

Parameter-analyse module ten behoeve van het LIFE-instrumentarium Schelde estuarium

Functioneel ontwerp

P.G.J. ten Brummelhuis
M.R.L. Ouboter



waterloopkundig laboratorium | WL

Inhoudsopgave

Samenvatting	ii
1 Inleiding	1
2 Doelstelling	2
3 Specificatie van de parameter-analyse	3
3.1 Inleiding	3
3.2 Het Goodness-of-Fit criterium	3
3.3 De te analyseren parameterruimte	5
3.4 Het updaten van de 'vase'	6
3.5 Representatie van de onzekerheid	6
4 Methode van Price	7
4.1 Inleiding	7
4.2 Initialisatie van de 'vase'	7
4.3 Random trekking uit $\mathcal{P}$	7
4.4 Random trekking volgens een uniforme verdeling	8
4.5 Update van de 'vase'	9
4.6 Random trekking uit de 'vase'	10
5 Bepaling van de onzekerheid	11
5.1 Inleiding	11
6 Overzicht van de resultaten	13
6.1 Tabel 1: Beschrijving van de 'vase'	13
6.2 Tabel 2: Beschrijving van de parameter-ruimte	13
6.3 Beschrijving van de concentratie-ruimte	13
6.4 Beschrijving van de flux-ruimte	14
6.5 Presentatie van de uitvoer	14
Referenties	15
Lijst van gebruikte symbolen	16

Samenvatting

In 1991 heeft WL in opdracht van en in samenwerking met Rijkswaterstaat, RIKZ, in het kader van het project SAWES (Systeem Analyse WESTerschelde) het waterkwaliteitsmodel van het Schelde-estuarium opgeleverd. In 1992 is in het kader van het OPERAWES-project het SAWES-model gekoppeld aan het programmapakket SENECA. Daarmee ontstond de mogelijkheid parameter-analyses uit te voeren voor het SAWES-model. Bij een parameter-analyse gaat de gebruiker na met welke parameter-instellingen de veldwaarnemingen gereproduceerd kunnen worden bij de gehanteerde belastingen, waterbeweging en procesformuleringen. Parameter-analyse uitgevoerd met SENECA is in het kader van de SAWES-modellering een belangrijk middel gebleken om het inzicht in de samenhang tussen systeemgedrag en modellen te vergroten.

In het kader van het huidige LIFE-project Schelde-estuarium gaan de SAWES-modellen voorzien worden van de uitgebreide functionaliteit van het waterkwaliteitsmodel DELWAQ4. De modellen putten hun procesformuleringen dan uit een bibliotheek, die de grondslag vormt voor alle met DELWAQ4 uitgevoerde modelleringen.

Het onder SENECA brengen van DELWAQ4 zou een aanzienlijke aanpassing van de SENECA-omgeving vergen. Er is daarom gekozen om een prototype van een parameter-analyse-module te maken gebaseerd op de methode van Price, waar ook SENECA op is gebaseerd. Deze methode richt zich op het selecteren van een verzameling parameter-instellingen waarmee de veldwaarnemingen volgens een te definiëren criterium gereproduceerd kunnen worden. Op basis van de meest succesvolle runs bepaalt de methode een nieuw te evalueren parameter-instelling. De mate van succes van deze parameter-instelling in het reproduceren van de metingen wordt gekwantificeerd. Bij voldoende succes vervangt deze modelrun de minst succesvolle run uit de geselecteerde verzameling. Gaandeweg de procedure verbetert hierdoor de kwaliteit van de geselecteerde verzameling parameter-instellingen.

De gebruiker van de module definieert:

- de parameters die gevarieerd worden en de grenzen waarbinnen ze gevarieerd worden,
- de uitvoer-variabelen waarvoor meetgegevens beschikbaar zijn die gereproduceerd moeten worden,
- eventuele weegfactoren met behulp waarvan verschillende uitvoer-variabelen in verschillende mate worden meegewogen, en
- het aantal berekeningen dat moet worden uitgevoerd om een eveneens door te gebruiker te bepalen aantal te selecteren parameter-instellingen te vinden.

Als resultaat krijgt de gebruiker alle geselecteerde parameter-instellingen waarmee de metingen gereproduceerd worden in een tabel. Boven- dien wordt de variatie in berekende concentraties en berekende fluxen grafisch weergegeven. De variatie in concentraties is per definitie klein doordat die parameter-instellingen geselecteerd worden die de veldwaarnemingen in zekere mate reproduceren. De variatie in fluxen kan veel groter zijn. Zo kan een bepaalde concentratie zowel het gevolg zijn van het verschil tussen twee kleine fluxen als van het verschil tussen twee grote fluxen.

De resultaten van de parameter-analyse vergroten het inzicht in de samen- hang tussen het beschouwde watersysteem en het model. Daarnaast kunnen zij een maat geven voor de onzekerheid van de resultaten van maatregelen en scenario's. Waar de geselecteerde parameter-instellingen de 'huidige situatie' adequaat beschrijven, kunnen zij leiden tot een variatie in

voorspelde concentraties.

