

Vloeiend modelleren in het waterbeheer

Handboek Good Modelling Practice

GMP is een project in het kader van AQUEST

STOWA-rapport 99-05

Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036

ISBN-nr 90-5773-056-1

Auteurs:

ir. R.H. van Waveren (Projectleider Rijkswaterstaat)

ir. S. Groot (WL | Delft Hydraulics, Projectleider Consortium)

drs. H. Scholten (Team lid LUW, Hoofdauteur Deel I)

dr.ir. F.C. van Geer (Team lid NITG-TNO)

dr. J.H.M. Wösten (Team lid SC-DLO)

ir. R.D. Koeze (Team lid WL | Delft Hydraulics)

ir. J.J. Noort (Waarnemer STOWA)



wl | delft hydraulics



**LUW – Applied Computer
Science Group**



**Netherlands Institute of
Applied Geoscience TNO**
National Geological Survey



DLO - Staring Centrum

stowa



RWS - RIZA

Dit Handboek GMP mag vrij gebruikt en vermenigvuldigd worden, mits correcte bronvermelding plaatsvindt: STOWA/RIZA, 1999, Vloeiend Modelleren in het Waterbeheer, Handboek Good Modelling Practice; STOWA-rapport 99-05, Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036, ISBN-nr. 90-5773-056-1.

Extra exemplaren van dit rapport zijn te bestellen à f 25,- per stuk bij:

- SDU, afdeling SEO/RIZA, Postbus 20014, 2500 EA Den Haag,
Tel. 070-3789783, Email: mlget@sdu.nl. Betaling na levering; een acceptgiro wordt bijgevoegd.
- Hageman Verpakkers BV, Postbus 281, 2700 AC Zoetermeer, o.v.v. ISBN- of bestelnummer en een duidelijk afleveradres.

Dit Handboek is tevens te vinden en te downloaden op het Internet:
<http://waterland.net/riza/aquest/projecten/modellen/gmp.html>.

Vloeiend modelleren in het waterbeheer

Handboek Good Modelling Practice

Dit Handboek bevat de volgende onderdelen:

- Voorwoord
- Introductie
- Afbakening
- Begrippenlijst en Begrippenkader
- Deel 1: Stappenplan, met apart:
 - Checklist en Stroomschema
 - Formulieren
- Deel 2: Valkuilen en gevoeligheden
- Literatuur
- Bijlagen
 - Schalen
 - Data-assimilatie
- Diskette met daarop de formulieren

De auteurs willen het Handboek graag dynamisch houden, zodat het Handboek niet alleen vóór modelleurs is, maar ook ván modelleurs. Alle gebruikers wordt dan ook verzocht hun ervaringen, voorstellen voor verbeteringen en ander commentaar door te geven op onderstaand adres, zodat het kan worden verwerkt in de volgende versie.

Rijkswaterstaat-RIZA
t.a.v. Harold van Waveren
Postbus 17
8200 AA Lelystad
email: aquest@riza.rws.minvenw.nl

Voorwoord

Voorwoord

Op 4 februari 1997 heeft in het kader van Aquest een bijeenkomst plaatsgevonden waarin een Standaard Raamwerk voor modellen in het Nederlandse waterbeheer ter discussie stond. Achterliggend idee is dat een grote efficiency-winst te halen is door de vele afzonderlijke ontwikkelingen die plaatsvinden op dit gebied op elkaar af te stemmen of wellicht te integreren. Een belangrijk deel van de bij het Nederlandse waterbeheer betrokken partijen zat hierbij rond de tafel (Rijkswaterstaat, Provincies, Waterschappen, STOWA, RIVM, Staring Centrum, NITG-TNO en diverse ingenieursbureaus die op dat moment trekker waren van één van de LWI-programma's (WL | DELFT HYDRAULICS, DHV, EDS en Aquasense/ECOSYS).

Tijdens deze bijeenkomst hebben alle betrokkenen de intentie uitgesproken om ten aanzien van een Standaard Raamwerk voor modellen intensiever te willen gaan samenwerken en is afgesproken het overleg te continueren. Dit heeft geresulteerd in de oprichting van een drietal werkgroepen: 'Generieke Tools', 'Good Modelling Practice (GMP)' en 'IT-koppeling van modellen'. De werkgroep Generieke Tools heeft een inventarisatie uitgevoerd naar de tools die in Nederland (en in het buitenland) beschikbaar zijn als bouwstenen voor een Standaard Raamwerk voor modellen. Deze inventarisatie is inmiddels afgerond en onlangs is gestart met de verkenning van de technische haalbaarheid van de bouw van het Standaard Raamwerk, dat overigens onlangs is omgedoopt tot Standaard Raamwerk Water (SRW). Hiervoor wordt een IT-architectuur opgezet en een technische beschrijving van de interfaces gegeven.

De werkgroep IT-koppeling van modellen is formeel geen werkgroep onder het Standaard Raamwerk Water, maar een al bestaande groep die zich bezig hield met het LWI-project 'Architectuur ontwerp complexe modelsystemen'. Centraal staat hier de koppeling van de complexe 2D/3D-hydrodynamische modellen SIMONA van RWS en Delft-2D/3D van WL|DELFT HYDRAULICS. Het LWI-project is inmiddels afgerond, en de samenwerkende partijen zijn inmiddels gestart met een vervolgproject.

Voor het Standaard Raamwerk Water is nu ook een vierde groep actief die zich bezig houdt met de problematiek van eigendomsrechten van software en gegevensbestanden.

De werkgroep Good Modelling Practice (GMP) heeft een project in gang gezet voor de ontwikkeling van een Handboek GMP. De doelstelling van het project was om te stimuleren dat op een juiste manier wordt omgegaan met modellen. Dit project is in augustus 1998 van start gegaan, gefinancierd door Rijkswaterstaat, STOWA en DLO Staring Centrum. Het project is uitgevoerd door de Landbouw Universiteit Wageningen, NITG-TNO en DLO Staring Centrum onder leiding van WL | DELFT HYDRAULICS en begeleid door een brede groep vertegenwoordigers van waterbeheerders, universiteiten, wetenschappelijke instituten en ingenieursbureaus.

Het project is gestart met een inventarisatiefase waarin de relevante literatuur is geraadpleegd en de ervaringen in de betrokken organisaties in kaart zijn gebracht. Op basis hiervan is een eerste concept van het Handboek 'Good Modelling Practice' opgesteld. De

bruikbaarheid van dit concept-Handboek is vervolgens getoetst door zowel relatief onervaren modelleers als door meer ervaren modelleers bij diverse waterbeheerders. De testperiode is afgesloten met een workshop waarin de ervaringen van de testers zijn besproken. Op basis van de bevindingen gedurende de testperiode is de uiteindelijke versie van het Handboek dat nu voor u ligt tot stand gekomen.

Het Handboek is primair bedoeld ter ondersteuning van de modelleur. Alle belangrijke stappen in het modelleerproces komen aan de orde en derhalve is het Handboek uitermate geschikt om als checklist gebruikt te worden. Wanneer het doorlopen van de checklist wordt vastgelegd (bijvoorbeeld in de bijgeleverde formulieren) ontstaat een logboek waarmee de modelstudie reproduceerbaar en overdraagbaar wordt en kunnen ook andere betrokkenen zich gemakkelijker een beeld vormen van de uitgevoerde modelstudie. Het Handboek is daarbij nadrukkelijk niet bedoeld als dwingend keurslijf voor de modelleur, maar vooral als hulpmiddel.

Het projectteam, waarvan de namen vóór in dit Handboek te vinden zijn, werd ondersteund en geadviseerd door een begeleidingscommissie bestaande uit de volgende personen:

dr. T. Aldenberg	RIVM-LWD
ir. R. Bol	RWS Directie Zuid-Holland
ing. E. Groot	Hoogheemraadschap Rijnland
drs. C.J. Hemker	VU Aardwetenschappen
dr. J.P.M. Kouwenhoven	Resource Analysis
dr.ir. W. de Lange	RIZA
dr.ir. A.J.M. Nelen	DHV Water (nu Nelen & Schuurmans Consultants)
drs. E. Olij	Uitwaterende Sluizen
dr.ir. T.N. Olsthoorn	Gemeente Waterleiding Amsterdam
ir. H.A. Paap	Waterschap Friesland
ir. P. Roeleveld	STOWA
ir. A.P. Salverda	Witteveen en Bos (nu Waterbedrijf Gelderland)
ing. J.M. Stroom	Hoogheemraadschap Rijnland
drs. M.W.M. van der Tol	RIKZ
prof.dr.ir. P. van der Veer	TU-Delft, Civiele Techniek
ir. B.J. van der Wal	IWACO
ir. J.D. van der Werff ten Bosch	Resource Analysis

Het Handboek GMP had nooit tot stand kunnen komen zonder de inzet van de testers die de eerste concept-versie van het Handboek in de praktijk hebben toegepast en zodoende waardevolle informatie hebben aangeleverd over de bruikbaarheid.

Tot slot is dank verschuldigd aan de vele experts binnen WL | DELFT HYDRAULICS, NITG-TNO, DLO Staring Centrum, STOWA, LUW, RIKZ en RIZA die bijdragen hebben geleverd aan de beschrijvingen van valkuilen en gevoeligheden in het tweede deel van het Handboek, en alle overige personen die op wat voor manier dan ook hebben meegewerkt aan de totstandkoming van dit Handboek Good Modelling Practice.

Introdunctie

Introductie

Achtergrond van het Handboek

Modellen zijn een onmisbaar hulpmiddel geworden in het moderne waterbeheer. Ze worden veelvuldig gebruikt en spelen een belangrijke ondersteunende rol bij het vervullen van de kerntaken in het waterbeheer, onder meer bij de beleidsvoorbereiding, het operationeel waterbeheer, het onderzoek en bij het verzamelen van basisgegevens (monitoring).

Naast het feit dat modellen steeds vaker gebruikt worden in het waterbeheer, is ook een ontwikkeling te zien van toenemende samenwerking op modelgebied. De tijd is voorbij dat iedere beheerder of ieder instituut al zijn modellen zelf ontwikkelde. Dat uit zich onder meer in de bereidheid tot de ontwikkeling van het Standaard Raamwerk Water door een groot aantal bij het Nederlandse waterbeheer betrokken partijen. Met het Standaard Raamwerk Water (voor modellen, gegevensbestanden en IT-hulpmiddelen als presentatieprogramma's in het waterbeheer) wordt beoogd waterbeheerders te voorzien van een integraal systeem waar gemakkelijk modellen en andere informatiesystemen kunnen worden 'ingehangen' of 'losgekoppeld', afhankelijk van het soort probleem dat de aandacht heeft. Hierdoor kan efficiënt gebruik wordt gemaakt van elders ontwikkelde kennis en van de beschikbare financiële middelen.

Wanneer modellen echter op een dergelijke wijze flexibel kunnen worden ingezet, vergroot dit ook de kans op onoordeelkundig gebruik. Soms is dit het gevolg van fouten in de programmatuur of onvolledige handleidingen, maar de oorzaak kan ook bij de modelleur zelf liggen. Onzorgvuldig omgaan met invoergegevens, onvoldoende calibratie en validatie, werken buiten het geldigheidsgebied van het model, uitgaan van verkeerde modelaannamen, het zijn allemaal fouten die er toe kunnen leiden dat de resultaten van modelberekeningen onbetrouwbaar zijn. Dit kan verstrekende gevolgen hebben, zeker gezien de belangrijke plaats die modellen in het moderne waterbeheer innemen.

Doelstelling

Om te stimuleren dat op een juiste manier wordt omgegaan met modellen, is het initiatief genomen tot een Handboek 'Good Modelling Practice', een lijst met richtlijnen voor modelgebruik. Met GMP kan bovendien de reproduceerbaarheid en overdraagbaarheid van modelstudies verbeterd worden. Richtlijnen voor GMP die door alle betrokken partijen in het waterbeheer worden gedragen bestonden nog niet. Wel hebben sommige instituten eigen richtlijnen. Samenvattend is het doel van het Handboek GMP om:

- een aanzet te geven voor richtlijnen ten aanzien van modelgebruik die door alle betrokken partijen in het waterbeheer worden gedragen;
- een zorgvuldiger gebruik van modellen in het waterbeheer te initiëren;
- de reproduceerbaarheid en overdraagbaarheid van modelstudies te verbeteren.

Het Handboek is daarbij vooral bedoeld ter ondersteuning van de modelleur. Alle belangrijke stappen in het modelleerproces komen aan de orde en derhalve is het Handboek uitermate geschikt om als checklist gebruikt te worden. Wanneer het doorlopen van de checklist wordt vastgelegd (bijvoorbeeld in de bijgeleverde formulieren) ontstaat een logboek waarmee de modelstudie reproduceerbaar en overdraagbaar wordt en kunnen ook andere betrokkenen zich gemakkelijker een beeld vormen van de uitgevoerde modelstudie. Het Handboek is daarbij nadrukkelijk niet bedoeld als dwingend keurslijf voor de modelleur, maar vooral als hulpmiddel.

Doelgroepen en gebruik van het Handboek

Het Handboek is bedoeld voor alle partijen in het waterbeheer die te maken hebben met modelleren. Daarbinnen kunnen een aantal specifieke doelgroepen worden herkend, die elk het Handboek waarschijnlijk op een andere manier zullen gebruiken. Daarom is ook gekozen voor een losbladig systeem, zodat elke gebruiker het Handboek naar eigen inzicht kan indelen.

De belangrijkste doelgroep voor het Handboek is de (niet-programmerende) *modelleur* die modelprojecten uitvoert. Een *onervaren modelleur* krijgt door de verschillende onderdelen van het Handboek een duidelijk en gedocumenteerd stappenplan in handen om een modelproject op een zorgvuldige, reproduceerbare en overdraagbare manier uit te voeren. Waarschijnlijk zal de *ervaren modelleur* met name gebruik maken van de checklist om na te gaan of alle stappen in het modelproces de nodige aandacht hebben gehad of zullen krijgen.

Een *opdrachtgever* zal bij uitbesteding van een modelproject met name zijn voordeel kunnen doen met de checklist en de in deel 1 en 2 beschreven begrippen en achtergronden. Bij de beoordeling van afgeronde modelprojecten kan de opdrachtgever nuttig gebruik maken van de (eventueel) ingevulde formulieren, die de achtergronden van de verkregen resultaten beschrijven en zo de overdraagbaarheid en reproduceerbaarheid van de modelstudie verbeteren.

Voor *instituten of bedrijven* kan het Handboek in de toekomst wellicht onderdeel worden van het eigen kwaliteitssysteem, waarbij het in principe niet uitmaakt of men daarbij opdrachtgever op opdrachtnemer is. Tenslotte kan het Handboek als studieboek en naslagwerk worden gebruikt bij de opleiding van modelleurs.

Hoe het Handboek of onderdelen daarvan ook worden gebruikt, belangrijk is dat de onderscheiden stappen altijd allemaal worden doorlopen. De opdrachtgever en modelleur besluiten in overleg welke stappen bij een modelproject prioriteit en/of extra aandacht zullen krijgen. Soms kunnen er ook goede redenen zijn om af te spreken dat bepaalde stappen geen of nauwelijks aandacht zullen krijgen. Daarbij zal de snelheid waarmee men de diverse stappen doorloopt doorgaans afhangen van de complexiteit van het modelproject.

Alle gebruikers wordt overigens aangeraden in ieder geval kennis te nemen van de begrippenlijst en de afbakening. Daarmee kunnen onnodige misverstanden worden voorkomen.

Het Handboek als geheel is naar verwachting een goed hulpmiddel om de kloof en spraakverwarring die regelmatig optreedt tussen opdrachtgever, opdrachtnemer en modelleur te verkleinen. Voor het volledig slechten van barrières is echter meer nodig, met name in de persoonlijke communicatie tussen opdrachtgever en modelleur.

Opzet van het Handboek

De kern van het Handboek bestaat uit twee delen:

Deel I: een stapsgewijze beschrijving van alle activiteiten die te maken hebben met het werken met modellen in het waterbeheer (van 'probleem' tot 'interpretatie' en 'documentatie');

Deel II: een overzicht van valkuilen en gevoeligheden voor modellen voor in totaal 13 verschillende toepassingsdomeinen, variërend van grondwaterkwaliteitsmodellen tot oppervlaktewaterkwaliteitsmodellen, en van ecologische modellen tot gebruiksfunctiemodellen.

In zowel Deel I als Deel II zijn literatuurverwijzingen opgenomen voor aanvullende informatie. Voor de vastlegging van modelprojecten is een serie formulieren aan het Handboek toegevoegd, zowel op papier als op een diskette. Voor elke stap uit het eerste deel is een formulier beschikbaar. Verder is een begrippenlijst toegevoegd. Deze is samengesteld op basis van al bestaande lijsten (bijvoorbeeld opgesteld in het kader van Nationaal Onderzoeksprogramma Verdroging en de inventarisatie van Generieke Tools in het kader van LWI) en de (internationale) literatuur op dit gebied, waarbij begrippen 'waterbeheerbreed' zijn omschreven.

Dynamisch karakter

Het voor u liggende Handboek is geen statisch geheel. Ook al ligt er een uitgebreide testperiode aan ten grondslag, een breder en intensiever gebruik van het Handboek zal onherroepelijk leiden tot aanvullingen en verbeteringen. Daarom is gekozen voor een losbladige opzet van het Handboek. Het is de bedoeling het Handboek dynamisch te houden en regelmatig op basis van de ervaringen in het gebruik uitbreidingen of aanpassingen te verspreiden. Uiteraard is de haalbaarheid hiervan sterk afhankelijk van de respons van de gebruikers. De auteurs nodigen de gebruikers dan ook uit hun ervaringen, voorstellen voor verbeteringen en ander commentaar door te geven. Dat kan op het voor in dit Handboek genoemde adres.

Afbakening

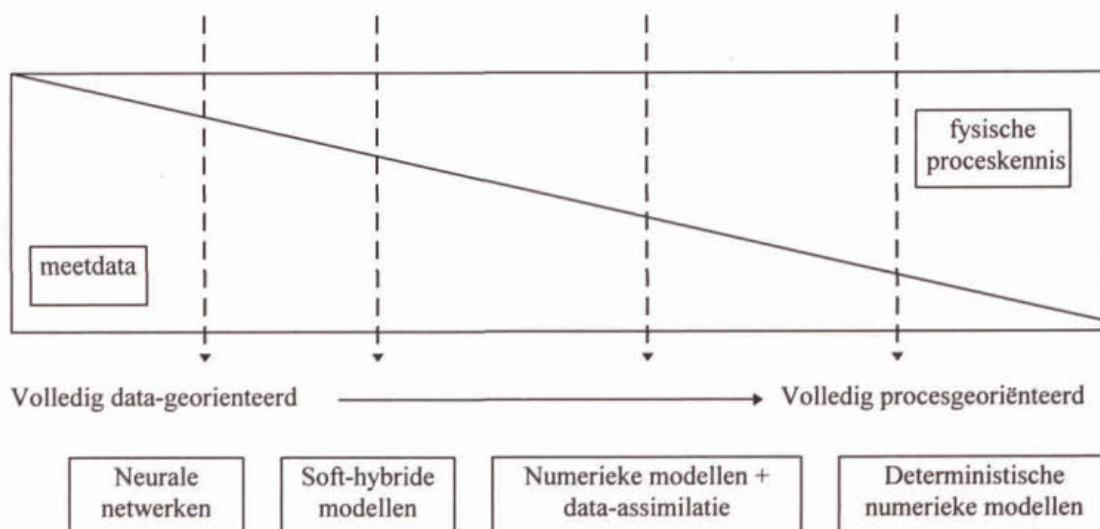
Afbakening

Op welk type modellen is dit Handboek van toepassing?

Het begrip ‘model’ kan erg ruim worden opgevat. In deze paragraaf wordt aangegeven op welke typen modellen dit Handboek wel en niet van toepassing is. Enerzijds vindt daarbij een afbakening plaats, anderzijds een uitwerking van het begrip ‘model’. Meer algemene informatie over het gebruikte begrippenkader in het Handboek is te vinden in de begrippenlijst en het bijbehorende begrippenkader.

Afbakening

De vragen vanuit de beleids- en beheerspraktijk hebben vaak betrekking op het gedrag van een watersysteem, op systeemparemeters of op invloedsfactoren van bepaalde systeemparemeters. Meestal luidt daarbij de kernvraag: *wat is, gegeven de in de vraagstelling opgesloten informatie-behoefte en gewenste nauwkeurigheid, de meest geschikte informatiebron om een vraag te beantwoorden*. In principe staan daarvoor twee aanpakken ter beschikking die als uitersten van een spectrum gezien kunnen worden. Ten eerste: volledig data-georiënteerd (veldmetingen) en, ten tweede, volledig procesgeoriënteerd (gebruik van een op fysische proceskennis gebaseerd deterministisch model). In onderstaande figuur is dit gevisualiseerd.



Behalve deze uitersten zijn er, zoals meestal het geval is, ook allerlei combinaties denkbaar. In veel gevallen zal het gebruik van alleen een model of alleen meetgegevens niet tot het gewenste antwoord leiden. Het scala van mogelijkheden kan men in grote lijnen onderverdeeld denken in de volgende klassen:

- *Neurale netwerken*, waarbij op louter statistische gronden een relatie wordt afgeleid tussen oorzaak en gevolg. De correlatie tussen de input- en de output-variabelen wordt afgeleid via calibratie op basis van data sets bestaande uit een representatieve set van input - output relaties. Het gecalibreerde neurale netwerk kan vervolgens de output voorspellen voor nieuwe waarden van de input-variabelen.
- *Soft-Hybride modellen*, waarbij in een neuraal netwerk fysische concepten worden verwerkt, bijvoorbeeld door bij de calibratie niet alleen gebruik te maken van de input-output combinaties maar daarin tevens fysische concepten als behoudswetten als randvoorwaarden mee te nemen. De gebruikte fysische concepten vormen daarbij een aanvulling op de in de meetdata opgesloten kennis.
- *Numerieke modellen met data-assimilatie*, waarbij de basis wordt gevormd door de in de numerieke modellen opgeslagen fysische proceskennis, aangevuld met veldmetingen welke via data-assimilatie (zie de begrippenlijst en bijlage 2) aan het model worden toegevoegd.
- *Deterministische numerieke modellen*, waarbij alle kennis over het systeem in het model is opgeslagen in de vorm van vergelijkingen en de daarbij behorende parameters en de kennis over de omgeving van het systeem wordt toegeleverd in de vorm van tijdseries. In dit soort modellen wordt de fysische proceskennis volledig bekend verondersteld.

In het waterbeheer wordt vooral gebruik gemaakt van de laatste categorie: deterministische numerieke modellen. Numerieke modellen met data-assimilatie worden ook toegepast, maar alleen door een selecte groep specialistische gebruikers. Het Handboek GMP richt zich vooral op de deterministische numerieke modellen (de rechterkant van de figuur). De grens is gelegd bij de numerieke modellen met data-assimilatie. Soft-Hybride modellen en neurale netwerken, die bijvoorbeeld in de ecologie regelmatig worden gebruikt, worden derhalve niet beschouwd.

Uitwerking van het begrip 'model'

Behalve bovengenoemde indeling van modellen, waarbij de mate waarin fysische proceskennis ten grondslag ligt aan het model bepalend is, zijn er vele andere indelingen mogelijk. Een aantal van deze indelingen komen in deze paragraaf aan de orde zonder overigens volledigheid na te streven. Voor al deze modellen kan het Handboek worden toegepast, mits aan de in de vorige paragraaf beschreven afbakening is voldaan.

In deel 2 van dit Handboek, 'Valkuilen en gevoeligheden', is gekozen voor een indeling van modellen in toepassingsdomeinen. Op basis van deze indeling wordt daar aandacht besteed aan specifieke valkuilen en gevoeligheden van modellen die gebruikt worden in het waterbeheer. De volgende toepassingsdomeinen worden onderscheiden:

- grondwatermodellen voor de verzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);
- grondwatermodellen voor de onverzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);
- neerslagafvoermodellen;
- waterverdelingsmodellen;
- hydrodynamische modellen;
- hoogwatervoorspellingsmodellen en operationele modellen;
- calamiteitenmodellen
- morfologische modellen;

- oppervlaktewaterkwaliteitsmodellen;
- afvalwaterzuiveringsmodellen;
- ecologische modellen;
- economische modellen en gebruiksfuncties;
- emissiemodellen.

Modellen kunnen ook op meer algemene gronden ingedeeld worden, zoals de ruimtelijke dimensie waarop ze van toepassing zijn:

- 0D (puntmodellen);
- 1D;
- 2D;
- 3D.

Soms wordt ook gesproken van quasi-2D of -3D modellen. Dit zijn geen aparte dimensies, maar het geeft een manier van schematiseren weer, bijvoorbeeld door een 2D-systeem te modelleren als een serie aan elkaar gekoppelde lijnelementen.

In het verlengde van de ruimtelijke dimensies kan ook onderscheid gemaakt worden in modellen voor lokale, regionale, nationale en internationale schaal.

Vergelijkbaar met de ruimtelijke resolutie is de resolutie in tijd. Het belangrijkste onderscheid dat hierin gemaakt kan worden is of een model stationair of dynamisch is. Hierbij speelt vaak ook het wiskundige oplossingsmechanisme een rol. Die levert op zich weer een eigen onderverdeling op variërend van puur analytisch tot volledig numeriek, en uiteraard alles wat daar tussenin zit.

Modellen kunnen tot slot ook worden onderscheiden op basis van de toepassingsreden, variërend van beleidsanalytisch (grof en breed) tot wetenschappelijke onderzoeksmodellen (gedetailleerd en smal). Daar tussenin zitten nog de operationele modellen (bijvoorbeeld voor real-time control van kunstwerken) en de calamiteitenmodellen. Overigens is het onderscheid tussen deze terreinen niet altijd even scherp te maken. De laatste jaren is in toenemende mate te zien dat de modellen voor de diverse terreinen in elkaar overvloeien.

Voorgaande vijf indelingen (toepassingsdomein, ruimte, tijd, wiskundig oplossingsmechanisme en toepassingsreden) staan deels los van elkaar, maar zijn deels ook gekoppeld.

