onderlinge verhouding geoptimaliseerd, waardoor deze zich gedragen als een enkele parameter. In plaats van de reguliere waarden zijn de logaritmische doorlatendheden van de parameters geoptimaliseerd. Het neerslagoverschot is opgelegd maar is tijdens de kalibratie aangepast (zie verderop). Door het beperkte aantal parameters (14) en het grote aantal waarnemingspunten kunnen de parameters goed worden geoptimaliseerd.

Toedelen van gewichten aan de waarnemingspunten

De waarnemingspunten zijn per WVP onregelmatig verdeeld over het modelgebied. Om een evenwichtige kalibratie voor het gehele modelgebied te verkrijgen is aan elk waarnemingspunt een gewicht toegekend, vooral ter ontclustering van groepen dicht bij elkaar gelegen peilbuizen. Gekozen is voor een pragmatische aanpak, waarbij het gewicht gelijk is aan de reciproke waarde van het aantal waarnemingspunten binnen een straal van 200 m inclusief het waarnemingspunt zelf. Door deze methode vormen de waar-

nemingspunten binnen een straal van 200 m gezamenlijk het gewicht van één. Het verdient aanbeveling om nader onderzoek naar optimalisatie van de gewichten uit te voeren.

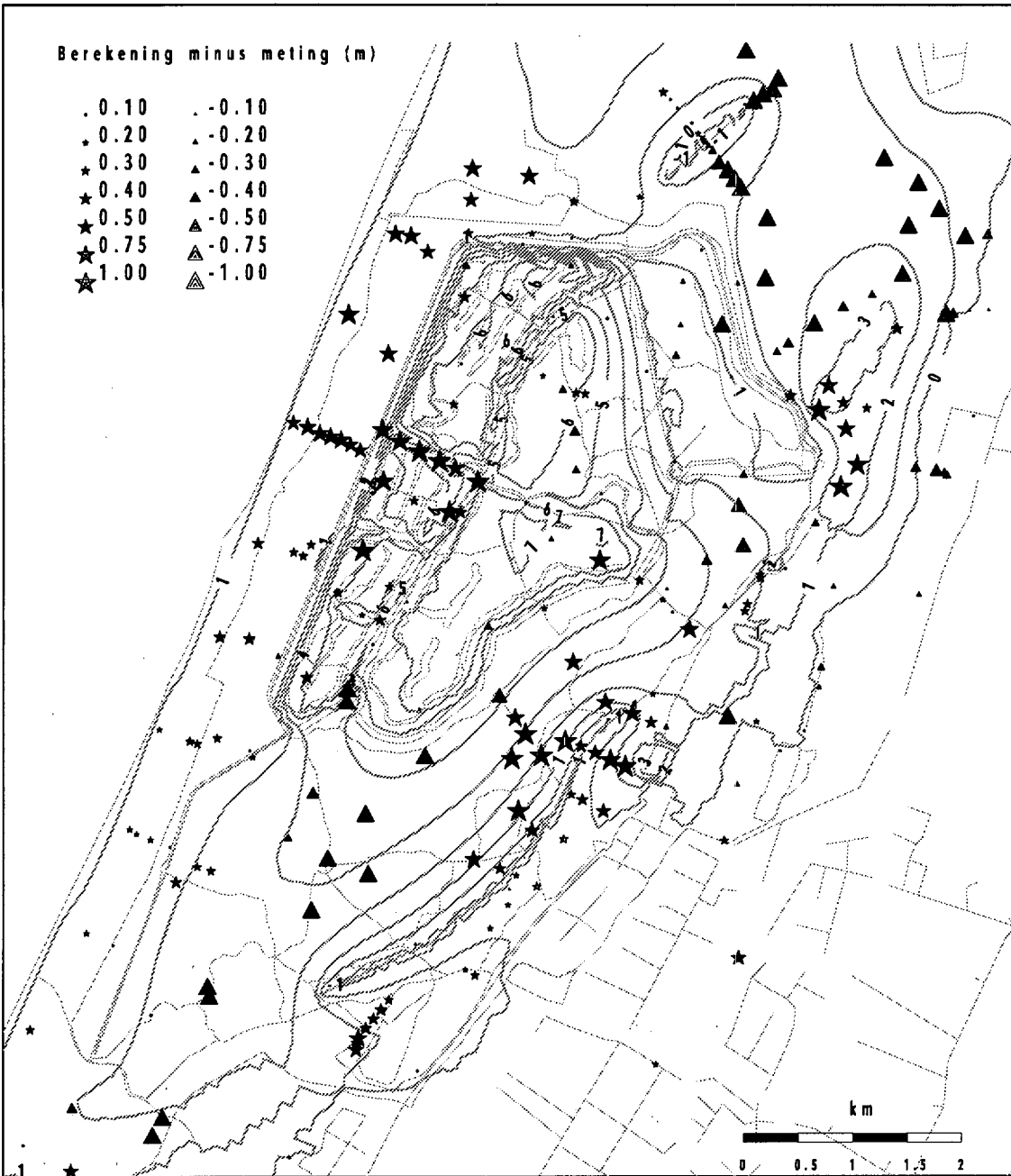
Presentatie van de fouten

De restfouten, overgebleven na de optimalisatie, behoren willekeurig verdeeld te zijn in het modelgebied. Het is hierdoor zinloos om een contourkaart van deze residuen te maken. Daarom is gekozen voor een presentatie waarbij de afwijking van de stijghoogten wordt geplot met symbolen op het isohypsenbeeld van elke WVP. De omvang van het symbool correspondeert met de grootte van de fout en het type symbool verwijst naar het teken (positief of negatief). Het GIS is voor dit doel gebruikt. Met zijn faciliteiten is het een nuttig gereedschap bij het zoeken naar modelfouten tijdens het kalibratieproces. Ook kan andere informatie, zoals de verbreiding van lagen op dezelfde kaart worden gepresenteerd.

Het kalibratieproces

Zolang het model niet goed is, vertegenwoordigen de geoptimaliseerde parameters ondeugdelijke fysieke waarden en wordt er geen aandacht aan besteed. We kunnen ze misschien gebruiken in negatieve zin om te concluderen dat het model niet goed is indien deze waarde ver buiten redelijke grenzen ligt.

Om te kunnen concluderen dat het model (voldoende) goed is, moeten we aantonen dat de fouten (verschillen tussen de gemeten en berekende potentialen) overeenkomen met de aannames van de kalibratietheorie. Dit vereist dat de verkregen fouten na de optimalisatie (van ons stationaire model) ruimtelijk niet gecorreleerd zijn. Daarom bestaat de opdracht van de hydroloog tijdens de kalibratie uit het verkrijgen van ruimtelijk (en in de tijd) ongecorreleerde residuen. Er bestaat geen mathematisch model dat dat voor hem kan oplossen. De hydroloog moet zijn kennis van het gebied gebruiken voor het zoeken naar hydro- en geologische oorzaken van ruimtelijke correlaties van de residuen. Na elke modelaanpassing worden de parameters opnieuw geoptimaliseerd en kaarten gemaakt van de residuen. Na inspectie van de resultaten is geconcludeerd of de modelaanpassing een structurele modelverbetering tot gevolg heeft of juist een verslechtering. Nadat het freatisch pakket naar tevredenheid was geoptimaliseerd is ook het diepe pakket bij de optimalisatie meegenomen. We kunnen nu zeggen dat 66 van onze 67 MODINV runs nodig waren om modelfouten op te sporen en alleen run 67 is gebruikt om de uiteindelijke parameterwaarden te verkrijgen.



Figuur 2: Freatisch pakket, isohypsen en restfouten na de eerste optimalisatieslag.

Modelverbeteringen

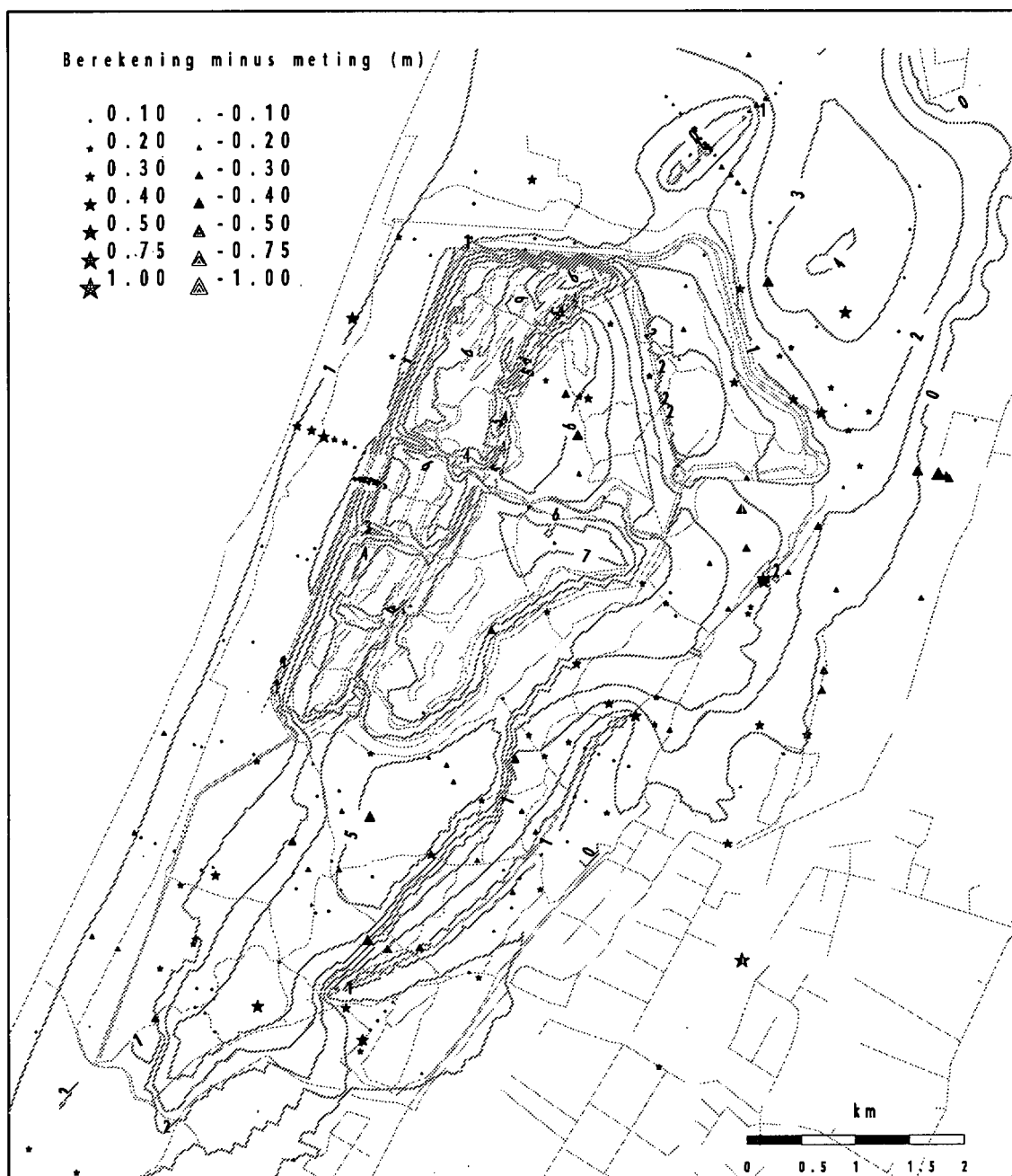
We verwachtten, nu het optimalisatiepakket de residuen voor ons minimaliseert, dat de kalibratie 'in één klap' afgehandeld zou zijn. Dit bleek echter een misvatting. Figuur 2 laat de isohypsen en de restfouten zien van het freatisch pakket na de eerste optimalisatiepoging. Het is duidelijk dat deze residuen verre van willekeurig verdeeld zijn.

Modelaanpassingen bleken noodzakelijk. Na elke aanpassing geeft het kalibratie-programma aan in hoeverre de verandering een substantiële verbetering was voor het model. De volgende aanpassingen gaven een duidelijke verbetering van het resultaat.

- Verwijderen van duidelijke fouten in de database: Onjuiste kanaal-bodemhoogten waardoor deze niet reikte tot in de tweede WVP zoals zou moeten, waarnemingspunten die aan de verkeerde WVP zijn toegekend en waarnemingspunten met verkeerde x,y-coördinaten.
- Het toepassen van de kleizoneringskaart van Stuyfzand (1987) die ook het type kleiafzetting bevatte, in de plaats van een kleidiktekaart uit GIS.
- Aanpassing van het neerslagoverschot in het noordoostelijk deel van het model, op basis van een nieuwe vegetatiekaart van dit gebied.
- Gaten in het veen zijn exacter aangegeven met gegevens van de georadar (Van Overmeeren, 1993). Deze aanpassingen gaven grote verbeteringen voor waarnemingspunten nabij de rand van het veen waar grote stijghoogtegradiënten aanwezig zijn.
- Ter verwerking van de badkuip-achtige vorm van het Hollandveen, is de doorlatendheid van het freatische pakket op de rand van het veen verlaagd. Dit resulteerde in een extra te optimaliseren parameter.
- De kleilaag bij het noordelijk pand van het Oosterkanaal is dunner gemaakt omdat volgens boringen blijkt dat hier de kleilaag (relatief) veel meer zand bevat.

Nadat geen verdere hydrologische aanwijzingen voor modelverbeteringen konden worden gevonden, is het derde WVP, tussen 20 en 65 m beneden NAP, onafhankelijk gekalibreerd met de zojuist verkregen parameterwaarden van de bovenliggende lagen. Met de hand zijn tenslotte de oostelijke en westelijke randvoorwaarden van het WVP geoptimaliseerd.

Hierna is MODINV voor de 67^e keer gebruikt om ditmaal de drie WVP's gecombineerd te kalibreren. De stijghoogten van het freatisch pakket geven uiteindelijk een gemiddelde afwijking van 17 cm (fig. 3). Duidelijk is te zien dat de meeste residuen klein zijn. Belangrijker is echter dat vrijwel alle structuur in de residuen is verdwenen. De overgebleven residuen zijn min of



Figuur 3: Freatisch pakket, isohypsen en restfouten na de laatste optimalisatieslag.

meer willekeurig verdeeld, alhoewel in sommige delen van het gebied enige structuur in de residuen aanwezig blijft. Omdat er verder geen (geo) hydrologische redenen voorhanden waren en er geen reden is om parameters toe te voegen of te verwijderen, geven we er de voorkeur aan om het zo te laten. De balletjes op de kaart dienen als waarschuwing voor de gebruiker van het model dat de resultaten in dit deel van het gebied minder betrouwbaar zijn. Figuur 4 laat de resultaten van het derde WVP na run 67 zien. De gemiddelde standaard afwijking is 15 cm, dit is vrijwel gelijk aan die van het Digitaal Terrein Model (DTM).