Dit rapport beschrijft het functioneel ontwerp van een prototype van een parameter-analyse-module. Op grond van de specificaties van het functioneel ontwerp wordt in een volgende fase, begin 1995, een detail-ontwerp opgesteld. Hierop aansluitend wordt een prototype van de module gemaakt en getest voor het LIFE-model, en de module wordt voorzien van een handleiding.

1 Inleiding

In 1991 heeft WL in opdracht van en in samenwerking met Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren, in het kader van het project SAWES (Systeem Analyse WESTerschelde), een waterkwaliteitsmodel van het Schelde-estuarium opgeleverd [1]. In 1992 is dit SAWES-model in het kader van het OPERAWES-project gekoppeld aan het pakket SENECA[5], dat ontwikkeld is door het toenmalige DIHO (nu NIOO-CEMO) in opdracht van Rijkswaterstaat. Daarmee is een stap gezet in de richting van een verdergaande operationalisering van het SAWES-waterkwaliteitsmodel tot een hulpmiddel bij analyses ten behoeve van beleidsvoorbereiding en -advisering.

In 1993 is er in LIFE-kader voor gekozen om voor de waterkwaliteitsmodellering in SAWES gebruik te gaan maken van DELWAQ4. Daarmee is de behoefte ontstaan om de functionaliteit van SENECA te kunnen gebruiken voor de analyse van parameters in DELWAQ4-modellen. Het kenmerkende verschil tussen het onder SENECA draaiende DELWAQ3.05 en DELWAQ4 is dat laatstgenoemde is voorzien van een zogenaamde proces-bibliotheek. Daarmee is het mogelijk op flexibele wijze een aantal in deze proces-bibliotheek voorkomende processen te selecteren en op te nemen in een DELWAQ4-model.

Omdat (een deel van) de functionaliteit van SENECA zeer waardevol is gebleken, is het van groot belang om binnen het LIFE-project ook te kunnen beschikken over een parameter-analyse module gebaseerd op de methode zoals geïmplementeerd in SENECA. Het onder SENECA(2.0) brengen van DELWAQ4 zou echter een aanzienlijke aanpassing van de SENECA-omgeving vergen. Daarom is in oktober 1994 door RIKZ, in de persoon van drs. B.J. Kater (brief RIKZ/AB-94.60119) in het kader van het project SCHOON, WL verzocht een offerte uit te brengen voor het ontwikkelen van een prototype van een dergelijke module. Op basis van deze offerte heeft RIKZ WL de opdracht vericend (opdrachtbonnr. 42943099, dd. 27 oktober 1994) voor het uitvoeren van fase 1a van dit voorstel, het maken van een functioneel ontwerp. Daarbij is tevens overeengekomen dat RIKZ en WL dit project gezamenlijk zullen financieren.

Dit rapport is het eindproduct van fase 1a en bevat een gedetailleerde beschrijving van het functioneel ontwerp van de parameter-analyse module. Fase 1a is uitgevoerd door dr. ir. P.G.J. ten Brummelhuis en drs. M.R.L. Ouboter, met medewerking van drs. B.J. Kater (RIKZ), terwijl de kwaliteitscontrole is verzorgd door ir. L. Postma.

2 Doelstelling

Het uitbreiden van het LIFE-instrumentarium met een parameter-analyse module heeft ten doel de gebruiker van DELWAQ4 in staat te stellen diverse proces-parameters en schalingsfactoren voor belastingen te bepalen zodat, bij gegeven waterbeweging, slibtransport en procesformuleringen, een bepaalde set veldmetingen zo goed mogelijk gereproduceerd wordt.

Met deze functionaliteit wordt beoogd bij te dragen aan het systeem-inzicht en de gebruiker een middel te bieden om de onzekerheid in de belastings- en proces-fluxen vast te stellen op grond van specifieke systeemkennis. Op basis hiervan kan vervolgens de onzekerheid worden bepaald in concentraties die het resultaat zijn van scenario-berekeningen.

De parameter-analyse wordt als een optie aan DELWAQ4 toegevoegd, te gebruiken nadat het betreffende DELWAQ4-model goed gedefinieerd en gespecificeerd is. Daarmee wordt bedoeld dat de model-invoer en de selectie van processen uit de proces-bibliotheek worden verondersteld reeds op elkaar te zijn afgestemd, m.a.w. dat het model geschikt is voor verwerking via DELWAQ2.

3 Specificatie van de parameter-analyse

3.1 Inleiding

De specificatie van de parameter-analyse omvat:

1. Definitie van het *GoF*-criterium,
2. Definitie van de te analyseren parameterruimte $\mathcal{P}$,
3. Specificatie van de manier waarop de 'vase' ge-update wordt, en
4. Specificatie van de manier waarop onzekerheid wordt gerepresenteerd.