Begrippenlijst

I Begrippenlijst

begrip	term	betekenis
afhankelijke variabele	dependent variable	variabele die ten opzichte van één of meer onafhankelijke variabele(n) verandert
algoritme	algorithm	lijst van stappen om in een computerprogramma een probleem op te lossen
analytische elementenmethode	analytic element method	methode voor grondwaterstromingsberekeningen gebaseerd op het superponeren van analytische oplossingen van de Poisson-vergelijking (voor gebiedsvariabele verticale stroming en voor de bergingsterm voor niet-stationariteit) die gelden binnen oneindige of begrensde gebieden in meerdere al-dan-niet-gekoppelde lagen
betrouwbaarheids-analyse	uncertainty analysis	activiteiten om de betrouwbaarheid van een model te schatten na afloop van de calibratie (en/of validatie)
calibratie	calibration	activiteiten om een vooraf bepaalde mate van overeenkomst tussen model en metingen in het veld te verkrijgen door het (systematisch) veranderen van onzekere factoren (vaak parameters), gevolgd door een analyse van de restfouten
conceptueel model	conceptual model	beschrijving van de structuur van een systeem met kwalitatieve afhankelijkheden
constante	constant	grootte die nauwkeurig bekend is
data	data	gegevens
data-assimilatie	data assimilation	benaderingswijze waarbij data wordt geïntegreerd met een fysisch/chemische procesbeschrijving, zodanig dat de informatie-inhoud van zowel de data als de procesbeschrijving expliciet wordt gemaakt en gewogen
deterministisch	deterministic	zonder toeval (tegenovergestelde van stochastisch)
dimensie	dimension	1. lengte, breedte, hoogte 2. (dimensie-analyse) eenheid waarin een grootte wordt uitgedrukt
dimensie-analyse	dimension analysis	test of in de modelvergelijkingen alle dimensies correct zijn
discretisatie	discretisation	het ombouwen van een continue model (in ruimte en tijd) naar een model dat het systeem beschrijft in discrete (niet oneindig kleine) stappen in de ruimte en tijd
doelfunctie	objective function	kwantificering van de modelfout met behulp van veldmetingen
domein	domain	wetenschapsgebied, in dit Handboek deelgebieden van het waterbeheer
dynamisch model	dynamic model	model waarbij de tijd een onafhankelijke variabele is

begrip	term	betekenis
eenheid	unit	gedefinieerde maat om een grootte uit te drukken of te meten
eindige-differentiemethode	finite difference method	transformatie van (partiële) differentiaalvergelijkingen die continu zijn in de ruimte en/of tijd, naar discrete differentievergelijkingen om ze zo numeriek op te kunnen lossen, met behulp van een discreet 'grid' of raster
eindige-elementenmethode	finite element method	transformatie van (partiële) differentiaalvergelijkingen die continu zijn in de ruimte naar discrete vergelijkingen om ze zo numeriek op te kunnen lossen, met behulp van discrete elementen, dat wil zeggen ruimtelijke compartimenten
energiebalans	energy budget	balans van energiestromen
entiteit	entity	zelfstandige grootte met een eigen betekenis
fuzzy logic model	fuzzy logic model	model met beschrijvingen op basis van vage logica, bijvoorbeeld met tussenvormen tussen ja en nee (misschien)
geldigheidsgebied	scope	het geheel van voorwaarden waaronder een model mag worden toegepast
gevoeligheidsanalyse	sensitivity analysis	onderzoek naar de relatie tussen veranderende factoren (vaak parameters) en modeluitvoer
globaalgedragtest	global behaviour test	test of de globale werking van het model overeenkomt met de verwachting
heuristische methode	heuristic method	niet formele methode om een niet precies bekend doel te bereiken op een onderzoekende en voortdurend evaluerende wijze volgens een bepaald criterium
identificatie	identification	calibratie met als doel eenduidige waarden van alle parameters en andere calibratiefactoren te bepalen
ijking	calibration	calibratie
integratie algoritme	integration algorithm	algoritme om (numeriek) differentiaalvergelijkingen op te lossen
integreren	integrate	oplossen van differentiaalvergelijkingen
interpretatie	interpretation	verklarende uitleg
Jakobiaan	Jacobian matrix	matrix van partiële afgeleiden van de individuele residuen naar de (model) parameters
massabalans	mass balance	balans van stofstromen
meta-informatie		gegevens over gegevens (waar zijn de gegevens, hoe en door wie gemeten, welke nauwkeurigheid, enzovoort)
model	model	verzamelbegrip voor representaties van essentiële aspecten van een systeem, waarbij kennis gepresenteerd wordt in een bruikbare vorm. N.B: In dit Handboek wordt hiermee veelal bedoeld een programma in de computer (een modelprogramma) met bijbehorende invoer. Het woord 'model' kan echter ook slaan op wat opmerkingen op papier, een wiskundige formulering, een schema of figuur
modellerproces	modelling process	alle stappen die doorlopen moeten of kunnen worden bij het maken en werken met modellen

begrip	term	betekenis
modelleren	model	1. maken van een model 2. werken met een model
modelleur	modeller	1. de ontwikkelaar van een model 2. iemand die werkt met een model
modelprogramma	model program	wiskundige formulering in de vorm van een computerprogramma, bedoeld om modellen mee te bouwen door middel van het invoeren van gegevens
modelproject	modelling project	project waarbij het werken met een model een belangrijke rol speelt
modelprojectformulier	model project form	formulier van dit Handboek GMP om het modelproject zo volledig mogelijk te beschrijven
neuraal netwerk model	neural network model	model waarbij de relaties tussen input en output worden beschreven m.b.v. van een netwerk van knopen die ieder een gewicht hebben, zodanig dat het neurale netwerk bij een bekende input een bekende output oplevert
niet-stationair model	non-stationary model	model waarbij de tijd een onafhankelijke variabele is (zie dynamisch model)
onafhankelijke variabele	independent variable	variabele ten opzichte waarvan de veranderingen in een dynamisch systeem worden beschreven; voorbeelden: tijd, drie ruimtelijke dimensies
optimalisatie	optimisation	vaststellen van de waarde van parameters op een zodanige wijze dat de vooraf gekozen doelfunctie minimaal wordt
overige variabele	auxiliary variable	variabele waarvan de waarde niet afhangt van de waarde op een vorige waarde van de onafhankelijke variabele (dus bijvoorbeeld niet van de waarde op een vorig tijdstip)
parameter	parameter	grootte die constant wordt verondersteld, maar die niet nauwkeurig bekend is
partiële differentiaalvergelijking	partial differential equation	differentiaalvergelijking met meer dan één onafhankelijke variabele
probleembeschrijving	problem definition	een heldere, precieze (niet noodzakelijk kwantitatieve) specificatie van wat bekend is over het probleem en van wat berekend moet worden
programmeur	programmer	iemand die computerprogramma's maakt of verandert. N.B: sommige (programmerende) modellers programmeren ook zelf, maar meestal is dit niet het geval
residu	residual	restfout
restfout	residual	verschil tussen de uitkomsten van model en veldmetingen
restfoutenanalyse		(statistische) analyse van restfouten
robuustheidtest	robustness test	test of het model bestand is tegen extreme invoergegevens
schematisatie	schematization	vereenvoudigde voorstelling van de ruimtelijke en temporele verdeling van variabelen en parameters

begrip	term	betekenis
simuleren	simulate	nabootsen van een deel van de werkelijkheid of systeem (gedachtenmodel, fysiek model, model op de computer)
soft-hybride model	soft-hybrid model	data-georiënteerd model (bijvoorbeeld een neurale netwerk) waarin (bijvoorbeeld via de calibratie) fysische concepten worden meegenomen
stabiliteit	stability	eigenschap van differentiaalvergelijking en/of integratiemethode, waarbij de fout in elke integratiestap kleiner wordt
standaard invoer	standard input	de invoergegevens van een standaard test (bijvoorbeeld uit de handleiding van het modelprogramma of een eigen simpele case), waarvan de bijbehorende uitvoer bekend is
stationair (statisch) model	stationary (static) model	model dat niet dynamisch is; de tijd veranderingen in de tijd worden niet onderzocht
statistische verdeling	statistical distribution	kansverdeling van een steekproef
stochastisch	stochastic	met toeval
systeem	system	een geheel (vaak een deel van de werkelijkheid) bestaande uit entiteiten, waartussen relaties bestaan
systeembeschrijving	system definition	een tekstuele beschrijving van een systeem
toestand	state	een verzameling variabelen binnen het systeem op een bepaald tijdstip, waarin alle informatie van het verleden is opgeslagen die relevant is voor de toekomst van het systeem. De toestand is niet altijd een unieke verzameling variabelen: er kunnen meerdere verzamelingen zijn die aan de definitie voldoen
toestandsvariabele	state variable	een variabele die deel uitmaakt van de toestand van het systeem
validatie	validation	vergelijken van modeluitvoer met een onafhankelijke (dat wil zeggen nog niet in de calibratie gebruikte) set meetgegevens, teneinde te kunnen vaststellen of het model 'goed' is (of het concept goed is, het model het verleden kan reproduceren met de vereiste nauwkeurigheid en of het model geschikt is om alle vragen te beantwoorden)
variabele	variable	grootte waarvan de waarde kan veranderen
veldwaarneming	observation	veldmeting, dus waarneming aan het systeem waar het model een representatie van is
verificatie	verification	controle of het wiskundige model correct geïmplementeerd is in het computerprogramma en of het computerprogramma correct in de computer is geïmplementeerd
wiskundige formulering	mathematical model	de wiskundige vertaling van het conceptuele model

2 Begrippenkader

2.1 Inleiding

Het taalgebruik van modelleers in het waterbeheer is in de praktijk niet altijd eenduidig. Er ontstaat regelmatig spraakverwarring. Om die spraakverwarring te voorkomen is in dit Handboek een begrippenlijst opgenomen, met eenduidige definities. Daarnaast wordt onderstaand een poging gewaagd om het geheel van begrippen in een samenhang te presenteren, zodat de individuele begrippen wat meer gaan leven.

2.2 Het begrippenkader van modelleren en simuleren

In dit Handboek wordt het woord *model* gebruikt als verzamelbegrip voor 'representaties van essentiële aspecten van een systeem, waarbij kennis gepresenteerd wordt in een bruikbare vorm'. Hiermee wordt veelal een programma in de computer (een *modelprogramma*) bedoeld met bijbehorende invoer. Het woord 'model' kan echter ook slaan op wat opmerkingen op papier, een wiskundige formulering, een schema of figuur die het systeem afbeelden. Een *systeem* is daarbij een deel van de werkelijkheid (los van de rest) dat bestaat uit *entiteiten* met hun onderlinge relaties (processen) en met een beperkt aantal relaties met de werkelijkheid buiten het systeem. Een *model* is een afbeelding van een systeem als het de structuur van het systeem (entiteiten en relaties) beschrijft. Een systeem wordt wel aangeduid met object-systeem als er een model van wordt gemaakt. *Modelleren* is dan het construeren van een model van een systeem, maar dit begrip wordt ook wel gebruikt voor het werken met een model. *Simuleren* is een vergelijkbare term en wordt meestal gebruikt voor 'iets met het model op een computer te doen'. Het begrip wordt echter ook wel breder gebruikt voor 'het nabootsen van het systeem op de computer' (dus het geheel). Dit betekent vrijwel altijd dat er een aantal aannames moeten worden gedaan die het model eenvoudiger, maar ook minder realistisch maken. Maar dit vereenvoudigen maakt het model wel beter hanteerbaar.

Om modellen weer te geven kunnen allerlei representaties worden gebruikt: gewone taal, figuren, wiskunde, enzovoort. *Wiskundige formuleringen* zijn de wiskundige vertaling van het conceptuele model. Voorbeelden van *wiskundige formuleringen* zijn: algebraïsche vergelijkingen, differentievergelijkingen, gewone differentiaalvergelijkingen, partiële differentiaalvergelijkingen, *neurale netwerken*, statistische modellen en combinaties hiervan.

Een model is *dynamisch* als het veranderingen in de tijd beschrijft en *stationair* of *statisch* als dat niet zo is. Een wiskundig model heeft één of meer *onafhankelijke variabelen* en één of meer *afhankelijke variabelen*. Een dynamisch model heeft tenminste de tijd als onafhankelijk variabele. Als er sprake is van een ruimtelijk model dan is tenminste één ruimtelijke dimensie ook een onafhankelijk variabele. Bij een dynamisch 3D-model is er sprake van vier onafhankelijke variabelen: de tijd en de drie ruimtelijke dimensies.

Dynamische modellen op basis van een 'harde' niet-stochastische representatie heten **deterministische modellen**: de kennis van het gemodelleerde systeem ligt vast in het model en herhaald draaien van het model levert dezelfde uitkomsten op. Een model heeft (net als het systeem waar het een afbeelding van is) een modelstructuur (toestandsvariabelen en relaties die beschreven worden met hulpvariabelen) en een modelgedrag (wat doet het model langs de as of de assen van de onafhankelijke variabelen: hoe verandert de uitkomst van een model in de tijd en/of hoe verandert het langs de ruimtelijke as(sen)).

In het kader van dit Handboek wordt alleen ingegaan op wiskundige (model) formuleringen bestaande uit (partiële of gewone) differentiaalvergelijkingen en/of algebraïsche vergelijkingen. Als hieronder gesproken wordt van een wiskundige (model) formulering, bestaat dat uit een stelsel van één of meer wiskundige vergelijkingen. Meestal is de logica die in deze modellen gebruikt wordt crisp (wel-niet; ja-nee; zwart-wit), soms gebruikt men *fuzzy logic* of vage logica (wel-misschien-niet; piepjong-jong-middelbaar-oud-stokoud).

Niet-wiskundige representaties van een model worden vaak **conceptuele modellen** genoemd: de structuur is beschreven, maar de onderdelen van het model en de relaties zijn niet (allemaal) kwantitatief gemaakt. De wiskundige vergelijkingen in een model kunnen worden opgelost langs analytische weg (waardoor er voor elk punt in het domein een exacte waarde kan worden afgeleid) of langs numerieke weg (waardoor voor elk punt in het domein de exacte waarde numeriek benaderd wordt).

De entiteiten in een wiskundig model worden gerepresenteerd met behulp van één of meer **toestandsvariabelen** en relaties tussen de entiteiten met behulp van **hulpvariabelen**. De toestandsvariabelen bepalen de toestand van het model. Veranderingen in toestandsvariabelen worden beschreven met behulp van (partiële) differentiaalvergelijkingen. Hulpvariabelen worden beschreven via algebraïsche vergelijkingen of er wordt direct een waarde aan toegekend (input). Vergelijkingen kunnen gebruik maken van toestandsvariabelen, hulpvariabelen, **parameters** (constant in de tijd), of andere **onderdelen van het model**.

Het conceptuele model wordt omgezet in een model op de computer door gegevens in te voeren in een **modelprogramma** (een wiskundig formulering in de vorm van een computerprogramma, bedoeld om modellen mee te bouwen door middel van het invoeren van gegevens). Hiervoor moeten er keuzes gemaakt worden die onder meer te maken hebben met de ruimtelijke **schematisatie**. Naast de gevolgen van deze keuzes over de **discretisatie** moeten er ook systeemgegevens worden aangeboden aan of opgenomen in het modelprogramma waarmee het model gebouwd wordt. De controle of een model goed op de computer is gezet heet **verificatie**.

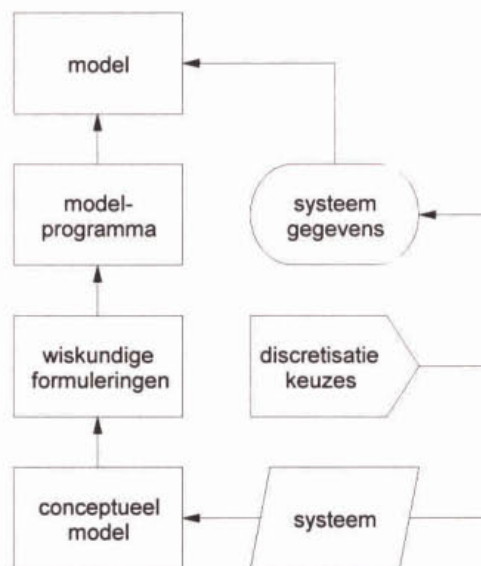
Nadat een model op de computer is gezet, is het vaak nodig om de overeenkomst tussen model en systeem beter op elkaar af te stemmen, of preciezer gezegd om het modelgedrag beter overeen te laten komen met het systeemgedrag. Dit heet **calibreren** en het wordt uitgevoerd door parameterwaarden te veranderen en vervolgens de modeluitkomsten met veldmetingen te vergelijken. Hierbij wordt vaak gebruik gemaakt van **optimalisatietechnieken**. Met dezelfde technieken die gebruikt worden bij een calibratie kan soms (als het model niet te ingewikkeld is en het systeem goed gekend door metingen) het model **geïdentificeerd** worden, dat wil zeggen dat eenduidige waarden van alle parameters

en andere calibratiefactoren gevonden worden. Om te bepalen welke onzekere factoren tijdens de calibratie moeten worden aangepast om de betere overeenstemming te bewerkstelligen kan gebruik gemaakt worden van een *gevoeligheidsanalyse*. Na afloop van de calibratie kunnen de resterende verschillen worden onderzocht en de resterende onzekerheid in de modelvoorspellingen gekwantificeerd in een *betrouwbaarheidsanalyse*. Behalve calibratie kan ook validatie plaatsvinden. *Validatie* houdt zich bezig met de vergelijking van de modeluitkomsten (de resultaten van de onzekerheidsanalyse) met een onafhankelijke, dat wil zeggen een niet bij de calibratie gebruikte, set waarnemingen, aan het echte systeem om te bepalen of het model het systeem(gedrag) goed beschrijft.

Het geheel aan handelingen en acties die betrekking hebben op het modelleren en simuleren om hiermee een bepaald probleem op te lossen noemen we het *modelproject*.

2.3 Samenhang op basis van het begrip 'model'

De figuur hieronder laat zien wat de verwantschap is tussen de verschillende representaties van een model.



Het conceptuele model wordt ontwikkeld op basis van kennis over het systeem. Op basis van dit concept wordt een wiskundige formulering opgesteld. Die kan analytisch of numeriek worden opgelost. In het laatste geval wordt op basis van het systeem een aantal keuzes gemaakt om het wiskundige model numeriek na te bootsen (discretisatie) en er worden numerieke algoritmen aan gekoppeld om de discretisatie in de tijd te verzorgen. Het dan ontstane geheel wordt verder opgewerkt tot een modelprogramma en tot slot tot een model op de computer door er de juiste invoer in te stoppen.

Literatuur

Knepell, P.L. and D.C. Arangno, 1993.

Sargent, R.G., 1984b.

Schlesinger, S., R.E. Crosbie, R.E. Gagne, G.S. Innis, C.S. Lalwani, J. Loch, R.J. Sylvester,
R.D. Wright, N. Kheir and D. Bartos, 1979.

Zeigler B.P., 1976.

Deel 1: Stappenplan

Inhoud

Stap 0 Het modellerenproces	0-1
Stap 1 Begin een logboek.....	1-1
Stap 2 Zet het modelproject op.....	2-1
2.1 Beschrijf het probleem.....	2-1
2.2 Definieer het doel	2-1
2.3 Analyseer de context en maak afspraken over de verantwoording.....	2-1
2.3.1 Context.....	2-1
2.3.2 Verantwoording.....	2-1
2.4 Formuleer de eisen.....	2-1
2.4.1 Kwaliteitseisen.....	2-1
2.4.2 Eisen aan expertise	2-1
2.4.3 Schatting benodigde capaciteit/menskracht.....	2-1
2.4.4 Communicatie en rapportage	2-1
2.4.5 Andere eisen	2-1
2.5 Maak een werkplan en begroting.....	2-1
Stap 3 Zet het model op.....	3-1
3.1 Kies het begin: gegevensanalyse, systeembeschrijving of conceptueel model	3-1
3.2 Analyseer de gegevens.....	3-1
3.2.1 Bepaal welke gegevens nodig zijn om het model te maken en te draaien.....	3-1
3.2.2 Bepaal welke gegevens nodig zijn om het model te analyseren..	3-1
3.2.3 Over de beschikbaarheid van gegevens en meta-informatie.....	3-1
3.3 Maak een systeembeschrijving	3-1
3.4 Maak een conceptueel model.....	3-1
3.4.1 Naar een conceptueel model	3-1
3.4.2 Beschrijf de structuur.....	3-1
3.4.3 Kies het soort model	3-1
3.4.4 Definieer de relaties tussen variabelen	3-1
3.4.5 Leg de aannames vast	3-1

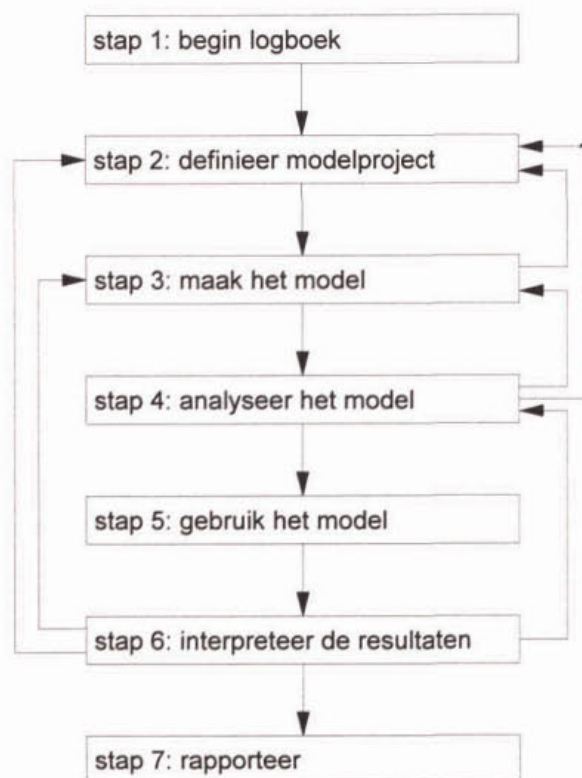
3.4.6	Controleer het conceptuele model	3-1
3.5	Maak een keuze uit bestaande modelprogramma's	3-1
3.6	Kies een discretisatie van het model in ruimte en tijd	3-1
3.7	Kies een numerieke aanpak	3-1
3.8	Implementeer het model	3-1
3.9	Verifieer het model	3-1
3.9.1	Verificatie versus validatie.....	3-1
3.9.2	Controle op implementatievoorschriften van het gebruikte modelprogramma	3-1
3.9.3	Dimensie-analyse (alleen voor programmerende modelleurs)	3-1
3.9.4	Run een bekend eenvoudig voorbeeld	3-1
3.9.5	Controleer de ruimtelijke schematisatie	3-1
Stap 4	Analyseer het model.....	4-1
4.1	Maak een plan van aanpak voor de analyse activiteiten	4-1
4.2	Analyseer globaal het model.....	4-1
4.2.1	Doe een run met standaard invoer	4-1
4.2.2	Voer de globaal-gedrag-test uit	4-1
4.2.3	Controleer de massabalansen.....	4-1
4.2.4	Doe een robuustheidstest	4-1
4.3	Voer een gevoeligheidsanalyse uit	4-1
4.4	Voer een (formeel) identificatie uit (als dat kan)	4-1
4.5	Calibreer het model.....	4-1
4.5.1	Inleiding	4-1
4.5.2	Kies de te optimaliseren parameters	4-1
4.5.3	Bereken de optimale waarden	4-1
4.5.4	Analyseer de resultaten van de optimalisatie	4-1
4.6	Voer een betrouwbaarheidsanalyse uit	4-1
4.7	Valideer het model	4-1
4.8	Bepaal het geldigheidsgebied van het model.....	4-1

Stap 5 Gebruik van het model	5-1
5.1 Maak een plan van aanpak voor de simulatie-runs	5-1
5.2 Doe de uiteindelijke simulatie-runs	5-1
5.3 Controleer de resultaten	5-1
5.4 Is dit het nou?	5-1
Stap 6 Interpreteer de resultaten	6-1
6.1 Beschrijf de uitkomsten	6-1
6.2 Bediscussieer de resultaten	6-1
6.3 Beschrijf de conclusies	6-1
6.4 Controleer of de doelstelling gehaald is	6-1
6.5 Vat de resultaten samen	6-1
6.6 Analyseer de gevolgen voor de onderzoeksvraag	6-1
Stap 7 Rapporteer en archiveer.....	7-1
7.1 Rapporteer in de taal van de doelgroep	7-1
7.2 Maak de modelstudie reproduceerbaar	7-1

Stap 0 Het modellerenproces

Het maken, onderzoeken en werken met modellen kan worden gezien als een netwerk van activiteiten en producten. In dit deel van het Handboek wordt een methode gepresenteerd om het modellerenproces te begeleiden. Hiertoe is het proces opgedeeld in een zevental stappen, te weten:

1. Begin een logboek;
2. Zet het modelproject op;
3. Zet het model op;
4. Analyseer het model;
5. Gebruik het model;
6. Interpreteer de resultaten;
7. Rapporteer en archiveer.



Het modellerenproces kent veel terugkoppelingen op momenten dat een stap in het proces wijst op onvolkomenheden in voorgaande stappen. Deze terugkoppelingen maken het modellerenproces tot een iteratief geheel.

In deel I van het Handboek is aan elke stap een apart hoofdstuk gewijd. Per stap of activiteit komen hierbij in het algemeen de volgende zaken aan de orde:

- wat is het;
- wie doet het;
- waarom wordt het gedaan (doel);
- wat zijn de producten;
- wie gebruikt de producten;
- welke methoden zijn gevolgd (standaard/anders);
- waar is alles beschreven.

Niet altijd zijn overigens alle stappen uit het Handboek even relevant. Voor sommige toepassingen kan snel over bepaalde delen van het schema heengestapt worden. Ook als altijd op dezelfde manier gewerkt wordt (volgens een protocol) kan hiernaar verwezen worden, zodat het vastleggen van alle activiteiten in de praktijk niet al te veel werk hoeft te kosten. Het resultaat is een beschrijving van alles wat in het modelproject is gedaan en wat daarmee is bereikt.

Literatuur

- Dekker, C.M., A. Groenendijk en C.J. Sliggers, 1990.
Giessen, A. van der, B.J. De Haan en P.E. Steinberger, 1992.
Knepell, P.L. and D.C. Arangno, 1993.
Kooiman, J.W., 1997.
Rolf, H.L.M., 1997.
Rykiel, E.J., 1996.
WL | DELFT HYDRAULICS, Cap Gemini, Coopers & Lybrand, NITG-TNO en RWS MD, 1997.

Stap I Begin een logboek

Een van grootste problemen van modelstudies is dat vaak niet te achterhalen is of de kwaliteit van de studie voldoende is om het probleem waarvoor de studie bedoeld is op te lossen. Tevens is het vaak voor derden onmogelijk verder te kunnen werken op het punt waar de studie gestopt is. Beide problemen worden veroorzaakt doordat niet of onvoldoende is vastgelegd hoe de studie is uitgevoerd. De studie is kortom niet of niet volledig reproduceerbaar. Welk denkproces is gevolgd? Welke concrete handelingen zijn uitgevoerd? Wie heeft welk onderdeel uitgevoerd? Welke keuzes zijn gemaakt? Hoe betrouwbaar is het eindresultaat? Het zijn allemaal vragen die beantwoord kunnen worden als dagelijks een logboek wordt bijgehouden. Vaak schiet dit er onder de tijdsdruk bij in, ook al omdat het geen leuk werk is. Om het allemaal wat makkelijker te maken, zijn daarom een aantal formulieren ontworpen die in dit Handboek zijn opgenomen. Voor de inhoud van het logboek kunnen deze formulieren worden gebruikt. Hierin wordt stapsgewijs de complete modelstudie doorlopen, en daarmee dus ook beschreven. In de laatste stap van dit Handboek GMP komen we terug op de rapportage.

stap 1



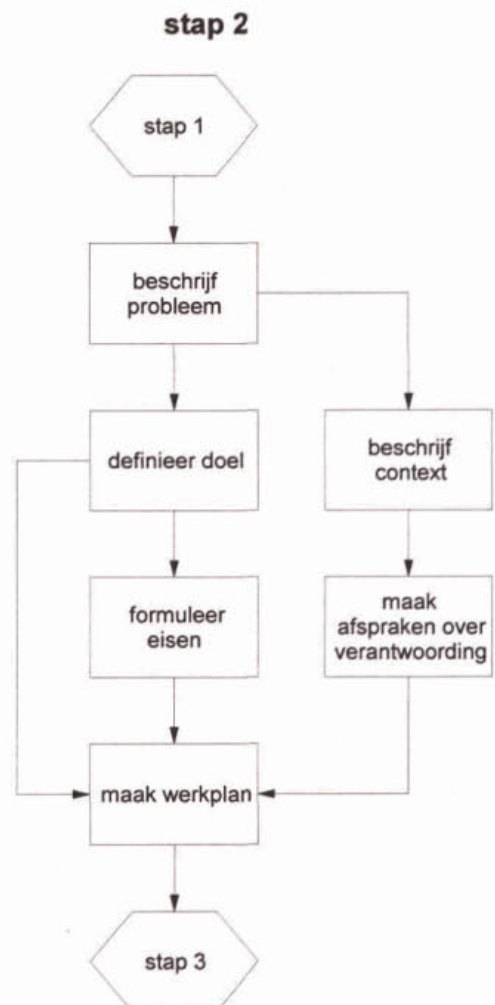
Literatuur

Knepell, P.L. and D.C. Arangno, 1993.
Scholten, H. and A.J. Udink ten Cate, 1998.