Resultaten

Tabel 1 laat de geoptimaliseerde parameters na run 67 zien. De subindex van het nummer van de parameter geeft aan dat de parameter tot een groep behoort en niet afzonderlijk wordt geoptimaliseerd. Onder de kolom 'optimale waarde' is het verkregen optimum van de parameter weergegeven. De standaardfactor (dit is de $10^{\sqrt{\text{variancie van de logparameter op de hoofddiagonaal van de covariantiematrix minus 1}}}$) geeft de standaard-spreiding van de parameter aan als percentage van de parameterwaarde. De standaardfactor geeft de mate van betrouwbaarheid aan waarmee de geoptimaliseerde waarde is bepaald. De rangvolgorde geeft het belang van de parameters aan bij de optimalisatie (dit is het kolomnummer van de eigenvectormatrix die door de betreffende parameter wordt gedomineerd). Parameter 11 is zodoende de belangrijkste van alle parameters.

De parameters 6, 12 en 13 blijken onbetrouwbaar; het heeft geen zin om deze als onafhankelijke parameter te optimaliseren. Zij zijn vervolgens aan andere parameters toegevoegd. De geoptimaliseerde waarde van de parameters 2, 4 en 6 komen goed overeen met de waarde van de parameters 1, 5-1 en 7. Ook deze zijn samengevoegd waardoor het aantal parameters wederom met drie verminderd is. De overgebleven acht parameters zijn vervolgens nogmaals geoptimaliseerd. In tabel 2 is te zien welke parameters zijn samengevoegd en wat de resultaten zijn. Door vergelijking met tabel 1 blijkt dat de betrouwbaarheid is verbeterd. De gemiddelde standaardafwijking is nagenoeg dezelfde, hij is van 14,5 cm gestegen naar 14,6 cm.

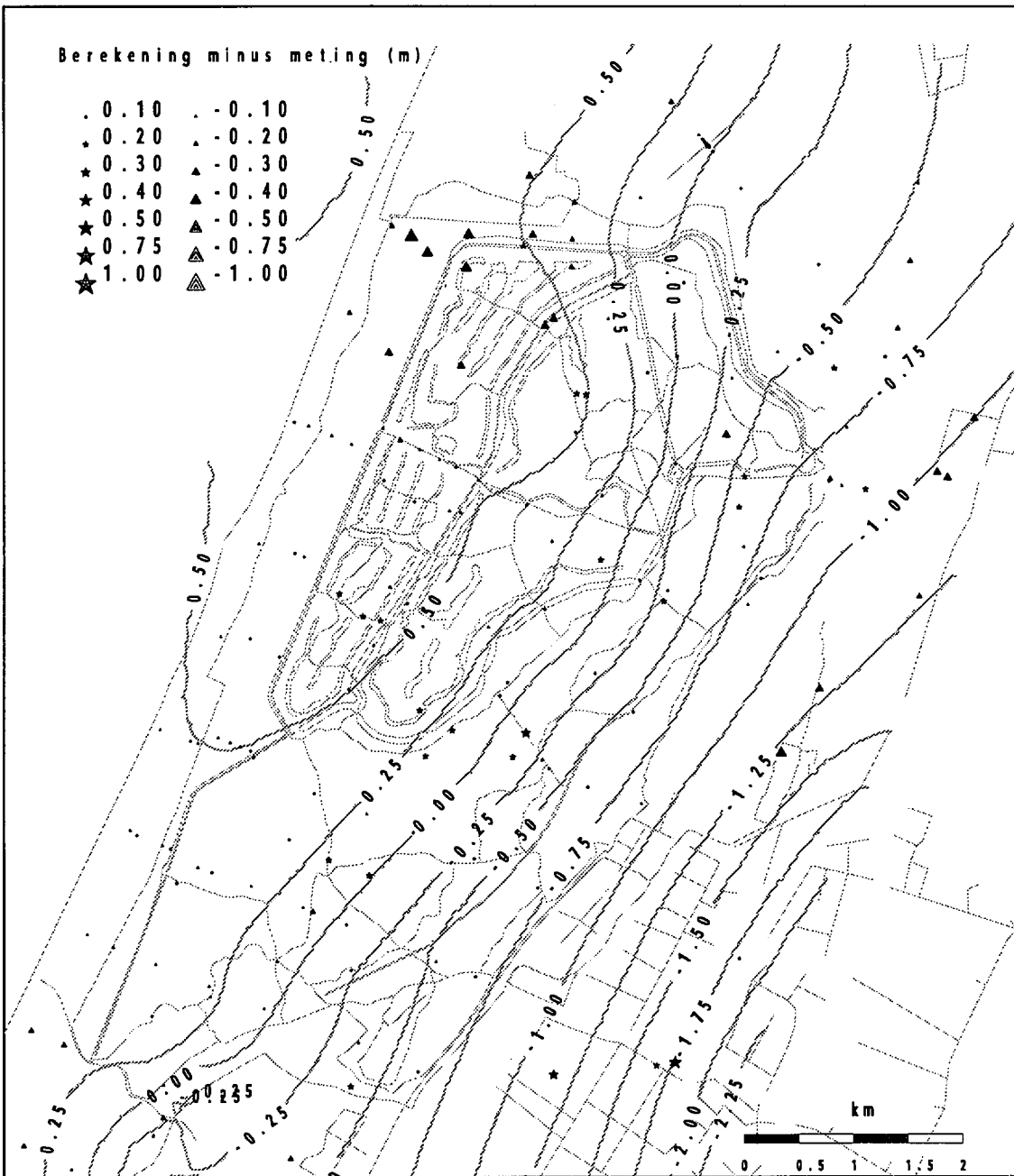
We hebben het model niet expliciet gekalibreerd op volumestromen. Het neerslagoverschot is de belangrijkste drijvende kracht. We hebben achteraf de onttrekkingen gecontroleerd van twee belangrijke winningskanalen waarvan onafhankelijke metingen voorhanden zijn (Kamps en Mosch, 1995). De onttrekking van het noordelijk gelegen Boogkanaal bleek een fout van 3% en die van het zuidelijke Oosterkanaal 7% te hebben. Dit kan beschouwd worden als een onafhankelijke validatie met een zeer acceptabel resultaat.

Tabel 1: Resultaten afkomstig uit MODINV na optimalisatie run 67 met 14 parameters, standaardafwijking residuen: 14,5 cm.

Lg #	Lg. type	Lithologische omschrijving	Par. #	Optimale waarde	Std. Fac.	Rang #
1	WVP	duinzand	1	22,9 m/d	18%	3
		duinzand bin-nenduinrand	2	21,0 m/d	10%	6
		duinzand op strandwal	3	0,9 m/d	62%	11
1	SDP	Veenvoorkomen op strandwal	4	4200 d	23%	9
		Hollandveen dikteklasse < 50 cm	5-1	3800 d	9%	2
		Hollandveen dikteklasse 50–100 cm	5-2	7700 d	–	–
		Hollandveen dikteklasse > 100 cm	5-3	15300 d	–	–
		Veenvoorkomen op oud duinlandschap	6	2000 d	172%	12
2	WVP	Wadachtige strandafzetting	7	8,3 m/d	9%	5
		Wadachtige strandafzetting duinrand	8	6,3 m/d	26%	10
2	SDP	Calais-klei niet aanwezig	9	170 d	16%	8
		Calais-klei niet aaneengesloten	10	2250 d	8%	4
		Calais-klei 1D dikteklasse 0,5–1,5 m	11-1	2900 d	11%	1
		Calais-klei 1D dikteklasse 1,5–3,0 m	11-2	5800 d	–	–
		Calais-klei 1D dikteklasse 3,0–5,0 m	11-3	11500 d	–	–
		Calais-klei 1D dikteklasse 5,0–10,0 m	11-4	23000 d	–	–
		Calais-klei 1G dikteklasse 0,5–3,0 m	12	3100 d	664%	13
		Calais-klei onduidelijke herkomst	13	20600 d	2660%	14
3	WVP	Eem-afzetting	14	56,0 m/d	16%	7

Tabel 2: Resultaten afkomstig uit MODINV na optimalisatie run 67 met 8 parameters, standaardafwijking residuen 14,6 cm.

Lg #	Lg. type	Lithologische omschrijving	Par. #	Optimale waarde	Std. Fac.	Rang #
1	WVP	duinzand	1	20,0 m/d	7%	2
		duinzand bin-nenduinrand	1	–	–	–
		duinzand op strandwal	2	1,9 m/d	41%	8
1	SDP	Veenvoorkomen op strandwal	3-1	–	–	–
		Hollandveen dikteklasse < 50 cm	3-1	3900 d	7%	3
		Hollandveen dikteklasse 50–100 cm	3-2	7800 d	–	–
		Hollandveen dikteklasse > 100 cm	3-3	15600 d	–	–
		Veenvoorkomen op oud duinlandschap	3-1	–	–	–
2	WVP	Wadachtige strandafzetting	4	8,2 m/d	6%	5
		Wadachtige strandafzetting duinrand	4	–	–	–
2	SDP	Calais-klei niet aanwezig	5	150 d	17%	7
		Calais-klei niet aaneengesloten	6	2210 d	6%	4
		Calais-klei 1D dikteklasse 0,5–1,5 m	7-1	2940 d	3%	1
		Calais-klei 1D dikteklasse 1,5–3,0 m	7-2	5900 d	–	–
		Calais-klei 1D dikteklasse 3,0–5,0 m	7-3	11800 d	–	–
		Calais-klei 1D dikteklasse 5,0–10,0 m	7-4	23600 d	–	–
		Calais-klei 1G dikteklasse 0,5–3,0 m	7-1	–	–	–
		Calais-klei onduidelijke herkomst	7-4	–	–	–
3	WVP	Eem-afzetting	8	67,0 m/d	12%	6



Figuur 4: Derde pakket, isohypsen en restfouten na de laatste optimalisatieslag.

Is eenmaal een acceptabel model verkregen, dan representeren de geoptimaliseerde parameters fysische waarden in plaats van artefacten die ontstaan door modelfouten. Ook kan dan zinvol in meer detail worden gekeken naar de overige informatie aangeleverd door MODINV, zoals de parameterfouten en de eigenwaarden. Deze informatie kan uiteindelijk worden gebruikt bij de scenario-studies waarin de eerste plaats de modellen voor worden gebruikt.

Conclusies

Met de kalibratie volgens de Monte-Carlo-methode uit 1992 die voor het zuidelijke deel van het duingebied werd een standaard-afwijking van de stijghoogte-residuen behaald van 24 cm (Olsthoorn, 1995). Zelfs met een directe optimalisatie volgens Marquardt-Levenberg (Olsthoorn, 1995) bleef de standaard-afwijking voor het zuidelijk deel van het duin 23 cm.

We hadden verwacht dat de optimalisator MODINV het model voor ons zou kalibreren, maar het verliep anders. De kalibratie werd een lange zoektocht naar modelfouten. De kalibratie van de vier parameters (het werden er uiteindelijk 14) nam twee maanden intensief werk en 67 MODINV optimalisaties in beslag. Uiteindelijk resulteerde de kalibratie in een duidelijk verbeterd model met een lage standaardafwijking van 0,17 m in het freatische WVP en 0,15 m voor de bovenste drie pakketten te zamen. Dit resultaat zou niet bereikbaar zijn zonder een goed softwarepakket dat de optimalisatie uitvoert. De software maakt de optimalisatie eenvoudig en relatief snel: voor 14 parameters enkele uren op onze alpha-machine, waardoor we al onze aandacht konden vestigen op de interpretatie van de kalibratieresultaten: het zoeken naar hydrologische of geologische verklaringen van de modelfouten, gevolgd door hydrologisch gegronde modelverbeteringen. Kortom de optimalisatiesoftware maakt in de praktijk tijd vrij voor echt hydrologisch werk; een feit dat niet voorzien was toen we begonnen.

Referenties

- ANONYMUS (1995) MODINV: MODFLOW parameter optimization; Australian Centre for Tropical Freshwater Research, James Cook University, Townsvill.
- EMKE, M.J. EN J.W. KOOIMAN (1988) De duinwaterwinplaats: Geohydrologisch gemodelleerd met het rekenprogramma MODFLOW; Gemeentewaterleidingen Amsterdam.
- KAMPS, P.T.W.J EN M. MOSCH (1995) De berekeningen van de freatische onttrekking van het Boogkanaal en het Oosterkanaal bij verschillende peilen en een calamiteitsberekening bij een inlaatstop van WRK-water; Gemeentewaterleidingen Amsterdam, november, 1995.

- KOSTER, M.J.M. (1994) Amsterdamse Waterleidingduinen: Inventarisatie van de geologische gegevens t.b.v. de koppeling aan het hydrologisch lagenmodel van het Regionaal Geohydrologisch Informatie Systeem (REGIS), Gemeentewaterleidingen Amsterdam.
- OLSTHOORN, T.N. (1995) IJking van grondwatermodellen met Monte Carlo en mathematische optimalisatie; in: *H₂O*, jrg 28, nr 10, pag 310–315.
- OLSTHOORN, T.N., P.T.W.J. KAMPS EN W.J. DROESEN (1993) Ground-water modelling using GIS at the Amsterdam Water Supply; in: Kovar K & H.P. Nahtnebel (red) *HydroGIS93: Proc. of the Vienna conference*, April 1993; IAHS Publ. 211, pag 665–674.
- OVERMEEREN, R.A. VAN (1993) Georadar: Een nieuwe techniek voor grondwaterverkenning; in: *H₂O*, jrg 26, nr 21, pag 610–717.
- STUYFZAND, P.J. (1987) Hydrochemie en hydrologie van de duinen en aangrenzende polders tussen Noordwijk en Zandvoort aan Zee; KIWA, Nieuwegein, SWE rapport 87.007.

Kalibratie met behulp van Monte Carlo en MODFLOW: enkele ervaringen

Jan Hoogendoorn is senior adviseur (geo)hydrologie binnen de afdeling Water en Ruimtelijke Ordening bij Tauw Milieu bv betrokken bij uiteenlopende water-vraagstukken.

Bennie Minnema is als projectleider binnen de sectie Grondwaterbeheer van het Nederlands Instituut voor Toegepaste Geowetenschappen TNO betrokken bij diverse modellerings-projecten.

Chris te Stroet is werkzaam bij de Technische Universiteit Delft en het Nederlands Instituut voor Toegepaste Geowetenschappen TNO. Zijn werk richt zich op het verwerken van waarnemingen bij het modelleren van stroming en transport.