Deze aspecten zullen in de volgende secties nader uitgewerkt worden.

3.2 Het Goodness-of-Fit criterium

In het uitvoer-blok (blok # 9) van een DELWAQ4-invoerfile (<NAME>.INP) staan de grootheden (concentraties en procesfluxen) vermeld die, na de DELWAQ2-berekening, als uitvoer in een *.HIS en een *.MAP-file worden weggeschreven. Vanuit deze <NAME>.INP-file kan dus simpel de verzameling van stoffen worden afgeleid (*S1*) waarvan de berekende concentraties na de DELWAQ4-simulatie verder verwerkt kunnen worden (zoals vergelijking met gemeten concentraties). Uit *S1* wordt vervolgens een deelverzameling (*S2*) bepaald van stoffen waarvan in de DATA-BASE concentratie-metingen beschikbaar zijn. Check daarbij op:

- ▷ stofnaam,
- ▷ plaats waar de metingen geregistreerd zijn, en
- ▷ begin- en eindtijdstip van de periode waarover de metingen beschikbaar zijn.

De concentraties van de stoffen uit *S2* zijn dus in principe geschikt als variabelen op basis waarvan een *GoF*-criterium kan worden gedefinieerd. De DELWAQ4-gebruiker kan tenslotte uit *S2* weer een aantal stoffen selecteren waarvan het residue (= het verschil tussen berekende en gemeten concentratie) ook daadwerkelijk bijdraagt aan het *GoF*-criterium.

Specificeer daartoe:

- NC_{max} totaal aantal stoffen,
- Voor iedere stof:
 - ▷ ic identificatie van stof (stofnaam)
 - ▷ $x_m^{(ic)}$ locatie(s) waar de concentratie (ic) gemeten wordt
 - ▷ $N_{win}^{(ic)}$ de lengte van het time-window waarover de concentratie wordt gemiddeld (uitgedrukt in termen van Δt)
 - ▷ $exp(ic)$ de exponent van het absolute verschil tussen berekende en gemeten concentratie in de bijdrage van de betreffende stof aan het *GoF*-criterium
 - ▷ $w(ic)$ weegfactor voor de bijdrage van de betreffende term aan het *GoF*-criterium.

Het *GoF*-criterium wordt nu als volgt gedefinieerd:

$$GoF(.) = \sum_{i=1}^{NC_{max}} GoF^{(ic)} \quad (1)$$

met

$$GoF^{(ic)} = \sum_m \frac{w^{(ic)}}{NW_{max}^{(ic)}} \sum_{w=1}^{NW_{max}^{(ic)}} \left| (\bar{z}_c^{(ic)})_{m,w} - \bar{c}_{m,w}^{(ic)} \right|^{exp^{(ic)}} \quad (2)$$

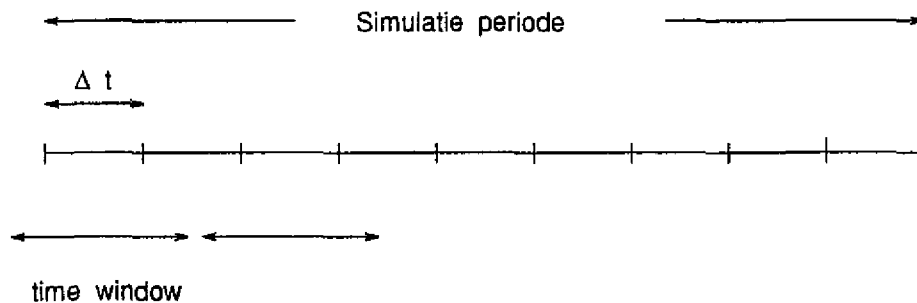
$(\bar{z}_c^{(ic)})_{m,w}$ = (het gemiddelde van $(z_c)^{(ic)}$ over het w -de time-window, in $x_m^{(ic)}$)

$$\bar{c}_{m,w}^{(ic)} = \frac{1}{N_{win}^{(ic)}} \sum_{n=1}^{N_{win}^{(ic)}} c_{NW_{win}^{(ic)}(w-1)+n}^{(ic)}(x_m^{(ic)})$$

(het gemiddelde van $c^{(ic)}$ over het w -de time-window, in $x_m^{(ic)}$)

Hierbij is $NW_{max}^{(ic)}$ het aantal disjuncte time-windows (zie Figuur 1) zodat

$$N_{win}^{(ic)} * NW_{max}^{(ic)} * \Delta t = \text{de totale simulatie-periode} \quad (3)$$



Figuur 1: Verdeling van de tijd ($NW_{max}^{(ic)} = 5$, $N_{win}^{(ic)} = 2$)

Opmerkingen:

- In deze versie van de parameter-analyse module zal het *GoF*-criterium alleen gebaseerd worden op (verschillen tussen berekende en gemeten) concentraties, niet op proces-fluxen.
- De weegfactoren $w^{(ic)}$ worden voorsnag als constanten gespecificeerd. Een eventuele afhankelijkheid van $w^{(ic)}$ van de correlatie-coëfficiënt tussen de berekende en de gemeten concentraties (resp. $c^{(ic)}$ en $(z_c)^{(ic)}$) is niet in deze versie geïmplementeerd.