Stap 2 Zet het modelproject op

2.1 Beschrijf het probleem

Iemand heeft ergens een probleem geconstateerd waarvan vermoed wordt dat een model wellicht een nuttige bijdrage kan leveren om het probleem op te lossen. Eén van de eerste stappen die dan gedaan moet worden is het analyseren van het probleem. Dat analyseren van het probleem moet in het algemeen op twee niveaus: op het niveau van de opdrachtgever en op het niveau van de modelleur. Beide hebben natuurlijk met elkaar te maken, maar er zijn vaak ook grote verschillen tussen de belevingswereld van een beleidsmaker en die van een technicus. In overleg zullen ze tot een goede probleembeschrijving moeten komen voor de modelleur, en uiteindelijk tot een werkplan dat voor beide acceptabel is. Als eerste moet het probleemgebied worden afgebakend. Tot welk domein hoort het probleem? Op welke karakteristieke tijdschaal en ruimtelijke schaal speelt het probleem? En ook: welke fysische processen spelen een rol, en moeten dus uiteindelijk met het model beschreven worden? Er moet ook een beknopte beschrijving in woorden van het probleem worden gegeven. De kwestie over de verschillende tijd- en ruimteschalen wordt uitvoerig beschreven in bijlage 1.



Details horen hier niet thuis, evenmin als enige detaillering en invulling van het model. Wel moet op dit moment serieus gekeken worden of een model wel het juiste hulpmiddel is om het probleem mee op te lossen. Wat zijn de alternatieven?

2.2 Definieer het doel

Als een model een juist middel lijkt om te helpen het probleem aan te pakken, dan moet er een doel van dit project gedefinieerd worden. Het doel moet beschreven worden in termen van:

- het domein en het probleemgebied;
- het waarom van het oplossen met behulp van een model;
- de door het model te beantwoorden vragen;
- de door te rekenen scenario's.

Dit laatste is overigens een vak apart, en in potentie een grote bron van onbegrip tussen opdrachtgever en modelleur. Bij stap 5 wordt hier dan ook uitgebreid op teruggekomen. Op verschillende momenten tijdens het project moet worden gecontroleerd of aan het doel wordt beantwoord.

2.3 Analyseer de context en maak afspraken over de verantwoording

2.3.1 Context

Het gebruik van een model vindt vrijwel altijd plaats in het kader van een groter geheel: een project, een studie, routinematige activiteiten, enzovoort. Soms zal ook het model zelf onderdeel zijn van een groter geheel, zoals een netwerk van modellen die elkaars resultaten gebruiken.

2.3.2 Verantwoording

In veel gevallen zal een interne of externe opdrachtgever een probleem op tafel leggen bij iemand die het probleem moet oplossen. Dit betekent dat de activiteiten om het probleem op te lossen (binnen het modelproject) tegenover deze opdrachtgever verantwoord moeten worden. Hierbij moet ook afgesproken worden hoe deze verantwoording plaatsvindt. Zijn er tussentijdse rapportages nodig, is er een oplevering van het modelproject, controle door derden, enzovoorts. Belangrijk is vooral van te voren vast te leggen op welke momenten de opdrachtgever goedkeuring moet verlenen aan de resultaten. Het moet ook tijdens het proces worden vastgelegd dat deze goedkeuring is verkregen. Tenslotte is het ook verstandig over de vorm, de omvang en de inhoud van de rapportage (ook wat voor soort 'plaatjes') met de opdrachtgever afspraken te maken. Natuurlijk kan dat nog niet tot in detail, dus gedurende het project zal hier nog regelmatig op worden teruggekomen.

2.4 Formuleer de eisen

2.4.1 Kwaliteitseisen

Misschien is dit wel de moeilijkste stap uit het hele modelleerproces. Wanneer is iets voldoende of onvoldoende? Soms is dit direct duidelijk, maar meestal kunnen de kwaliteitseisen alleen via langdurig overleg tussen opdrachtgever en modelleur worden vastgelegd. En dan nog blijkt vaak tijdens of aan het eind van het modelleerproces dat de kwaliteitseisen toch net even anders moesten of gewoon onhaalbaar zijn en kan het hele traject weer opnieuw worden doorlopen. Daarom is het verstandig deze stap niet alleen helemaal in het begin van het modelleerproces te doorlopen, maar hierover continu nauw contact te onderhouden met de opdrachtgever.

Aan welke kwaliteitseisen moet je daarbij denken? Dat zijn er een aantal, die overigens allemaal met elkaar te maken hebben:

- eisen aan de kwaliteit van het antwoord op de vraag die is gesteld;
- eisen aan de kwaliteit van de met het model uit te voeren analyses;
- eisen aan de kwaliteit van het model;
- eisen aan de calibratie, met name ten aanzien van wanneer gestopt kan worden met calibreren.

2.4.2 Eisen aan expertise

Om een bepaald probleem op te lossen met een model is een bepaalde deskundigheid van de betrokkenen nodig op het terrein van de onderzoeksdiscipline. Van tevoren moet zo goed mogelijk in kaart worden gebracht welke deskundigheid nodig is, en of hierin wordt voorzien door de mensen die al bij het project betrokken zijn. Als dit laatste niet het geval is, moet worden aangegeven hoe de expertise alsnog kan worden verkregen.

2.4.3 Schatting benodigde capaciteit/menskracht

Net als bij elk ander project moet van tevoren geschat worden hoeveel capaciteit nodig is om het project te volbrengen. Soms is echter van buiten opgelegd of op een andere manier maar een beperkte hoeveelheid tijd/menskracht beschikbaar. Bij de planning van het project moet hier rekening mee worden gehouden. Er moet een duidelijke relatie zijn tussen omvang van het project (in menskracht) en het ambitieniveau van het modelproject. Een indicatie (en meer niet) van de globale tijdsbesteding zou er als volgt uit kunnen zien:

• begin een logboek	0 %
• definieer het modelproject	10 %
• maak het model	25 %
• analyseer het model	30 %
• gebruik het model	10 %
• interpreteer de resultaten	5 %
• rapporteer	20 %

Door terugkoppelingen worden sommige 'stappen' (of 'sub-stappen') meerdere keren doorlopen (zie de figuur bij stap 0: Het modelleerproces). De hier aangegeven tijdsbesteding heeft betrekking op de totaal te besteden tijd. Heel soms ligt er al een kant-en-klaar model dat direct ingezet kan worden. Dan nemen uiteraard de stappen 3 en 4 veel minder tijd in beslag.

2.4.4 Communicatie en rapportage

Hier moet worden vastgelegd hoe en met wie over het project wordt gecommuniceerd (vergaderingen, workshops, studiedagen, enzovoort). De eisen die aan rapportage van het project moeten worden gesteld zijn:

- wat moet er gerapporteerd worden?
- aan wie?
- wanneer?

Van tevoren moet worden vastgelegd hoe in dit project met deze eisen wordt omgegaan, zodat daar later geen discussie meer over kan ontstaan. Bij kleine routinematige projecten zal er vaak alleen een rapport hoeven worden opgesteld en eventueel een oplevering van de resultaten, waarbij de vastlegging van het project door wat het Handboek voorschrijft (de formulieren) over het algemeen voldoende is.

Vaak is het handig een begeleidingscommissie in het leven te roepen die helpt om de kwaliteit van het proces te bewaken. Sommige opdrachtgevers eisen dit.

2.4.5 Andere eisen

In sommige projecten worden aanvullende eisen geformuleerd. Daarbij kan bijvoorbeeld gedacht worden aan:

- gebruik van de resultaten afkomstig uit andere modellen en de eisen die daaraan moeten worden gesteld;
- aanleveren van resultaten van dit modelproject voor gebruik door andere modellen;
- wetenschappelijke rapportage;
- de aan het model ten grondslag liggende aannames;
- de kwaliteit van de veldgegevens;
- formuleren van aansprakelijkheden ten behoeve van de eindoplevering;
- evaluatie van twee of meer verschillende aanpakken (met verschillende modellen en/of modelprogramma's);
- oplevering van een geïmplementeerd model aan de opdrachtgever;
- verwerking van de modelresultaten in een beleidsadvies;
- aanleveren van digitale bestanden van (een deel van) de resultaten.

2.5 Maak een werkplan en begroting

Afhankelijk van wat gebruikelijk is moeten de activiteiten in de vorm van een project worden uitgevoerd (plan, projectleiding, administratie, enzovoorts). Hoe één en ander projectmatig ook wordt aangepakt, in ieder geval zal volgens normale (in de organisatie gebruikelijke) methoden een werkplan moeten worden opgesteld, waarin worden opgenomen:

- probleemdefinitie (stap 2.1: Beschrijf het probleem);
- doel van het project (stap 2.2: Definieer het doel);
- afspraken over de verantwoording (stap 2.3);
- welke kwaliteitseisen aan de eindresultaten moeten worden gesteld (stap 2.4.1);
- welke eisen aan de mensen moeten worden gesteld die het project uitvoeren (stap 2.4.2);
- benodigde capaciteit aan mensen en andere benodigdheden (stap 2.4.3);
- eisen aan communicatie en rapportage (stap 2.4.4);
- andere eisen die aan het project gesteld worden (stap 2.4.5);
- hoe het project uitgevoerd zal worden.

Daarnaast moet het werkplan de volgende onderdelen bevatten:

- eventuele onderverdeling van het modelproject in deelprojecten;
- tijdsplanning;
- allocatie van de taken aan projectteamleden.

Aan het eind van deze stap moet het project zo helder mogelijk zijn vastgelegd. Wel moet het uiteraard mogelijk blijven in te spelen op onvoorziene omstandigheden en inzichten. Het is dus niet de bedoeling het project in dit stadium al volledig dicht te timmeren.

Het gebruik van ISO 9001 is overigens aan te bevelen. Deze normen van de International Organization for Standardization gaan over de eisen gesteld aan organisaties die zich bezighouden met zaken variërend van ontwerp en ontwikkeling tot productie, installatie en dienstverlening.

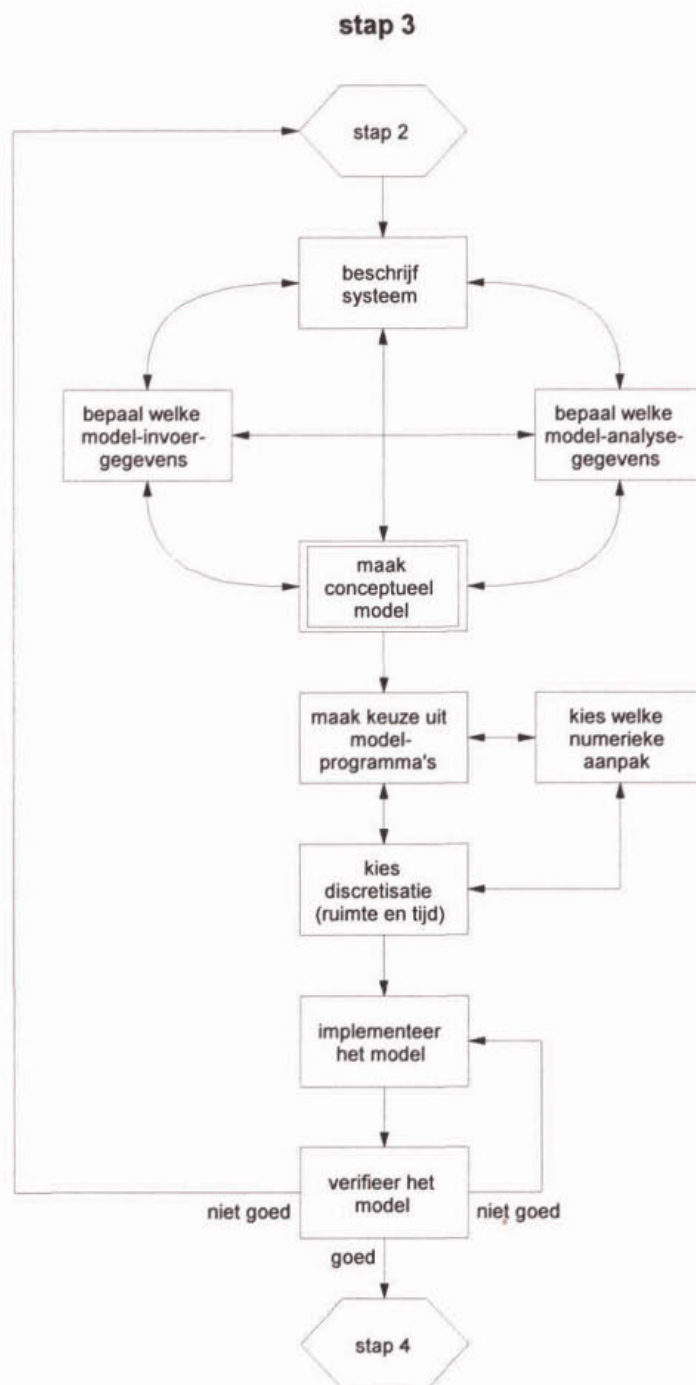
Literatuur

Knepell, P.L. and D.C. Arangno, 1993.

Molen, D.T. van der, 1999.

Stap 3 Zet het model op

3.1 Kies het begin: gegevensanalyse, systeembeschrijving of conceptueel model



Het opzetten van een model begint met het analyseren van de beschikbare en benodigde gegevens, het beschrijven van het systeem en het maken van een conceptueel model. De volgorde van deze 4 stappen kan van geval tot geval en van modelleur tot modelleur verschillen, en is ook niet echt van belang. Vaak is het een iteratief proces. In dit Handboek is er bij de beschrijving van de stappen voor gekozen te beginnen met het analyseren van de gegevens, maar naar keuze kan dus ook begonnen worden bij het maken van de systeembeschrijving of het opstellen van het conceptuele model.

3.2 Analyseer de gegevens

3.2.1 Bepaal welke gegevens nodig zijn om het model te maken en te draaien

Om een model te kunnen maken en draaien zijn er veel gegevens nodig. Deze kunnen betrekking hebben op:

- schematisatiegegevens (fysische gebiedsgegevens, gegevens van de randen);
- invoergegevens (beginwaarden en invoertijdseries);
- (proces) parameters;
- gegevens voor scenario's en maatregelen (combinaties van het bovenstaande).

In dit stadium moet worden nagegaan welke gegevens precies benodigd zijn om het probleem op te lossen. Uiteraard kan deze stap niet altijd los worden gezien van het (conceptuele) model en het modelprogramma waarmee je uiteindelijk wilt gaan werken, maar in dit stadium is het vooral belangrijk te denken vanuit de fysische processen zoals die bij de probleembeschrijving (stap Beschrijf het probleem) zijn gedefinieerd. Die vormen uiteindelijk de basis voor de keuze van een modelprogramma. In een iteratief proces kan later nog eens op deze stap worden teruggekomen als de definitieve keuze voor een bepaald modelprogramma gemaakt is.

3.2.2 Bepaal welke gegevens nodig zijn om het model te analyseren

Om het model te kunnen analyseren (bijvoorbeeld gevoeligheidsanalyse en calibratie) moeten er, aanvullend op de invoergegevens, nog meer gegevens worden verzameld. Deze hebben betrekking op drie aspecten:

- metingen om de modelresultaten mee te kunnen vergelijken (niet nodig voor een gevoeligheidsanalyse);
- kennis over de parameters: welke zijn bekend en welke zijn niet precies bekend;
- statistische verdelingen (vaak alleen maar een range) van alle parameters die niet nauwkeurig bekend zijn.

Deze gegevens moeten dus geïnventariseerd worden (wat is er en waar zijn ze), maar ook (voor later) daadwerkelijk verzameld.

3.2.3 Over de beschikbaarheid van gegevens en meta-informatie

In dit stadium van het project is het eigenlijk al voldoende over de benodigde gegevens te weten:

- dat ze er zijn;
- waar ze zijn;
- of ze in digitale vorm beschikbaar zijn;
- wat ongeveer de waarden zijn;
- hoe moet worden omgegaan met uitbijters;
- hoe moet worden omgegaan met ontbrekende gegevens;
- de kwaliteit van de gegevens;
- wie is verantwoordelijk voor het aanleveren van de gegevens.

Deze kennis is dus globale kennis en meta-kennis (waar zijn de gegevens, hoe en door wie gemeten, welke nauwkeurigheid, enzovoort). Het is overigens vaak handig om de gegevens ook alvast daadwerkelijk te verzamelen.

Tenslotte verdient het aanbeveling om aandacht te besteden aan het eigendomsrecht van gegevens en de juridische aspecten.

3.3 Maak een systeembeschrijving

Als er een redelijk overzicht is van het probleem, het doel van het project en welke gegevens er allemaal beschikbaar zijn, kan een afbakening gemaakt worden tussen wat wel en wat niet tot de te modelleren zaken behoort. Meestal is dit een fysiek deel van de werkelijkheid.

De systeemdefinitie kan als volgt worden opgesteld:

1. som alle relevante onderdelen (componenten) van het systeem op;
2. beschrijf de onderlinge relaties tussen de componenten (de processen);
3. beschrijf de relaties tussen de systeemcomponenten en de omgeving (= alles wat niet tot het systeem behoort).

De systeemgrens vormt de scheiding tussen systeem en omgeving. Vaak is het voldoende om duidelijk de systeemgrens te definiëren. Dit moet bij voorkeur zo gebeuren dat de scheiding tussen systeem en omgeving gekenmerkt wordt door een duidelijke overgang van systeem-eigen en systeem-niet-eigen processen.

3.4 Maak een conceptueel model

3.4.1 Naar een conceptueel model

De eerste echte modelleerstep is het opstellen van een conceptueel model (of modelconcept). Dit conceptuele model beschrijft in woorden of in wiskundige vergelijkingen de functionele relaties tussen componenten waarmee het systeem (de werkelijkheid) zal worden vereenvoudigd tot een model. Eén en ander kan eventueel ondersteund worden met tekeningen, grafieken en schema's. Het resultaat is het model zonder dat expliciet alles in wiskundige termen beschreven staat.

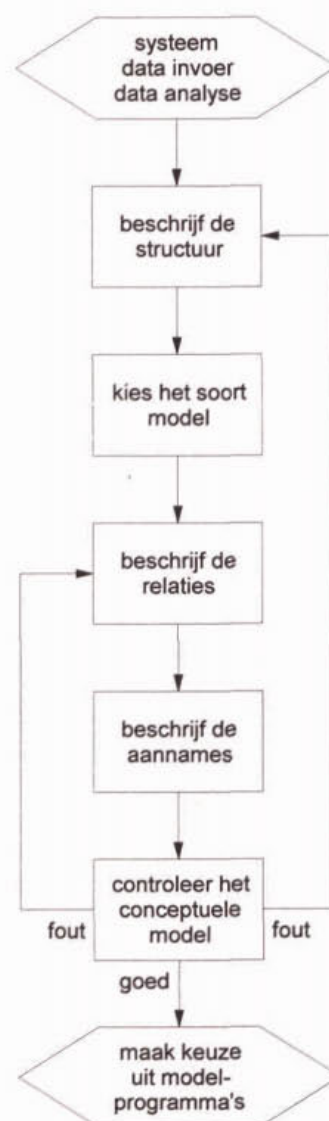
Het belang van een conceptueel model is vooral dat het idee dat aan het model ten grondslag ligt wordt beschreven en aan anderen kan worden voorgelegd.

Het vastleggen van de grenzen van het model vormt een essentiële stap in het vaststellen van het conceptuele model: wat wordt nog wel meegenomen en wat niet, hoe ver (in ruimte en tijd) moet buiten het doelgebied worden meegenomen, welke processen treden op de rand op en hoe wordt de interactie met de omgeving (per deel van de grens) vertaald.

Belangrijk is dat hier een keuze gemaakt wordt in de mate van detaillering, met name met betrekking tot de vraag welke processen in het model worden opgenomen. Ook wat betreft tijd en ruimte moet een eerste keuze gemaakt worden. Hierop wordt in stap 3.6 (Kies een discretisatie van het model in ruimte en tijd) en in bijlage 1 verder ingegaan. De detaillering in componenten en processen (aggregatieniveau van het model) moet bij het opstellen van het conceptuele model al worden gekozen.

Aan deze eerste echte modelleerstep en de overige stappen binnen dit hoofdstuk wordt ook in deel II van dit Handboek (Valkuilen en gevoeligheden) voor alle typen modellen ruim aandacht besteed. Daarbij wordt onder meer aangegeven op basis waarvan de in dit hoofdstuk beschreven keuzes gemaakt kunnen worden, in welke situaties bepaalde keuzes uitgesloten zijn of juist een voorkeur genieten, en wat de gevolgen van de gemaakte keuzes zijn.

conceptueel model



3.4.2 Beschrijf de structuur

In het conceptuele model moet in ieder geval de structuur van het model worden vastgelegd. Dit wil zeggen dat het netwerk van componenten (onderdelen), waaruit het model wordt opgebouwd hier moet worden beschreven, evenals de relaties tussen de componenten (meestal 'processen'). Het gaat om de volgende componenten:

- invoervariabelen (= geïnterpoleerde invoergegevens);
- toestandsvariabelen;
- andere variabelen.

3.4.3 Kies het soort model

Bij deze stap moeten eerst de onafhankelijke variabelen worden gekozen. Bij een dynamisch model is dat bijvoorbeeld de tijd en verder 1 of meer ruimtelijke dimensies. Nadat de onafhankelijke variabelen zijn bepaald, moet het soort model worden gekozen. Dat is vooral afhankelijk van het toepassingsdomein (chemisch, fysisch, ecologisch, enzovoorts), maar ook van onder meer tijd en ruimte. Als alleen de tijd een rol speelt, is er sprake van een dynamisch model voor een punt in de ruimte (0D). Als ruimte en tijd de onafhankelijke variabelen zijn, dan kan het model 1D, 2D of 3D zijn.

Bij deze stap is het raadzaam de handleiding van een bepaald modelprogramma te raadplegen om de keuze te onderbouwen.

3.4.4 Definieer de relaties tussen variabelen

De relaties geven aan welke variabele een of meer andere variabelen beïnvloedt. Hierbij kan het gaan om toestandsvariabelen, invoervariabelen of andere variabelen. Voor zover dat nog niet elders of door anderen is gebeurd, moet er hier worden vastgelegd hoe de relatie wiskundig (of met woorden) wordt gedefinieerd.

3.4.5 Leg de aannames vast

Ieder model-concept bevat impliciet een (groot) aantal aannames. Een evaluatie van het succes of falen van een modelproject staat of valt met de mogelijkheid de veronderstellingen en aannames in het concept te gebruiken om de resultaten te interpreteren. Er moet dus een lijst worden opgesteld van alle aannames, waarbij tevens wordt vermeld waarom deze aanname is gedaan of waarom deze aanname gerechtvaardigd is. Vergeet niet expliciet aan te geven hoe de begrenzing van het model tot stand is gekomen. Het verwijzen naar een andere modelstudie (met dezelfde aannames) is soms ook gerechtvaardigd.

3.4.6 Controleer het conceptuele model

Als er een conceptueel model is, moet men zich vervolgens afvragen of dit concept het beste concept is, gegeven het probleem, het doel van het model en de beschikbare gegevens en technieken. Dit kan op een aantal manieren worden onderzocht, maar geen van deze manieren zijn erg formeel. Het beste is om enkele concepten met elkaar te vergelijken door experimenteel te werk te gaan (dat wil zeggen maak en analyseer het model conform de verschillende concepten en vergelijk de resultaten hierna). Minder tijdrovend is om het conceptuele model voor te leggen aan deskundigen (gesprek, workshop, opdrachtgever, begeleidingscommissie of iets dergelijks).

Als blijkt dat er inconsistenties (zaken die met elkaar in tegenspraak zijn) in het conceptuele model zitten, of wanneer er andere redenen zijn om het conceptuele model onacceptabel te vinden moet je teruggaan naar eerdere stappen.

3.5 Maak een keuze uit bestaande modelprogramma's

In de voorgaande stappen is zo goed mogelijk bepaald aan welke criteria een model moet voldoen. Met behulp van deze criteria kan nu gezocht worden naar geschikte modelprogramma's (dat wil zeggen: een wiskundig model in de vorm van een computerprogramma, bedoeld om modellen mee te bouwen door middel van het invoeren van gegevens). Eventueel kan ook nieuwe programmatuur ontwikkeld worden. Dit laatste is in het algemeen echter niet aan te raden, tenzij men voldoende kennis en ervaring heeft of het echt niet anders kan.

De keuzes die hier moeten worden gemaakt worden mede bepaald door de keuze van het type model, afhankelijk van de dimensies in ruimte en tijd. Voor een 0D-model kan er bijvoorbeeld uit een andere serie beschikbare modelprogramma's worden gekozen dan bij 3D-modellen.

De keuze wordt verder bepaald door bijvoorbeeld projectmatige zaken en de computer. Voorbeelden hiervan zijn:

- beschikbare hardware platform;
- beschikbare operating systeem;
- beschikbare expertise;
- beschikbare tijd;
- persoonlijke voorkeuren van de modelleur met betrekking tot interfaces;
- wensen of voorschriften van de opdrachtgever;
- wat is beschikbaar in de organisatie.

Tot slot is ook een belangrijk praktisch criterium of er een toegankelijke handleiding voor het modelprogramma beschikbaar is en een helpdesk voor eventuele toekomstige problemen. In de toekomst zullen dit soort zaken waarschijnlijk geregeld gaan worden via het STOWA-watermerk voor modelprogramma's. Tegen die tijd kan volstaan worden met de aanbeveling om bij voorkeur programma's te kiezen met een STOWA-watermerk.

3.6 Kies een discretisatie van het model in ruimte en tijd

Afhankelijk van het doel van het model en van de beschikbare gegevens is gekozen voor een 0D, een 1D, een 2D of een 3D benadering. Nu moet nog een feitelijke schematisatie (hoe zit het model ruimtelijk in elkaar) worden gekozen. Verder moet ook de rest van de discretisatie (keuzen van ruimtelijke en temporele resolutie) worden gekozen.

Bij al deze zaken zijn uiteraard ook weer het doel en de beschikbare data van belang, maar er moet ook gekeken worden naar de beschikbare tijd en de beschikbare menskracht (= geld). Heel vaak hangt de feitelijke discretisatie ook samen met de keuze van het modelprogramma.

De definitieve keuzes met betrekking tot de discretisatie worden gemaakt na het kiezen van de numerieke aanpak (stap 3.7: Kies een numerieke aanpak).

3.7 Kies een numerieke aanpak

In bepaalde modelprogramma's kan er gekozen worden tussen diverse methoden om de (differentiaal)vergelijkingen numeriek (of analytisch) op te lossen. Analytische methodes zijn in het algemeen veel sneller, maar lang niet altijd beschikbaar. Vandaar dat vaak gewerkt wordt met numerieke methodes.