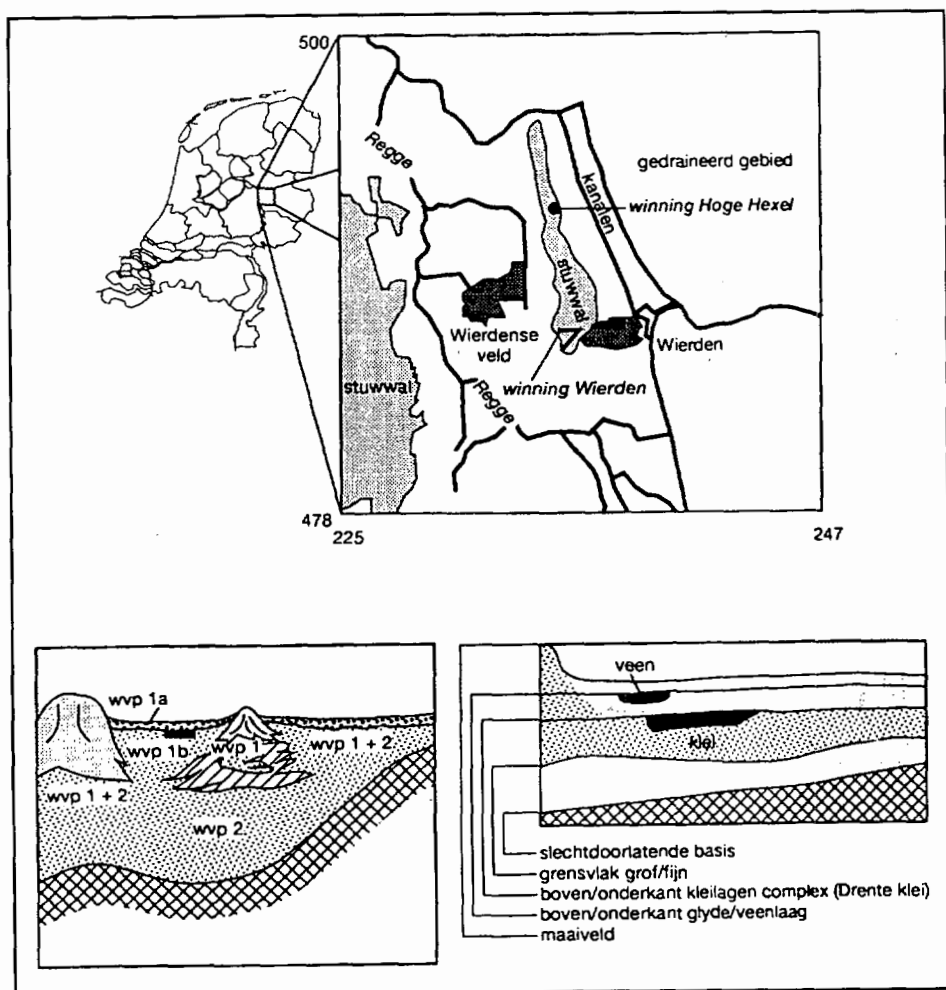
J.H. Hoogendoorn, B. Minnema en C.B.M. te Stroet

Inleiding

In het kalibratieproces zijn het verkrijgen van inzicht in de gevoeligheid van een model voor variaties in parameterwaarden en de optimalisatie van parameterwaarden essentiële stappen. Met name wat betreft het laatste ontbreekt het veelal aan sturing en resteert na afronding van de parameter-optimalisatie een soms knagend gevoel rond de vraag of de variaties in parameterwaarden wel voldoende zijn verkend. Parameteroptimalisatie methoden zoals de Monte Carlo-methode en Gauss-Newton van MODFLOW bieden een sturende hand in de parameteroptimalisatie, doordat de optimalisatie op zich min of meer is geautomatiseerd. Hierdoor hoeft veel minder tijd besteed te worden aan het 'draaien aan de knoppen' van het model en kan de beschikbare tijd beter worden benut voor bijvoorbeeld verbetering van het modelconcept.

Enige jaren geleden is ten behoeve van een analyse van het watersysteem rond Wierden een grondwatermodel gebouwd met de modelcode MODFLOW. Omdat aan de watersysteemverkenning tevens een doorvertaling naar ecologische effecten verbonden was, bestond de behoefte meer grip te krijgen op de parameteroptimalisatie, de onzekerheid in de parameterwaarden en de consequenties daarvan voor de uiteindelijk berekende grondwaterstanden. Er is hiervoor toen gebruik gemaakt van de Monte Carlo-methode, voorafgegaan door een systematische gevoeligheidsanalyse van de modelparameters. De uitvoering van een systematische gevoeligheidsanalyse werd als een zeer belangrijk onderdeel van het kalibratieproces ervaren. Bij het beschikbaar komen van MODFLOW rees de vraag in hoeverre deze modelcode de Monte Carlo-methode kan vervangen en wat de voor- en nadelen van MODFLOW zijn. In het kader van het symposium 'Modelkalibratie' is een test uitgevoerd, waarvan de resultaten zijn opgenomen in dit artikel.

Het modelgebied en de modelschematisatie zijn weergegeven in figuur 1. Het modelgebied is oostelijk van de stuwwal van de Sallandse Heuvelrug gesitueerd. Voor de watersysteemanalyse vormden het Wierdense Veld, een natuurreservaat met overwegend heide, de grondwaterwinningen Wierden en Hoge Hexel en het oppervlaktewaterstelsel de belangrijkste elementen. De ondergrond is geschematiseerd tot drie modellen. Dit betreft het diepe en het ondiepe watervoerend pakket, gescheiden door een kleilaag (Drenteklei) met een onregelmatige verbreiding, en een toplaag die de relatief fijne zanden van de Formatie van Twente en plaatselijk een veenlaag in het



Figuur 1: Modelgebied en modelschematisatie

Wierdense Veld representeert. Er is zowel een stationaire als een niet-stationaire versie van het model gekalibreerd.

De resultaten van de diverse rekensessies zijn samengevat in tabel 2. Een belangrijk deel van het artikel is verder rond deze tabel opgebouwd.

Parameterisatie en optimalisatie

De verschillen en overeenkomsten tussen de Monte Carlo-methode en MODFLOW zijn weergegeven in tabel 1 en hebben zowel betrekking op de wijze van parameterisatie als de wijze van optimalisatie van parameterwaarden.

Tabel 1: Karakterisering van de verschillen tussen Monte Carlo en MODFLOWP.

Methode	Parameterisatie	Optimalisatie
Monte Carlo	zonering	trekking van parametersets, simulatie, en selectie van parametersets met een minimale waarde voor de doelfunctie
MODFLOWP	zonering	minimalisering van de doelfunctie op basis van veranderingen in dh/dP

Karakteristiek bij de Monte Carlo-methode en MODFLOWP is de zonering van het model. Zoneren houdt in dat het model in verschillende delen wordt onderverdeeld en aan elk deel een te optimaliseren parameterwaarde wordt toegekend. Bijvoorbeeld het onderscheid in k -waarde tussen gestuwde en niet-gestuwde delen van een watervoerend pakket. Bij de optimalisatie wordt deze zonering als een vast gegeven beschouwd. Het onderverdelen van de modelruimte in zones vormt een belangrijk stap in het kalibratieproces. Ongewenste en/of onverwachte resultaten bij de parameteroptimalisatie kunnen het gevolg zijn van een onjuist aangebrachte zonering. Bijstelling van de zonering kan dan een verbetering in het resultaat te zien geven.

Bij MODFLOWP vindt de optimalisatie van parameterwaarden plaats aan de hand van de minimalisering van de doelfunctie op basis van veranderingen in stijghoogte als gevolg van veranderingen in de parameterwaarden (dh/dP). Bij de Monte Carlo-methode worden uit de verzameling van mogelijke parameterwaarden 'parametersets' getrokken. Elke parameterset vormt de basis voor een run met het model. Vervolgens wordt van elke run de doelfunctie geëvalueerd en worden parametersets met de kleinste waarde voor de doelfunctie als meest optimaal beschouwd. Eén optimalisatie-run omvat meerdere runs met het model. Het benodigd aantal modelruns kan, afhankelijk van het te bereiken resultaat, al gauw oplopen tot enkele tientallen en zelfs vele honderden. Het zal duidelijk zijn dat een dergelijke methode veel rekentijd vergt.

In principe kan de parameterisatie bij de toepassing van de Monte Carlo-methode en MODFLOWP zowel van 'grof naar fijn' als van 'fijn naar grof' plaatsvinden. Van grof naar fijn houdt in dat in eerste instantie het aantal te optimaliseren parameters zo beperkt mogelijk gehouden wordt. Is het resultaat van de optimalisatie onbevredigend, dan kan stapsgewijs het aantal te optimaliseren parameters uitgebreid worden. Wordt van fijn naar grof gewerkt, dan wordt eerst gekeken welke vormen van onderscheid belangrijk zouden kunnen zijn voor de te berekenen stijghoogten. Een aan de parameter optimalisatie voorafgaande systematische gevoeligheidsanalyse is hierbij essentieel om te toetsen of de variatie van parameters binnen de onderscheiden zones nog voldoende variatie in de stijghoogte oplevert om nog van invloed te zijn op de doelfunctie (m.a.w. wordt de variatie van een pa-

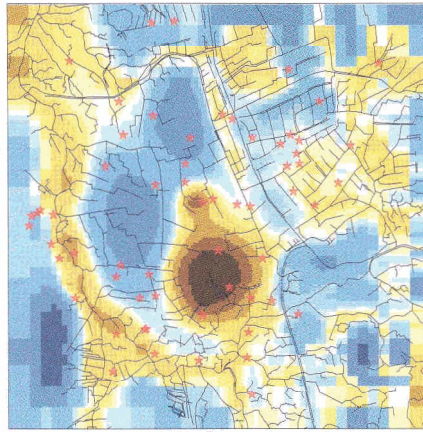
parameter van een bepaalde zone nog wel 'gezien' door het meetnet). Dit zal in het navolgende verder worden geïllustreerd. Indien de doelfunctie ongevoelig is voor een parameter, dan betekent dit dat de betreffende parameter niet of nauwelijks te kalibreren is. Zo mogelijk moet dan aggregatie van zones plaatsvinden.

Parameterisatie en gevoeligheidsanalyse van het Wierden-model

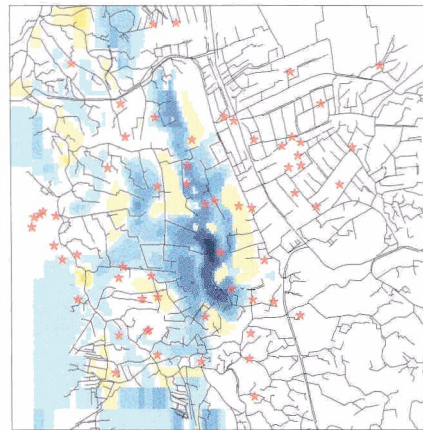
Wat betreft het Wierden-model, is gewerkt van fijn naar grof. De onderscheiden zones zijn weergegeven in de eerste kolom van tabel 2. De fijne onderverdeling werd ingegeven door de wens zicht te krijgen op de invloed van de parameters op de door het model berekende stijghoogte, ook al omspannen vele parameters een beperkte ruimte. Een ruimtelijke weergave van de gevoeligheid van het model per parameter is zeer inzichtelijk (figuur 2). De bij de berekening van de gevoeligheid gehanteerde ranges zijn weergegeven in de tweede kolom van tabel 2. Deze ruimtelijke weergave is in feite niets anders dan het zichtbaar maken van de reactie van de stijghoogte op een verandering in de parameterwaarde. Figuur 2a geeft een beeld van de ruimtelijke gevoeligheid voor een gevoelige parameter: de k-waarde van het diepe watervoerende pakket buiten de stuwwallen. Duidelijk is te zien dat de onttrekkingskegel van de winning Wierden dieper wordt bij een kleiner wordende k-waarde en dat de opbolling tussen de waterlopen juist toeneemt. In figuur 2 zijn tevens de locaties van de waarnemingsputten met meetgegevens ten behoeve van de berekening van de doelfunctie weergegeven. De mate waarin de parameter door het meetnet wordt 'gezien', wordt bepaald door de verandering van de stijghoogte die op de betreffende locaties optreedt als gevolg van een verandering in de parameterwaarde. Figuur 2b geeft een voorbeeld van een minder gevoelige parameter: de c-waarde van de Drente-klei. Overigens is de modelgevoeligheid voor deze parameter plaatselijk zeer hoog.

Figuur 2c geeft de modelgevoeligheid weer voor de grondwateraanvulling in bebouwd gebied. Bij deze parameter heeft de gevoeligheid naast een theoretische ook een praktische betekenis, in de zin dat het een beeld geeft van het uitstralingseffect van veranderingen in de grondwateraanvulling binnen bebouwd gebied.

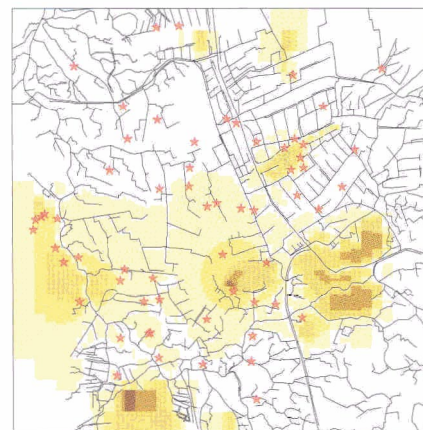
De gevoeligheid van een parameter kan, naast een ruimtelijke weergave, ook worden samengevat in één getal. Voor het model Wierden is dit gedaan door voor elke parameter afzonderlijk de stijghoogteveranderingen over het gehele model te sommeren en de verkregen som vervolgens te normeren op de parameter met de grootste stijghoogteverandering: in dit geval het peil in (het dichte netwerk) van de kleine waterlopen. Deze getallen zijn opgenomen in de derde kolom van tabel 2. Uit deze kolom komt duidelijk naar voren dat vele parameters een relatief lage gevoeligheid hebben.



A: k-waarde diepe wvp (modellaag 3)



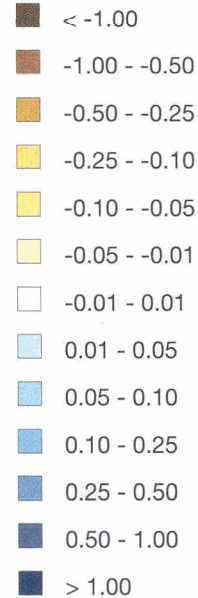
B: c-waarde Drente-klei (modellaag 1)



C: grondwateraanvulling bebouwd gebied (modellaag 1)

Legenda:

dh/dP (m):



★ Meetpunt

Figuur 2: Ruimtelijke weergave van de gevoeligheid van enkele parameters.

Tabel 2: Overzicht van de resultaten van de diverse rekensessies.