3.3 De te analyseren parameterruimte

Door de pre-processor DELWAQ1P wordt de <NAME>.INP-file gescanned op stofnamen, en worden vervolgens alle processen in de proces-bibliotheek geselecteerd die van invloed zijn op de concentratie van die stof. Aangezien we uitgaan van een volledige en correct gespecificeerde DELWAQ4-invoer is in de <NAME>.LSP-file een volledig overzicht van alle actieve processen in de DELWAQ4-berekening beschikbaar. Hieruit valt ook de verzameling van proces-parameters af te leiden die in de actieve processen voorkomen (= $S3$).

Het *GoF*-criterium (als een maat voor de overeenstemming tussen metingen en model-resultaten) is dan, in principe, een functie van de volgende parameters:

- De schalingsfactoren voor de belastingen (waste-loads),
- De proces-parameters in de actieve processen (= $S3$).

De gebruiker selecteert vervolgens uit bovenstaande verzameling die parameters, alsmede een interval $[p_{min}^{(ind)}, p_{max}^{(ind)}]$ waarbinnen deze geacht worden te kunnen variëren, die we als de argumenten van het *GoF*-criterium beschouwen. Deze selectie houdt dus in dat een hyperkubus $\mathcal{P}$ in de N_{par} - dimensionale parameter-ruimte wordt gedefinieerd als de verzameling van alle toegelaten parameter-combinaties. Specificatie van de te analyseren parameter-ruimte omvat derhalve:

- N_{par} = $N_{proc.par} + N_{load.sc}$, de dimensie van de te analyseren parameterruimte,
- $N_{proc.par}$ aantal proces-parameters,
- $N_{load.sc}$ aantal schalingsfactoren,
- Voor iedere proces-parameter:
 - ▷ ind index van de component in de parameter-combinatie
 - ▷ ip parameter-naam
 - ▷ $p_{min}^{(ind)}$ minimum van $p^{(ind)}$ in $\mathcal{P}$
 - ▷ $p_{max}^{(ind)}$ maximum van $p^{(ind)}$ in $\mathcal{P}$
- Voor iedere schaalfactor:
 - ▷ ind index van de component in de parameter-combinatie
 - ▷ $iloc$ locatie van de lozing
 - ▷ iw naam van de geloosde stof
 - ▷ $p_{min}^{(ind)}$ minimum van $p^{(ind)}$ in $\mathcal{P}$
 - ▷ $p_{max}^{(ind)}$ maximum van $p^{(ind)}$ in $\mathcal{P}$

De gebruiker dient deze specificatie van stoffen en parameters in de vorm van een ASCII-file volgens een voorgeschreven format aan te leveren. Voordat de parameter-analyse wordt gestart zullen checks worden uitgevoerd op het voorkomen van de opgegeven stof-, parameter- en

locatienamen in de DELWAQ4-invoer en (voor wat betreft de namen van stoffen waarop het Goodness-of-Fit criterium is gebaseerd) in de metingen DATA-BASE.

3.4 Het updaten van de 'vase'

In deze versie van de parameter-analyse module is alleen het updaten van de 'vase' volgens de methode van Price (zie hoofdstuk 3) geïmplementeerd. Daartoe dienen de volgende grootheden gespecificeerd te worden:

- ▷ N_{vase} aantal parameter-combinaties in de 'vase'
- ▷ N_{ran} omvang van de random trekking uit de 'vase'
- ▷ N_{sim} totaal aantal DELWAQ4-simulaties
- ▷ $STORE_{result}$ 0/1-switch voor het wel/niet opslaan van de DELWAQ4-resultaten behorende bij parameter-combinaties in de 'vase'

Opmerking:

- Het is relatief eenvoudig om variaties op de methode van Price te implementeren, zie ook 4.5.
- De switch $STORE_{result}$ is geïntroduceerd om voor grootschalige DELWAQ4-toepassingen niet alle DELWAQ4-resultaten te hoeven bewaren die behoren bij de parameter-combinaties in de 'vase'. Deze DELWAQ4-resultaten zijn nodig voor het afleiden van de onzekerheid die echter pas afgeleid kan worden nadat de resulterende 'vase' is bepaald. Het alternatief is dat, na bepaling van de resulterende 'vase', nogmaals N_{vase} DELWAQ4-simulaties worden uitgevoerd die dan onmiddellijk verwerkt kunnen worden en niet meer opgeslagen hoeven worden.

3.5 Representatie van de onzekerheid

In deze versie van de parameter-analyse module is gekozen voor een representatie van de onzekerheid in termen van min-max waarden zodat zowel in de parameter-ruimte, in de concentratie-ruimte als in de flux-ruimte een hyper-kubus gedefinieerd kan worden.