De diverse methodes onderscheiden zich onder andere qua discretisatie (eindige-differentiemethode, eindige-elementenmethode of analytische elementenmethode). Daarnaast kan er soms gekozen worden uit verschillende numerieke integratie-algoritmen voor de oplossing van de differentiaalvergelijkingen in de tijd.

Beide keuzes hangen nauw samen met de stabiliteit van de oplossing, de discontinuïteiten (eventueel stijfheid van het stelsel), de gewenste nauwkeurigheid en efficiëntie. Dit zijn zaken die tot het terrein van de numerieke wiskunde behoren en die al snel buiten het bereik van dit Handboek vallen. Een deel van deze problematiek heeft ook te maken met de uiteindelijke discretisatie (stap 3.6: Kies een discretisatie van het model in ruimte en tijd) en met de mogelijkheden die geboden worden door de programmatuur.

3.8 Implementeer het model

In deze stap wordt het model door middel van een gekozen modelprogramma op de computer 'gezet'. Eigenlijk is dit een recht-toe-recht-aan stap, maar (afhankelijk van het modelprogramma) kan dit soms veel werk met zich mee brengen. Deze stap moet vooral zorgvuldig gebeuren, omdat fouten die hier worden gemaakt soms moeilijk te vinden zijn.

Belangrijk is dat vooraf goed de handleiding van het modelprogramma gelezen is, zodat op dit moment goed bekend is waar men op moet letten bij het implementeren. Alleen mensen met veel expertise in het gebruik van het modelprogramma in kwestie zullen zonder dit hulpmiddel tot een goed product (=model) komen.

3.9 Verifieer het model

3.9.1 Verificatie versus validatie

Verificatie is de stap, waarin gecontroleerd wordt of het wiskundige model (en dus ook het conceptuele model) wel op een goede manier omgezet is in een computerprogramma. Een soort toetsing dus van de vertaalslag. *Validatie* daarentegen controleert op een inhoudelijke manier de geschiktheid van het model om een onafhankelijke (dat wil zeggen nog niet in de calibratie gebruikte) gegevensset te simuleren (stap 4.5). Hiermee wordt tevens de geschiktheid van het model bepaald ten aanzien van het doel (kan het wel de vragen beantwoorden die aan het model mogen worden gesteld; stap 2.2).

Een eenvoudige *verificatie* kan uit de volgende onderdelen bestaan:

- controle op de voorschriften van het gebruikte modelprogramma (stap 3.9.2);
- dimensie/eenheden-analyse (alleen voor programmerende modelleurs; stap 3.9.3);
- run een voorbeeld model (met schematisatie/discretisatie) dat meegeleverd wordt met het modelprogramma (stap 3.9.4);
- controleer de ruimtelijke schematisatie (stap 3.9.5).

Verificatie zal nooit leiden tot zekerheid omtrent een correcte implementatie. Hooguit wordt het vertrouwen erin hierdoor verhoogd.

3.9.2 Controle op implementatievoorschriften van het gebruikte modelprogramma

Nadat het model geïmplementeerd is, is het verstandig om achteraf te controleren of er geen fouten zijn gemaakt bij de implementatie. Eventuele problemen kunnen met behulp van de producent van het modelprogramma of met een meer ervaren gebruiker meestal worden opgelost.

3.9.3 Dimensie-analyse (alleen voor programmerende modelleurs)

Een tweede stap in de verificatie van een model kan een dimensie-analyse zijn. Eigenlijk worden dan niet alleen de dimensies gecontroleerd, maar ook of de juiste eenheden zijn gebruikt. In deze stap worden dus niet alleen verkeerde dimensies/eenheden opgespoord, (bijvoorbeeld W versus J), maar ook fouten in eenheden en conversiefactoren ($\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$ en $\text{kg m}^2 \text{h}^{-1}$).

3.9.4 Run een bekend eenvoudig voorbeeld

Sommige modelprogramma's leveren voor testdoeleinden een eenvoudig model mee, dat wil zeggen een eenvoudige schematisatie, invoer, enzovoort, waarbij de uitvoer bekend is. Als het programma een dergelijk testprogramma niet heeft, kan de modelleur natuurlijk ook zelf een eenvoudige case definiëren, waarbij hij of zij vooraf weet wat eruit zou moeten komen. Bij de run met standaard invoer is het de bedoeling dat het model niet crasht, dat de uitkomsten te begrijpen zijn en bovendien overeen komen met de verwachtingen.

3.9.5 Controleer de ruimtelijke schematisatie

De ruimtelijke schematisatie moet altijd worden gecontroleerd. Sommige modelprogramma's kunnen zelf overzichten maken van de schematisatie, zoals totaalwaarden van de oppervlakten en de volumes. Ook het maken van een plaatje is vaak erg inzichtelijk.

Literatuur

Kooiman, J.W., 1997.

Walsum, P.E.V. van, en A.A. Veldhuizen, 1997.

Zeigler, B.P., 1996.

Stap 4 Analyseer het model

4.1 Maak een plan van aanpak voor de analyse activiteiten

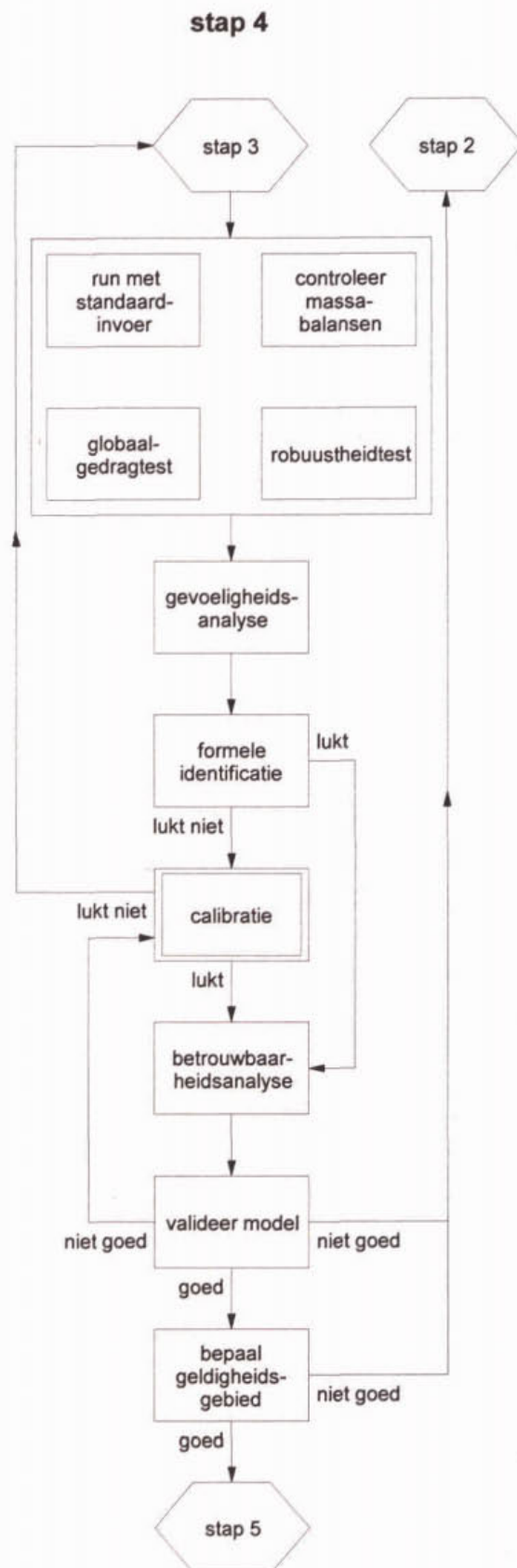
Als er na stap 3 een model ligt, waarin een redelijk vertrouwen kan worden gesteld, moet het model verder worden onderzocht. De eerste stap is het opstellen van een plan waarin een overzicht wordt gegeven van de analyses waaraan het model wordt onderworpen. Tevens moet daarbij voor elke analyse worden vastgelegd aan welke kwalitatieve eisen getoetst moet worden.

De analyse van het model kan heel simpel maar ook heel uitvoerig en complex worden uitgevoerd. Afhankelijk van de mogelijkheden en vereisten kunnen/moeten onderstaande tests worden uitgevoerd:

- globale analyses (stap 4.2):
 - run met standaard invoer (stap 4.2.1);
 - globaal-gedrag-test (stap 4.2.2);
 - controle van massabalansen (stap 4.2.3);
 - robuustheidstest (4.2.4);
- gevoeligheidsanalyse (stap 4.3);
- (formele) identificatie (nauwelijks aan de orde voor de meeste modellen; stap 4.4);
- calibratie (stap 4.5);
- betrouwbaarheidsanalyse (stap 4.6);
- validatie (stap 4.7).

Nadat voorgaande activiteiten zijn uitgevoerd kan het geldigheidsgebied van het model bepaald worden (stap 4.8) en rest tot slot de controle of de doelstelling gehaald is.

In dit plan moet niet alleen gekozen worden welke analysetechnieken worden uitgevoerd, maar ook hoeveel tijd daar aan besteed wordt en wat de te verwachten resultaten zijn. Belangrijk is dat voor elke stap wordt vastgelegd wat er precies is gebeurd, door wie, wanneer, met welke invoergegevens, enz.



4.2 Analyseer globaal het model

Zoals in de vorige paragraaf is beschreven zijn er vier meestal eenvoudige tests waarmee globaal een eerste indruk kan worden verkregen van de correcte werking van het model. Deze tests zijn:

- een run met standaard invoer (stap 4.2.1);
- globaal-gedrag-test (stap 4.2.2);
- controle van massabalansen (stap 4.2.3);
- robuustheidstest (stap 4.2.4).

In onderstaande paragrafen worden de diverse tests besproken.

4.2.1 Doe een run met standaard invoer

De meest voor de hand liggende test is het uitvoeren van een enkele run met zogenaamde ‘standaard invoer’. Dit is meestal een eenvoudige case waarvan de modelleur vooraf weet wat eruit zou moeten komen. Als dit al bij stap 3.9 is uitgevoerd, hoeft het hier uiteraard niet nog een keer te gebeuren. Een standaard run moet goed gedocumenteerd worden: wat is de gebruikte modelversie (programma met de bijbehorende gegevens zoals die in de vorige stap zijn ingevoerd), wat is de invoer voor de testberekening, en wat zijn de resultaten?

4.2.2 Voer de globaal-gedrag-test uit

Van ieder model moet de globale werking worden onderzocht. Dit betekent dat het model veranderingen in de invoer of in de stuurvariabelen moet vertalen in een veranderde uitvoer die op een verwachte manier het gedrag van het systeem beschrijft.

4.2.3 Controleer de massabalansen

De meeste modelprogramma's hebben voorzieningen om de massabalans (of energiebalans) sluitend te maken en te houden. Toch moet men zich hiervan verzekeren door het te controleren. Als er geen voorzieningen zijn moet de modelleur zelf deze controle uitvoeren.

4.2.4 Doe een robuustheidstest

Bij een robuustheidstest wordt het model gevoed met extreme waarden om te onderzoeken onder welke condities het model vastloopt (of ander ongewenst gedrag gaat vertonen). Het meeste werk is hier een beperkt aantal interessante invoersets te kiezen. Bij veelgebruikte modellen is deze exercitie niet echt nodig, omdat dan het geldigheidsgebied van het model precies bekend is, dat wil zeggen onder welke omstandigheden het model gebruikt mag worden (stap 4.8). De handleiding van het modelprogramma kan hierin ook (deels) de weg wijzen.

4.3 Voer een gevoeligheidsanalyse uit

Een volgende stap is het systematisch testen van het modelgedrag voor veranderingen in de invoer, de initiële condities en parameters. Dit kan handmatig of met speciaal hiervoor geschreven programma's (zie paragraaf 4.5). Het modelgedrag dient te worden bestudeerd aan de hand van veranderingen van outputvariabelen. De uitkomsten van deze stap geven informatie met betrekking tot de nauwkeurigheid die gewenst is voor invoer, initiële condities en parameters. Anderzijds geeft het aan voor welke parameters parameterschatting zinvol is.

Wanneer veranderingen in de invoer, initiële condities en parameters tot geen of zeer extreme veranderingen in modelgedrag leiden, kan de modelstructuur worden heroverwogen. Aan de andere kant zijn de uitkomsten alleen geldig voor het bereik waarbinnen getest is.

De aangebrachte veranderingen in invoer, initiële condities en parameters dienen wel realistisch te zijn. Vaak wordt een vast percentage van een nominale waarde genomen of een percentage van de standaard deviatie. Het testen van een minimale en een maximale afwijking is wenselijk bij niet-lineaire modellen. Veranderingen kunnen één voor één worden bekeken of gecombineerde veranderingen kunnen worden bestudeerd. Tenslotte dient een keuze gemaakt te worden hoe het modelgedrag wordt beoordeeld. Behalve de keuze van (de gewichten die toegekend worden aan verschillende) variabelen, is de periode van belang; een gemiddelde, een bepaald moment of de grootste afwijking? Initiële condities zullen bijvoorbeeld minder een rol spelen naarmate de periode langer wordt of het ijkpunt verder weg ligt.

Er zijn vele studies gedaan naar het wat, het waarom en het hoe van gevoeligheidsanalyses. Globaal zijn er verschillende mogelijkheden:

- **een analytische gevoeligheidsanalyse:** als de modelvergelijkingen analytisch kunnen worden opgelost is het effect van veranderende factoren (bijvoorbeeld parameters) op de modeluitkomsten direct te berekenen en grafisch uit te zetten;
- **afzonderlijk variëren van een aantal als onafhankelijk veronderstelde factoren:** bij deze aanpak wordt telkens één factor tegelijk veranderd. Het belangrijkste nadeel van deze methode is dat de effecten van interacties tussen de factoren worden verwaarloosd;
- **klassieke gevoeligheidsanalyse:** rond de instelwaarden van de factoren wordt het model gelineariseerd, waardoor op ieder tijdstip en voor iedere toestandsvariabele de afgeleide naar een factor in één enkele modelrun kan worden bepaald en zo de gevoeligheid van het model eenvoudig kan worden bepaald. Deze methode is alleen bruikbaar als de factoren maar weinig mogen afwijken van de instelwaarde en het resultaat zal sterk afhangen van de gekozen instelwaarde. Een ander nadeel is dat interacties tussen factoren worden verwaarloosd;
- **'Response Surface' Methode:** hierbij wordt een metamodel gemaakt van het model. Dit metamodel is lineair in de coëfficiënten en bestaat vaak uit een eerste of tweede orde Taylorreeksbenadering. In het eerste geval worden geen interacties tussen de factoren meegenomen en in het tweede geval wel. Het metamodel moet overigens nog wel worden gevalideerd, bijvoorbeeld door kruisvalidatie;
- **'Monte Carlo' analyse:** hierbij worden alle te variëren factoren tegelijkertijd gevarieerd (getrokken uit hun statistische verdeling), dus niet systematisch. Er moeten relatief zeer

veel runs worden gedaan en na afloop wordt met behulp van lineaire regressie het verband tussen de modeluitkomsten en de factoren bepaald. In tegenstelling tot de klassieke gevoeligheidsanalyse hoeft er van te voren geen aannames over de lineariteit te worden gemaakt;

- **'Regionalized Sensitivity Analysis'**: door het model een behoorlijk aantal keren (Monte Carlo) te runnen en de runs te verdelen in acceptabel en onacceptabel kunnen twee empirische verdelingsfuncties worden verkregen, waarna de verschillen tussen de verdelingen kunnen worden gebruikt om een maat voor de gevoeligheid te schatten.

Het gaat te ver om al deze mogelijkheden hier uit te leggen, maar in de literatuurlijst zijn enige referenties opgenomen (Beck, 1987, Janssen, 1990a, 1990b, 1992a, 1992b, Kleijnen & Groenendaal, 1988).

Een analytische aanpak is zelden mogelijk, maar als die mogelijk is, is deze sterk te verkiezen boven elke andere. Het afzonderlijke variëren van factoren is eenvoudig uit te voeren, maar gaat voorbij aan interacties tussen factoren (covariantie).

Welke methode er ook toegepast wordt, de resultaten van de gevoeligheidsanalyse moeten verwerkt worden tot gevoeligheidsmaat. Hiervoor komen (afhankelijk van de methode) in aanmerking: partiële afgeleiden, regressie-coëfficiënten en een discrepantiemaat. Ook hiervoor geldt dat het te ver gaat om al deze mogelijkheden uit te leggen, maar in de literatuurlijst zijn enige referenties opgenomen.

4.4 Voer een (formele) identificatie uit (als dat kan)

Eigenlijk zou een model 'geconstrueerd' moeten kunnen worden op basis van de kennis die er over het systeem (= de veldsituatie) beschikbaar is. Iets minder vergaand: de parameterwaarden van een model moeten met grote nauwkeurigheid kunnen worden bepaald als er voldoende metingen/waarnemingen in het veld zijn gedaan. In de echte praktijk is dit nauwelijks mogelijk. Meestal zijn er te weinig veldwaarnemingen, zijn de tijdseries te kort of het aantal te identificeren parameters te groot. In dat geval is calibratie een oplossing (stap 4.5).

4.5 Calibreer het model

4.5.1 Inleiding

Als een model niet volledig geïdentificeerd kan worden (stap 4.4) is calibratie noodzakelijk. Zo kan er in ieder geval voor gezorgd worden dat er een zekere mate van overeenkomst (fit) is tussen modeluitkomsten en metingen in het veld. Vooraf moeten criteria worden vastgesteld (stap 2.4.1) om in een betrouwbaarheidsanalyse (stap 4.6) te kunnen toetsen of het model na calibratie voldoende betrouwbaar is voor het te onderzoeken probleem. In deze paragraaf wordt het principe van calibratie in grote lijnen beschreven. Echter, goed en efficiënt calibreren is ook een kwestie van ervaring.

Vandaar dat in deel 2 van dit Handboek (de valkuilen en gevoeligheden) bij alle soorten modellen ervaringen van modelleers zijn opgeschreven.

Over het calibreren van modellen bestaat een uitgebreide literatuur, uiteenlopend van zeer geavanceerde wiskundige verhandelingen tot op een voor een specifieke discipline beschreven toepassing. Een goed leesbare introductie is gegeven door Hemker (1997).

Bij calibreren staat de vergelijking tussen modeluitkomsten en veldwaarnemingen centraal. Een belangrijk uitgangspunt is dat naarmate het verschil tussen de berekende modeluitkomsten en de veldwaarnemingen kleiner is, het model beter wordt. Tot op zekere hoogte is dit ook het geval, immers bij een perfect model wordt dit verschil uitsluitend veroorzaakt door de meetfouten. Echter, in de praktijk is een goede fit lang niet altijd een garantie voor een goed model.

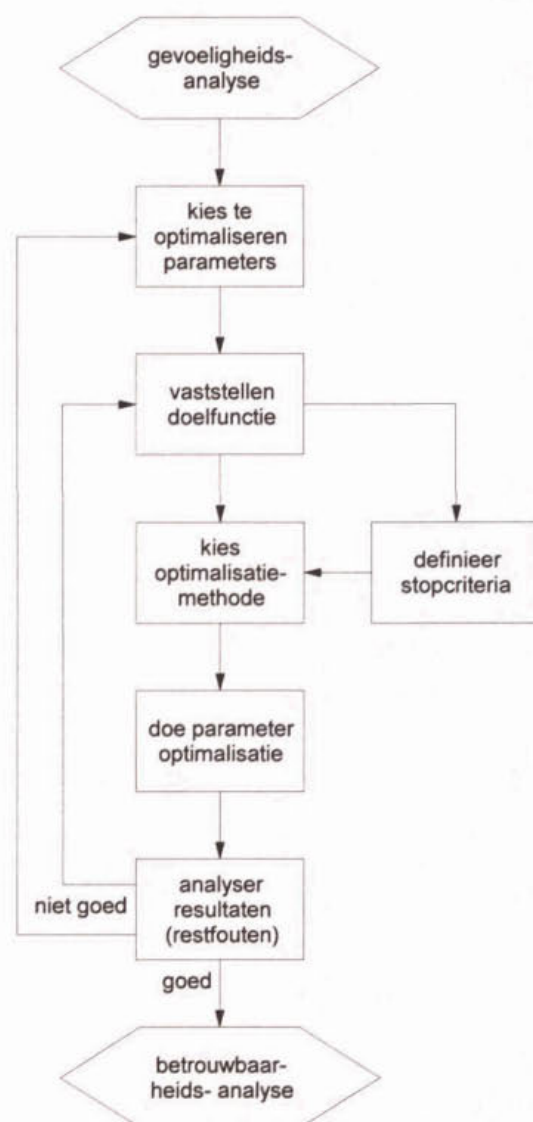
De verschillen tussen de modelresultaten en de veldwaarnemingen worden door een groot aantal factoren bepaald. Deze factoren kunnen worden verdeeld in groepen (eventuele softwarefouten blijven in dit kader buiten beschouwing):

1. Conceptuele fouten. Dit zijn onvolkomenheden in de beschrijving, zoals het (bewust) vereenvoudigen van complexe structuren, het niet meenemen van bepaalde (deel)processen, fouten in de wiskundige beschrijving of numerieke oplossingsmethode.
2. Parameterwaarden. Veel modellen kennen een flink aantal grootheden, waarvan de waarde niet exact bekend is.
3. Fouten in de drijvende krachten. Dit uit zich bijvoorbeeld in fouten in de randenvoorwaarden van het model.
4. Meetfouten in de veldwaarnemingen.

In de praktijk van het modelleren worden de bovenstaande foutenbronnen lang niet altijd expliciet gekwantificeerd. Een benadering waarin alle foutenbronnen integraal kunnen worden meegenomen is Data Assimilatie. Een nadeel van veel Data Assimilatie technieken is echter dat ze veelal complex zijn en niet altijd zijn beschreven in literatuur, die voor modelleers makkelijk toegankelijk is. In het kadertje in deze paragraaf en in bijlage 2 wordt het begrip Data Assimilatie nader toegelicht. Een goed overzicht van Data Assimilatie mogelijkheden bij calibratie is gegeven door Te Stroet (1995). In algemene termen kan het calibratieproces in drie delen worden gesplitst, waarbij de cyclus meestal enige malen herhaald wordt met andere keuzes voor de te optimaliseren parameters:

1. keuze van de te optimaliseren parameters;
2. het berekenen van de optimale waarden;
3. het analyseren van de resultaten van de optimalisatie.

calibratie



4.5.2 Kies de te optimaliseren parameters

Veel modellen kennen een grote hoeveelheid parameters, die al dan niet ruimtelijk verdeeld en/of gecorreleerd kunnen zijn. In vrijwel alle gevallen laat de hoeveelheid veldgegevens echter niet toe dat alle parameterwaarden geoptimaliseerd worden. Dit houdt in dat op een of andere manier het aantal te optimaliseren parameters moet worden teruggebracht door een keuze te maken welke parameters (of combinatie hiervan) worden geoptimaliseerd. Dit kan op vele manieren, onder meer door de 'goed bekende' parameterwaarden als bekende constanten mee te nemen, door groepen parameterwaarden aan elkaar gelijk te stellen (zoneren) of door een (geostatistisch) verband tussen parameters aan te nemen.

Bij de keuze van de te optimaliseren parameters kan men zich laten leiden door de resultaten van de gevoeligheidsanalyse. Daarnaast beschikt de modelleur vaak over expertise om de juiste parameters te kiezen voor een calibratie. Enerzijds moeten ze een behoorlijke invloed hebben op de uiteindelijke modeluitkomsten en anderzijds moeten ze ook 'door de metingen gezien' kunnen worden.

Data Assimilatie

Een belangrijkste kenmerk van Data Assimilatie is dat getracht wordt optimaal gebruik te maken van zowel de procesbeschrijving als de meetinformatie. De kwantificering (in termen van kansverdelingen) van alle bronnen van onzekerheden is hiervoor een noodzakelijke voorwaarde. Data Assimilatie kan zowel worden toegepast bij de calibratie als bij het schatten van de modeluitkomsten in de gebruiksfase (toestandschatting). De voordelen van Data Assimilatie zijn dat:

- procesbeschrijving en meetinformatie (statistisch) optimaal worden gecombineerd zowel voor het calibreren als de toestandschatting;
- de onzekerheden in de calibratie en toestandschatting worden expliciet gekwantificeerd.

De invloed van veldwaarnemingen (zowel in de tijd als in de ruimte) op de calibratie en de toestandschatting wordt expliciet meegenomen en gekwantificeerd. Dit kan eventueel gebruikt worden voor meetnetontwerp en meetnetevaluatie.

4.5.3 Bereken de optimale waarden

Vaststellen van de doelfunctie

Tijdens de calibratie zullen in het algemeen op de een of andere manier de verschillen tussen de veldwaarnemingen en de modeluitkomsten in een doelfunctie (objective function, penalty function) worden beschreven. De doelfunctie kan op vele manieren wiskundig worden geformuleerd, afhankelijk van welke factoren expliciet worden meegenomen. Alle verschillen tussen model en veldwaarneming worden verwerkt, op ieder tijdstip en op iedere positie in de ruimte (voor zover van toepassing) voor één of meer (toestands)variabelen. Eenvoudige, veel gebruikte vormen voor de doelfunctie in het univariate geval (één onbekende variabele/parameter met bijbehorende veldgegevens) zijn:

- de relatieve fout;
- de gemiddelde waarde van het restfout;
- de maximale restfout;
- de kwadraten van de restfouten (kleinste kwadratensom).

Deze hebben ieder hun voor- en nadelen, maar hierop wordt in dit Handboek niet verder ingegaan. Ook in het multivariate (meerdere onbekende parameters/variabele met veldgegevens) geval kan de doelfunctie één getal (maat) opleveren. Dit kan bijvoorbeeld door het maximum of het gemiddelde te nemen van alle maten die per variabele zijn bepaald. Desgewenst kunnen de doelfuncties worden uitgebreid door gewichten aan de verschillende termen toe te kennen om zo bepaalde aspecten meer of minder te benadrukken en additionele voorwaarden (constraints) toe te voegen. De keuze van de doelfunctie wordt in de praktijk vaak bepaald door het modelprogramma dat gebruikt wordt.

Kies een optimalisatiemethode

De essentie van de doelfunctie is dat naar mate het verschil tussen de veldwaarnemingen en de modeluitkomsten kleiner wordt de waarde van de doelfunctie afneemt. Bij de calibratie wordt er dus gestreefd naar minimalisatie van de doelfunctie. In het univariate geval is dit nog redelijk overzichtelijk, maar indien er meerdere parameters geoptimaliseerd moeten worden, is het al snel ondoenlijk om een het overzicht te houden.

Voor het vinden van het minimum van de doelfunctie zijn vele methoden ontwikkeld. Onderscheid kan worden gemaakt tussen *handmatig optimaliseren* en *automatisch optimaliseren*. Uiteraard kunnen beide technieken ook worden gecombineerd.

Bij handmatig optimaliseren wordt door 'proberen' (trial and error) getracht om het minimum te vinden. Dit wordt ook wel treffend aangeduid als de 'methode Heijermans' ('op hoop van zegen'). Door de resultaten van eerdere runs wordt inzicht opgebouwd omtrent de invloed van de verschillende parameters op de waarde van de doelfunctie. De parameterwaarden worden net zolang aangepast totdat de doelfunctie binnen geaccepteerde grenzen ligt. Het voordeel van handmatig optimaliseren is dat het de modelleur veel gevoel kan geven voor de karaktereigenschappen van het model (zie ook gevoeligheidsanalyse). Echter, hoewel een ervaren modelleur voor niet al te complexe problemen tot goede resultaten kan komen, is deze aanpak niet erg reproduceerbaar. Bovendien zal het zelden leiden tot het werkelijke optimum van de doelfunctie.