Omschrijving parameter/zone	Initiële range	Gev	Geselecteerde waarde	
			Monte Carlo	MODFLOWP
k-waarde modellaag 1 & 2; Twente-zanden	1 – 30	45	30 m/d	niet geoptim.
k-waarde modellaag 1 & 2; binnen stuwwallen	30 – 90	3	30 m/d	niet geoptim.
k-waarde ml 1 & 2; klei vlak aan oppervlak	1 – 10	13	5 m/d	niet geoptim.
k-waarde modellaag 3; buiten stuwwallen	30 – 75	55	40 m/d	40 m/d
k-waarde modellaag 3; binnen stuwwallen	30 – 90	21	30 m/d	niet geoptim.
c-waarde ml1; Twente-zanden	25 – 125	59	200 d	350 d
c-waarde ml1; glyde, dun	50 – 500	0	200 d	niet geoptim.
c-waarde ml1; glyde, medium	250 – 2500	0	500 d	niet geoptim.
c-waarde ml1; glyde, dik	2000 – 20000	0	2000 d	niet geoptim.
c-waarde ml2; Drente-klei, zeer dun	25 – 250	8	150 d	
c-waarde ml2; Drente-klei, dun	75 – 750	10	150 d	
c-waarde ml2; Drente-klei, medium	250 – 2500	11	1500 d	* 1
c-waarde ml2; Drente-klei, dik	1000 – 10000	1	15000 d	
c-waarde ml2; Drente-klei, zeer dik	5000 – 50000	3	25000 d	
grondwateraanvulling; grasland	0,5 – 1,2	87	0,8 mm/d	
grondwateraanvulling; bebouwd gebied	0,5 – 1,2	12	0,4 mm/d	
grondwateraanvulling; bos	0,5 – 1,2	21	0,8 mm/d	
grondwateraanvulling; heide	0,5 – 1,2	5	0,8 mm/d	* 1
grondwateraanvulling; bouwland	0,5 – 1,2	4	0,8 mm/d	
grondwateraanvulling; klei vlak aan oppervlak	0,3 – 1,0	17	0,4 mm/d	
peil waterlopen, peil bekend; met aanvoer	-0,3 – +0,3	77	0,00 m	optimalisatie niet mogelijk
peil waterlopen, peil bekend; zonder aanvoer	-0,4 – +0,4	63	0,00 m	
peil waterlopen; 3e orde waterlopen	-0,4 – +0,4	25	-0,05 m	
peil waterlopen; 4e en 5e orde waterlopen	-0,4 – +0,4	100	-0,05 m	
intreeweerstand waterlopen; infiltrerende kanalen	0,6 – 6,0	16	* 2	niet geoptim.
intreeweerstand waterlopen; exfiltrerende kanalen	0,6 – 6,0	1	* 1	niet geoptim.
intreew. waterlopen; geometrie bekend	0,6 – 6,0	71	* 1	* 0,7
intreew. waterlopen; geometrie onbekend	0,6 – 6,0	94	* 0,15	* 2,3

Tabel 2 (vervolg):

diepte waterlopen; peil bekend, met aanvoer	0,5 – 1,5	1	* 1	optimalisatie niet mogelijk
diepte waterlopen; peil bekend, zonder aanvoer	0,0 – 2,0	2	* 1	

Toelichting op tabel 2:

Gev = gevoeligheid, genormeerd op de parameter met de hoogste gevoeligheid (= 100);

niet geopt. = niet geoptimaliseerd (te geringe modelgevoeligheid); peilen en diepten van waterlopen kunnen niet met MODFLOWP geoptimaliseerd worden.

*X: waarbij X in de Monte Carlo-kolom = de factor waarmee de waarden in het oorspronkelijke niet-gekalibreerde model vermenigvuldigd moeten worden om de waarden van het met de Monte Carlo gekalibreerde model te verkrijgen en X in de MODFLOWP-kolom X = de factor waarmee de waarden in het met de Monte Carlo-methode gekalibreerde model vermenigvuldigd moeten worden om de waarden van het met MODFLOWP gekalibreerde model te verkrijgen.

Optimalisatie van parameterwaarden

De parameters van het Wierden-model zijn aanvankelijk geoptimaliseerd met behulp van de Monte Carlo-methode. De uiteindelijk geselecteerde waarden zijn opgenomen in de vierde kolom van tabel 2. Hierbij kan overigens aangetekend worden dat de uiteindelijke waarden van de parameters met een geringe gevoeligheid eerder gekozen dan geoptimaliseerd zijn. Een opmerkelijk fenomeen was, dat bij de optimalisatie de weerstand van de Twente-zanden naar een hoge waarde van meer dan 200 dagen tendeerde. Omdat een hogere c-waarde voor de Twente-zanden onwaarschijnlijk lijkt, is een acceptatiegrens bij deze waarde aangehouden.

De optimalisatie is vervolgens uitgevoerd met MODFLOWP. De aanpak hierbij was na te gaan in hoeverre MODFLOWP de waarden zoals die uit de Monte Carlo-optimalisatie naar voren kwamen handhaaft, indien wordt uitgegaan van het met Monte Carlo gekalibreerde model. Bij de toepassing van MODFLOWP heeft verder een aanzienlijke aggregatie van parameters plaatsgevonden. Zowel de weerstand van de Drente-klei als de grondwateraanvulling zijn geaggregeerd tot elk één parameterwaarde. De resultaten van de optimalisatie van MODFLOWP zijn weergegeven in de vijfde kolom van tabel 2. De (her)optimalisatie met MODFLOWP geeft geen aanleiding tot bijstelling van de k-waarde van het diepe watervoerend pakket, de c-waarde van de Drente-klei en de grondwateraanvulling.

Zoals reeds hiervoor is opgemerkt, is de waarde voor de weerstand van de Drente-klei bij de optimalisatie met behulp van de Monte Carlo-methode gemaximaliseerd op 200 dagen. De optimalisatie met MODFLOWP geeft aan dat het optimum blijkbaar toch bij een hogere waarde moet liggen. De verklaring hiervoor kan zijn dat fouten in het modelconcept zich vertalen in een onrealistische c-waarde omdat het ter plekke de enige 'vrije' parameter is. Het is bijvoorbeeld mogelijk dat de weerstand meer representeert dan

de weerstand van de Twente-zanden alleen (bijvoorbeeld anisotropie of een extra weerstand in relatie tot de waterlopen).

Met MODFLOWP is tevens een experiment uitgevoerd met het werken van grof naar fijn. Een overzicht van de resultaten hiervan is opgenomen in tabel 3. Hieruit blijkt dat de uitkomst van de parameteroptimalisatie mede afhangt van het aantal parameters dat erin wordt meegenomen. De stabiliteit van een parameter (de mate waarmee de waarde van de parameter onduidelijk bepaald wordt) hangt samen met de gevoeligheid ervan. Een gevoelige parameter is nu eenmaal eenduidiger vast te stellen dan een minder gevoelige. De stabiliteit van een parameter komt ook duidelijk tot uiting in de standaarddeviatie van de geoptimaliseerde parameters. Naarmate de standaarddeviatie van een parameter toeneemt, neemt de stabiliteit af.

Verder is het zo dat een stijghoogtevariatie die gerelateerd is aan een parameter die niet in de optimalisatie is betrokken, 'gaat zitten' in de waarde van parameters die wel worden geoptimaliseerd. Opvallend in dit verband is, dat bij de optimalisatie van de niet-stationaire versie van het model de weerstand van de Drente-klei op een twee maal zo hoge waarde uitkomt als bij de optimalisatie van de stationaire versie. Geconcludeerd kan derhalve worden dat de parameterkeuze een belangrijke stap vormt in het kalibratieproces.

Opmerkelijk is, dat de standaarddeviatie van de geoptimaliseerde parameters bij de niet-stationaire versie van het model aanzienlijk lager is dan bij de stationaire versie. Dit geldt met name voor de weerstandswaarden. De lagere standaarddeviatie is voor een deel gerelateerd aan het feit dat de schatting van de parameters is gebaseerd op meer grondwaterstandsmetingen. Anderzijds heeft waarschijnlijk bij stationaire berekeningen het niet simuleren van de dynamiek in de grondwaterstanden zijn keerzijde, in de zin dat deze van invloed is op de geoptimaliseerde weerstandswaarden. Merkwaardig is dat de weerstand van de Twente-zanden nu nog hoger uitkomt, namelijk op ruim 350 dagen.

In tabel 4 is de correlatiematrix van de geoptimaliseerde parameters van run 5 uit tabel 3 opgenomen. De (relatief lage) correlatie tussen de k-waarde van het diepe watervoerend pakket en de grondwateraanvulling is negatief, hetgeen opmerkelijk is. Doorgaans is deze correlatie positief, vanwege de relatie die bestaat tussen de neerslag (N), de afstand tussen de waterlopen (L), de transmissiviteit van de ondergrond (kD) en de opbolling van de grondwaterstand tussen de de waterlopen (O): $O = N * L^2 / 2 * kD$. Hier wordt deze relatie echter overschaduwd door het effect van de grondwateronttrekkingen, waarbij sprake is van een negatieve correlatie tussen N en kD (een hogere grondwateraanvulling leidt tot een vlakker kegel, hetgeen gecompenseerd kan worden door een lagere kD).

Naarmate de correlatie-coëfficiënt tussen de parameters lager is, neemt de uniciteit van de geoptimaliseerde parameterwaarden overigens toe.

Tabel 3: Overzicht van de resultaten van opeenvolgende runs met MODFLOWP, waarbij telkens één te optimaliseren parameter is toegevoegd.

Parameter	Stationair					Niet-stationair		
	Run 1	Run 2	Run 3	Run 4	Run 5	Run 1	Run 2	Run 3
<i>kD watervoerend pakket; buiten stuwwallen</i>	1,18	1,16	1,13	1,11	1,08	0,93	0,95	0,95
als boven: minus 2 maal st. dev.	0,99	0,98	0,92	0,90	0,89	0,91	0,92	0,92
als boven: plus 2 maal st. dev.	1,40	1,36	1,37	1,34	1,31	0,97	0,98	0,99
<i>Weerstand Twente-zanden</i>		1,56	1,41	1,37	1,67		1,79	1,82
als boven: minus 2 maal st. dev.		0,83	0,83	0,78	0,93		1,61	1,61
als boven: plus 2 maal st. dev.		2,39	2,44	2,38	2,94		2,00	2,00
<i>Grondwateraanvulling</i>			1,02	1,04	0,93			
als boven: minus 2 maal st. dev.			0,93	0,94	0,81			
als boven: plus 2 maal st. dev.			1,11	1,14	1,05			
<i>Intreeweerstand waterlopen; geometrie bekend</i>				0,61	0,80			
als boven: minus 2 maal st. dev.				0,21	0,28			
als boven: plus 2 maal st. dev.				1,72	2,22			
<i>Intreeweerstand waterlopen; geometrie onbekend</i>				2,33	2,38			
als boven: minus 2 maal st. dev.				1,02	1,18			
als boven: plus 2 maal st. dev.				5,26	4,76			
<i>Weerstand Drente-klei</i>					2,17			0,95
als boven: minus 2 maal st. dev.					1,28			0,85
als boven: plus 2 maal st. dev.					3,57			1,06

Toelichting op tabel 3:

De waarden betreffen vermenigvuldigingsfactoren ten opzichte van de waarden die bij de optimalisatie met de Monte Carlo-methode zijn verkregen.

In vet: de geoptimaliseerde waarde; daaronder: de range (ondergrens = minus 2 maal de standaarddeviatie; bovengrens = 2 maal de standaarddeviatie).

N.B.: de waarde van $-2 * \text{st. dev.}$ en $+2 * \text{st. dev.}$ is voor de k- en c-waarden niet symmetrisch, aangezien de optimalisatie van deze parameters met de logaritme van deze waarden heeft plaatsgevonden.

Interessant is verder de negatieve correlatie van $-0,72$ tussen de intreeweerstand van de waterlopen met bekende en onbekende geometrie. Dit geeft aan, dat deze weerstanden enigszins uitwisselbaar zijn en trachten elkaar te compenseren. Een hogere intreeweerstand voor waterlopen met bekende geometrie zal in het model gecompenseerd worden door een lagere berekende intreeweerstand voor waterlopen met een onbekende geometrie en vice versa.

De correlatie tussen de grondwateraanvulling en de weerstand van de Twentezanden, de Drente-klei en de intreeweerstand van de waterlopen met bekende geometrie is negatief (respectievelijk $-0,50$, $-0,65$ en $-0,43$). Dit



Figuur 3: Ruimtelijke weergave van de residuen van run 5 uit tabel 3.
Rode cirkels: residu negatief
Blauwe cirkels: residu positief
De straal van de cirkels correspondeert met de grootte van de residuen.

geeft aan dat er meer grondwateraanvulling benodigd is om een zekere hoogte voor de ondiepe grondwaterstand te bereiken, naarmate de weerstand van de ondiepe ondergrond afneemt. Bij een dergelijke situatie zouden gegevens omtrent afvoeren van sloten en beken een welkome aanvulling betekenen voor de kalibratie. De afvoergegevens kunnen immers voor een goede terugkoppeling zorgen, aangezien de afvoer in het model vrij direct gerelateerd is aan de grondwateraanvulling.

In figuur 3 zijn van run 5 uit tabel 3 de residuen ruimtelijk weergegeven. Over het algemeen zijn de residuen redelijk random over negatieve en positieve waarden verdeeld. Verder komen er plaatselijk uitschieters voor, die waarschijnlijk mede zijn toe te schrijven aan lokale kleilenzen. In het noordoosten van het modelgebied zijn de waarden voor de residuen overwegend negatief. Hierin zou mogelijk verbetering gebracht kunnen worden door relevante parameters voor dit gebied ruimtelijk los te koppelen (aanpassing van de zonering). Hiervan is echter afgezien, omdat het betreffende gebied niet tot het doelgebied behoorde waarop de eigenlijke analyse van het watersysteem betrekking had.

Monte Carlo versus MODFLOW

In gebruik scoort MODFLOW aanzienlijk beter dan de Monte Carlo-methode. Het aantal runs dat met de Monte Carlo-methode gedraaid kan worden, is theoretisch vrijwel altijd te beperkt. MODFLOW geeft in één (langdurige (afhankelijk van het aantal parameters)) run, dezelfde en zelfs meer informatie dan de Monte Carlo-methode. Met optimalisatie-pakketten als MODFLOW is het gebruik van de Monte Carlo-methode in feite achter-

Tabel 4: Correlatie-matrix van de geoptimaliseerde parameters van run 5 uit tabel 3.

	k3	c1	c2	rch	criv1	criv2
k3	1,00					
c1	0,30	1,00				
c2	0,00	0,22	1,00			
rch	-0,49	-0,50	-0,65	1,00		
criv1	0,12	-0,01	0,28	-0,43	1,00	
criv2	-0,01	-0,13	-0,08	0,16	-0,72	1,00

Toelichting op tabel 4:

- k3 = k-waarde diepe watervoerend pakket, buiten de stuwwallen;
 - c1 = weerstand Twente-zanden;
 - c2 = weerstand Drente-klei;
 - rch = grondwateraanvulling;
 - criv1 = intreeweerstand waterlopen met bekende geometrie;
 - criv2 = intreeweerstand waterlopen met onbekende geometrie.
-

haald. Verder gaf de gevoeligheidsanalyse van MODFLOWP vrijwel hetzelfde beeld als de gevoeligheidsanalyse gerelateerd aan de Monte Carlo-methode. Daarbij is de benadering van MODFLOWP zuiverder, aangezien de gevoeligheid in MODFLOWP gedefinieerd is als dh/dP , terwijl de gevoeligheid in de zelf ontwikkelde software is gerelateerd aan gekozen ranges voor de parameterwaarden (zie bijvoorbeeld kolom 2, tabel 2). Geconcludeerd kan dan ook worden, dat MODFLOWP een krachtig hulpmiddel vormt bij de uitvoering van een systematische gevoeligheidsanalyse en parameteroptimalisatie.