Opmerking:

- De onzekerheid kan pas afgeleid worden nadat het iteratief updaten van de 'vase' is voltooid. Daardoor kunnen zonder veel moeite andere opties voor onzekerheids-representatie in een later stadium worden toegevoegd, zoals het representeren van de onzekerheid aan de hand de spreiding rond een gemiddelde.

4 Methode van Price

4.1 Inleiding

De methode van Price is er op gericht binnen de hyper-kubus $\mathcal{P}$ een zog. 'vase' te creëren van parameter-combinaties die de laagste GoF -waarden opleveren. Deze 'vase' (met een van tevoren gedefinieerd aantal elementen) wordt geïnitieerd via random trekking uit $\mathcal{P}$ en daarna iteratief ge-update. De methode is erop gebaseerd dat door het iteratieve updaten van de 'vase' de parameter-combinaties in de 'vase' zich zullen clusteren rond de minima van het GoF -criterium. Op basis van de resulterende 'vase' kan dan vervolgens weer een hyper-kubus worden geconstrueerd, echter van (veel) geringer afmeting dan $\mathcal{P}$.

4.2 Initialisatie van de 'vase'

1. Trek random, uitgaande van een uniforme verdeling, N_{vase} parameter-combinaties : $\{\underline{p}_i^{vase} \in \mathcal{P} \mid i = 1, \dots, N_{vase}\}$ (zie 4.3) (N.B.: $\underline{p}_i^{vase} = [\dots, p_i^{(ind)}, \dots]$),
2. Voer voor iedere $\underline{p}_i^{vase}$ een DELWAQ4-simulatie uit en bepaal $GoF(\underline{p}_i^{vase})$
3. Bepaal

$$GoF_{max} = \text{maximum } GoF(\underline{p}_i^{vase}), \quad i = 1, \dots, N_{vase} \quad (4)$$

4. Definieer $\underline{p}_{i0}^{vase}$ middels $GoF(\underline{p}_{i0}^{vase}) = GoF_{max}$.
5. Indien $STORE_{result} = \text{TRUE}$ voorzie de DELWAQ4-uitvoerfiles van een label zodat deze kunnen worden herkend als behorend bij $\underline{p}_i$ uit de 'vase'

De 'vase' wordt voorgesteld als een verzameling triplets:

$$'vase' = \{(i, \underline{p}_i^{vase}, GoF(\underline{p}_i^{vase})) \mid i = 1, \dots, N_{vase}\} \quad (5)$$

4.3 Random trekking uit $\mathcal{P}$

Voor het initialiseren van de 'vase' wordt gebruik gemaakt van de zog. Latin hypercube sampling methode (zie o.a. [2]). Voor iedere afzonderlijke parameter $p^{(ind)}$ wordt het interval $[p_{min}^{(ind)}, p_{max}^{(ind)}]$ in N_{vase} deelintervallen van gelijke lengte verdeeld. In elk interval wordt random een waarde getrokken uitgaande van een uniforme verdeling over deze deelintervallen. Dit resulteert in N_{vase} waarden:

$$p_j^{(ind)}, \quad j = 1, \dots, N_{vase} \quad (6)$$

$p_j^{(ind)}$ is dus de waarde van $p^{(ind)}$ die random getrokken is uit het j -de deelinterval van $[p_{min}^{(ind)}, p_{max}^{(ind)}]$:

$$[p_{min}^{(ind)} + (j-1) \frac{p_{max}^{(ind)} - p_{min}^{(ind)}}{N_{vase}}, p_{min}^{(ind)} + j \frac{p_{max}^{(ind)} - p_{min}^{(ind)}}{N_{vase}}] \quad (7)$$

Vervolgens worden de getrokken waarden van de eerste parameter random gekoppeld aan random getrokken waarden van de tweede parameter. Deze paren worden weer gekoppeld aan random getrokken waarden van de derde parameter etc. tot en met de N_{par} -de parameter zodat uiteindelijk N_{vase} parameter-combinaties ontstaan die samen de initiële 'vase' vormen. Iedere getrokken waarde $p_j^{(ind)}$ van de parameter $p^{(ind)}$ wordt hierbij slechts eenmaal gebruikt. In pseudo-taal:

```
FOR i = 1, Nran DO
.   FOR (ind) = 1, Npar DO
.       j = random trekking uit [1, 2, ..., Nvase - i + 1]
.       (ind)-de component van  $p_i^{vase} = p_j^{(ind)}$ 
.       FOR index = j, Nvase - i + 1 DO  $p_{index}^{(ind)} = p_{index+1}^{(ind)}$ 
.       ENDFOR
.   ENDFOR
ENDFOR
```