Een alternatief voor handmatig optimaliseren is het automatisch optimaliseren, waarbij het minimum van de doelfunctie op een systematische wijze in een iteratief proces wordt gevonden. De modelleur hoeft dus zelf niet meer tussentijds de parameterwaarden aan te passen.

Het optimalisatieproces is hierbij eigenlijk een parameterschattingsproces, een zoektocht in de parameterruimte (zoeken in een n -dimensionele ruimte, waarbij n het aantal te schatten parameters is). Vanuit een bepaalde stand van zaken (een bepaalde fit tussen model en veldsituatie, oftewel vanuit een bepaalde waarde van de doelfunctie op dat moment) wordt gekeken of het nog beter kan. Veelal wordt via een bepaalde wiskundige techniek bepaald in welke richting de parameterwaarden moeten worden bijgesteld en hoe groot die bijstelling moet zijn. Het model wordt met de nieuwe parameterwaarden doorgerekend, de waarde van de doelfunctie wordt opnieuw bepaald. Er wordt gekeken of de waarde van de doelfunctie aan de vooraf gestelde criteria voldoet (voldoende klein is). Is dit laatste het geval dan kan worden gestopt, anders wordt er weer één of meer nieuwe vectoren gekozen. Enzovoorts.

Een groot voordeel van automatisch optimaliseren is dat bij veel methoden ook informatie over de betrouwbaarheid van het model wordt gegenereerd. Deze informatie kan gebruikt worden bij de betrouwbaarheidsanalyse.

Hoewel er tegenwoordig erg veel verschillende methoden zijn, allemaal afkomstig uit de wereld van '(global) optimization', worden er maar een beperkt aantal in de wereld van het waterbeheer gebruikt. Het voert te ver om hier een uitvoerig overzicht te geven, vandaar dat maar een beperkt aantal mogelijkheden besproken worden.

De methoden zijn in twee groepen te verdelen: *stochastische* en *deterministische*. De stochastische zijn meestal eenvoudig te implementeren, vereisen geen bepaalde wiskundige structuur (geen partiële afgeleiden naar de parameters om de richting van de bijstelling te bepalen), maar er is ook geen garantie dat in een eindige tijd de gezochte (beste, het globale optimum) oplossing wordt gevonden. Deterministische methoden zijn veel moeilijker te implementeren. Het meest eenvoudig zijn ze te gebruiken als ze zijn ingebouwd in het gebruikte modelprogramma, maar er zijn ook programma's op de markt (bijvoorbeeld PEST, 1994) die gekoppeld kunnen worden met modelprogramma's.

Enkele van de *stochastische methoden* zullen hier in het kort worden besproken. 'Pure Random Search' (PRS) is een methode waarbij de parametervectoren willekeurig (random) worden getrokken uit de statistisch verdelingen van de afzonderlijke parameters. Vervolgens wordt het model met een nieuwe parametervector gerund en de fit bepaald. Net zo lang tot de optimalisatie klaar is. Dit is ook precies wat er gebeurt met een Monte Carlo benadering. Varianten hierop zijn 'Controlled Random Search' (CRS), dat met PRS verschilt in de manier waarop een nieuwe parametervector wordt gekozen. Hierdoor convergeert CRS sneller, maar de eigenschappen van de posterior parametervectoren zijn wat minder aantrekkelijk. Genetische Algoritmen (GA) lijkt hierop, maar heeft minder handige methoden om nieuwe parameters te trekken, maar meer voorzieningen om het optimalisatieproces te sturen. Unified Covering by Probabilistic Rejection (UCPR), een recent ontwikkelde methode, convergeert redelijk snel en heeft aan het einde een verzameling parametervectoren die aantrekkelijke eigenschappen heeft (uniform verdeeld zijn).

Deterministische methoden gebruiken op de een of andere manier de wiskundige structuren. Op deze manier kunnen partiële afgeleiden (naar de parameters) worden bepaald en gebruikt. Relevante methoden voor de soort problemen behandeld in dit Handboek worden hieronder opgesomd. Veel van de methoden maken gebruik van de Jacobiaan. Te noemen valt hier de Gauss-Newton-methode en de hier aan verwante methode van Levenberg-Marquardt (die ook met singulier matrices om kan gaan). Deze methoden gebruiken het 'kleinste kwadraten criterium'. Eenvoudiger in het gebruik zijn directe zoekmethoden, zoals Nelder-Mead of de methode van Powell, maar deze leveren vaak lokale optima. Dan bestaan er nog methoden die tussen directe zoekmethoden en methoden die op de Jacobiaan gebaseerd zijn, in staan, zoals de methode die met DUD wordt aangeduid (Doesn't Use Derivatives) en die ontwikkeld is door Ralston en Jenrich. In plaats van de Jacobiaan te berekenen schatten ze deze. Tenslotte moet ook de veel gebruikte 'adjoint method' van Carrera-Neuman worden genoemd.

Vaak zal in het praktisch gebruik de modelleur overgeleverd zijn aan de ingebouwde mogelijkheden voor calibratie en er daar één van kiezen. Als er meer methoden zijn ingebouwd, kan het vergelijken van twee methoden soms de moeite waard zijn.

Definieer criteria om te stoppen met de optimalisatie

De beste manier om vast te stellen wanneer met de optimalisatie gestopt kan worden is met behulp van een van tevoren vastgesteld criterium voor de doelfunctie. Dit is het geval als er een parametervector gevonden wordt, waarmee het model minder afwijkt van de veldgegevens dan het criterium. Of (bij een andere methode) als alle parametervectoren resultaten geven die voldoen aan het criterium. Bij automatische optimaliseren wordt vaak gestopt als de opeenvolgende iteraties niet meer veranderen dan een tevoren opgegeven criterium. Men neemt dan aan de doelfunctie dicht genoeg in de buurt van het minimum is. Echter men moet bedenken dat het gevonden minimum geldt voor de gekozen set van parameters. Het is goed mogelijk dat een andere keuze van de te optimaliseren parameters een kleinere waarde geeft van de doelfunctie. Derhalve dienen de resultaten van de optimalisatie altijd geanalyseerd te worden.

Niet altijd levert de optimalisatie een bevredigende set parameters op. Hierbij is er een verschil tussen handmatig en automatisch optimaliseren. Een automatische procedure kan niet convergeren naar het juiste minimum, bijvoorbeeld als de doelfunctie weinig gevoelig is voor de te optimaliseren parameters of als gevolg van een te groot aantal te optimaliseren parameters. Bij handmatig optimaliseren loopt de modelleur het risico dat fouten als gevolg van te veel te optimaliseren parameters niet aan het licht komen, met het gevolg dat het model goed lijkt, maar het in werkelijkheid niet is.

In de praktijk worden soms ook wel andere criteria gebruikt om te stoppen. Bijvoorbeeld een van tevoren vastgesteld aantal iteraties of een van tevoren vastgestelde hoeveelheid mensdagen besteed aan calibreren. Dit kan tot zeer onwenselijke resultaten leiden en is dan ook sterk af te raden.

4.5.4 Analyseer de resultaten van de optimalisatie

Als de optimalisatie geëindigd is, moet er aan twee eisen worden voldaan:

- het stopcriterium moet worden gehaald (zie stap 4.5.3);
- de restfouten moeten klein zijn en mogen niet systematisch zijn (dat wil zeggen dat de restfouten eigenlijk 'willekeurig' moeten zijn; zie Hemker, 1997).

Bijvoorbeeld: een hydrodynamisch model kan prima lijken doordat alle berekende modelwaarden kleiner zijn dan een bepaald criterium, bijvoorbeeld x centimeter afwijken van de meetwaarden. Als echter voor alle berekende punten geldt dat ze consequent x centimeter te hoog zitten, dan is er sprake van een systematische fout.

Als het modelconcept goed is en er is een goede keuze gemaakt voor de te optimaliseren parameters zijn de restfouten acceptabel. Indien de restfouten niet acceptabel zijn, dan zijn er verschillende mogelijkheden om verder te gaan. Dit zijn:

- andere calibratiefactoren (parameters) zonder nieuwe gevoeligheidsanalyse (ga naar stap 4.5.2);
- andere calibratiefactoren (parameters) op basis van een nieuwe gevoeligheidsanalyse (ga naar stap 4.3);
- teruggaan en iets aan 'het model' veranderen, bijvoorbeeld aan:
 - de discretisatie (ga naar stap 3.6);
 - de numerieke aanpak (ga naar stap 3.7);
 - het conceptuele model (ga naar stap 3.4.1);
 - de kwaliteitseisen (de criteria) (ga naar stap 2.4.1);
- meer of andere veldgegevens verzamelen (ga naar stap 3.2.2).

Wanneer het model niet bevredigend kan worden gecalibreerd, zal in sommige gevallen toch worden besloten om met de niet perfecte of onbevredigende calibratieresultaten te werken. Het is dan van het grootste belang om de resterende onzekerheid zo goed mogelijk te schatten ten einde te vermijden dat ten onrechte te veel vertrouwen in het model wordt gesteld.

4.6 Voer een betrouwbaarheidsanalyse uit

In deze stap van het simulatie- en modelleerproces moet de resterende onzekerheid worden geschat. Deze stap lijkt op een gevoeligheidsanalyse, maar nu is men geïnteresseerd in het totale effect van onzekere factoren op de modeluitkomsten en niet in de (relatieve) gevoeligheden van factoren. In het kort komt het erop neer dat de onzekerheid in de gecalibreerde parameters (en overige bronnen van onzekerheid die expliciet meegenomen zijn: de onzekerheid in conceptuele fouten en fouten in drijvende krachten) wordt doorvertaald naar de onzekerheid in de modeluitkomst. Sommige calibratiemethoden ondersteunen deze stap (bijvoorbeeld Price's CRS). Eigenlijk mogen resultaten van een gecalibreerd model alleen gepresenteerd worden inclusief de betrouwbaarheid van de modeluitkomsten.

Hoe de analyse moet worden uitgevoerd hangt sterk af van de gekozen of gebruikte calibratiemethode. Bij een recht toe recht aan aanpak van de betrouwbaarheidsanalyse is de onzekerheid in de gecalibreerde parameter vector (en overige bronnen van onzekerheid) te karakteriseren met een variantie-covariantie-matrix. Deze kan vervolgens via het model doorvertaald worden naar een betrouwbaarheidsinterval in de modeluitkomst. In de praktijk is deze aanpak echter vaak niet eenvoudig. Als alternatief wordt wel een min-max benadering gekozen (hetgeen veel op een gevoeligheidsanalyse lijkt) of een betrouwbaarheidsinterval met behulp van een Monte Carlo Simulatie geconstrueerd.

Overigens zeggen betrouwbaarheidsintervallen niet alles. Een interval komt namelijk tot stand na diverse keuzen. Vaak wordt bijvoorbeeld alleen de onzekerheid als gevolg van parameterranges weergegeven. Deze kan volledig wegvallen ten opzichte van onzekerheid in toekomstige input. Ook is het betrouwbaarheidsinterval afhankelijk van een aantal aannamen omtrent de statistische verdeling van de gecalibreerde parameter. Zo wordt veelal verondersteld dat de fout in de parameterwaarde (log)normaal verdeeld is.

4.7 Valideer het model

Om vast te stellen of een handmatig gecalibreerd model 'goed' is, moet het gevalideerd worden (zie ook paragraaf 3.9.1: verificatie versus validatie). Het gecalibreerde model moet daarbij met een vooraf gestelde mate van overeenkomst (met of zonder onzekerheid in model en veldwaarnemingen) veldwaarnemingen uit een onafhankelijke dataset (dat wil zeggen van een dataset die niet bij de calibratie is gebruikt), kunnen reproduceren. Ook bij automatisch gecalibreerde modellen kan er gevalideerd worden, mits er nog een onafhankelijke dataset achter de hand is gehouden. Vaak wordt echter bij automatische calibratie meteen al alle beschikbare data gebruikt om tot een zo optimaal mogelijk resultaat te komen. Het is dan een bewuste en verdedigbare keuze de validatie te laten vervallen.

De 'onafhankelijke dataset' is vaak een meetserie van hetzelfde systeem voor een ander jaar dan de meetserie die is gebruikt bij de calibratie. Nog beter is het als het model veldwaarnemingen kan simuleren van een ander goed vergelijkbaar systeem. Uiteraard mag het model niet opnieuw gecalibreerd worden.

Een belangrijke opmerking die hier moet worden gemaakt heeft te maken met wetenschapsfilosofische onmogelijkheid te kunnen aantonen dat het model 'correct' is. Bewijzen kan niet. Door meer met een model te experimenteren, dat wil zeggen allerlei validatie-testen uit te voeren, kan het vertrouwen in het model worden verhoogd. Dit wordt in het Engels met 'corroboration' aangeduid en in het Nederlands wel eens 'confirmatie' genoemd. Het model is na voldoende geslaagde testen niet 'valide' of 'goed' maar 'goed genoeg', waarbij dat genoeg bepaald wordt door de eisen die van te voren zijn gesteld (stap 2.4.1). Het model kan dan (in meerdere of mindere mate) als 'gevalideerd' worden beschouwd.

De onmogelijkheid de juistheid van een model te bewijzen kan niet los gezien worden van een belangrijk gevolg: modellen (gevalideerd of niet) mogen eigenlijk niet worden gebruikt om te extrapoleren. Niet in de ruimte en niet in de tijd. Dit maakt het gebruik van modellen (op zijn minst in theorie) tot een hachelijke zaak. Als er wel gevalideerd is en dan met name voor situaties die een grote gelijkenis hebben met de situatie waarover het model voorspellingen moet doen, dan mag men er enig vertrouwen in hebben dat de voorspelling enigszins betrouwbaar is, maar zeker is dit allerminst.

4.8 Bepaal het geldigheidsgebied van het model

Als laatste stap in het analyse-traject moet worden nagegaan onder welke omstandigheden het model mag worden gebruikt en vooral of daarmee het probleem kan worden opgelost, waarvoor het model gemaakt is. Dit moet ook duidelijk beschreven worden. Het geldigheidsgebied hoort onlosmakelijk bij het gebouwde en geanalyseerde model.

Eigenlijk mag een model niet gebruikt worden voor extrapolaties zoals veelal gebruikelijk is bij voorspellingen en bij scenario-analyses., maar vaak is dat juist de reden dat het model gemaakt is. Het model zal dan toch worden ingezet, maar bij een presentatie van de resultaten hiervan moet uitvoerig ingegaan worden op de onzekerheden die verbonden zijn aan het gebruik van het model voor deze toepassing. Beck heeft het probleem goed samengevat met de volgende stelling: 'met wetenschappelijk onderbouwde modellen zul je vaak met grote nauwkeurigheid een foute toekomst voorspellen, en met complexe, niet-identificeerbare modellen heb je de kans om met grote onzekerheid de juiste toekomst te voorzien'.

Literatuur

- Beck, M.B., 1987.
 Carrera, J. and S.P. Neuman, 1986a, 1986b, 1986c.
 Doherty, J., 1994.
 Hemker, C.J., 1997.
 Hendrix, E.M.T., 1998.
 Janssen, P.H.M. en W. Slob, 1990a.
 Janssen P.H.M., W. Slob en J. Rotmans, 1990b.
 Janssen, P.H.M. en P.S.C. Heuberger, 1992a.
 Janssen, P.H.M., P.S.C. Heuberger en R. Sanders, 1992b.
 Kleijnen, J.P.C. en W.J.H. Groenendaal, 1988.
 Klepper, O., H. Scholten en J.P.G. Van de Kamer, 1991.
 Knepell, P.L. and D.C. Arango, 1993.
 Kooiman, J.W., 1997.
 Mous, S.L.J., 1994.
 Olsthoorn, T.N., 1997.
 Power, M., 1993.
 Rykiel, E.J., 1996.
 Sargent, R.G., 1982.
 Sargent, R.G., 1984a.
 Sargent, R.G., 1984b.
 Sargent, R.G., 1986.
 Schlesinger, S., R.E. Crosbie, R.E. Gagne, G.S. Innis, C.S. Lalwani, J. Loch, R.J. Sylvester, R.D. Wright, N. Kheir and D. Bartos, 1979.
 Scholten, H. and M.W.M. van der Tol, 1994.
 Summers, J.K., H.T. Wilson and J. Kou, 1993.
 Tarantola, A., 1987.
 Te Stroet, C.B.M., 1995.
 Somlyódy, L. and G. van Straten, 1986.
 Wallach, D. and B. Goffinet, 1989.
 Zaadnoordijk, W.J. en A. Stein, 1997.

Stap 5 Gebruik van het model

5.1 Maak een plan van aanpak voor de simulatie-runs

Op het moment dat het model grondig is onderzocht en de modelleur er voldoende vertrouwen in heeft, kan het model gebruikt worden voor allerlei toepassingen. Het is verstandig in dit stadium een plan van aanpak op te stellen, waarin beschreven wordt hoe deze inzet precies zal plaatsvinden. Hierin wordt opgenomen:

- met welke invoer zal worden gewerkt;
- welke (gecalibreerde) versie van het model wordt gebruikt;
- welke periode wordt gesimuleerd;
- wat de verschillen zijn met de referentie-run (de run met standaard invoer,
- wat men kan verwachten van de uitkomsten.

Bij het nadenken over de te maken berekeningen moet nauw worden samengewerkt met de opdrachtgever. Al eerder waren in stap 2 de te maken berekeningen globaal beschreven, maar nu het model rekenklaar is, moeten deze afspraken opnieuw worden gezien en uitgewerkt. Daarbij is het belangrijk dat onderscheid gemaakt wordt in de vragen die de opdrachtgever beantwoord wil hebben en de vertaling daarvan naar vragen voor de modelleur en het model. Zo kan er soms bijvoorbeeld een belangrijk verschil zitten tussen de beleidsscenario's van de opdrachtgever (waarbij meestal alleen een kleine afwijking ten opzichte van het huidige beleid mogelijk is) en de analysescenario's van de modelleur (waar de bandbreedte van de meest wilde oplossingen wordt verkend). Nauw overleg in 'dezelfde taal' is essentieel om verwarring te voorkomen. Spreek dus een eenduidig begrippenkader af met de opdrachtgever. Voordat je met de opdrachtgever gaat overleggen kan het handig zijn alvast een eerste serie berekeningen te maken. Dan weten beide partijen waarover men praat.



5.2 Doe de uiteindelijke simulatie-runs

Deze belangrijke stap (waar het eigenlijk allemaal om begonnen is) ligt nu erg voor de hand. Zorg ervoor dat de uitvoer (de resultaten) zo worden weggeschreven dat ze naderhand voor andere doeleinden en met andere tools gebruikt kunnen worden. Te denken valt hier aan nabewerking voor presentatie en aan statistische analyses. Vaak hebben modelprogramma's daar eigen tools voor.

5.3 Controleer de resultaten

Na afloop van het feitelijke gebruik van het model, moet meteen een controle van de resultaten worden uitgevoerd om zo extreme of onmogelijke uitkomsten aan het licht te brengen. Punten waarop gelet moet worden zijn:

- uitschieters en uitbijters;
- ranges van modeluitvoer;
- onverwachte resultaten;
- aanwijzingen voor numerieke fouten.

5.4 Is dit het nou?

In deze fase van het modelproject moet worden vastgesteld of er wel echt gedaan is wat men wilde doen en of dit op een verantwoorde manier is gedaan. Is de goede versie van het model gebruikt, met de goede invoer, met alle overige instellingen correct, is de oplossing stabiel, zijn de massabalansen correct, enzovoort.

Hierbij kan men aan de hand van de modelprojectformulieren alle doorlopen stappen nog een keer langslopen:

- beantwoordt het model aan het doel?
- wordt aan de kwaliteitseisen voldaan?
- zijn alle benodigde gegevens correct en zijn ze juist gebruikt?
- is de systeembeschrijving correct?
- is het conceptuele model correct?
- zijn alle aannames correct en terecht gemaakt?
- is de discretisatie in ruimte en tijd goed gekozen?
- is de keuze van de modelbegrenzings juist geweest?
- is achteraf gezien het juiste model en/of modelprogramma gekozen?
- is de numerieke aanpak verantwoord gekozen?
- is de implementatie correct uitgevoerd?
- wat is er geverifieerd ten aanzien van de implementatie?
- is de handleiding van het modelprogramma gevolgd?
- kloppen de dimensies en de eenheden?
- welke analyses zijn er uitgevoerd?
- kloppen de massabalansen?

- wat zijn de gevoelige parameters (en andere factoren)?
- hoe en met welk resultaat is het model gecalibreerd?
- is dit voldoende gezien de van te voren gestelde (kwaliteits)eisen?
- is er een betrouwbaarheids/onzekeerheidsanalyse uitgevoerd?
- is het geldigheidsgebied van het model goed beschreven en zodanig dat de vragen die met het model beantwoord moeten worden ook daadwerkelijk beantwoord kunnen worden?
- is er bij het uitvoeren van de runs om de probleemstelling te beantwoorden rekening gehouden met onzekerheden in de uitkomsten?

Literatuur

geen

Stap 6 Interpreteer de resultaten

6.1 Beschrijf de uitkomsten

Het vastleggen hoe de resultaten geïnterpreteerd moeten worden is van groot belang, vooral ook omdat er mensen zijn die alleen naar de resultaten (willen) kijken en niet naar de manier waarop die tot stand zijn gekomen.

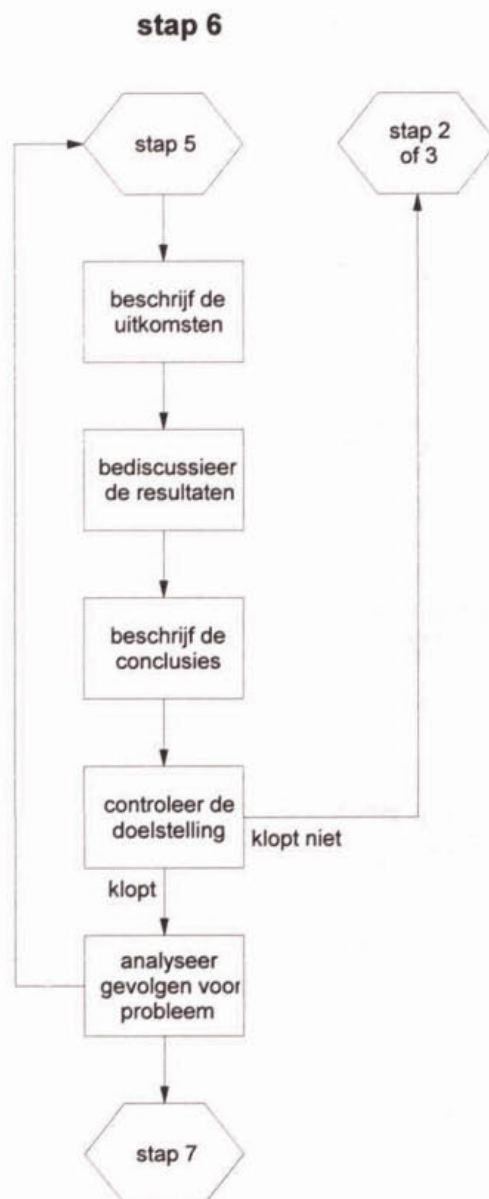
Het is verstandig de resultaten eerst te beschrijven zonder hieraan al conclusies, consequenties of verklaringen bij te geven. Hierbij moeten teksten, figuren en tabellen worden gebruikt op een manier dat de resultaten compact maar toch volledig worden beschreven (eventueel verwijzen naar appendices, bijlagen, andere rapporten, databases). De beschrijving van de resultaten moet worden vastgelegd in de modelprojectformulieren. Hierin wordt het hele modelproject vastgelegd. Ze vormen de basis voor de latere verslaglegging en rapportage.

6.2 Bediscussieer de resultaten

Hier moeten de resultaten worden vergeleken met die van andere vergelijkbare studies. Ook onverwachte resultaten moeten besproken worden en van een (mogelijke) verklaring voorzien.

6.3 Beschrijf de conclusies

Uit de resultaten moeten conclusies getrokken worden die te maken hebben met het doel van het model en de modelberekeningen (stap 2.2). Er moet dus een directe link gelegd worden tussen de onderzoeksvraag en de resultaten.



6.4 Controleer of de doelstelling gehaald is

Bij deze stap (operationele validatie) moet de vraag beantwoord worden of de gevolgde procedure heeft geleid tot een model, waarmee de in het doel gestelde vragen kunnen worden beantwoord. Kan dat niet dan zal het doel moeten worden bijgesteld (makkelijk voor de modelleur, maar vaak onacceptabel voor de opdrachtgever) of het model moet worden bijgesteld (wat mogelijk heel veel werk met zich meebrengt voor de modelleur en dus waarschijnlijk ook extra kosten voor de opdrachtgever).

6.5 Vat de resultaten samen

Vaak zijn mensen geneigd om informatie eerder te lezen als deze in een compacte vorm wordt aangeboden. Maak daarom een verantwoorde (statistische) samenvatting, waarin bij de resultaten heel duidelijk de beperkingen en onzekerheden worden aangegeven. Vergelijk de kwaliteit van de eigen resultaten met wat op het vakgebied (elders) gebruikelijk is.

6.6 Analyseer de gevolgen voor de onderzoeksvraag

Helaas zal de gevolgde procedure vaak leiden tot een onbevredigende oplossing, een compromis tussen haalbaarheid en betaalbaarheid. Dit kan verschillende soorten gevolgen hebben:

- op het modelproject wordt negatief gereageerd (met name kan dat het geval zijn als de modelleur te veel slagen om de arm houdt);
- het modelproject legt hiaten in de domeinkennis bloot en genereert zo nieuwe onderzoeksvragen;
- het modelproject vraagt om meer veldwaarnemingen/metingen;
- er moet een vervolg-modelproject worden gestart om alles nu eens goed uit te zoeken;
- de opdrachtgever is ontevreden of juist tevreden.

Literatuur

geen

Stap 7 Rapporteer en archiveer

7.1 Rapporteer in de taal van de doelgroep

De weg van wetenschap via model naar advies is gehuld in mist, waarin duidelijke richtingaanwijzers ontbreken of niet meer te lezen zijn. Voor de opdrachtgever is het vaak volstrekt onduidelijk hoe een advies tot stand is gekomen, wat de status er van is en hoeveel vertrouwen er aan gehecht moet worden. Hoewel modelresultaten zelden direct worden gebruikt om beleid op te baseren, hebben modelleers een eigen verantwoordelijkheid als het gaat om het vertalen van modelresultaten in beleidsondersteunende conclusies. Beleidsmakers op een hoog niveau bijvoorbeeld willen duidelijke antwoorden op ingewikkelde vragen. Veel van de wetenschappelijk verantwoorde kanttekeningen die tijdens het beantwoorden van de vraag gemaakt worden, komen niet in de 'executive summary', waarop uiteindelijk beslissingen worden gebaseerd. Conclusies uit een modelstudie moeten dus zo vertaald worden dat ze wetenschappelijk verantwoord zijn, maar zo helder (en zonder vaktaal) geformuleerd dat de doelgroep (bijvoorbeeld managers en beleidsmakers) dit volledig begrijpen en het niet zelf naar een beleidsadvies hoeven te vertalen (met alle risico's van dien).