Een vergelijking tussen de Monte Carlo-methode en MODFLOWP kan verder overigens niet geheel eerlijk plaatsvinden, omdat de software die benodigd was om Monte Carlo-cycli automatisch te kunnen runnen zelf ontwikkeld was. Deze zelf ontwikkelde software betrof maatwerk, waarmee het mogelijk was elke parameter in de optimalisatie te betrekken. Nadeel van MODFLOWP is namelijk dat bijvoorbeeld peilen in waterlopen en de extinctiediepte (de diepte waaronder geen capillaire opstijging meer plaatsvindt) niet geoptimaliseerd kunnen worden. In het model Wierden is gebruik gemaakt van een simpel onverzadigde zone modelletje, waarvan de parameters vanzelfsprekend buiten het zicht van MODFLOWP blijven. Daarnaast geeft MODFLOWP problemen wanneer binnen cellen meer dan één zogenaamde MODFLOWP-'riverreach' voorkomt. Wellicht kunnen met enige aanpassingen van MODFLOWP de voornoemde beperkingen opgeheven worden.

Referenties

- HILL, M.C. (1992) A Computer Program (MODFLOWP) for Estimating Parameters of a Transient, Three-Dimensional, Ground-Water Flow Model Using Non-Linear Regression; U.S. Geological Survey.
- HOOGENDOORN, J.H EN C.B.M. TE STROET (1994) Optimalisatie waterbeheer Wierden/Wierdense Veld; TNO-Grondwater en Geo-Energie, rapportno. OS 94-14 B.

Gestructureerde kalibratie van een geïntegreerd model (SIMGRO): praktijkvoorbeeld (Fochteloërveen en omgeving)

Paul van Walsum is als senior hydroloog verbonden aan de DLO–Staring Centrum in Wageningen. Zijn takenpakket bestaat uit ontwikkeling en toepassing van hydrologische modellen.

Ab Veldhuizen is als hydrologisch onderzoeker werkzaam op de DLO–Staring Centrum. Hij houdt zich onder andere bezig met het herontwerp van het model SIMGRO.

P.E.V. van Walsum en A.A. Veldhuizen

Inleiding

Voor het Fochteloërveen en omgeving wordt door het Ministerie van LNV een gebiedsvisie opgesteld. Dat vereist onder meer kennis over de regionale hydrologie en de gerelateerde ecologische aspecten. De modelstudie waterhuishouding Fochteloërveen is verricht om die kennis te verkrijgen.

De waterhuishouding van het Fochteloërveen en omgeving bevat alle elementen die kenmerkend zijn voor de hydrologie van 'hoog Nederland'. Het betreft onder andere:

- een mozaïek van bodemgebruiksvormen; per bodemgebruiksvorm verschilt de verdamping, die tevens gedurende het jaar varieert, en op verschillende wijzen reageert op te droge of te natte omstandigheden;
- peilfluctuaties in het grondwater, met als gevolg:
 - ontwateringsmiddelen die slechts gedurende een deel van het jaar actief zijn; droogvallen van greppels en sloten tijdens de zomer is een normaal verschijnsel;
 - tijdelijke inundatie van het maaiveld, vooral in natuurgebieden;
- peilfluctuaties in het oppervlaktewater, als gevolg van variaties in afvoer of aanvoer en beheersingrepen.

Voor het simuleren van deze aspecten ligt het voor de hand om gebruik te maken van een geïntegreerd model van vegetatie-atmosfeer-interacties, en van bodem-, gronden oppervlaktewaterprocessen. Het regionaal hydrologisch model SIMGRO (Querner en Van Bakel, 1989) is daarom als uitgangspunt genomen. In het kader van dit onderzoek zijn er diverse modeluitbreidingen gerealiseerd en is tevens uitgebreid gebruik gemaakt van geografische informatiesystemen in de voor- en nabewerkingsfasen van het modelleringsproces.

Voorafgaand aan de modellering zijn een systeemverkenning en meetprogramma uitgevoerd in de periode januari 1992 tot en met juni 1993 (Wit e.a., 1995). Vervolgens is SIMGRO voor het studiegebied in twee fasen geïmplementeerd (zie ook Van Walsum en Veldhuizen, 1996):

- gebruik van directe informatie over gebiedskenmerken, zoals hoogtegegevens;
- gebruik van 'afgeleide' informatie over gebiedskenmerken, zoals gemeten afvoeren en grondwaterstanden (kalibratie en toetsing van het model).

In het navolgende wordt kort beschreven hoe de twee fasen zijn doorlopen aan de hand van concrete informatie over de modeltoepassing.

Implementatie van SIMGRO voor het Fochteloërveen en omgeving

Het modelgebied beslaat ca. 19.000 ha, waarvan 1.900 ha in het Fochteloërveen. Voor het berekenen van nietstationaire fluxrandvoorwaarden van het grondwatersysteem is om het eigenlijke studiegebied een schil van ca. 3 km gelegd (figuur 1). Voor het aldus vergrote studiegebied is een 'grof' model opgezet, waarvan de stationaire fluxrandvoorwaarden zijn ontleend aan NAGROM (De Lange, 1991; De Lange, pers. med.).

Het model kent drie niveaus van ruimtelijke eenheden, die corresponderen met de drie gemodelleerde deelsystemen:

- 'afwateringseenheden' voor de oppervlaktewatermodellering;
- 'subgebieden' voor de bodemwater-modellering;
- 'gridcellen' voor de grondwater-modellering.

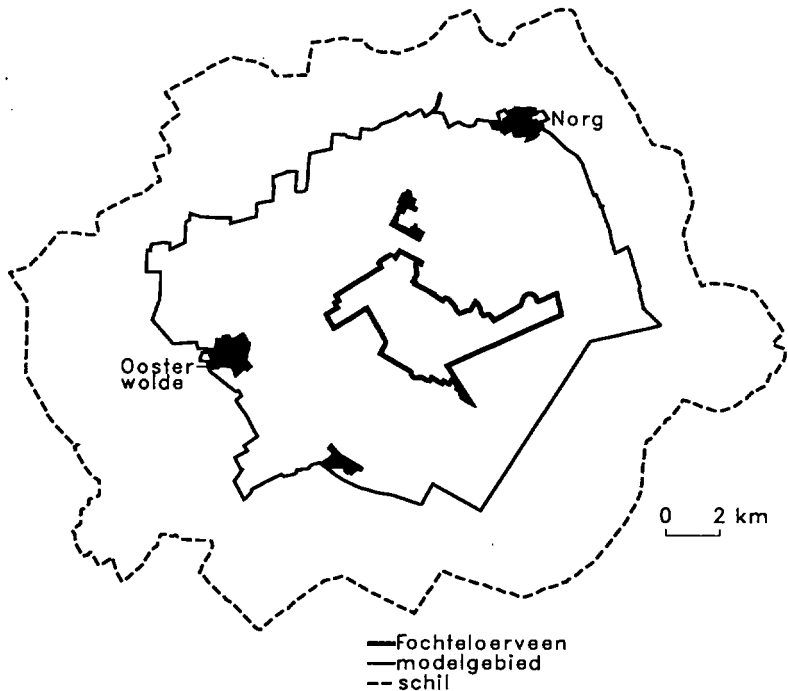
Het studiegebied is gemodelleerd met 346 afwateringseenheden, 670 subgebieden, en 5725 gridcellen.

De stroming van water in de ondergrond wordt 'quasi-3D' gesimuleerd. De schematisatie van de ondergrond (tabel 1) omvat 6 'actieve' lagen, beginnend bij een al of niet aanwezige veenlaag (slecht doorlatend), en eindigend met een watervoerende laag bestaande uit grof zand. Daaronder bevindt zich tenslotte de vrijwel ondoorlatende hydrologische basis (Formatie van Breda).

Tabel 1: Opeenvolging van lagen in schematisatie van grondwaterstroming (Wit e.a., 1995). De k-waarde van de Formatie van Drenthe (keileem) is afhankelijk van de laagdikte D gesteld.

Laag	Type	Formatie	Materiaal	k-waarde (m/d)
1	slecht doorlatend	Griendtsveen	veen/gliede	0,00033
2	watervoerend	Twente	matig fijn zand	7
3	slecht doorlatend	Drenthe	keileem	0,03/D ($D < 3$ m) 0,01 ($D > 3$ m)
4	watervoerend	Eindhoven	matig fijn zand	7
5	slecht doorlatend	Peelo	potklei	0,001
6	watervoerend	Harderwijk/Urk	grof zand	35

Figuur 1: Grens model-gebied. De onderbroken lijn geeft de grens van de schil die gebruikt wordt voor de berekening van randvoorwaarden van het grondwatersysteem.



In de bodemwater-modellering wordt onderscheid gemaakt tussen:

- vegetatie-atmosfeer-interacties;
- de wortelzone;
- het onverzadigde deel van de ondergrond.

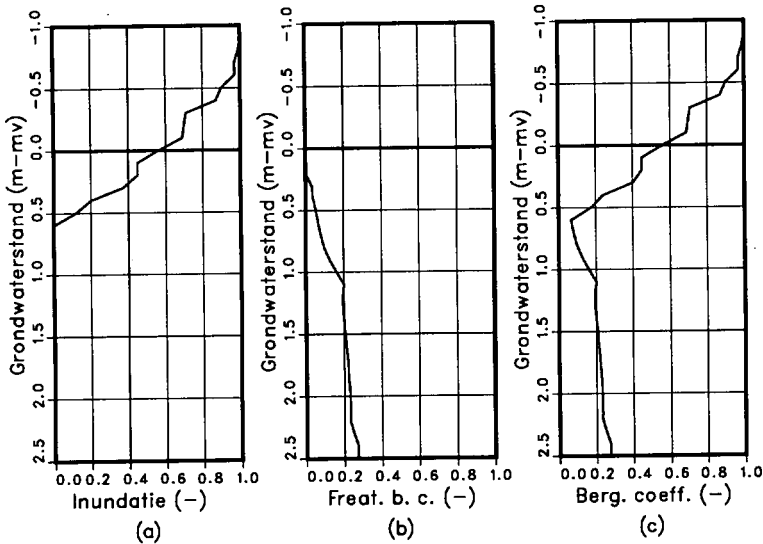
De berekening van de verdamping wordt verricht in twee stappen:

- berekening van de potentiële verdamping;
- berekening van de actuele verdamping, aan de hand van de potentiële verdamping en het actuele vochtgehalte.

Voor de berekening van de potentiële verdamping is onder meer gebruik gemaakt van grondgebruiksgegevens uit het LGN-bestand (LandGebruik Nederland, zie Thunnissen e.a. (1992)).

De vochthuishouding van de wortelzone en van het onverzadigde deel van de ondergrond wordt met eenvoudige balans-modellen gesimuleerd. Daarbij wordt gebruik gemaakt van gegevens die zijn afgeleid met het stationair bodemvochtmodel CAPSEV (Wesseling, 1991). Daaraan voorafgaand is onder meer een bodemfysische schematisatie van het gebied uitgevoerd (Stolte e.a., 1995).

In de modellering van het 'onverzadigde' deel van de ondergrond en het freatische grondwater wordt speciale aandacht besteed aan processen die spelen bij tijdelijke inundatie. Bij de modellering van natte natuurgebieden



Figuur 2: Voorbeeld van een fractioneel inundatie-diagram. (a): het aandeel van een subgebied dat onder water is gelopen als functie van de grondwaterstand ten opzichte van het gemiddelde maaiveld in een subgebied. Opgeteld bij de freatische bergingscoëfficiënt van de ondergrond (b) levert dit de totale bergingscoëfficiënt (c).

is dit een zeer wezenlijk aspect, onder andere vanwege de invloed op de verdamping en de berging van water op het maaiveld. Het bergingsaspect van het inundatieproces wordt gesimuleerd door gebruik te maken van een samengestelde bergingscoëfficiënt voor het freatische pakket. Aan de hand van de maaiveldshoogteverdeling wordt per subgebied een zogenaamd fractioneel inundatie-diagram afgeleid (figuur 2), dat de areaalfractie aangeeft die onder water staat bij een bepaalde grondwaterstand. Door de geïnundeerde fractie op te tellen bij de berging als gevolg van berging in de onverzadigde zone (van delen van een subgebied die bij een bepaalde grondwaterstand nog niet onder water staan), wordt een gemiddelde bergingscoëfficiënt afgeleid.

In het numerieke oplossingschema van het grondwatermodel (gebaseerd op de eindige-elementenmethode) wordt rekening gehouden met het veranderen van de bergingscoëfficiënt binnen de tijdstap. Dat maakt de vergelijkingen niet-lineair.

De afwateringseenheden van het model vallen samen met de eenheden op de waterschapskaarten (niet te verwarren met de Waterstaatskaart van Rijkswaterstaat.) Bij de modellering van het oppervlaktewater wordt binnen een afwateringseenheid onderscheid gemaakt tussen vier categorieën van waterlopen: grotere waterlopen, sloten, drains, en greppels. Bij de modellering van de berging bij de oppervlaktewater-dynamiek vormen alle waterlopen binnen een afwateringseenheid één reservoir. Voor de weerstandskennmerken en peilinstelling wordt gebruik gemaakt van gegevens van de afwateringsleiding binnen de eenheid. De reservoirs van de afwateringseenheden staan met elkaar in verbinding conform de afwateringsstructuur op de waterschapskaarten.

Voor de sloten en grotere waterlopen is de drainageweerstand berekend aan de hand van simulaties met FLONET (Guigier en Frind, 1991; Veldhuizen en Van Walsum, in voorbereiding). Daarbij is gebruik gemaakt van de volgende gegevens:

- geohydrologische parameters van de ondergrond;
- dichtheid van het leidingenstelsel;
- bodemdiepte en talud-helling;
- aangenomen waarde voor de intreeweerstand (Massop, pers. med.).

Per categorie van waterlopen en per gridcel van het model wordt de drainage/infiltratie berekend aan de hand van:

- de ontwateringsbasis of oppervlaktewaterpeil;
- de grondwaterstand;
- de drainage/infiltratieweerstand.