4.4 Random trekking volgens een uniforme verdeling

Bij een random trekking van een reëel getal x uit het interval $[a, b]$ volgens een uniforme verdeling wordt gebruik gemaakt van een procedure die random een reëel getal uit het interval $[0, 1]$ genereert. Enkele (standaard)-procedures staan beschreven in Numerical Recipes [3].

$$x = a + (b - a) * RANX(seed) \quad (8)$$

Indien uit de verzameling $\{n, n+1, \dots, N\}$ random een integer j getrokken moet worden vinden we

$$j = n + INT((N - n) * RANX(seed)) \quad (9)$$

4.5 Update van de 'vase'

De methode van Price is gebaseerd op het iteratief updaten van de 'vase' teneinde GoF_{max} te minimaliseren. In pseudo-taal:

FOR iteration = 1, .., N_{sim} DO

1. Trek random N_{ran} parameter-combinaties $\{p_1, \dots, p_{N_{ran}}\}$ uit de 'vase', uitgaande van een uniforme verdeling (zie 3.6)
2. Bepaal aan de hand hiervan een nieuwe parameter-combinatie $p_{i_{new}}$ volgens

$$p_{i_{new}} = \left\{ \frac{2}{N_{ran}-1} \sum_{i=1}^{N_{ran}-1} p_i \right\} - p_{N_{ran}} \quad (10)$$

Opmerking:

- Volgens de oorspronkelijke methode van Price (zie [4]) is $N_{ran} = N_{par} + 1$. Hier is gekozen voor een iets algemenere opzet en kunnen N_{ran} en N_{par} onafhankelijk van elkaar worden voorgeschreven.
- Andere opties om $p_{i_{new}}$ te bepalen kunnen in een volgende versie opgenomen worden.

3. IF $p_{i_{new}} \ni \mathcal{P}$ THEN GOTO 1. ELSE GOTO 4.
4. Voer een DELWAQ4-simulatie uit en bepaal $GoF(p_{i_{new}})$,

IF $GoF(p_{i_{new}}) < GoF_{max} = GoF(p_{i_0}^{vase})$

. THEN

. $p_{i_0}^{vase} = p_{i_{new}}$

. $GoF(p_{i_0}^{vase}) = GoF(p_{i_{new}})$

5. . Bepaal i_0 zodanig dat

. $GoF(p_{i_0}^{vase}) = \max \{GoF(p_i^{vase}) | p_i^{vase} \in \text{ge-update 'vase'}\}$

. IF STORE $result = \text{TRUE}$

. THEN voorzie DELWAQ4-uitvoerfiles van een label i_0

ENDFOR

4.6 Random trekking uit de 'vase'

In pseudo-taal:

```
FOR  $j = 1, \dots, N_{ran}$  DO
.    $i_j = 1 + INT(N_{vase} * RANX(seed))$ 
.   IF  $i_j$  nog niet getrokken
.       THEN  $p_j = p_{i_j}$ 
.       ELSE  $j = j - 1$ 
ENDFOR
```

5 Bepaling van de onzekerheid

5.1 Inleiding

Het doel van de parameter-analyse is niet alleen het bepalen van de 'vase' maar veeleer het afleiden van een maat voor de onzekerheid in de concentraties en de proces-fluxen in relatie tot de onzekerheid in de afzonderlijke parameters. Doordat de 'vase' is bepaald op basis van verschillen tussen berekende en gemeten concentraties zal de onzekerheid in de concentraties per definitie relatief klein zijn. Dit hoeft echter niet te gelden voor de onzekerheid in de proces-fluxen.

Een maat voor de onzekerheid in de concentraties en de proces-fluxen kan worden afgeleid op basis van de berekende concentraties en proces-fluxen die corresponderen met de parameter-combinaties in de resulterende 'vase'. Dit houdt in dat het eerst na het voltooiën van het updaten van de 'vase' de genoemde onzekerheid (hier: de minimale en maximale waarden) afgeleid kan worden. Indien middels de switch `STORE_result` is aangegeven dat de DELWAQ4-uitvoerfiles, behorende bij een parameter-combinatie $\underline{p}_i$ in de 'vase', voorzien zijn van een label waarmee de relatie met $\underline{p}_i$ is vastgelegd, is het restoren van deze uitvoer voldoende om de onzekerheid te bepalen. Voor parameter-analyse in grootschalige DELWAQ4-toepassingen kan deze aanpak echter leiden tot geheugencapaciteitsproblemen. Een alternatief voor de opslag van de genoemde DELWAQ4-uitvoer is het, na de resulterende 'vase' bepaald te hebben, opnieuw uitvoeren van N_{vase} DELWAQ4-simulaties. Doordat het nu alleen DELWAQ4-simulaties betreft die corresponderen met parameter-combinaties in de resulterende 'vase' kan de DELWAQ4-uitvoer direct verwerkt worden inzake de bijdrage aan de onzekerheid in de concentraties en de proces-fluxen. Opslag is in dat geval niet meer nodig.