Een ander aspect is de vorm waarin de resultaten worden gepresenteerd. Vooral als het om grafische weergaven van de resultaten gaat, is het belangrijk dat de vorm van tevoren is doorgesproken tussen modelleur en opdrachtgever (stap 2.3.2).

7.2 Maak de modelstudie reproduceerbaar

De basis van de rapportage bestaat uit de ingevulde formulieren elders uit dit Handboek. Hiermee ligt het hele modelleerproces vast, van probleem tot beleidsadvies. Uiteraard zal een praktische en bij voorkeur uniforme structuur en lay-out van de rapportage bijdragen aan de kwaliteit van het hele modelproject. Alle onderwerpen die in dit algemene deel van het Handboek aan de orde zijn geweest, moeten daarbij besproken worden in de rapportage, ook als ze – met reden – niet zijn uitgevoerd.

stap 7



De kwaliteit van deze rapportage moet zodanig zijn dat derden de modelstudie kunnen reproduceren (inclusief de resultaten) en/of verder kunnen gaan op het punt waar de studie is afgerond. Voor dit laatste is het dan ook nodig dat bijvoorbeeld de geldigheid, bruikbaarheid en eventuele beperkingen van modelresultaten duidelijk zijn aangegeven.

De modelstudie moet niet alleen - zoals boven beschreven - worden gerapporteerd, maar ook worden gearhiveerd (op papier en elektronisch) om modelstudies, die in het verleden zijn uitgevoerd, opnieuw ter hand te kunnen nemen.

Literatuur

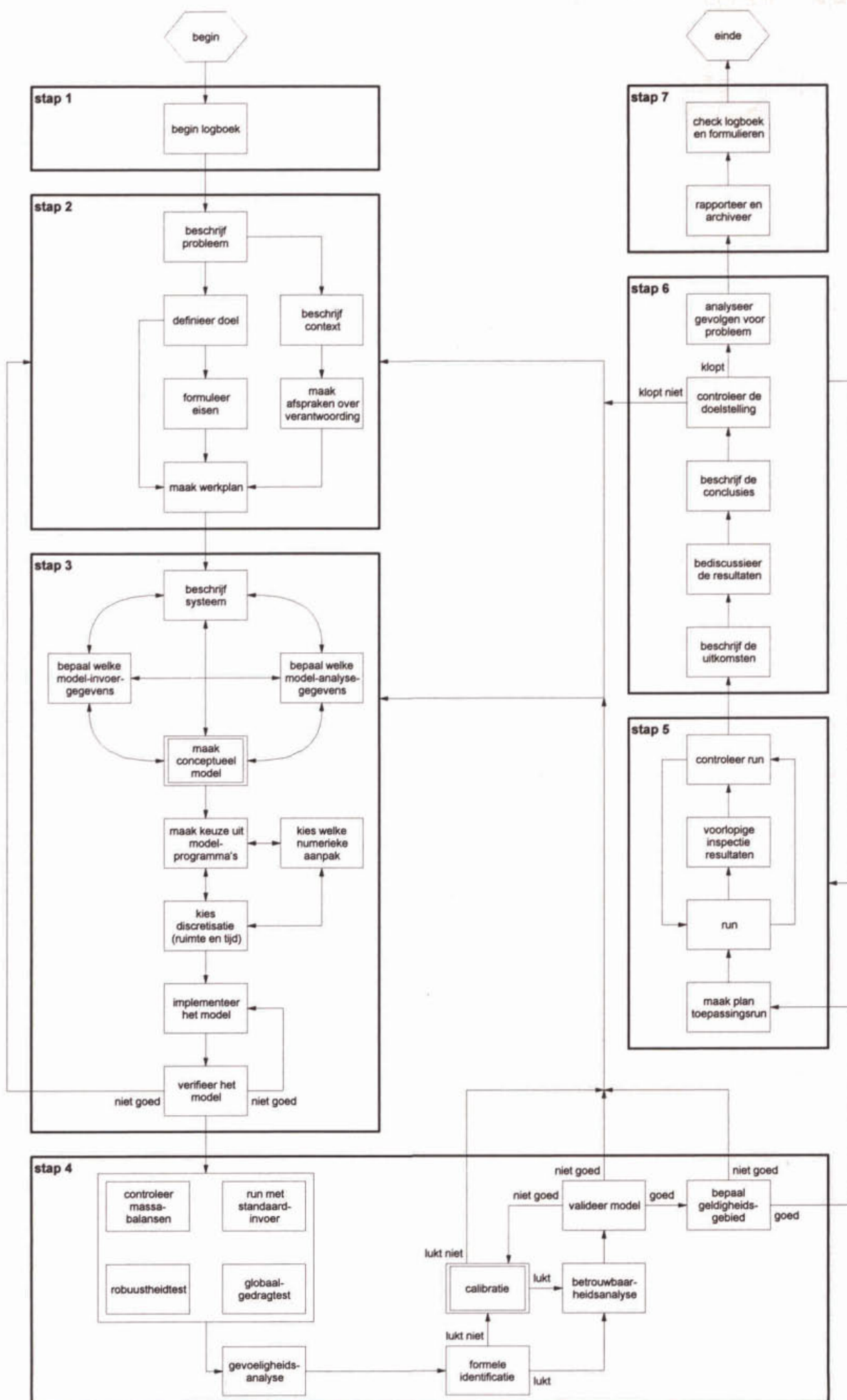
Kooiman, J.W., 1997.

Molen, D.T. van der, 1999.

Checklist en Schema

Checklist - Good Modelling Practice

Activiteit / Stap	Uitgevoerd ?		
	Ja	Nee	Nvt
Stap 1: Begin een logboek (en blijf het gebruiken)			
Stap 2: Zet het modelproject op:			
2.1 Beschrijf het probleem			
2.2 Definieer het doel			
2.3 Analyseer de context en maak afspraken over de verantwoording:			
2.3.1 Context			
2.3.2 Verantwoording / verantwoordelijkheden			
2.4 Formuleer de eisen:			
2.4.1 Kwaliteitseisen			
2.4.2 Eisen aan expertise			
2.4.3 Schatting benodigde capaciteit/menskracht			
2.4.4 Communicatie en rapportage			
2.4.5 Andere eisen			
2.5 Maak een werkplan en begroting			
Stap 3: Zet het model op:			
3.1 Kies het begin: gegevensanalyse, systeembeschrijving of conceptueel model			
3.2 Analyseer de gegevens			
3.2.1 Bepaal welke basisgegevens nodig zijn om het model te maken en te draaien			
3.2.2 Bepaal welke gegevens nodig zijn om het model te analyseren			
3.2.3 Over de beschikbaarheid van de gegevens en meta-data			
3.3 Maak een systeembeschrijving			
3.4 Maak een conceptueel model (in woorden):			
3.4.1 Naar een conceptueel model			
3.4.2 Beschrijf de structuur			
3.4.3 Kies het soort model			
3.4.4 Definieer de relaties tussen variabelen			
3.4.5 Leg de aannames vast			
3.4.6 Controleer het conceptuele model			
3.5 Maak een keuze uit bestaande modelprogramma's			
3.6 Kies een discretisatie van het model in ruimte en tijd			
3.7 Kies een numerieke aanpak			
3.8 Implementeer het model			
3.9 Verifieer het model			
Stap 4: Analyseer het model:			
4.1 Maak een plan van aanpak voor de analyse-activiteiten			
4.2 Analyseer globaal het model			
4.2.1 Doe een run met standaard invoer			
4.2.2 Voer de globaal-gedrag-test uit			
4.2.3 Controleer de massabalansen			
4.2.4 Doe een robuustheidstest			
4.3 Voer een gevoeligheidsanalyse uit			
4.4 Voer een (formele) identificatie uit (als dat kan)			
4.5 Calibreer het model:			
4.5.1 Inleiding			
4.5.2 Kies de te optimaliseren parameters			
4.5.3 Bereken de optimale waarden			
4.5.4 Analyseer de resultaten van de optimalisatie			
4.6 Voer een betrouwbaarheidsanalyse uit			
4.7 Valideer het model			
4.8 Bepaal het geldigheidsgebied van het model			
Stap 5: Gebruik het model:			
5.1 Maak een plan van aanpak voor de simulatie-runs			
5.2 Doe de uiteindelijke simulatie-runs			
5.3 Controleer de resultaten			
5.4 Is dit het nou?			
Stap 6: Interpreteer de resultaten:			
6.1 Beschrijf de uitkomsten			
6.2 Bediscussieer de resultaten			
6.3 Beschrijf de conclusies			
6.4 Controleer of de doelstelling gehaald is			
6.5 Vat de resultaten samen			
6.6 Analyseer de gevolgen voor de onderzoeksvraag			
Stap 7: Rapporteer en archiveer:			
7.1 Rapporteer in de taal van de doelgroep			
7.2 Maak de modelstudie reproduceerbaar (archiveer)			



Formulieren

Stap I: Begin een logboek

Dit formulier is ingevuld door	
--------------------------------	--

- Om alle stappen van het modelproject vast te leggen wordt gebruik gemaakt van:

de formulieren van dit Handboek	
een eigen logboek op basis van dit Handboek	
een eigen logboek volgens eigen inzichten	
op een andere manier (welke?)	
een kwaliteitssysteem (welk)	

Stap 2: Zet het modelproject op

Dit formulier is ingevuld door

2.1 Beschrijf het probleem

- Geef een beknopte beschrijving in woorden van het probleem (geen details):

- Omcirkel het/de probleemdomein(en): (grondwaterkwantiteitsmodellen, grondwaterkwaliteitsmodellen, neerslagafvoersmodellen, waterverdelingsmodellen, hydrodynamische modellen, hoogwatervoorspellingsmodellen, morfologische modellen, oppervlaktewaterkwaliteitsmodellen, emissiemodellen, ecologische modellen, economische modellen, andere modellen)?

- Vul met betrekking tot de (fysische) processen in dit modelproject in:

relevante processen?	karakteristieke tijdschaal?	ruimtelijke schaal?

- Is een model de enige juiste tool om het probleem mee op te lossen?

- Zo nee, wat zijn de alternatieven voor een modelmatige benadering?

- Wat is de toepassingsreden van het model (beleidsanalytisch, wetenschappelijk, operationeel, calamiteitenmanagement)?

2.2 Definieer het doel

- Wat is het domein en het probleemgebied?

- Wat is het doel van een model in dit project?

- Welke vragen moeten met behulp van het model worden beantwoord?

- Geef een indicatie van de scenario's die met behulp van het model moeten worden doorgerekend.

2.3 Analyseer de context en maak afspraken over de verantwoording

2.3.1 Context

- Het grotere geheel (project, studie, routinematige activiteiten, onderzoeksprogramma, enzovoort) van dit modelproject is:

- Dit modelproject moet worden uitgevoerd in samenhang met de volgende modellen (in een keten):

model	locatie

2.3.2 Verantwoording

- Met de opdrachtgever is afgesproken om op de volgende beslissingsmomenten de volgende modelprojectstappen te beoordelen:

beslismomenten	modelprojectstap

- Met de opdrachtgever zijn de volgende afspraken gemaakt over de rapportage en de oplevering:

--

2.4 Formuleer de eisen

2.4.1 Kwaliteitseisen

- Het geanalyseerde (gecalibreerde) model moet een bepaalde dataset met een bepaalde nauwkeurigheid beschrijven: ja/nee.
- Zo ja:
 - aan welke dataset:
 - met welke nauwkeurigheid:

2.4.2 Eisen aan expertise

- In het modelproject worden de volgende personen en de daaraan gekoppelde deskundigheden ingezet:

naam persoon	deskundigheden

2.4.3 Schatting capaciteit menskracht

- Voor het modelproject is de volgende menskracht nodig:

discipline	tijd (dagen)	te besteden aan stap

2.4.4 Communicatie en rapportage

- In het kader van het modelproject zijn de volgende vergaderingen, workshops en dergelijke gepland:

activiteit	wanneer	betrokkenen	onderwerp

- Welke rapportages van het modelproject moeten er verzorgd worden?

soort rapportage (voortgang, tussenrapport, eindrapport)	wanneer	voor wie bestemd

2.4.5 Andere eisen aan het modelproject

- Uit welke andere modellen worden in dit modelproject resultaten gebruikt?

--

- Welke eisen worden er aan die resultaten van andere modellen gesteld (format, sluitende balans, calibratie, discretisatie, meta-informatie,)?

--

- Wie levert, wanneer de resultaten van die andere modellen?

--

- Wie controleert de resultaten van die andere modellen?

--

- Wie flatteert de resultaten van die andere modellen?

- Hoe kan de kwaliteit van de (veld)gegevens het best worden omschreven:
 - zeer onvolledig/tamelijk volledig/volledig
 - slecht gedocumenteerd/tamelijk goed gedocumenteerd/goed gedocumenteerd
- Wat kan er nog meer gezegd worden over de kwaliteit van deze gegevens?

- Moeten er in dit modelproject alternatieve modellen of andere methoden (discretisatie, integratie-algoritmen) worden gebruikt om een vergelijkingskader te creëren?

- Als de resultaten worden verwerkt tot een beleidsadvies, wie doet dat dan?

2.5 Maak een werkplan en begroting

- Maak op basis van het bovenstaande een werkplan van het modelproject en een planning van de nog uit te voeren stappen. Voeg een begroting toe.

Stap 3: Zet het model op

Dit formulier is ingevuld door	
--------------------------------	--

3.1 Kies het begin

Het opzetten van het model is een iteratief proces, waarbij de onderstaande stappen meerdere malen kunnen worden doorlopen.

3.2 Analyseer de gegevens

3.2.1 Basisgegevens nodig voor run

gebiedgegevens	
tijdseries	
beginwaarden	
randvoorwaarden	
parameters	
scenariogegevens	
andere gegevens	

3.2.2 Gegevens nodig voor analyse

waarnemingen aan het systeem (veldmetingen)	
statistische verdelingen of ranges van niet-constante parameters	

3.2.3 Beschikbaarheid van gegevens

zijn er gegevens beschikbaar?	
waar zijn de gegevens?	
zijn de gegevens digitaal beschikbaar?	
beschrijf in het kort de waarden van de gegevens	
hoe wordt omgegaan met uitbijters?	
hoe wordt omgegaan met ontbrekende gegevens?	
beschrijf de kwaliteit van de gegevens	
wie is verantwoordelijk voor het aanleveren van de gegevens?	

3.3 Systeembeschrijving

Het systeem is dat deel van de werkelijkheid dat in het model wordt gesimuleerd (zie deel I).

componenten waaruit het systeem bestaat	
de relaties tussen de componenten	
de relaties tussen de componenten en de omgeving (buiten het systeem)	

3.4 Conceptueel model

3.4.1 In woorden

- Beschrijf in woorden het globale conceptuele model.

3.4.2 Structuur

- Als de structuur van het model niet helemaal vastligt door de keuze van het model, beschrijf dan in woorden of met tekeningen deze structuur.

3.4.3 Soort model

toepassingsdomein	
dynamisch/stationair	
aantal ruimtelijke dimensies	

3.4.4 Relaties

- Als door de keuze van een model de relaties tussen de componenten nog niet helemaal vastliggen, geef ze hieronder aan.

3.4.5 Aannames

- Als er nog impliciete of expliciete aannames zijn gemaakt (anders dan die in het gebruikte model zitten en beschreven zijn in de handleiding), beschrijf ze dan hieronder.

3.4.6 Controle van het conceptuele model

- Wat is er gedaan om vast te stellen dat het conceptuele model consistent (zonder zaken die met elkaar in strijd zijn) is en aansluit bij de oplossing van het probleem?

3.5 Welk bestaand modelprogramma of model

welk bestaand modelprogramma of model is gekozen	
waarom is dat modelprogramma of model gekozen	
kan er op inhoudelijke gronden een betere keuze worden gemaakt en welke zou dat zijn	
waarom is die betere keuze niet gemaakt	

3.6 Discretisatie in ruimte en tijd

beschrijf de ruimtelijke schematisatie	
waar is deze (gedetailleerd) vastgelegd	
welke keuzes zijn gemaakt ten aanzien van de discretisatie in de tijd (hangt samen met numerieke aanpak)	

3.7 Verdere numerieke aanpak

welke oplossingsmethode (algoritme) is gekozen voor de ruimtelijke integratiestap	
is er een keuze mogelijk en is de gemaakte keuze wel inhoudelijk de beste	
als de keuze niet de beste is, waarom is deze dan toch gemaakt	
welke oplossingsmethode is gekozen voor de integratie in de tijd	
is er een keuze mogelijk en is de gemaakte keuze wel inhoudelijk de beste	
als de keuze niet de beste is, waarom is deze dan toch gemaakt	

3.8 Implementatie van het model

hoe is het model geïmplementeerd?	
op welke punten is hierbij afgeweken van de handleiding van het gekozen modelprogramma	

3.9 Verificatie van het model

- De verificatie heeft plaatsgevonden door:

interne controle (ingebouwd in de functionaliteit van het model)	
handmatige controle van I/O, andere delen van de implementatie	
handmatige of automatische dimensie- en eenhedencontrole	
is er een voorbeeld gerund dat met het modelprogramma is meegeleverd (o.i.d.)?	
is de ruimtelijke schematisatie gecontroleerd?	

Stap 4: Analyseer het model

Dit formulier is ingevuld door

4.1 Welke analyse activiteiten

- Geef aan welke analyse activiteiten zijn gepland of waarom ze niet worden gedaan:

welke	ja/nee	opmerkingen
standaard run		
globaal gedrag test		
massabalans controle		
robuustheidstest		
gevoeligheidsanalyse		
(formele) identificatie		
calibratie		
betrouwbaarheidsanalyse		
validatie		
bepalen geldigheidsgebied		

4.2 Analyseer globaal het model

4.2.1 Run met standaard invoer

beschrijf de invoer	
hoe is de run verlopen	
zijn de uitkomsten te begrijpen	
zijn de uitkomsten overeenkomstig de verwachtingen	

4.2.2 Globaal gedrag test

- Welke karakteristieke veranderingen zijn getest om het modelgedrag te controleren (effect van meer belasting, meer neerslag, meer nutriënten, geen belasting, enzovoort):

- Voer deze runs uit en beschrijf het resultaat van deze testen:

--

4.2.3 Massabalansen

- Hoe zijn de massabalansen gecontroleerd

hoe	ja/nee	resultaat
door het model		
handmatig		

4.2.4 Robuustheidtest

is er een robuustheidtest gedaan?	
welke extreme waarden van parameters en andere invoer zijn gebruikt?	
wat zijn de resultaten van deze test?	

4.3 Gevoeligheidsanalyse

is er een gevoeligheidsanalyse uitgevoerd en zo ja, op welke manier?	
hierbij is wel/niet naar interacties tussen alle onzekere factoren gekeken	
als maat voor de gevoeligheid is gebruikt	
gevoelige factoren (incl. parameters) zijn	
ongevoelige factoren zijn	

4.4 Formele identificatie

zijn er genoeg gegevens (waarnemingen en metingen) voor een identificatie?	
is de identificatie gelukt?	

4.5 Calibratie

is er een calibratie uitgevoerd?	
hoe is de keuze gemaakt van de te calibreren factoren?	
welke maat is gebruikt om de voortgang en het resultaat van de calibratie vast te stellen (doelfunctie)?	
volgens welke methode en/of welk pakket is een calibratie uitgevoerd?	
met behulp van welk criterium is de calibratie gestopt?	
beschrijf het resultaat van de calibratie	
is voldaan aan het van te voren gestelde criterium?	
is er een restfoutenanalyse uitgevoerd?	
zijn de restfouten systematisch?	
als een calibratie mislukt is, naar welke vorige stap is dan teruggegaan?	
hoeveel (mensdagen) tijd is besteed aan de calibratie	

4.6 Betrouwbaarheidsanalyse

is er een schatting gemaakt van de onzekerheid in de modeluitkomsten?	
de onzekerheidsanalyse is gedaan op basis van een covariantie-analyse	
de onzekerheidsanalyse is anders uitgevoerd, namelijk	

4.7 Validatie van het model

heeft er een vergelijking plaatsgevonden tussen de modeluitkomsten (van het gecalibreerde model en veldmetingen), anders dan de gegevens die gebruikt zijn om te calibreren?	
wat is hiervan het resultaat?	

4.8 Geldigheidsgebied van het model

is het geldigheidsgebied van het model bepaald?	
hoe is het geldigheidsgebied bepaald?	
wat is volgens u het geldigheidsgebied van het model?	

Stap 5: Gebruik het model

Dit formulier is ingevuld door	
--------------------------------	--

5.1 Beschrijf de uiteindelijke simulatie-runs in termen van:

de gebruikte invoer	
de (gecalibreerde) versie van het model	
de simulatieperiode	
de verschillen met de standaard-run	
de verwachting over de uitkomst	

5.2 Voer de uiteindelijke simulatie-runs uit

datum	
persoon	
computer	
afdeling	
instituut	
waar zijn de resultaten opgeslagen	

5.3 Controle van de resultaten

welke uitschieters en uitbijters worden aangetroffen in de modeluitvoer?	
komen de ranges van modeluitvoer overeen met de verwachtingen?	
welke onverwachte resultaten zijn er gevonden in de uitkomsten?	
zijn er aanwijzingen voor numerieke fouten (discretisatie in ruimte en tijd) en zo ja, welke?	

5.4 Is dit het nou?

op welk punt beantwoordt het model niet aan het doel?	
aan welke kwaliteitseisen wordt niet voldaan?	
welke van de benodigde gegevens zijn niet correct en zijn onjuist gebruikt?	
in welk opzicht is de systeembeschrijving niet correct?	
in welk opzicht is het conceptuele model niet correct?	
welke aannames zijn niet correct of onterecht gemaakt?	
is de discretisatie in ruimte en tijd goed gekozen?	
is achteraf gezien het juiste modelprogramma of model gekozen?	
is er een beter modelprogramma of model?	
waarom is het betere alternatief niet gekozen	
is de gekozen numerieke aanpak verantwoord?	
kan de implementatie van het model beter? zo ja, op welke onderdelen?	
wat is er geverifieerd ten aanzien van de implementatie?	
op welke punten is afgeweken van de handleiding van het modelprogramma?	

is er een dimensie- en eenhedenanalyse uitgevoerd?	
welke modelanalyses zijn er uitgevoerd?	
kloppen de massabalansen?	
welke zijn de gevoelige parameters (en andere factoren)?	
hoe en met welk resultaat is het model gecalibreerd?	
is dit voldoende gezien de van te voren gestelde (kwaliteits)eisen?	
is er een betrouwbaarheidsanalyse uitgevoerd en met welk resultaat?	
valt het model binnen het vanuit de vraagstelling gewenste geldigheidsgebied?	
is er bij de runs om de probleemstelling te beantwoorden rekening gehouden met onzekerheden in de uitkomsten?	
wat kan er verder nog worden opgemerkt over het modelproject?	

Stap 6: Interpreteer de resultaten

Dit formulier is ingevuld door	
--------------------------------	--

6.1 Beschrijf de uitkomsten

waar is een beschrijving van de resultaten te vinden	
waar en in welke vorm zijn de simulatieresultaten opgeslagen?	

6.2 Bediscussieer de resultaten

in vergelijking met andere studies	
onverwachte resultaten zijn	
kunnen de onverwachte resultaten worden verklaard	
het modelproject is op de volgende punten onvolledig	
er zijn verder de volgende punten van kritiek mogelijk op het modelproject	

6.3 Beschrijf de conclusies

samengevat luiden de conclusies	
---------------------------------	--

6.4 Is de doelstelling gehaald

welke punten van de doelstelling zijn gehaald	
welke punten van de doelstelling zijn niet gehaald	

6.5 Vat de resultaten samen

de <i>executive summary</i> van het modelproject luidt	
--	--

6.6 Analyseer de gevolgen voor de onderzoeksvraag

door wie en hoe wordt er op het modelproject gereageerd (positief, gereserveerd, negatief)?	
wat zijn de belangrijkste reacties?	
welke hiaten legt het modelproject in de domeinkennis bloot en welke nieuwe onderzoeksvragen worden hierdoor gegenereerd?	
waren er voldoende waarnemingen en metingen voor het modelproject?	
in een vervolg-modelproject zouden de volgende zaken nog eens goed moeten worden uitgezocht:	
welke suggesties heeft u voor vervolgstudies of andere (soortgelijke) modelprojecten?	
in hoeverre is de opdrachtgever tevreden?	

Stap 7: Rapporteer en Archiveer het modelproject

Dit formulier is ingevuld door	
--------------------------------	--

7.1 Rapportage

de rapportage maakt gebruik van de formulieren van dit Handboek	volledig/deels/niet
een rapport over het modelproject is te vinden	
wordt er nog over het modelproject wetenschappelijk gerapporteerd? zo ja, in welk tijdschrift?	

7.2 Overige documentatie

een volledige beschrijving van het gebruikte model is te vinden	
welke interne memo's (etc.) zijn er verder?	
waar is het modelprojectarchief opgeslagen?	

Deel 2: Valkuilen en Gevoeligheden

Inhoud

1	Inleiding	1-1
2	Algemene valkuilen en gevoeligheden	2-1
3	Valkuilen en gevoeligheden per domein	3-1
3.1	Grondwatermodellen verzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit)	3-2
3.1.1	Algemeen	3-2
3.1.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-2
3.1.3	Literatuur	3-8
3.2	Grondwatermodellen onverzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit)	3-9
3.2.1	Algemeen	3-9
3.2.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-9
3.2.3	Literatuur	3-10
3.3	Neerslag/afvoermodellen	3-11
3.3.1	Algemeen	3-11
3.3.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-11
3.3.3	Literatuur	3-12
3.4	Waternverdelingsmodellen	3-13
3.4.1	Algemeen	3-13
3.4.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-13
3.4.3	Literatuur	3-14
3.5	Hydrodynamische modellen	3-15
3.5.1	Algemeen	3-15
3.5.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-16
3.5.3	Literatuur	3-19
3.6	Hoogwatervoorspellings- en operationele modellen	3-20
3.6.1	Algemeen	3-20
3.6.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-20
3.6.3	Literatuur	3-21
3.7	Calamiteitenmodellen	3-22
3.7.1	Algemeen	3-22
3.7.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-22
3.7.3	Literatuur	3-23

3.8	Morfologische modellen	3-24
3.8.1	Algemeen	3-24
3.8.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-24
3.8.3	Literatuur	3-26
3.9	Waterkwaliteitsmodellen	3-27
3.9.1	Algemeen	3-27
3.9.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-28
3.9.3	Literatuur	3-31
3.10	Afvalwaterzuiveringsmodellen	3-32
3.10.1	Algemeen	3-32
3.10.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-33
3.10.3	Literatuur	3-35
3.11	Ecologische modellen	3-36
3.11.1	Algemeen	3-36
3.11.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-36
3.11.3	Literatuur	3-38
3.12	Economische modellen en gebruiksfunctiemodellen	3-39
3.12.1	Algemeen	3-39
3.12.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-39
3.12.3	Literatuur	3-40
3.13	Emissiemodellen	3-41
3.13.1	Algemeen	3-41
3.13.2	Valkuilen en gevoeligheden	3-42
3.13.3	Literatuur	3-45

I Inleiding

In deel 1 van dit Handboek Good Modelling Practice is een stappenplan gegeven dat de modelleur kan gebruiken bij zijn werk. Dit stappenplan gaat voornamelijk over het te hanteren proces bij het modelleren, en veel minder over de inhoud. In dit deel wordt juist wel over de inhoud gesproken, middels een beschrijving van valkuilen en gevoeligheden die de modelleur kan tegenkomen. Deze beschrijving van valkuilen en gevoeligheden heeft daarbij niet de pretentie volledig te zijn. Vaak zijn valkuilen en gevoeligheden immers modelspecifiek. Wel is geprobeerd een opsomming te geven van veelvoorkomende problemen.