Kalibratie

Bij kalibratie worden invoergegevens van het model aangepast om een betere overeenstemming te krijgen tussen waarnemingen en simulaties. Aan die aanpassingen worden overigens wel grenzen gesteld: gegevens waar een grote mate van betrouwbaarheid aan wordt toegekend, worden niet of nauwelijks veranderd.

In de kalibratieprocedure zijn de volgende fasen onderscheiden:

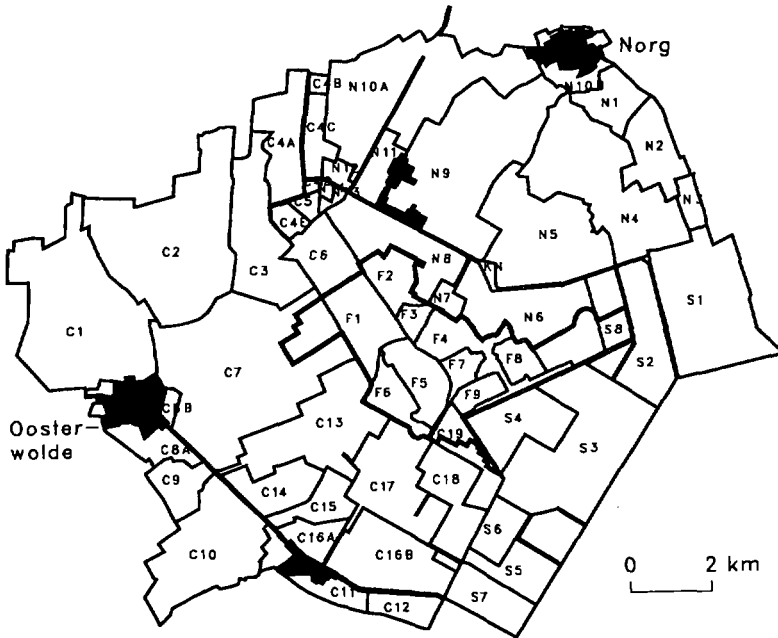
- formulering doelfunctie;
- uitvoering gevoeligheidsanalyse;
- aanpassing van parameters;
- 'validatie'.

Doelfunctie

Zowel afvoeren als stijghoogtegegevens waren beschikbaar. Beide soorten gegevens zijn verwerkt in de doelfunctie.

De periode van het veldonderzoek besloeg de afvoerperioden van twee hydrologische jaren. Eén was bedoeld voor de modelkalibratie en één voor de toetsing van het model aan de hand van een tweede dataset. Er is echter voor gekozen om alle beschikbare gegevens te verwerken in de doelfunctie van de kalibratie: de kosten van het verkrijgen van die gegevens zijn veel te hoog geweest om ze bij de kalibratie slechts voor de helft te gebruiken.

Een belangrijke keuze betrof de ruimtelijke eenheid die bij de kalibratie wordt gehanteerd. Deze eenheid bepaalt de ruimtelijke schaal waarop de deeltermen van de doelfunctie worden berekend en tevens de 'zones' waarbinnen parameters nog op een gelijksoortige wijze worden bijgesteld. Bij aanpassing van bijvoorbeeld de drainageweerstand binnen een bepaalde zone worden alle waarden met één en dezelfde factor vermenigvuldigd. Het aanbrengen van een zonering in de parameteraanpassing is een noodzake-



Figuur 3: Waterbalansen-eenheden van het veldonderzoek, die tevens gebruikt zijn voor de 'parameter-zonering' van de kalibratie.

lijke stap, omdat anders het aantal aan te passen parameters het 'effectieve' aantal waarnemingen ver overtreft. Het kalibratieprobleem is dan in wiskundig opzicht 'slecht gesteld', en niet eenduidig oplosbaar. Het ligt voor de hand de parameterzonering aan te laten sluiten bij de waterbalansen-eenheden van het veldonderzoek (figuur 3).

Per waterbalansen-eenheid is de ME_q (Mean Error) van gesimuleerde afvoeren berekend en de gemiddelde $RMSE_H$ (Root Mean Squared Error) van de stijghoogtes. Vervolgens zijn beide soorten fouten met een weegmethode bij elkaar opgeteld. Daarbij is absolute waarde van de ME_q gebruikt. Een afvoerafwijking van 1 mm/d is drie keer zo zwaar aangerekend als een $RMSE_H$ van 1 m. Relatief meer gewicht is gegeven aan de afvoeren, omdat afvoeren gegevens zijn met betrekking tot vlakken. Stijghoogtegegevens zijn op zich nauwkeuriger, maar hebben het probleem dat het puntwaarden zijn waarvan het nog maar de vraag is hoe representatief ze zijn. Om voor het gebied tot één doelfunctiewaarde te komen zijn vervolgens de waarden van de verschillende balansen-eenheden bij elkaar opgeteld, eveneens met een weegmethode. Daarbij is zowel op de oppervlakte van een waterbalansen-eenheid (areaalfractie) als op de geschatte kwaliteit van de gegevens gelet. Overigens ontbreekt het nog aan wetenschappelijke methoden voor het kiezen van weegfactoren voor afvoeren en stijghoogtes.

Tabel 2: Parameters gebruikt in de gevoeligheidsanalyse.

Code	Parameter-omschrijving	Eenheid	T	R	G
CDCT1	weerstand van het veen	d	1	2	1
CDCT2	doorlatendheid van de Twente-formatie	m/d	1	2	1
CDCT3	weerstand van de keileem	d	1	2	1
CDCT4	doorlatendheid van de Eindhoven-formatie	m/d	1	1	1
CDCT5	weerstand van de potklei	d	1	1	1
CDCT6	doorlatendheid van de Urk/Harderwijk-formatie	m/d	1	1	1
DRNG1	drainageweerstand van de grotere waterlopen	d	1	2	2
DRNG2	drainageweerstand van de sloten	d	1	2	2
DRNG3	drainageweerstand van de buisdrainage	d	1	2	2
DRNG4	drainageweerstand van het greppelsysteem d10-				
DRNG5	drainagebasis van de grotere waterlopen	cm	2	2	2
DRNG6	drainagebasis van de sloten	cm	2	2	2
DRNG7	drainagebasis van de buisdrainage	cm	2	2	2
DRNG8	drainagebasis van het greppelsysteem	cm	2	2	1
STOR1	freatische berging	-	3	2	1
STOR2	elastische berging	-	4	0	-
DISH1	bergings oppervlaktewater	m ³ /ha	1	2	1
DISH2	Q-h-relatie van de afwateringseenheid	m ³ /s	1	2	1
DISH3	hoogte zomerpeil	cm	2	2	2
DISH4	hoogte winterpeil	cm	2	2	2
UNSA1	evenwichtsvochtgehalte	mm	4	0	-
UNSA2	capillaire opstijging	mm/d	4	0	-
METE1	neerslag	mm/d	5	1	1
METE2	verdamping	mm/d	5	1	1

De parameters hebben een type (T), volgens welke ze worden gevarieerd in de gevoeligheidsanalyse (zie tabel 3). De R-code geeft aan hoe met de parameter wordt omgesprongen bij de kalibratie:

0 = wordt bij de kalibratie niet meegenomen;

1 = wordt wel meegenomen maar mag niet ruimtelijk worden gevarieerd;

2 = wordt wel meegenomen en mag wel ruimtelijk worden gevarieerd (per waterbalanseenheid);

De G-code geeft aan welke opties bij de kalibratie mogen worden gekozen:

1 = alleen de minder extreme opties mogen worden gebruikt (2,3, en 4 van tabel 3)

2 = alle opties mogen worden gebruikt.

Tabel 3: De parametervariaties van de gevoeligheidsanalyse. Optie 3 is de uitgangssituatie.

Type parameter (zie tabel 2)	Optie				
	1	2	3	4	5
1	* 4	* 2	* 1	/ 2	/ 4
2	+ 30	+ 15	+ 0	- 15	- 30
3	+ 40%	+ 20%	+ 0%	- 20%	- 40%
4	* 20	* 10	* 1	/ 10	/ 20
5	+ 10%	+ 5%	+ 0%	- 5%	- 10%

Systematische gevoeligheidsanalyse

Een gevoeligheidsanalyse is een voorbereiding op de kalibratie. Tevens is de gevoeligheidsanalyse een hulpmiddel bij het interpreteren van modelresultaten en het samenstellen en onderbouwen van scenario's. De gevoeligheidsanalyse is gedaan voor 24 parameters (tabel 2), waarbij per parameter een viertal varianten zijn doorgerekend (tabel 3). Die varianten zijn steeds voor het hele gebied doorgevoerd: bijvoorbeeld overal een verdubbeling van de drainageweerstand van sloten. Het was niet haalbaar (i.v.m. de vereiste rekentijd) om bijvoorbeeld per waterbalansenheid een parameter te variëren, hoewel dat wel wenselijk was geweest. De resultaten zijn grafisch verwerkt om een totaaloverzicht van de gevoeligheden te kunnen krijgen.

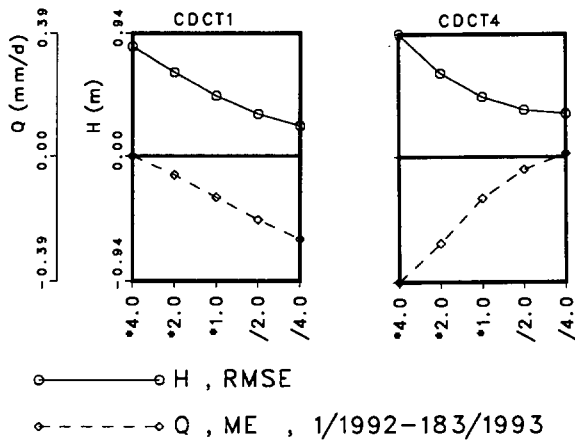
In figuur 4 zijn bij wijze van voorbeeld enkele resultaten voor het 'centrale compartiment' (F5) van het Fochteloërveen geselecteerd. Uitgebeeld zijn de resultaten van de gevoeligheidsanalyse voor:

- 'CDCT1', de c -waarde van het veen (laag 1 van de geohydrologische schematisatie);
- 'CDCT4', de k -waarde van het tweede watervoerend pakket (laag 4).

Per figuur zijn simultaan de effecten van parameteraanpassingen op de ME_q en de $RMSE_H$ uitgebeeld. Het blijkt dat het door 4 delen van de veenweerstand een vergelijkbaar effect heeft op de $RMSE_H$ als het door vier delen van de k -waarde van het tweede watervoerend pakket. Nadere analyse leerde dat de $RMSE_H$ in de uitgangssituatie vooral werd veroorzaakt door te lage stijghoogten in de vierde laag. Deze stijghoogten kunnen op de twee genoemde manieren worden verhoogd, d.w.z.

- of door meer water te laten wegzijgen vanuit het veen, als gevolg van een lagere veenweerstand; dit gaat gepaard met een verdere onderschatting van de afvoer, zoals blijkt uit de afname van de ME_q ;
- of door het afremmen van de stroming door de ondergrond, d.m.v. een lagere k -waarde; dit gaat gepaard met een verbetering van de geschatte afvoer, zoals blijkt uit de toename van de ME_q naar een minder negatieve waarde.

Figuur 4: Resultaten van de gevoeligheidsanalyse, voor het centrale compartiment van het Fochteloërveen (F5). De deelfiguur met het bovenschrift 'CDCT1' heeft betrekking op de c-waarde van het veen (laag 1). De deelfiguur met bovenschrift 'CDCT4' heeft betrekking op de k-waarde van het tweede watervoerend pakket. Op de horizontale as staat de aanpassingsfactor van een parameter, op de verticale as (dubbel) de bijbehorende waarde van de doelfunctie-componenten voor H ($RMSE_H$) en Q (ME_q)



Uit de interpretatie van de gevoeligheidsanalyse blijkt hoe belangrijk de afvoermetingen waren voor de kalibratie. Sterker nog, zonder afvoerinformatie was het model per definitie niet te kalibreren geweest.

Van de parameters die een zeer lokale uitstraling hebben, zoals de greppelweerstand, kan worden aangenomen dat de effecten die met de uitgevoerde gevoeligheidsanalyse zijn berekend 'lokaal' bepaald zijn. Met andere woorden, de effecten die worden berekend voor een bepaalde balanseenheid zijn (vrijwel) onafhankelijk van de tegelijkertijd doorgevoerde parameteraanpassingen in naastgelegen balanseenheden. Het per afzonderlijke balanseenheid uitvoeren van de gevoeligheidsanalyse had in dat geval geen andere informatie opgeleverd dan is verkregen door voor het gehele gebied tegelijkertijd de betreffende parameter te variëren.

Er zijn echter ook parameters die wel degelijk andere informatie hadden gegeven indien de variatie per afzonderlijke waterbalanseenheid was uitgevoerd. Het betreft parameters die een regionale 'uitstraling' hebben: een verandering in balanseenheid i heeft ook effecten op een naastgelegen balanseenheid j . Dit houdt omgekeerd dus in dat de nu berekende resultaten voor balanseenheid j niet alleen worden veroorzaakt door de parameterverandering in balanseenheid j , maar (onder andere) ook door die in balanseenheid i .

Een voorbeeld van een parameter die een regionale uitstraling heeft is de doorlatendheid van het derde watervoerend pakket. Doordat deze parameter over het gehele gebied tegelijkertijd is gevarieerd, is achteraf niet meer te achterhalen wat de effecten van aanpassingen in afzonderlijke balanseenheden zouden zijn geweest. Met deze beperking is rekening gehouden in het verdere gebruik van de rekenresultaten bij de kalibratie.

Aanpassingen van parameters

De aanpassing van parameters in de kalibratieprocedure is in drie stappen gedaan:

- 1 aanpassingen op grond van kwalitatieve conclusies uit het veldonderzoek;
- 2 aanpassingen op grond van de gevoeligheidsanalyse;
- 3 aanpassingen van parameters op grond van restfouten en andere bronnen (o.a. Ernst, 1979).

De aanpassingen op grond van de gevoeligheidsanalyse (stap 2) zijn verricht met een op *heuristieken* gebaseerd rekenprogramma. Daarbij wordt de gevoeligheidsanalyse niet steeds herhaald, zoals gebeurt bij toepassing van bijvoorbeeld het kalibratiepakket PEST (Doherty, 1994). Voor het kunnen toepassen PEST moet het model namelijk zeer vaak worden gedraaid. Als gevolg van het geïntegreerd karakter van SIMGRO (grond-, bodem, en oppervlaktewater) is voor het herhaald draaien de vereiste rekentijd veel te groot (duizenden uren).