In pseudo-taal:

1. Initialiseer de minimum-, maximum- en gemiddelde waarden van de afzonderlijke parameters, van de concentraties en de proces-fluxen op 0.
2. FOR $i = 1, \dots, N_{vase}$ DO

IF `STORE_result` = TRUE

 - a. . THEN restore de DELWAQ4-uitvoer die correspondeert met $\underline{p}_i$
 - . ELSE voer DELWAQ4-simulatie uit met $\underline{p}_i$

FOR $(ind) = 1, \dots, N_{par}$ DO

 - . IF $p_i^{(ind)} > p_{max}^{(ind)}$ THEN $p_{max}^{(ind)} = p_i^{(ind)}$
 - b. . IF $p_i^{(ind)} < p_{min}^{(ind)}$ THEN $p_{min}^{(ind)} = p_i^{(ind)}$
 - . $p_{av}^{(ind)} = p_{av}^{(ind)} + \frac{1}{N_{vase}} p_i^{(ind)}$
 ENDFOR

```

FOR alle (ic) DO
.   FOR m = 1, ..., #segmenten DO
.     FOR k = 1, ..., #tijdstappen DO
.       IF  $c^{(ic)}(\underline{p}_i, x_m, t_k) > c_{max}^{(ic)}(x_i, t_k)$ 
.         THEN  $c_{max}^{(ic)}(x_m, t_k) = c^{(ic)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.       IF  $c^{(ic)}(\underline{p}_i, x_m, t_k) < c_{min}^{(ic)}(x_m, t_k)$ 
c.   .     THEN  $c_{min}^{(ic)}(x_m, t_k) = c^{(ic)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.        $c_{av}^{(ic)}(x_m, t_k) = c_{av}^{(ic)}(x_m, t_k) + \frac{1}{N_{vase}} c^{(ic)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.     ENDFOR
.   ENDFOR
ENDFOR
FOR alle (if) DO
.   FOR m = 1, ..., #segmenten DO
.     FOR k = 1, ..., #tijdstappen DO
.       IF  $\phi^{(if)}(\underline{p}_i, x_m, t_k) > \phi_{max}^{(if)}(x_m, t_k)$ 
.         THEN  $\phi_{max}^{(if)}(x_m, t_k) = \phi^{(if)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.       IF  $\phi^{(if)}(\underline{p}_i, x_m, t_k) < \phi_{min}^{(if)}(x_m, t_k)$ 
d.   .     THEN  $\phi_{min}^{(if)}(x_m, t_k) = \phi^{(if)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.        $\phi_{av}^{(if)}(x_m, t_k) = \phi_{av}^{(if)}(x_m, t_k) + \frac{1}{N_{vase}} \phi^{(if)}(\underline{p}_i, x_m, t_k)$ 
.     ENDFOR
.   ENDFOR
ENDFOR
ENDFOR

```

Met deze resultaten kunnen dan een hyper-kubus in de parameter-ruimte (5.2), in de concentratie-ruimte (5.3) en in de proces-flux-ruimte (5.4) gedefinieerd worden.

Opmerking

- Bij deze stap van 'vase' naar hyper-kubus geldt dat deze hyper-kubus ook delen van $\mathcal{P}$ omvat die tijdens het iteratie-proces zijn verworpen.

6 Overzicht van de resultaten

6.1 Tabel 1: Beschrijving van de 'vase'

$$\triangleright \{(i, \underline{p}_i^{vase}, GoF(\underline{p}_i^{vase})) | i = 1, \dots, N_{vase}\} \quad (11)$$

6.2 Tabel 2: Beschrijving van de parameter-ruimte

$$\triangleright \{(ind, ip, p_{av}^{(ind)}, p_{min}^{(ind)}, p_{max}^{(ind)}) | ind = 1, \dots, N_{proc.par}\} \quad (12)$$

of

$$\triangleright \{(ind, iloc, iw, p_{av}^{(ind)}, p_{min}^{(ind)}, p_{max}^{(ind)}) | ind = N_{proc.par} + 1, \dots, N_{par}\} \quad (13)$$

met

ind index van de component in de parameter combinatie

ip parameter-naam

iloc locatie van de lozing

iw naam van de geloosde stof

$p_{av}^{(ind)}$ gemiddelde $\{p_i^{(ind)} | i = 1, \dots, N_{vase}\} = \frac{1}{N_{vase}} \sum_{i=1}^{N_{vase}} p_i^{(ind)}$

$p_{min}^{(ind)}$ minimum $\{p_i^{(ind)} | i = 1, \dots, N_{vase}\}$

$p_{max}^{(ind)}$ maximum $\{p_i^{(ind)} | i = 1, \dots, N_{vase}\}$

6.3 Beschrijving van de concentratie-ruimte

Voor alle concentraties van stoffen (in totaal NC_{max} , aangeduid met (ic)):

$$\triangleright \{c_{max}^{(ic)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (14)$$

$$\triangleright \{c_{min}^{(ic)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (15)$$

$$\triangleright \{c_{av}^{(ic)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (16)$$