Zaken die voor alle modellen van belang zijn worden in hoofdstuk 2 beschreven, waarbij de onderverdeling in stappen is aangehouden zoals die in deel 1 van dit Handboek zijn onderscheiden. Daarna volgt in hoofdstuk 3 de beschrijvingen van valkuilen en gevoeligheden voor in totaal dertien verschillende specifieke toepassingsterreinen, variërend van grondwatermodellen tot ecologische modellen en van waterkwaliteitsmodellen tot economische modellen.

Waar mogelijk zijn relevante literatuurverwijzingen opgenomen voor lezers die meer over bepaalde details willen weten. Aan de hand van ervaringen van modelleurs kan dit deel geregeld worden bijgesteld.

2 Algemene valkuilen en gevoeligheden

In dit hoofdstuk worden een aantal algemene valkuilen en gevoeligheden genoemd. Daarbij worden de stappen in het modelleringsproces gevolgd, zoals die in deel 1 zijn beschreven.

Stap 1: Begin een logboek

In directe zin heeft het logboek geen invloed op de modellering. Echter bij het overdragen van taken van de modellering en het (na enige tijd) hergebruiken van model en data-files kan het ontbreken van volledige informatie leiden tot foute interpretatie. Bijvoorbeeld doordat niet meer eenduidig te achterhalen is welke output bij welke input hoort. Het gebeurt maar zelden dat een goed logboek wordt opgeleverd. Twee veelvoorkomende valkuilen zijn:

- het logboek is onvolledig,
- het logboek is onbegrijpelijk, niet alleen voor derden maar vaak ook voor de schrijver zelf.

Beide valkuilen hebben veelal te maken met tijd en motivatie. Aan het laatste valt weinig te doen; een logboek bijhouden is nu eenmaal niet leuk. Aan de factor tijd is wel wat te doen, bijvoorbeeld door vooraf voor dit aspect voldoende tijd in te plannen. Daarnaast is het ook een kwestie van investeren. Voor de korte termijn kost het bijhouden van een logboek tijd, maar voor de lange termijn, als moet worden achterhaald welke werkzaamheden precies zijn uitgevoerd, wordt die tijd meer dan terugverdiend.

Stap 2: Zet het modelproject op

Het doel waarvoor de modellering wordt uitgevoerd en de eisen waaraan de modellering moet voldoen kunnen niet duidelijk genoeg worden vastgelegd. Een valkuil bij het opzetten van het modelproject is dat pas verder in het modelproject wordt vastgesteld hoe de resultaten verder worden verwerkt. Zeker als een model deel uitmaakt van een keten, is het van belang om vooraf alle relevante eisen te formuleren (onder meer over de resolutie, randvoorwaarden, betrouwbaarheid en schaal). Het gebied moet bijvoorbeeld zo groot gekozen worden dat de randvoorwaarden onafhankelijk zijn van wat er in het studiegebied plaatsvindt.

Als de tijd- en ruimteschalen van het probleem niet scherp genoeg zijn omschreven, heeft dit consequenties in de latere fasen van de modellering. Het gevolg kan zijn dat de modelschalen niet overeenkomen met het gewenste antwoord. Als de modelschaal te groot wordt gekozen vertaalt dit zich in een te grove schematisatie, waardoor relevante details niet meer uit de resultaten kunnen worden afgeleid. Het probleem kan bijvoorbeeld worden weggeschematiseerd. Als de modelschaal te klein wordt gekozen, wordt onevenredig veel gewicht toegekend aan niet relevante kleinschalige variaties, hetgeen kan leiden tot een niet optimale calibratie voor de grootschalige variaties.

De gebruiker moet zich bewust zijn van de mogelijkheden van het model. Het komt nogal eens voor dat er meer functionaliteit van een model wordt geëist dan mogelijk is (onvoldoende support van kennis, gegevens, theorie enzovoorts). Voorts wordt in de praktijk vaak de doelstelling van een modellering op een 'management' niveau geformuleerd. Dit leidt soms tot communicatieproblemen bij de vertaling naar het 'technisch' modelniveau. Het resultaat hiervan is dat de modellering uiteindelijk niet het antwoord geeft op wat de opdrachtgever wil.

Stap 3: Zet het model op

Gevoelig bij deze stap is het vaststellen van het goede modelconcept. Een foute keuze van processen en de vergelijkingen die het proces beschrijven, kan leiden tot later niet meer traceerbare fouten in het model. Dit kan onder meer optreden als essentiële processen (bijvoorbeeld chemie) of drijvende krachten (bijvoorbeeld lozingen) over het hoofd worden gezien. In het verdere verloop van de modellering bestaat het risico dat verkeerde keuzen in het modelconcept worden 'verborgen' door de wijze van calibratie.

Een ander gevoelig punt is het opzetten van een zeer gedetailleerd model, terwijl er niet of onvoldoende gegevens beschikbaar zijn. Zeker bij grote ruimtelijk verdeelde modellen is het van groot belang om de schaal en het aantal onafhankelijke parameters (vrijheidsgraden) in overeenstemming te kiezen met de beschikbare data. Indien een model overgeparametriseerd is bestaat er het gevaar dat het model ogenschijnlijk goed voldoet (de historische metingen goed volgt), maar niet of nauwelijks geschikt is voor interpolatie of voorspelling. Dat kun je overigens alleen bepalen als er voldoende meetgegevens beschikbaar zijn, dus met de juiste frequentie ten opzichte van de gekozen tijdstap. Vaak worden meetgegevens geïnterpoleerd om aan de tijdstap van een model te voldoen. Vooral de wijze van interpoleren kan grote consequenties hebben. Al bij het opzetten van het model moet hierbij rekening worden gehouden, omdat anders het gevaar bestaat dat een niet calibreren model wordt opgezet. In een aantal gevallen kan het verkeerd inschatten van een beginconditie (bijvoorbeeld de hoeveelheid aanwezige verontreiniging) tot foute conclusies leiden.

Tenslotte is kennis van verschillende beschikbare modelprogramma's van groot belang. Maar al te vaak wordt er een bepaalde modelprogramma gebruikt omdat de modelleur er goed mee bekend is. Dit houdt lang niet altijd in dat dat programma ook de meest geschikte is.

Stap 4: Analyseer het model

De belangrijkste valkuil bij deze stap is dat er onvoldoende tijd voor wordt uitgetrokken, ondanks het feit dat nagenoeg iedereen het er wel over eens is dat dit misschien wel de belangrijkste stap is in het modelleertraject. Kennelijk is de praktijk weerbarstiger dan de theorie, en komt deze stap vaak onder druk te staan van het op tijd leveren van een eindproduct.

Veelal wordt ook niet objectief, aan de hand van vooraf bepaalde criteria, vastgesteld wanneer een model 'goed' wordt bevonden. In veel gevallen hangt deze beoordeling af van de expertise van de modelleur. Zeker in gecompliceerde gevallen is deze expertise derhalve een gevoelige factor.

Bij de keuze van de te calibreren parameters (zie de vorige twee stappen) dient het aantal en de ruimtelijk verdeling van de vrijheidsgraden ('knoppen van het model') te worden afgestemd op de hoeveelheid informatie die er voor calibratie beschikbaar is. Calibreren van een model met te veel vrijheidsgraden levert vaak een vertekend beeld op van de werkelijkheid. Zo kunnen fouten in het modelconcept worden 'weggecalibreerd'. Bij voorgaand punt treedt de paradox op dat een model beter lijkt te fitten als er minder meetgegevens zijn. In de praktijk bestaat daarom veelal de neiging om het aantal te calibreren parameters te vergroten om de verschillen tussen gemeten en berekende waarden te verkleinen. Er bestaan wel theoretische concepten ('observeerbaarheid') om te bepalen of er teveel vrijheidsgraden zijn gedefinieerd, maar deze worden in de praktijk niet algemeen gebruikt.

In een aantal gevallen worden wel schattingen van de betrouwbaarheid van de gecalibreerde parameterwaarden berekend. Dit strekt zeer tot aanbeveling. Onbekende parameters kunnen overigens ook via expert-judgement worden ingeschat. Default-waarden zijn meestal niet toereikend, omdat ze op een (te) algemeen of op een enkel systeem van toepassing zijn.

Het kan ook voorkomen dat parameters niet gevoelig zijn voor de beschikbare waarnemingen (niet op de locaties of tijdstippen waarop er waarnemingen zijn). Hierdoor kunnen de gevoelige parameters niet goed gecalibreerd kunnen worden.

Bij de vergelijking van modelresultaten en waarnemingen wordt lang niet altijd rekening gehouden met het verschil in schaal (zie ook bijlage 1). Vaak wordt een puntwaarneming direct vergeleken met een modelwaarde die representatief is voor een bepaald volume of een bepaalde tijdsperiode. Bij calibratie worden meestal niet alle bronnen van onzekerheid meegenomen. Hierdoor kunnen bijvoorbeeld bij kleinere datasets meetfouten een parameterwaarde sterk beïnvloeden.

Tot slot: een perfecte 'history match' geeft op zich nog geen garantie op een goede beschrijving van het systeem.

Stap 5: Gebruik het model

Voordat de echte berekeningen gestart worden, moet er allereerst voor worden gezorgd dat het model voldoende inspeeltijd krijgt. Deze kan soms zelfs langer zijn dan de gesimuleerde periode. Het van te voren inschatten van de inspeeltijd aan de hand van verblijftijd en processnelheid wordt aanbevolen.

De belangrijkste valkuil bij modellen is dat het model buiten het geldigheidsgebied wordt gebruikt. Dit treedt bijvoorbeeld op als de modelopzet en -analyse is gedaan met gegevens behorende bij een ander waterbeheersregime.

Meestal treedt dit op als het model voor scenario's wordt gebruikt die de situatie van nog uit te voeren maatregelen representeren. Deze valkuil kan twee oorzaken hebben: of de modelanalyse (de voorgaande stap) is niet goed uitgevoerd, of de resultaten uit de vorige stap worden niet goed gebruikt.

Stap 6: Interpreteer de resultaten

Houd bij de interpretatie van resultaten rekening met de betrouwbaarheids-bandbreedte. Kijk bijvoorbeeld of er nog wel onderscheidend vermogen is tussen resultaten van verschillende scenario's. Bij het gebruik van presentatiepakketten gebeurt het ook nogal eens dat eenheden of stroomrichtingen worden verwisseld. De absolute waarden zijn dan wel goed, maar dan wel de verkeerde kant op.

Stap 7: Rapporteer

De rapportage dient te worden uitgevoerd in de 'taal' van de opdrachtgever. Hierbij is het van belang een goed evenwicht te vinden tussen het (technische) detail en de bruikbaarheid voor de opdrachtgever. Vaak zijn de rapportages in de praktijk niet volledig en kan de modellering op basis van het rapport niet gereproduceerd worden.

Een essentiële valkuil waar zowel opdrachtgever als modelleur vaak intrappen is dat met het afronden van een rapport vaak ook de kennisoverdracht ophoudt. Het gevolg kan zijn dat de door de modelleur geleverde informatie verkeerd gebruikt wordt. Een goede rapportage kan dit in theorie voorkomen, maar in de praktijk blijkt dat het bijna nooit voorkomt dat alleen een schriftelijke rapportage voldoende is om een opdrachtgever precies de informatie te geven die nodig is. Persoonlijk contact tussen modelleur en opdrachtgever is essentieel. Het is daarbij ook de verantwoordelijkheid van de modelleur om, voor zover hij daar invloed op heeft, te bewaken dat de door hem of haar geleverde informatie op de juiste wijze wordt gebruikt.

3 Valkuilen en gevoeligheden per domein

In dit hoofdstuk is een aantal veelvoorkomende valkuilen en gevoeligheden per domein beschreven. Per paragraaf wordt één domein beschreven. Hierbij gaat het om de volgende domeinen:

- grondwatermodellen voor de verzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);
- grondwatermodellen voor de onverzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit);
- neerslag-afvoermogelijkheden;
- waterverdelingsmodellen;
- hydrodynamische modellen;
- hoogwatervoorspellingsmodellen en operationele modellen;
- calamiteitenmodellen
- morfologische modellen;
- oppervlaktewaterkwaliteitsmodellen;
- afvalwaterzuiveringsmodellen;
- ecologische modellen;
- economische modellen en gebruiksfuncties;
- emissiemodellen.

Elke paragraaf bestaat uit twee secties. De eerste sectie begint met een korte inleiding waarin enkele relevante kenmerken van de modellen worden genoemd. Tevens zijn voorbeelden gegeven van in Nederland courante modelprogramma's. In de tweede sectie worden per modelleringsstap valkuilen en gevoeligheden genoemd. Daarbij worden alleen die modelleringsstappen genoemd waar valkuilen en gevoeligheden optreden.

3.1 Grondwatermodellen verzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit)

3.1.1 Algemeen

Voor het numeriek benaderen van de *grondwaterstroming* zijn veel modelprogramma's beschikbaar. Zonder volledig te willen zijn kan gesteld worden dat de meest gebruikte modelprogramma's in Nederland zijn: MODFLOW, TRIWACO, MicroFEM, MLAEM en SIMGRO. Zonder uitzondering gaan deze programma's uit van de elementaire behoudswetten (de wet van Darcy en de continuïteitsvergelijking). De verschillen zitten voornamelijk in de wijze van discretisatie (eindige differenties, eindige elementen en analytische elementen) en de wijze waarop de gebruiker de randvoorwaarden kan definiëren.

Bij de *grondwaterkwaliteitsmodellen* zijn twee klassen van modelprogramma's te onderscheiden. De eerste klasse zijn de 'lumped' modelprogramma's, waarin de chemie door sterk vereenvoudigde parameters (dispersie, sorptie, retardatie) worden beschreven. Bekende modelprogramma's in deze klasse zijn: MT3D, HST3D, RT3D, MODWALK. Net als bij de grondwaterstromingsmodellen zitten de verschillen tussen de diverse programma's voornamelijk in de wijze van discretisatie en de wijze waarop de gebruiker de randvoorwaarden kan definiëren. Dit betreft met name het topsysteem (dat is het bodemgedeelte met verzadigde grondwaterstroming boven het eerste watervoerende pakket).

De tweede klasse van modelprogramma's beschrijft de chemische reacties expliciet. Vertegenwoordigers van deze klasse zijn FREEQM en CHARON. Dit type modelprogramma is niet zonder een gedegen chemische expertise te gebruiken.

3.1.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Conceptuele model

Voordat numeriek kan worden gemodelleerd, wordt een conceptueel model gemaakt. Dit conceptuele model beschrijft onder meer de globale structuren van de ondergrond en de daarin voorkomende stoffen.

Voor grondwaterstroming spelen vooral de hydraulische eigenschappen een grote rol. De keuzen die in het conceptuele model worden gemaakt ten aanzien van de grenzen van het modelgebied, zowel horizontaal als verticaal, worden doorgaans in het verdere verloop van de modellering niet meer veranderd. De keuze van plaats en type van de rand kan van grote invloed zijn op de model resultaten en verdient daarom goede onderbouwing.

Veelal worden de lagen ingedeeld in watervoerende en scheidende lagen. De wijze van verbinden van deze lagen is van grote invloed op het gesimuleerde stromingsveld en daarmee op de resultaten van het model.

Een ander belangrijk aspect is het bestaan van hydraulische kortsluitingen of blokkades. Deze fenomenen treden op bij scheidende lagen, breuksystemen (open of juist dicht), zand- en grindbanen en stuwwallen. Informatie over deze fenomenen wordt vaak niet expliciet meegenomen of is onvoldoende bekend. Het niet onderkennen van deze structuren kan in het verdere verloop van de modellering leiden tot verkeerde interpretatie van de resultaten. Daarnaast kan het verwaarlozen van dichtheidsvariatie tot volstrekt verkeerde stromingsrichtingen en gecalibreerde constanten leiden. Vooral in de kustgebieden van Nederland moet veelal met de effecten van dichtheidsvariatie door verschillen in het zoutgehalte rekening worden gehouden. Dit geldt ook ter plaatse van vuilstorten en andere locaties met sterk verontreinigd grondwater.

Voor stoftransport is vooral de inschatting van locale heterogeniteiten van belang. Deze zijn mede bepalend voor reistijden en doorbraakcurven. Daarnaast is een goede hypothese van de geohydrochemische processen van het allergrootste belang. Voorbeelden van belangrijke aspecten zijn de sorptieprocessen (evenwicht of niet-evenwicht, lineair of niet-lineair), het al dan niet aanwezig zijn van afbraak, de geochemische condities (bijvoorbeeld zuurstofrijk of zuurstofarm), het voorkomen van organisch stof in het sediment, enzovoorts. Vaak is het beperkte waarnemingsmateriaal niet voldoende om in de calibratiefase onderscheid te kunnen maken tussen verschillende processen, zodat de modellering sterk afhangt van de expertise in de conceptuele fase.

Keuze van het modelprogramma

Voor het uiteindelijke resultaat van een modellering van grondwaterstroming, is de keuze van het modelprogramma niet erg kritisch, ten minste niet voor de in Nederland gangbare modellen. Wel dient de modelleur zich rekenschap te geven van de onderliggende aannames en de gebruiksbependingen van de verschillende modelprogramma's. Zo is het topsysteem (kleine oppervlaktewateren, drainage en onverzadigde zone) bij het ene model meer in detail beschreven dan bij het andere model. De aanpak van modelleren bij MLAEM verschilt nogal sterk van die bij de andere modelprogramma's (er bestaan bijvoorbeeld geen elementen grids en er moet worden gekozen uit verschillende typen analytische elementen).

Bij de modellering van stoftransport kunnen de verschillen tussen de diverse modelprogramma's wel zeer relevant zijn. Bij de meeste modelprogramma's gebaseerd op eindige elementen en eindige differentie benadering treedt numerieke dispersie op. De massabalans is vaak niet gegarandeerd bij modelprogramma's gebaseerd op de eindige elementen benadering. Met name bij sterke gradiënten in de concentratie kan dit grote fouten opleveren, doordat in het model de flux en de concentratie ten onrechte wordt uitgesmeerd over een groot oppervlak.

Behalve fysische en chemische overwegingen spelen bij de keuze van het modelprogramma ook praktische overwegingen een rol. Naarmate de invoer van parameters en opties overzichtelijker is, is de kans op fouten in het gebruik ook geringer. Bovendien kan voor complexere (niet-stationaire) problemen ook de rekentijd en het geheugenbeslag een rol spelen.

Stap 4: Analyseer het model

Gevoelige parameters

Voor grondwaterstromingsmodellen zijn de gevoelige grootheden vaak afhankelijk van het doel van het model. Voor veel modellen zijn weerstanden van scheidende lagen gevoelige parameters omdat die minder goed kunnen worden ingeschat (variatie in de orde 10 of 100) dan bijvoorbeeld het doorlaat-vermogen van watervoerende lagen (variatie in orde 2). Locale gaten in scheidende lagen hebben regionaal veel grotere effecten dan locale gebieden met hoog doorlaatvermogen. Omgekeerd hebben gebieden met lokaal een veel hogere weerstand in de scheidende laag nauwelijks invloed, terwijl locale gebieden met hoge weerstand in watervoerende lagen over het algemeen relevant zijn.

De afwezigheid van stroming over een scheidende laag brengt met zich mee dat de waarde van de weerstand niet belangrijk is, maar maakt het bepalen van de weerstand vrijwel onmogelijk. Na het aanbrengen van stroming over deze laag in een scenario (door bijvoorbeeld een onttrekking) kan het belang van de weerstand echter overheersend zijn (bijvoorbeeld als hij relatief groot is).

Wat voor stoftransportmodellen de meest gevoelige parameters zijn is afhankelijk van het type stoffen dat wordt beschreven en van de locale situatie. Voor stoffen die adsorberen aan organisch stof kan veelal de sorptie factor (retardatie factor) en het organisch stof gehalte worden aangemerkt als een gevoelige parameters (NOBIS, 1995).

Discretisatie

De ruimtelijke en temporele discretisatie dient voldoende klein te zijn om numerieke fouten te minimaliseren. In het algemeen betekent dit dat er bij steilere gradiënten kleinere stappen genomen moeten worden. De steilheid van de gradiënten wordt mede bepaald door de hydraulische eigenschappen van het systeem en kan vaak worden gekarakteriseerd door de samengestelde spreidingslengte (zie Maass, 1996). In het algemeen moeten elementen kleiner zijn dan deze spreidingslengte. Dit geldt dus ook ter plaatse van oppervlaktewateren met vrijwel afwezige weerstandslagen. De fouten die in dit soort gevallen worden gemaakt, kunnen leiden tot zowel verkeerde stromingen in het model als tot verkeerde hydraulische parameters in de calibratie.

Veel stoftransportmodellen zijn erg gevoelig voor de gridgrootte voor wat betreft numerieke dispersie. De discretisatie die voldoet voor een stromingsmodel is niet automatisch ook geschikt voor een stoftransportmodel dat op het snelheidsveld van betreffend stromingsmodel is gebaseerd. Tijdstap en gridafstanden kunnen niet onafhankelijk van elkaar worden gekozen. In sommige modelprogramma's wordt de (maximale) tijdstap automatisch bepaald. Indien dit niet het geval is kunnen grote numerieke fouten optreden.

Het verkleinen van de gridafstanden en de tijdstappen levert niet automatisch betere modelresultaten. Een heel fijn rooster geeft optisch de indruk van een zeer gedetailleerd, en dus nauwkeurig, model. Zonder dat er op de juiste schaal informatie wordt toegevoegd, heeft een fijner grid echter alleen meerwaarde als daarmee numerieke fouten worden voorkomen. In combinatie met een te gedetailleerde parametrisatie kan een fijner grid zelfs minder informatie geven. Omgekeerd kan een te grof elementen netwerk tot 'stabiele'

calibratieresultaten leiden, die onjuist zijn vanwege onvoldoende mogelijkheden om variatie in stijghoogte en flux te simuleren.

Eén van de belangrijkste valkuilen bij het modelleren van randen is het definiëren van een dichte rand of vaste stijghoogte ter plaatse van een waterscheiding onder een infiltratie gebied. Die rand en dus de stroming en de stijghoogte verandert als de omstandigheden veranderen. Hetzelfde geldt bij het modelleren van een zoet-zout grensvlak; dat kan ook niet als dichte rand worden genomen als de omstandigheden in de buurt ervan veranderen.

Speciale aandacht verdient de discretisatie in de verticaal. Voor modellen ten behoeve van regionale stroming is een quasi-3D aanpak een goede benadering. Met quasi-3D wordt bedoeld dat de verticale verschillen in de stijghoogte binnen een watervoerend pakket in de berekeningen worden verwaarloosd. Dit houdt niet in dat er binnen het watervoerend pakket geen verticale stromingscomponent kan optreden. In deze gevallen moet zeer zorgvuldig met de schematisatie in watervoerende pakketten en scheidende lagen worden omgegaan, omdat foutieve aansluitingen tot grote fouten in het model kunnen leiden. Bovendien kan deze benadering bij locale problemen en bij stroming in heterogene pakketten tot relevante fouten leiden, vooral in de berekende stromingsverdeling en het stoftransport.

Parametrisatie

Een numeriek grondwaterstromingsmodel of een grondwatertransportmodel bestaat uit zeer veel ruimtelijk te onderscheiden eenheden (blokken, elementen). In principe wordt aan elke eenheid een waarde voor de parameters (doorlatendheid, bergingscoëfficiënt, dispersiecoëfficiënt, sorptie, enzovoorts) toegekend. Dit leidt tot vele (vaak tienduizenden) vrijheidsgraden. Gezien de beperkte beschikbaarheid van informatie, zowel wat betreft de geologische beschrijving als van waarnemingen aan de dynamiek (stijghoogte- en concentratiemetingen) is het noodzakelijk om het aantal vrijheidsgraden terug te brengen. Dit geschiedt door het aanbrengen van een bepaalde bewerking van de parameterwaarden. Veel gebruikte methoden zijn het zoneren, waarbij een bepaalde zone dezelfde waarde krijgt en een geostatistische interpolatie.

Een valkuil bij de parametrisatie is dat er veel te gedetailleerde structuren worden gemodelleerd, die bij gebrek aan veldwaarnemingen (zie ook calibratie) in het verdere verloop van de modellering niet meer kunnen worden bijgesteld en dus een eigen leven kunnen gaan leiden. Een ander belangrijk punt is dat de schaal waarop informatie van de parameterwaarden beschikbaar is, niet altijd overeenkomt met de modeldiscretisatie. Dit geldt bijvoorbeeld voor geologische informatie uit boringen en geohydrologische informatie uit pompproeven (zie ook bijlage 1). De parameters in de gridblokken moeten 'blokeffectieve' waarden zijn. De puntwaarnemingen moeten derhalve worden opgeschaald. De wijze van opschaling kan zeer gevoelig zijn, met name bij grote heterogeniteit. Indien in zo'n geval 'gewoon' een rekenkundig gemiddelde of een lineaire interpolatie van de puntwaarden wordt genomen, kunnen grote fouten worden gemaakt, met name wat betreft de doorbraakcurven en verblijftijden. Vooraf is niet goed aan te geven welke methode wel moet worden gebruikt, maar in ieder geval moet goed getoetst worden aan veldwaarnemingen.

Randvoorwaarden

Een belangrijk onderdeel van de modellering is het formuleren van de randvoorwaarden. Dit zijn behalve de voorwaarden op de fysieke externe randen van het model ook de voorwaarden op de zogenaamde interne randen (onttrekkingspunten, drains, enzovoorts). Het is van groot belang om naast de potentialen (gemeten of geschatte stijghoogten en grondwaterstanden) ook zoveel mogelijk waarnemingen van fluxen (debieten) mee te nemen. Hydraulische parameters in een model zonder gegeven fluxen kunnen in principe niet gedefinieerd worden, omdat ze anders alle (dus ook onzinnige) waarden kunnen krijgen in een calibratieprocedure.

Calibratie & Opschalen

Metingen waarmee een model wordt gecalibreerd (stijghoogten, fluxen en concentraties) zijn veelal puntwaarnemingen ten opzichte van de 'blokeffectieve' waarden die het model berekent. Zeker bij grote kleinschalige variabiliteit is het zeer de vraag in hoeverre een berekende stijghoogte of concentratie in een gridblok of element moet voldoen aan de gemeten puntwaarde. Wel moet meestal de trend goed overeenkomen, maar ook daarvoor geldt dat dit niet altijd het geval hoeft te zijn. Een goede (geostatistische) analyse vooraf van de representativiteit van de meetpunten is daarom altijd aan te bevelen.

Calibratie- & Minimalisatie-criteria

Calibratie (zowel handmatig als met calibratieprogramma's) wordt uitgevoerd door parameterwaarden te veranderen teneinde de modeluitkomsten in overeenstemming te brengen met waarnemingen. Als maat voor calibratie wordt vaak een kwadratensom of een variantie gebruikt. Een groot aantal calibratieprocedures is gebaseerd op ongewogen criteria. Dat wil zeggen dat alle metingen even zwaar meetellen. Dit kan leiden tot een onevenwichtige calibratie, bijvoorbeeld als er in bepaalde gebieden clusters van waarnemingen zijn met veel overbodige informatie. De cluster krijgt dan een onevenredig groot gewicht ten opzichte van een enkel meetpunt op een andere locatie. Als het waardebereik van de variabelen sterk uiteenloopt (bijvoorbeeld bij concentratie metingen) is er de kans dat een uitschieter in de waarnemingen een onevenredig groot gewicht krijgt.