In het rekenprogramma voor stap 2 is onderscheid gemaakt tussen parameters met een 'regionale' uitstraling (zoals de k -waarde van het diepste watervoerend pakket) en parameters met een lokale uitstraling (zoals de greppeldrainageweerstand). Parameters met een regionale uitstraling zijn alleen over het hele gebied op uniforme wijze aangepast, terwijl parameters met een lokale uitstraling per waterbalanseenheid zijn gekalibreerd. Voor het per waterbalanseenheid aanpassen van de genoemde k -waarde zijn namelijk de resultaten van de gevoeligheidsanalyse een te wankel basis, doordat lokale effecten en effecten van naastgelegen waterbalanseenheden niet uiteen zijn te rafelen op basis van de gedane gevoeligheidsanalyse. In tabel 2 is het onderscheid tussen gebiedsgewijze aanpassing en aanpassing per waterbalanseenheid aangegeven met de R-code (met respectievelijk waarden 1 en 2). Het genoemde onderscheid is aangebracht op basis van *expert judgement*.

Verder wordt in het rekenprogramma voor stap 2 ervan uitgegaan dat de deelresultaten van de gevoeligheidsanalyse superponeerbaar zijn. Dit zal worden toegelicht aan de hand van twee eenvoudige voorbeelden. Stel dat een verhoging van de afvoerdrempel met 30 cm in een deelgebiedje de systematische afwijking van afvoeren ME_q doet afnemen van 0,50 naar 0,40, en dat een verdubbeling van de weerstand een afname geeft van 0,50 tot 0,30, dan wordt berekend dat bij de combinatie van beide maatregelen de verwachte ME_q een waarde krijgt van $0,50 - 0,10 - 0,20 = 0,20$. Voor de $RMSE_H$ is een andere rekenwijze gebezigd, omdat de $RMSE_H$ per definitie niet negatief kan worden. Bij het gebruik van dezelfde getallen als boven wordt een $RMSE_H$ verwacht van $0,50 * (0,4/0,5) * (0,3/0,5) = 0,24$. Hierbij wordt er dus van uitgegaan dat de iedere verbetering verhoudingsgewijs doorwerkt. Het toepassen van het superpositieprincipe zoals boven uiteengezet is een puur *heuristische* manier van werken. Het enige wat daarbij telt

is of er een verbetering wordt bereikt met betrekking tot de totale doelfunctie. Uiteraard is dit laatste getoetst aan de hand van een simulatierun.

De feitelijke aanpassingen van parameters in stap 2 van de kalibratie werden in twee deelstappen uitgevoerd, echter zonder tussentijdse simulatie:

- 2a aanpassingen van parameters die voor het hele gebied op dezelfde wijze worden aangepast ($R = 1$ van tabel 2);
- 2b aanpassingen van parameters die voor iedere balanseenheid op dezelfde wijze worden aangepast ($R = 2$ van tabel 2).

Vijf parameters kwamen in aanmerking om te worden aangepast in stap 2a. Het betrof allemaal parameters waarvan de 'extreme' aanpassingen (tabel 3) niet in aanmerking kwamen om eventueel gekozen te worden. Bijvoorbeeld, aanpassing van de neerslag met meer dan 5% werd niet als een reële optie beschouwd. Per parameter waren er dus 3 opties. Met het rekenprogramma zijn alle mogelijke combinaties ($3^5 = 243$ stuks) onderzocht op hun effecten op de doelfunctie. Daarbij is steeds gebruik gemaakt van de resultaten van dezelfde gevoeligheidsanalyse en is het effect op de doelfunctie voorspeld met behulp van de heuristische aanname dat de effecten superponeerbaar zijn. Terwijl standaardkalibratiemethoden uitgaan van aanpassing van parameters op een continue schaal, werkt het hier gebruikte algoritme met 'discrete' opties. Het werken met discrete opties geeft overigens direct aan met wat voor onzekerheden deze parameteroptimalisatie (minimaal) is behept.

Resultaat van het zoekproces was dat twee parameters in aanmerking kwamen om aangepast te worden:

- halvering van de k-waarde van het tweede watervoerend pakket;
- verlaging van de neerslag met 5%.

De verlaging van de neerslag met 5% bracht de neerslag weer terug op de waarde zoals gepubliceerd door het KNMI: standaardpraktijk is namelijk om die neerslag met 5% te verhogen (de zgn. Warmerdam-factor; Warmerdam, 1981).

In stap 2b is per waterbalanseenheid naar de vijf meest gevoelige parameters gezocht. Door alle combinaties van mogelijkheden ($5^5 = 3125$ stuks) af te tasten is de doelfunctie voor alle balanseenheden afzonderlijk geminimaliseerd. Hierbij is rekening gehouden met de veranderingen van stap 2a (aan de hand van de gesuperponeerde effecten van de gevoeligheidsanalyse). Bij het aftasten van de parameteraanpassingen per balanseenheid afzonderlijk zijn echter niet meer de aanpassingen van stap 2a herzien. Als de gevoeligheid van een parameter te gering was, is hierop niet gekalibreerd.

Het rekenprogramma voor stap 2 heeft de waarde van de doelfunctie van 1,16 tot 1,04 omlaaggebracht. Op grond van de veronderstelde superponeerbaarheid (en onderlinge onafhankelijkheid van naast elkaar liggende waterbalanseenheden) werd een doelfunctiewaarde van 0,73 verwacht. De beperkte geldigheid van de superponeerbaarheid heeft echter niet verhinderd dat de procedure (voor een eerste toepassing) redelijk heeft gewerkt. Maar natuurlijk is er geen enkele garantie dat het 'echte' optimum is bereikt. De

Tabel 4: De waarde van de doelfunctie voor de uitgangssituatie (stap 0) en de 4 stappen van de kalibratie, gesommeerd over het gehele modelgebied.

Doelfunctie	Stap				
	0	1	2a	2b	3
OF	1,21	1,16	1,10	1,04	0,87
$ ME_q $	0,28	0,27	0,25	0,21	0,18
$RMSE_H$	0,37	0,35	0,36	0,40	0,34

OF = doelfunctie hele modelgebied ('Objective Function');

$|ME_q|$ = gemiddelde absolute waarde van de afwijking van afvoeren (mm/d);

$RMSE_H$ = gemiddelde standaardfout stijghoogten (m);

OF wordt berekend met $OF = 3 * |ME_q| + RMSE_H$.

bereikte verbetering is ook relatief bescheiden in vergelijking met de verbeteringen als gevolg 'handmatig' aangebrachte veranderingen in stap 1 en 3: in de drie stappen van parameteraanpassingen is de waarde van de doelfunctie afgenomen van respectievelijk 1,21 (uitgangssituatie) naar 1,16 (stap 1), naar 1,04 (2), en tenslotte naar 0,87 (3). Tabel 4 bevat een overzicht van de verloop van de doelfunctie en de deeltermen voor afvoeren en stijghoogten.

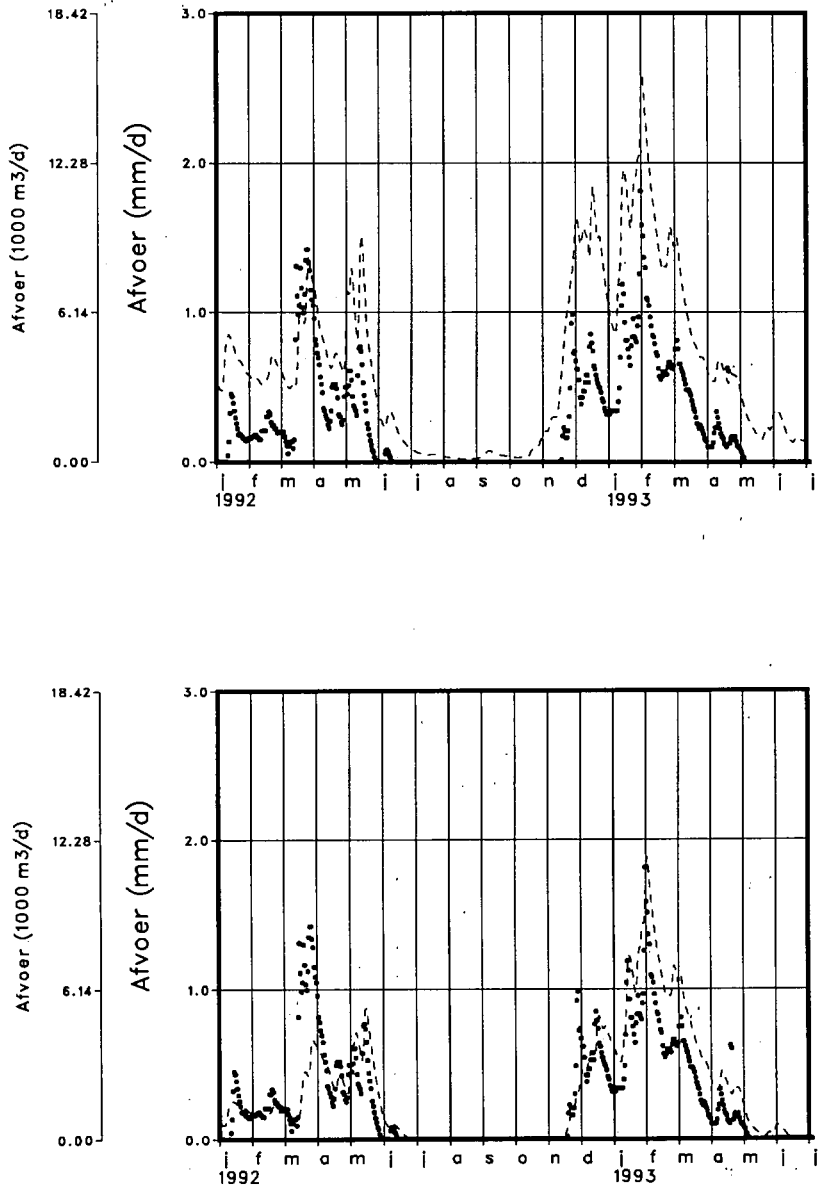
De relatief bescheiden verbetering in stap 2 is mede terug te voeren op de relatief stringente beperkingen die aan het algoritme zijn opgelegd. In een vervolgstudie (van het Bargerveen) is de met het zoekprogramma bereikte verbetering aanzienlijk groter (afname doelfunctie met ruim 20% in vergelijking met 10% afname bij de Fochteloërveenstudie).

Ter illustratie van de met het model verkregen resultaten is in figuur 5 het gesimuleerde versus gemeten afvoeroverloop afgebeeld, voor en na kalibratie, voor een meetpunt dat circa $2/3$ van het Fochteloërveen als stroomgebied heeft.

Validatie

Validatie houdt in dat vastgesteld wordt dat het model 'goed' is en 'goede' voorspellingen kan doen. Strikt gesproken is validatie per definitie onmogelijk, omdat in scenarios diepe ingrepen in het systeem kunnen worden gepleegd. Wel wordt vaak getracht een toetsing uit te voeren aan de hand van waarnemingen die niet zijn gebruikt bij de kalibratie. Indien de toetsing aangeeft dat het model de werkelijkheid nog niet goed beschrijft, dan dient een nieuwe kalibratiecyclus te worden doorlopen. Bij het opnieuw toetsen van het bijgestelde model zou eigenlijk een andere waarnemingsset moeten worden gebruikt. Als namelijk steeds dezelfde waarnemingsset wordt gebruikt bij iedere nieuwe toetsing, dan gaat de validatie feitelijk onderdeel worden van de kalibratie. Meestal is het aantal waarnemingssets echter beperkt, en vervaagt op den duur de scheidslijn tussen kalibratie en validatie. Dat was ook het geval bij de huidige studie. Hoewel de meetperiode in eerste instantie in twee deelperioden was opgesplitst, één voor

kalibratie en één voor validatie, is uiteindelijk de hele meetset gebruikt voor de kalibratie. Voor een onafhankelijke toetsing bleef toen geen materiaal over.



Figuur 5: Gemeten afvoer-verloop versus gesimuleerde (streepjeslijn), voor een meetpunt dat circa $\frac{2}{3}$ van het Fochteloërveen als stroomgebied heeft. Boven: simulatie vóór kalibratie; onder: simulatie na kalibratie.

Conclusies

Uit de systematische gevoeligheidsanalyse kwam nog eens duidelijk naar voren hoe belangrijk het is om behalve over stijghoogteinformatie ook over afvoerinformatie te beschikken. Zonder die afvoerinformatie zou het model per definitie niet te kalibreren zijn geweest. Dit geldt overigens voor de meeste omstandigheden in Nederland.

Geïntegreerde modellen van bodem-, grond- en oppervlaktewater hebben als nadeel dat als gevolg van de vereiste rekentijd de toepassing van standaardkalibratiealgoritmen (vooralsnog) nauwelijks of niet haalbaar is. Dat hoeft echter niet te betekenen dat de kalibratie moet ontaarden in ongestructureerd 'gedraai aan knoppen'. In het artikel wordt verslag gedaan van een kalibratieprocedure die de stappen van een 'goede' kalibratieprocedure bevat, maar die om de rekentijd te bekorten een aantal beperkingen heeft, waarvan de belangrijkste zijn:

- het niet steeds herhalen van de gevoeligheidsanalyse;
- het werken met discrete opties voor parameteraanpassingen.

Gezien het 'heuristische' karakter van de methode kan niet verwacht worden dat het echte optimum is gevonden. Wel bleek dat de doelfunctiewaarde met de methode kon worden verbeterd. Verwacht wordt dat door verbetering van de heuristieken de methode nog aanzienlijk effectiever kan worden gemaakt.

Literatuur

- DOHERTY, J. (1994) PEST; Model Independent Parameter Estimation; Watermark Computing, Oxley (Australië).
- ERNST, L.F. (1979) Hydrologisch onderzoek van het Fochteloërveen-kolonieveld; DLO-Staring Centrum, ICW-nota 1164 (niet gepubliceerd), Wageningen.
- GUIGIER, J.M. EN E.O. FRIND (1991) FLONET (version 2.0); Two-dimensional steady-state flownet generator; Waterloo Centre for Groundwater Research, Waterloo (Ontario, Canada).
- LANGE, W.J. DE (1991) A groundwater model of The Netherlands; RIZA (Ministerie van Verkeer en Waterstaat), Lelystad.
- QUERNER, E.P. EN P.J.T. VAN BAKEL (1989) Description of the regional groundwater flow model SIMGRO; DLO-Staring Centrum, Report 7, Wageningen.
- STOLTE, J., H. ROSING, EN A.A. VELDHUIZEN (1995) Bodemfysische schematisatie van het Fochteloërveen en omliggende landbouwgronden; DLO-Staring Centrum, Rapport 382, Wageningen.
- THUNNISSEN, H., R. OLTJOF, P. GETZ (1992) Grondgebruiksdatabase van Nederland vervaardigd met behulp van Landsat Thematic Mapper opnamen; DLO-Staring Centrum, Technisch Document 18, Wageningen.
-

- WALSUM, P.E.V. VAN EN A.A. VELDHUIZEN (1996) Modelstudie waterhuishouding Fochteloërveen en omgeving; simulatie van scenario's voor het waterbeheer met SIMGRO ; DLO-Staring Centrum, Rapport 399, Wageningen.
- WARMERDAM, P.M.M. (1981) De invloed van wind op regenwaarnemingen; een vergelijkend regenmeteronderzoek; in: *H₂O*, jrg 14, nr 1.
- WESSELING, J.G. (1991) CAPSEV; Steady state moisture flow theory; program description; user manual; DLO-Staring Centrum, Report 37, Wageningen.
- WIT, K.E., J.M.P.M. PEERBOOM, H. TH. L. MASSOP EN J.W.J. VAN DER GAAST (1995) Modelstudie waterhuishouding Fochteloërveen; systeemverkenning en resultaten meetprogramma; DLO-Staring Centrum, Rapport 347, deel 1, Wageningen.