6.4 Beschrijving van de flux-ruimte

Voor alle proces-fluxen (in totaal #processen, aangeduid met (if)):

$$\triangleright \{\phi_{max}^{(if)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (17)$$

$$\triangleright \{\phi_{min}^{(if)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (18)$$

$$\triangleright \{\phi_{av}^{(if)}(x_m, t_k) | m = 1, \dots, \#segmenten, k = 1, \dots, \#tijdstappen\} \quad (19)$$

6.5 Presentatie van de uitvoer

De uitvoer van de parameter-analyse module omvat:

- ▷ Een beschrijving van de inhoud van de resulterende 'vase' in tabelvorm door de triplets die in de vgl. (11) en (12) zijn gedefinieerd.
- ▷ Een beschrijving van de parameter-ruimte in tabelvorm met daarin de minimale, gemiddelde en maximale waarden van de parameter-componenten behorend bij de parameter-combinaties in de resulterende 'vase', zie vgl. (13).
- ▷ Een grafische weergave van de concentratie-ruimte in de vorm van een trajectorie van de gemiddelde concentraties (zie vgl. (16)) met een onzekerheidsmarge bepaald door de minimale en maximale concentraties, zie vgl. (14) en (15).
- ▷ Een grafische weergave van de proces-flux ruimte in de vorm van een trajectorie van de gemiddelde proces-fluxen (zie vgl. (19)) met een onzekerheidsmarge bepaald door de minimale en maximale proces-fluxen, zie vgl. (17) en (18).

Referenties

[1]

P.M.A. Boderie, M.R.L. Ouboter; Optimalisering van het waterkwaliteitsmodel Schelde-estuarium, OPERAWES-nota 1a, WL-rapport T941, 1992.

[2]

R.L. Iman, J.H. Helton; *An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models*, Risk Analysis, vol. 8, pp.71-90, 1988.

[3]

W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery; *Numerical Recipes in Fortran, The art of scientific computing*, Cambridge University Press, 1992.

[4]

W.L. Price; *A controlled random search procedure for global optimization*, The Computer Journal, vol. 20 no. 4, pp.367-370, 1976.

[5]

H. Scholten, B.J. de Hoop, P.M.J. Herman; *SENECA 1.2 manual*, DIHO en RWS/DGW, 1990

Lijst van gebruikte symbolen

ic	id. stof (stofnaam)
if	id. proces-flux
$iloc$	lozings-locatie
ind	index in parameter-combinatie
ip	id. parameter (parameter-naam)
iw	id. stof (stofnaam)
$c^{(ic)}$	concentratie van stof ic
$c_{max}^{(ic)}(x_m, t_k)$	maximum van $c^{(ic)}(x_m, t_k)$ behorende bij parameter-combinaties in de 'vase'
$c_{min}^{(ic)}(x_m, t_k)$	idem, minimum
$c_{av}^{(ic)}(x_m, t_k)$	idem, gemiddelde
$exp(ic)$	exponent van het absolute verschil tussen berekende en gemeten concentraties van stof (ic) in het GoF -criterium
GoF	Goodness-of-Fit criterium
$GoF^{(ic)}$	bijdrage van concentratie (ic) aan GoF -criterium
NC_{max}	totaal aantal stoffen
$NW_{max}^{(ic)}$	aantal disjuncte time-windows
N_{par}	dimensie van de te analyseren parameterruimte $\mathcal{P}$
N_{ran}	omvang van de random trekking uit de 'vase'
N_{sim}	het totaal aantal DELWAQ4-simulaties
N_{vase}	omvang van de 'vase'
$N_{win}^{(ic)}$	de lengte van het time-window waarover de concentratie wordt gemiddeld, uitgedrukt in Δt
p_i	$[....., p_i^{(ind)},]$
$p_{j_{new}}$	parameter-combinatie, berekend na random trekking uit 'vase'
$p_{av}^{(ind)}$	gemiddelde van $p^{(ind)}$ in de 'vase'
$p_{min}^{(ind)}$	idem, minimum
$p_{max}^{(ind)}$	idem, maximum
$\mathcal{P}$	N_{par} -dimensionale parameter-ruimte
$w(ic)$	weegfactor voor de bijdrage van stof (ic) aan het GoF -criterium
$x_m^{(ic)}$	plaatscoördinaat van locatie(s) van concentratie (ic) gemeten wordt
Δt	uitvoer-tijdstap in DELWAQ4
$\phi^{(if)}$	procesflux (if)
$\phi_{max}^{(if)}(x_m, t_k)$	maximum van $\phi^{(if)}(x_m, t_k)$ behorende bij parameter-combinaties in de 'vase'
$\phi_{min}^{(if)}(x_m, t_k)$	idem, minimum
$\phi_{av}^{(if)}(x_m, t_k)$	idem, gemiddelde
Δt	uitvoer-tijdstap in DELWAQ4