Sluiting en follow-up

A. Leijnse en T.N. Olsthoorn

Toon Leijnse is als senior onderzoeker werkzaam bij het laboratorium voor Bodem- en Grondwateronderzoek van het RIVM. Daarnaast is hij een dag per week werkzaam bij de vakgroep Waterhuishouding van de Landbouwniversiteit Wageningen.

Theo Olsthoorn is als hoofd van de sector Hydrologie werkzaam bij Gemeentewaterleidingen Amsterdam.

De methode 'Heijermans' (op hoop van zegen), zoals Harry Rolf de tot vandaag gangbare ijkmethode zo treffend noemt, biedt geen garantie op een goede ijking van een complex grondwatermodel. Nog afgezien van het feit dat deze 'methode' tijdrovend en daarom zeer duur is, zijn de resultaten niet reproduceerbaar. Evenmin wordt informatie over de betrouwbaarheid van de met de 'ijking' berekende parameterwaarden verkregen.

Uit de bijdragen in dit boekje blijkt wel dat we met de kalibratie van grondwatermodellen zo langzamerhand een heel stuk verder zijn dan de ons zo bekende 'methode Heijermans'. Met name ook uit bijdragen aan de onlangs gehouden conferentie ModelCARE '96 blijkt dat het gebruik van geavanceerdere technieken niet alleen beperkt blijft tot enkelingen. Goede software is tegenwoordig beschikbaar om de kalibratie op een begrijpbare en consistente manier uit te voeren, en het is dan ook te hopen dat naar aanleiding van dit boekje het gebruik van die instrumenten hand over hand zal toenemen.

De ervaring leert dat het gebruik van kalibratiesoftware een aanmerkelijke verdieping geeft aan de hydrologische modellering. De software neemt de kalibratie allerm minst van de hydroloog over: het blijft de hydroloog die het model kiest (bouwt), de te optimaliseren parameters selecteert, het kalibratieproces stuurt en de resultaten beoordeelt. De software reduceert de tijd voor het optimaliseren van de gekozen parameters tot minuten, waar de hydroloog wellicht weken bezig zou zijn. De software levert bovendien de statistische gegevens die onontbeerlijk zijn om een kwantitatief oordeel te kunnen vellen over de betrouwbaarheid van de geoptimaliseerde parameters.

Het is aan de hydroloog om aan de hand van de resultaten van de optimalisatie het 'gekalibreerde model' al dan niet te accepteren. Eén van de beste beoordelingscriteria is de ruimtelijke c.q. temporele verdeling van de restfouten na optimalisatie. Zolang die niet voldoen aan de statistische uitgangspunten dient het model als niet geijkt te worden beschouwd. Het is dan opnieuw aan de hydroloog om de oorzaak daarvan op te sporen, en het model of de parameterkeuze te verbeteren. De betrouwbaarheid van de geoptimaliseerde parameters kan uiteindelijk, nadat een acceptabel restfoutenpatroon is verkregen, het best worden beoordeeld aan de hand van de covariantiematrix van de berekende parameters. Deze gegevens zijn van een dusdanig belang, dat we in de toekomst nauwelijks nog modelverslagen zullen kunnen maken zonder deze statistische onzekerheidsinformatie.

Gelukkig (voor de onderzoekers tenminste) blijven er altijd wel een aantal vragen en onduidelijkheden over. Voor zover we dit kunnen overzien, zullen de verdere ontwikkelingen van kalibratie-methodieken (of parameterschatting-methoden) zich voornamelijk op vier gebieden afspelen. Allereerst is daar het probleem van de weging van de verschillende soorten informatie, maar ook van gelijksoortige informatie. Hoe bijvoorbeeld om te gaan met metingen van grondwaterstanden die op korte afstand van elkaar (bijvoorbeeld rondom pompstations) zijn gedaan? Moeten die alle net zo zwaar wegen als de verspreide andere waarnemingen? Het lijkt ons duidelijk dat een goede geohydroloog een nieuwe waarnemingsput niet vlak bij een bestaande put zal plaatsen, omdat dat weinig nieuwe informatie zal opleveren. Op dezelfde gronden zou je bij de weging van de verschillende waarnemingen moeten kijken hoeveel extra informatie elke waarneming ten opzichte van de overige waarnemingen toevoegt. Er zijn methodieken om dat te doen, maar het gebruik daarvan is nog niet erg eenduidig (en duidelijk).

Ten tweede denken we, dat een deel van de ontwikkeling zich zal toespitsen op het gebruik van apriorische informatie in de kalibratie. Dat wil zeggen dat we (meestal zachte) informatie over de parameters hebben voor we met een parameterschatting beginnen. Alle hier gedemonstreerde methoden kunnen in principe rekening houden met deze apriorische informatie. Als we nu bijvoorbeeld te maken hebben met de uitkomst van pompproeven, dan is duidelijk wat de apriorische informatie is, en wat we ermee kunnen doen. Als we echter praten over beschikbare geologische informatie, en hoe we die kunnen vertalen naar bruikbare apriorische informatie voor de parameters in onze grondwatermodellen is dat minder duidelijk. Het eenduidig maken van die vertaalslag zal ook nog het nodige onderzoek vereisen.

Ten derde is er het probleem van het gebruik van verschillende soorten informatie. Het ligt voor de hand dat we over niet al te lange tijd bij de kalibratie van onze grondwatermodellen niet alleen gebruik maken van metingen van grondwaterstanden, maar ook van metingen van concentraties opgeloste stof in het grondwater. Nu is het één (de grondwaterstand) het gevolg van totaal andere processen dan het ander (de concentratie), zodat de 'waarde' van de verschillende waarnemingen ook anders zal zijn. Dat zal tot uitdrukking moeten komen in een verschillende weging van de verschillende waarnemingen. Hoe dat zal moeten gebeuren is ook nog niet eenduidig vastgesteld.

Tenslotte niet het minste probleem: de toetsing van het conceptuele model, waaronder bijvoorbeeld het probleem hoe de ruimtelijke verdeling van de te schatten parameters moet worden gedefinieerd. Er zijn bijvoorbeeld andere mogelijkheden dan de veel toegepaste zonering. Zo worden er thans methodieken ontwikkeld die uitgaan van een continue ruimtelijke verdeling van de te schatten parameters.

Bij alle nieuwe ontwikkelingen zal de Onderzoeksschool Hydrologie (OSH) een cruciale rol moeten spelen. Een deel van het onderzoek is al op gang; zie bijvoorbeeld de activiteiten van Chris te Stroet op de Technische Universiteit Delft. Vanuit de OSH zal, met ondersteuning van bijvoorbeeld organisaties als NWO (GOA) en STW, onderzoek op dit gebied moeten worden gestart. Wij hopen dat de organisaties die op het symposium vertegenwoordigd waren dergelijke onderzoeksvoorstellen van harte zullen ondersteunen.

Al die nieuwe ontwikkelingen laten onverlet dat de huidige stand van de techniek ons veel mogelijkheden biedt om een 'goede' kalibratie van onze grondwatermodellen uit te voeren. Wij willen nogmaals de hoop uitspreken dat het gebruik van die methoden in de praktijk weldra vanzelfsprekend zal zijn geworden.

Terminologie

Definitie van de verschillende termen en begrippen bij de kalibratie van grondwatermodellen

Model	Rekenprogramma met gegevens, ter nabootsing van een 'werkelijkheid'.
Verificatie	Aantonen dat het rekenprogramma dat doet waarvoor het gemaakt is.
Modelconcept	De manier waarop de 'werkelijkheid' in het model is geschematiseerd.
Modelfout	Afwijking van het modelresultaat ten opzichte van de 'werkelijkheid'. ¹
Doelfunctie	Kwantificering van de modelfout met behulp van metingen.
Systematische fout	Duidelijke ruimtelijke of temporele structuur binnen de modelfout.
Kalibreren (= ijken)	Het in brede zin aanpassen van het model door optimalisatie van parameters, het opsporen van systematische fouten, het verbeteren van het concept, etc.
Parameter-optimalisatie	Het minimaliseren van de — in de doelfunctie vastgelegde — modelfout door het aanpassen van parameters.
Gevoeligheidsanalyse	Vaststellen van de verandering van het modelresultaat ten gevolge van de verandering van een (eenheidshoeveelheid) parameterwaarde.
Betrouwbaarheidsanalyse	Kwantificeren van de betrouwbaarheid en de onderlinge afhankelijkheid van de geoptimaliseerde parameters in het gekalibreerde model.
Simulatie	Het rekenen met het model.
Toepassing	Het rekenen met het model voor het beoogde doel (vaak een voorspelling van een nog niet bestaande hydrologische situatie).

¹ Binnen de modelfout bestaan naar gelang de oorzaak of het karakter verschillende typeringen: meetfouten, conceptuele fouten, systematische fouten. Vaak wordt verondersteld dat de meetfout verwaarloosbaar klein is.

Validatie	Vaststellen dat het model 'goed' is en 'goede' voorspellingen kan doen. ²
Betrouwbaarheidsonderzoek toepassing	Kwantificeren van de te verwachten betrouwbaarheid van de toepassing (voorspelling).
Gekalibreerd model	Een model waar de hydroloog voldoende vertrouwen in heeft met het oog op de toepassing, kijkend naar o.a. de grootte en de structuur van de afwijkingen.

² Er bestaan in principe twee mogelijkheden om te valideren:

- a het simuleren van een andere (liefst afwijkende) periode, en
- b controle achteraf in hoeverre een voorspelling is uitgekomen ('post-audit', 'post-validatie').

In het eerste geval (2^e hydrologische periode) ontbreekt het vaak aan voldoende gegevens en bovendien is het verstandiger om ook de metingen van die periode in de kalibratie te betrekken. Post-validatie is zeer aan te bevelen, maar wordt in de praktijk zelden gedaan. Vaak wordt wel een evaluatie uitgevoerd van de opgetreden effecten, maar de resultaten (afwijking tussen voorspelde en opgetreden effecten) worden niet teruggekoppeld naar het gebruikte model.

Adressen

Drs. C.J. Hemker
Vrije Universiteit
Faculteit der Aardwetenschappen
De Boelelaan 1085
1081 HV Amsterdam
Tel: (020) 444 72 73
Fax: (020) 646 24 57
E-mail: hemk@geo.vu.nl

Drs. J.H. Hoogendoorn
Tauw Milieu bv
Postbus 133
7400 AC Deventer
Tel: (0570) 69 95 43
Fax: (0570) 69 97 75
E-mail: jho@tauw.nl

Ing. P.T.W.J. Kamps
Gemeentewaterleidingen
Vogelenzangseweg 21
2114 BA Vogelenzang
Tel: (023) 523 35 67
Fax: (023) 528 14 60

Ir. J.W. Kooiman
Kiwa Onderzoek en Advies
Postbus 1072
3430 BB Nieuwegein
Tel: (030) 606 96 83
Fax: (030) 606 11 65
E-mail: kooiman@kiwa.oa.nl

Dr.ir. W.J. de Lange
RIZA
Postbus 17
8200 AA Lelystad
Tel: (0320) 27 07 38
Fax: (0320) 24 92 18
E-mail:
W.dLange@RIZA.RWS.minvenw.nl

Prof. dr. ir. A. Leijnse
RIVM/LBG
Postbus 1
3720 BA Bilthoven
Tel: (030) 274 33 67
Fax: (030) 229 28 97
E-mail: A.Leijnse@rivm.nl

Ir. B. Minnema
NITG-TNO
Afdeling Geohydrologie
Postbus 6012
2600 JA Delft
Tel: (015) 269 71 60
Fax: (015) 256 48 00
E-mail: minnema@iag.tno.nl

Ir. T.N. Olsthoorn
Gemeentewaterleidingen
Vogelenzangseweg 21
2114 BA Vogelenzang
Tel: (023) 523 35 69
Fax: (023) 528 14 60
E-mail:
t.olsthoorn@gw.amsterdam.nl

Ir. H.J.M. Rolf
PWN
Postbus 5
2060 BA Bloemendaal
Tel: (023) 541 32 02
Fax: (023) 525 61 05

Prof. dr. ir. A. Stein

Landbouwwuniversiteit
Vakgroep Bodemkunde en
Geologie
Postbus 37
6700 AA Wageningen
Tel: (0317) 48 24 20
Fax: (0317) 48 24 19
E-mail:
Alfred.Stein@bodlan.beng.wau.nl

Ir. J.M.A. Streng

Gemeentewerken Rotterdam
Adviesbureau Geotechniek
Afdeling IGM
Postbus 6633
3002 AP Rotterdam
Tel: (010) 489 42 57
Fax: (010) 489 70 89
E-mail:
igliba@gw.gem-rotterdam.nl

Dr. ir. C.B.M. te Stroet

NITG-TNO
Afdeling Geohydrologie
Postbus 6012
2600 JA Delft
Tel: (015) 269 71 60
Fax: (015) 256 48 00
E-mail: stroet@iag.tno.nl

Ir. A.A. Veldhuizen

DLO-Staring Centrum
Postbus 125
6700 AC Wageningen
Tel: (0317) 47 42 94
Fax: (0317) 42 48 12
E-mail: A.A.Veldhuizen@sc.dlo.nl

Ir. P.E.V. van Walsum

DLO-Staring Centrum
Postbus 125
6700 AC Wageningen
Tel: (0317) 47 43 10
Fax: (0317) 42 48 12
E-mail:
P.E.V.vanWalsum@sc.dlo.nl

Dr. ir. W.J. Zaadnoordijk

IWACO
Postbus 8520
3009 AM Rotterdam
Tel: (010) 286 55 99
Fax: (010) 220 00 25
E-mail: wjzaadnoordijk@iwaco.nl

H. Boukes

Adviesburo Harry Boukes
Rosweijdelaan 29
3454 BL De Meern
Tel + fax: (030) 666 61 28
E-mail: H.Boukes@inter.nl.net

Drs. M.R. van der Valk

Postbus 61003
1005 HA Amsterdam
Tel + fax: (020) 683 66 28
E-mail: valm@xs4all.nl