Calibratie van stationaire modellen

In de geohydrologische praktijk wordt vaak gewerkt met stationaire modellen. Deze modellen verwaarlozen het effect van berging en kunnen alleen een 'gemiddelde' stroming beschrijven en worden daarom meestal alleen voor modellering van de kwantiteit gebruikt. Het uitgangspunt bij stationaire modellen is dat er een evenwichtssituatie wordt beschreven, dat wil zeggen een situatie waarin de effecten van veranderingen in de tijd verwaarloosd kunnen worden ten opzichte van de te berekenen effecten. Met name voor het beschrijven van de grondwaterstroming (stromingsrichting en verblijftijden) liggen hier de nodige valkuilen. Voor effecten in termen van grondwaterstand of stijghoogte is het vaak minder gevoelig.

De waarnemingen die in de calibratie gebruikt worden, komen uit een dynamisch systeem. Vaak worden waarnemingen uit een zogeheten 'gemiddeld hydrologisch jaar' gebruikt. Met name bij systemen met een lang 'geheugen' (grote traagheid) kan dit tot grote fouten leiden (ook in stijghoogten). Veelal is het voor het calibreren van de hydraulische parameters van de kwantiteit beter om te zoeken naar een vrijwel stationaire toestand (dat wil zeggen een

toestand waarin de bergingsverandering verwaarloosbaar is) zoals het einde van het natte seizoen en deze over enige jaren te middelen.

Om een stationair model goed te calibreren (dat wil zeggen bruikbaar voor het berekenen van een gemiddelde stromingssituatie), dienen voor de waarnemingen uit het dynamische systeem (stijghoogten, concentraties, neerslagen, oppervlaktewaterstanden, enzovoorts) de stationaire waarden te worden bepaald. Vuistregel daarbij kan het gemiddelde over circa 4 maal de correlatielengte (de periode waarbinnen de te modelleren variabelen nog samenhang vertonen) zijn. Dit betekent dat in veel situaties in laag Nederland een periode van 5 tot 10 jaar met representatieve stijghoogtewaarnemingen voldoende is. In hoog Nederland is de benodigde periode veel langer (vaak > 40 jaar).

Calibratie van niet-stationaire modellen

Als in de calibratiefase weinig dynamiek aanwezig is, kunnen de parameters die het tijdafhankelijke gedrag beïnvloeden (berging) slecht worden vastgesteld. Indien mogelijk (bijvoorbeeld bij grondwatersaneringen) verdient het aanbeveling om in de uitgangstoestand grote dynamische variatie aan te brengen ten behoeve van de calibratie van het model.

Stap 5: Gebruik het model

In de gebruiksfase (voorspelling) zijn de modelresultaten vaak voor andere parameters gevoelig dan in de calibratie fase (huidige toestand). Een bekend voorbeeld hiervan is dat een model dat is gecalibreerd voor een gemiddelde situatie niet zonder meer op een droge of natte situatie kan worden toegepast. Een ander voorbeeld is dat de grondwaterstroming vaak in belangrijke mate afhankelijk is van de voeding vanuit het topsysteem. Vanwege de complexiteit van het topsysteem wordt in veel modelstudies een belangrijk deel van de energie gestoken in het calibreren ervan. Echter als het model bedoeld is om de effecten van een verandering in de diepe grondwaterwinning te analyseren, kunnen de scheidende lagen tussen de watervoerende pakketten minstens zo belangrijk zijn.

Eén van de bekende valkuilen bij scheidende lagen is dat er in de calibratiefase meestal een kleine hydraulische gradiënt overheerst, waardoor de weerstand hiervan niet nauwkeurig kan worden gecalibreerd, terwijl die weerstand in de nieuwe toestand bij het vergroten van de winning doorslaggevend kan zijn. Maatregelen in het topsysteem leiden vaak tot verandering in de representatieve weerstand van dat topsysteem. Ook gebeurt het dat door verandering in de stroming (richting en grootte) de hydraulische eigenschappen van lagen veranderen. Voorbeelden daarvan zijn:

- het veranderen van de intrede-weerstand onder oppervlaktewateren door het omslaan van kwel in infiltratie of door baggerwerkzaamheden;
- het sterk vergroten van de weerstand van een scheidende laag door het vergroten van stroming door een onttrekking.

In dergelijke gevallen verandert de spreidingslengte en moet gecontroleerd worden of de elementgroottes nog kleiner zijn dan deze spreidingslengte.

Ook voor stoftransportmodellen kunnen de omstandigheden (in termen van stroming en transport) in de gebruiksfase heel anders zijn dan in de calibratiefase. Bijvoorbeeld kan in de calibratiefase de diffusie en afbraak een belangrijke rol spelen op het stoftransport, terwijl die in de gebruiksfase juist wordt bepaald door het convectief transport. In feite is dan een modellering gewenst buiten het geldigheidsgebied van de calibratie.

In het algemeen is de dynamische variatie in de uitgangstoestand anders en geringer dan die in de gebruiksfase. Een verandering van stromingsrichting (horizontaal en/of verticaal) kan grote gevolgen hebben voor de parameterwaarden die uit de calibratie worden bepaald (bijvoorbeeld van retardatie en sorptie).

3.1.3 Literatuur

Ernst, L.F., 1956.

Gelhar, L.W. and J.L. Wilson, 1974.

Lange, W.J. de, 1997.

NOBIS, 1995.

Querner, E.P., 1988 and 1997.

Querner, E.P., J.A. Morábito, M. Manzanera, J.A. Pazos, N.C. Ciancaglini and M. Menenti, 1997.

Querner, E.P., J.A. Morábito, H. van den Oever and M. Menenti, 1997.

WL | DELFT HYDRAULICS, 1996a.

3.2 Grondwatermodellen onverzadigde zone (kwantiteit en kwaliteit)

3.2.1 Algemeen

LEACHM, MUST, DEMGEN, MOZART, SWIF, WATBAL, SWACROP, SWAP, ANIMO, STONE zijn veelgebruikte modelprogramma's voor de berekening van water- en soms ook stoftransport in de onverzadigde zone van de bodem. De modelprogramma's verschillen onderling in de manier waarop de stromingsvergelijkingen (Darcy-vergelijking gecombineerd met de continuïteitsvergelijking tot de Richards-vergelijking) worden opgelost. Globaal gesproken kan dit volgens de volgende methoden:

- Balansbenadering (tipping bucket) waarvan WATBAL een voorbeeld is. In feite is dit de meest simpele versie. Vaak wordt met slechts 1 of 2 (boven- en ondergrond) bodemcompartimenten gewerkt. Het gevolg is dat de databehoeftes relatief gering is, maar ook dat de verkregen resultaten relatief weinig gedetailleerd zijn. Dit type modelprogramma's wordt vaak gebruikt op grotere schalen om een globale indruk te krijgen van het watertransport. Stoftransport wordt niet meegenomen.
- Pseudo-stationaire benadering, combinatie van balans en dynamisch modelprogramma. MUST is hiervan een voorbeeld. Onderscheid in meerdere bodemcompartimenten is mogelijk. Dit type modelprogramma's neemt een tussenpositie in tussen de balans- en de dynamische modelprogramma's. Stoftransport wordt meestal niet meegenomen.
- Dynamische modelprogramma's waarin de Richards-vergelijking wordt opgelost. SWAP is hiervan een voorbeeld. De programma's gebruiken bodemcompartimenten van variabele dikte; dicht bij het maaiveld bijvoorbeeld 1 cm en dieper in het profiel bijvoorbeeld 25 cm. Het gevolg is dat de databehoeftes relatief groot is en dat de verkregen resultaten relatief gedetailleerd zijn. Dit type modelprogramma's wordt vaak gebruikt op kleinere schalen (veldschaal) om een gedetailleerde indruk te krijgen van het watertransport. Stoftransport wordt op een globale manier meegenomen.

3.2.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Voor dit type modellen geldt vrijwel zonder uitzondering dat ze gevoelig zijn voor schematisering en randvoorwaarden. Splitsing van het verticale bodemcompartiment gebeurt meestal in lagen van 1 cm dikte over de eerste 15 cm beneden maaiveld, via lagen van 5 cm tot lagen van 25 cm aan de onderkant van het onverzadigde systeem. In horizontale zin vormen bodemkaarten in combinatie met bestanden aan gemeten bodemfysische karakteristieken een praktische ingang om tot een bodemfysische schematisatie van de onverzadigde zone te komen die vervolgens de invoer vormt voor berekeningen. De modellen gaan er bijna allemaal vanuit dat de onverzadigde zone een homogeen, anisotroop medium is. In de praktijk zijn zaken als hysteresis in de waterretentie karakteristiek, preferente stroming en zwel- en krimpverschijnselen echter eerder regel dan uitzondering.

In de gedetailleerde dynamische modellen zijn deze processen vaak als aparte modules in het model opgenomen, maar hierbij doet zich dan vervolgens het probleem voor hoe de invoergegevens voor deze modules gegenereerd moeten worden. Men zou kunnen zeggen dat soms de 'modelcrisis' wordt vervangen door de 'datacrisis' en dat er dus een probleem blijft bestaan.

Blooper: "We hebben bij de calibratie de greppelfactor geïntroduceerd".

"Bij de calibratie van ons nutriënten af- en uitspoelingsmodel bleek de voorspelling volstrekt niet overeen te komen met de metingen. Telkens zat er ongeveer een factor 2 tussen. Bij nadere analyse bleek dat er juist op de overgang van onverzadigd grondwater naar oppervlaktewater, dus naar de greppels en sloten, processen plaatsvinden die een enorme retentie opleveren. Die processen zaten niet in ons model. Omdat we haast hadden konden we het model niet meer aanpassen. We hebben toen maar de 'greppelfactor' geïntroduceerd met een grootte van 0.5. Het model klopte vervolgens perfect!"

Stap 4: Analyseer het model

Bodemfysische eigenschappen (waterretentie en verzadigde- en onverzadigde doorlatendheid) zijn steeds gevoelige parameters.

Dit type modellen stelt vrijwel zonder uitzondering water- en/of massabalansen op. Deze balansen dienen sluitend te zijn. Bij voorkeur is de door computer-onnauwkeurigheid altijd optredende balansfout, in de resultaten terug te vinden.

Evenals in de verzadigde zone zijn stoftransportmodellen voor de onverzadigde zone gevoelig voor de initiële waarden, voor sorptieprocessen (evenwicht of niet-evenwicht, lineair of niet-lineair), wel of geen afbraak, aeratietoestand en aanwezigheid organische stof. Onafhankelijke meetwaarden zijn vaak onontbeerlijk. Echter de metingen zijn vaak niet representatief. Vooral ruimte- en tijdschalen spelen hierbij een belangrijke rol, omdat het topsysteem vaak een snel reagerend systeem is (het topsysteem is het bodemgedeelte met verzadigde grondwaterstroming boven het eerste watervoerende pakket). In het geval de initiële waarden niet of slecht bekend zijn, is een inregelrekening van enige weken aan te bevelen.

3.2.3 Literatuur

- Ashby, M., A.J. Dolman, P. Kabat, E.J. Moors and M.J. Ogink-Hendriks, 1996.
 Belmans, C., J.G. Wesseling and R.A. Feddes, 1983.
 Beltman, W.H.J., J.J.T.I. Boesten and S.E.A.T.M. van der Zee, 1995.
 Boesten, J.J.T.I., 1986.
 Feddes, R.A., P. Kabat, P.J.T. van Bakel, J.J.B. Bronswijk and J. Halbertsma, 1988.
 Genuchten, M.Th. van, and R.J. Wagenet, 1989.
 Groen, K.P., 1997.
 Hutson, J.L. and R.J. Wagenet, 1992.
 Lange, W.J. de, 1991.
 Vogel, T., K. Huang, R. Zhang and M.Th. van Genuchten, 1996.
 Walker, A., 1974.

3.3 Neerslag/afvoermodellen

3.3.1 Algemeen

Gangbare modelprogramma's in Nederland zijn SOBEK-RR, RAM, AQUARIUS, SIMGRO, MIKE-SHE, MODFLOW, J-model. Neerslag-afvoer-modellen simuleren regionale grondwaterstroming en waterpeilen in het oppervlaktewater. Vaak wordt rekening gehouden met aspecten zoals waterretentie in de onverzadigde zone, sprinkling irrigatie, ondergrondse irrigatie en verdampingsreductie.

In de modellen wordt onderscheid gemaakt in verharde en onverharde terreinen. Ook wordt rekening gehouden met het type en capaciteit van riool en de verwerkingscapaciteit van RWZI's. In glastuinbouwgebieden moet rekening gehouden worden met bassinbeheer.

De stroming in het oppervlaktewater kan op een aantal verschillende manieren worden berekend. Veel voorkomend zijn: stationair, pseudo-stationair, niet-stationair of middels stroomgebiedskenmerken. Vaak zijn de modellen een onderdeel van een grotere modellentrein, waarbij bijvoorbeeld een thema als verdroging centraal staat.

3.3.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

De belangrijkste valkuilen en gevoeligheden worden beschreven bij de oppervlaktewatermodellen en modellen voor de onverzadigde zone. Aanvullend zijn er echter nog een aantal andere punten te noemen. Vooraf moet bijvoorbeeld goed worden nagedacht of dit type modellen geschikt is. Voor gebieden waar significante oppervlakte-afvoer optreedt, is dit bijvoorbeeld niet het geval. Helling en microreliëf hebben belangrijke invloed.

Blooper: "Een 'veilig' ontwerp, maar wel onnodig kostbaar".

"Na de bouw van een groot bergingsbassin bleek dat het vrijwel nooit meer dan halfvol raakte, zelfs niet bij extreem zware buien. Bij het nalopen van de ontwerp-berekeningen bleek dat was aangenomen dat alle neerslag snel tot afvoer zou komen. Neerslag-verliezen waren niet in rekening gebracht, een trage afvoercomponent via het grondwater al evenmin. Met als gevolg een enigszins overgedimensioneerd bassin. Een 'veilig' ontwerp schreven ze, maar wel onnodig kostbaar!"

Het effect van het fluctueren van de onderrandvoorwaarde (regionale invloed) voor de modellering van de onverzadigde zone wordt ook vaak onderschat. Het regionale grondwatersysteem moet in bepaalde gevallen worden meegenomen, verzadigd en onverzadigd. Dit type model wordt vaak voor extreme omstandigheden toegepast. Het schatten van de initiële condities van met name de onverzadigde zone is echter even moeilijk als belangrijk. Gemeten vochtgehalten of kennis over het verloop van drukhoogten met de diepte zijn dan uiterst waardevol. Ook een goede schatting van drainageweerstand en functie van de grondwaterstand is belangrijk.

Stap 4: Analyseer het model

Specifieke calibratiegrootheden

(Zie ook oppervlaktewatermodellen en modellen voor de onverzadigde zone). De belangrijkste calibratieparameter is het percentage open water. Daarbij worden vaak de grootte en het moment van afvoerpieken voor calibratie gebruikt. Ook de bergingscoëfficiënt in de onverzadigde zone is meestal slecht bekend en wordt daarom vaak gecalibreerd. Tevens zijn de drainageweerstand vaak moeilijk onafhankelijk te meten en worden ze daarom veelal via calibratie op grondwaterstanden verkregen. Een veelvoorkomende valkuil voor dit type modellen is dat modelleurs vaak trachten fouten in de modellering van de onverzadigde zone te compenseren door aan andere parameters (zoals de drainageweerstand) te sleutelen. Een laatste valkuil tot slot is dat de modellen een voldoende lange insteltijd (enige weken) moet worden gegund om in het geval van onzekere initiële condities tot betrouwbare rekenresultaten te leiden.

3.3.3 Literatuur

Chow, V.T., D.R. Maidment and L.W. Mays, 1988.

French, R.H., 1994.

Singh, V.P., 1995.

3.4 Waterverdelingsmodellen

3.4.1 Algemeen

Gangbare modelprogramma's zijn DM, DIWA, HYDRA, TAUWSIM, RIBASIM, AAD (ARIADNE), CONVER. Waterverdelingsmodellen worden vaak gebruikt voor planning op het gebied van watervraag-situaties, terwijl hydrodynamische modellen vooral gebruikt worden voor wateroverschot- (overstromings-) situaties. Bij waterverdelingsmodellen gaat het veelal om stationaire berekeningen. Dynamische berekeningen worden bij voorkeur met een hydrodynamisch model uitgevoerd.

3.4.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

De interpretatie van invoergegevens vraagt deskundigheid van de modelgebruiker. De 'boekhoudkundige' benadering in dit type modellen is vaak nogal afwijkend van de praktijksituatie en vraagt om een zorgvuldige omvorming van praktijkgegevens naar invoergrootheden voor het model (van infrastructuur naar modelschematisatie, van beheersmaatregel naar modelberekening, etc.). De koppeling met districten (districtsmodellen) is vaak essentieel.

Blooper: "De fout in de meting was 7 keer groter".

"We kregen de opdracht om met een waterbewegingsmodel waarin ook Chloride was gemodelleerd te analyseren hoe een bepaalde zoutlozing gecompenseerd kon worden. De zoutlozing leverde een concentratieverhoging op van ongeveer 1%, en die moest met waterhuishoudkundige maatregelen teniet gedaan worden. Echter, alleen al de meetfout van de zoutconcentratie bedroeg 7%, en daarnaast kende ook het model een betrouwbaarheids-marge van meer dan 10%. Voor dit soort vragen was ons model dus volstrekt ongeschikt. Echter, onze opdrachtgever hield voet bij stuk. Hij moest en zou de sommen hebben. We hebben het uiteindelijk gedaan, maar of hij er veel aan heeft gehad?"

Waterverdelingsmodellen rekenen met stationaire situaties. Tijdstappen mogen daarom niet te kort gekozen worden. In een waterverdelingsmodel zonder volumes (sommige waterverdelingsmodellen kennen volumes in reservoirs) heeft het water geen 'looptijd', het water is direct van de oorsprong bij de riviermond. Dit impliceert dat waterverdelingsmodellen alleen voor projecten op het gebied van planning gebruikt kunnen/mogen worden, en dus niet voor 'real-time' studies. Onnauwkeurigheden in waterverdelingsmodellen hangen vaak samen met een overschrijding van de maximaal toepasbare tijdstap.

Stap 4: Analyseer het model

Fouten in de invoer zijn eenvoudig op te sporen door het opstellen van balansen (groot voordeel van waterverdelingsmodellen ten opzichte van hydrodynamische modellen).

Calibratiegrootheden

De belangrijkste calibratiegrootheden bij dit type modellen zijn:

- gemeten debieten (en/of waterstanden) in rivieren en kanalen;
- balansen over de lange termijn; check deze met karakteristieke grootheden als de jaargemiddelde afvoer en dergelijke;
- peilbeheer en beheersregels voor waterverdeling;
- met behulp van het model zijn onbekende balansposten vaak aardig in te schatten;
- houd er rekening mee dat de praktijksituatie vaak wel dynamisch is, bijvoorbeeld als gevolg van het uitvallen van pompen.

Stap 5: Gebruik het model

Initiële condities spelen vaak een beperkte rol in een model, al kunnen de startvolumes van aanwezige reservoirs van belang zijn.

Blooper: “Het water werd uit de zee gezogen en verdween in de onttrekking”.

“We hadden een calibratie uitgevoerd met een calibratietool. Wat we echter niet door hadden was dat de tool alleen de absolute waarde van de afvoer presenteerde. Uit de gepresenteerde afvoer kon dus niet de RICHTING van de stroming worden afgeleid. Door een aanzienlijke onttrekking ergens midden in het projectgebied kon de situatie ontstaan dat na calibratie het water uit zee werd 'gezogen', de berg opstroomde om te verdwijnen in de 'onttrekking'. De absolute waarde van de gecalibreerde afvoeren kwam echter fraai overeen met de gemeten waarden! Waarschuwing: ook als een 'normale' presentatietool zou zijn gebruikt kan deze fout/valkuil optreden doordat de gebruiker per tak/segment van een schematisatie de positieve stromingsrichting kan opgeven.”

3.4.3 Literatuur

- Bos, M.G., J. Vos and R.A. Feddes, 1996.
 Burnash, R., L. Ferral and R. McGuire, 1973.
 Goodman, A.S., 1984.
 Hall, W.A. and J.A. Dracup, 1970.
 Kneese, A.V. and B.T. Bower, 1971.
 Kropff, M.J., H.H. van Laar and H.F.M. ten Berge, 1993.
 Maass, A., M.M. Hufschmidt, R. Dorfman, H.A. Thomas, S.A. Marglin and G.M. Fair, 1966.
 Major, D.C. and R.L. Lenton, 1979.
 Miser, J. and E.S. Quade, 1985.
 Rand Corporation, 1983.
 Smith, M., 1992.

3.5 Hydrodynamische modellen

3.5.1 Algemeen

Hydrodynamische modellen worden vaak ingezet aan het begin van een keten van simulaties, zoals waterbeweging => waterkwaliteit of waterbeweging => morfologie. Vaak gebeurt dit op basis van een sequentiële koppeling, waarbij de simulatie met één module volledig wordt afgewerkt voordat de simulatie met de opvolgende module wordt gestart. In bepaalde gevallen is echter een koppeling impliciet of expliciet op tijdstapniveau gewenst, zoals waterbeweging <=> zout | temperatuur. Op eenzelfde manier worden berekeningen met een hydrodynamisch model soms gekoppeld aan een neerslag-afvoer model. Ook hier wordt als regel sequentieel gesimuleerd, maar in vlakke gebieden is vaak een directe koppeling tussen grondwater en oppervlaktewater wenselijk.

Hydrodynamische modellen zijn gebaseerd op één- of meerdimensionale schematisaties. De keuze voor het detail waarmee de berekeningen worden uitgevoerd is voornamelijk gebaseerd op de uit de schematisatie volgende rekentijden. Momenteel worden 1D-modellen veel ingezet voor de analyse van het gedrag van een systeem over een reeks van jaren. Opvolgend worden over het algemeen de statistische parameters van het gedrag van het systeem bepaald. Als voorbeeld: rioolstelsels worden momenteel ontworpen op basis van simulaties van het overstortgedrag voor een 10-jarige regenvalreeks. Statistische parameters zijn dan de overstortfrequentie per locatie en de verdeling van overstortvolumes. 1D-modellen worden vaak ingezet voor ontwerp, voorspellingen, operationeel beheer, optimalisatie van systemen en beleidsstudies. Momenteel gangbare modelprogramma's zijn: SOBEK (met de lijnen River / Low Land / Urban), DUFLOW, ISIS, MIKE11, MOUSE en HYDROWORKS.

2D-schematisaties worden toegepast waar gedetailleerd inzicht in het snelheidsveld en/of de waterstanden in het horizontale vlak gewenst is en waar de variatie van variabelen over de verticaal geen significante invloed heeft op het resultaat van de berekeningen. 2D-modellen worden over het algemeen ingezet voor de begeleiding van ontwerp en uitvoering en voor gedetailleerde morfologische- en waterkwaliteitsstudies. Simulaties worden over het algemeen opgezet voor een geselecteerde set van gebeurtenissen. Gangbare modelprogramma's op dit gebied zijn pakketten als MIKE21, Delft3D, WAQUA en DUCHESS.

3D-simulaties worden uitgevoerd in vergelijkbare projecten als 2D-simulaties, namelijk in situaties waar de verdeling van de van belang zijnde variabele-waarden over de verticaal een discretisatie langs deze as noodzakelijk maakt. Over het algemeen betreft dit de simulatie van verdelingen van temperatuur, zout en andere waterkwaliteitsgrootheden. Gangbare modelprogramma's zijn Delft3D, MIKE3 en TRIWAQ. Ook de minder gebruikelijke 2DV-schematisaties worden met deze pakketten gesimuleerd.

3.5.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet de modelapplicatie op

Systeemgedrag

Het is af te raden de modelschematisatie op te zetten zonder een goed inzicht te hebben in het gedrag van het te modelleren systeem. Het kan nuttig zijn om eerst een pilotmodel op te zetten, waarbij op basis van een grove schatting van modelgegevens enkele berekeningen worden gemaakt. Hierbij kunnen gevoeligheden worden onderzocht, zoals hoe ver de invloed van randvoorwaarden strekt, gevoeligheid van bepaalde fysische modelparameters als wrijving of berging, demping van de dynamische verschijnselen in het systeem, enzovoorts. Ga altijd na welke termen van belang zijn in de gebruikte vergelijkingen.

Schaal van de modellering

Speciaal in 2D- en 3D-modellering is de keuze van de schaal belangrijk. Worden belangrijke fysische processen beschreven op het gekozen rooster? Komt de benodigde dynamiek door in vervolgberekeningen, zoals morfologie, waterkwaliteit? Welke tijdschaal wordt gekozen, bijvoorbeeld via filtering van getijden?

Van dit laatste is een geval bekend dat bij het afregelen van een getijdemodel de waterstand niet bleek te variëren. Vanwege de lage frequentie van bemonsteren was er een rekentijdstap van 12 uur gekozen, ofwel precies één getij. Een rekentijdstap van een uur gaf een veel beter resultaat.'

Randvoorwaarden

Leggen we de grenzen van het model wel ver genoeg weg? Uitgangspunt is dat bij studie naar veranderingen in het fysische systeem de resultaten zo veel mogelijk onafhankelijk blijven van wat aan de randen is opgelegd. Bij een rivier betekent dit bijvoorbeeld dat de benedenrand zo ver benedenstrooms van het studiegebied ligt dat de stuwkromme veroorzaakt door een fout in deze randvoorwaarde niet doorwerkt in de modelresultaten van het gebied waar de ingrepen plaatsvinden. Het pilotmodel kan helpen bij het controleren van de gekozen locatie van de randen.

Zout- en temperatuurverschillen

Deze werken sterk door in de hydrodynamische detailberekeningen (2D en 3D). In 1D-modellen is de invloed op de resultaten vaak beperkt. Denk echter aan de doorwerking op dispersiecoëfficiënten.

Berging en afvoercapaciteit

Dit is vooral van belang voor 1D-berekeningen. 1D-systemen kunnen meestal worden gezien als een samenspel van berging en afvoercapaciteit. Hoe gevoelig is ons systeem voor beide parameters? Hoe varieert deze gevoeligheid over het modelgebied? Richt je hierop bij het doen van gevoeligheidsanalyses met het pilotmodel. Vergeet niet te corrigeren voor

Blooper: "Het eerste de beste schip ramde bijna de brug".

"Met ons nieuwe 1D-hydrodynamische model hebben we een kanaal ontworpen dat vooral gebruikt zou gaan worden voor de scheepvaart. De stroomsnelheden mochten dus niet te hoog zijn. Het ontwerp werd dan ook zodanig gemaakt dat de stroomsnelheid niet boven de 1 m/s uitkwam. Nadat het kanaal met veel ceremonie geopend was, ramde het eerste de beste schip bijna de brug. Het was door de hoge stroomsnelheden bijna onbestuurbaar geworden was. Wat bleek: de brug leverde een vernauwing van het kanaal op, die bovendien nog in de bocht van het kanaal was gelegen. Daardoor lag gemiddeld weliswaar de stroomsnelheid nog steeds op 1 m/s, maar lokaal bij de brug lag die op 5 m/s. We hadden hier dus een 2D-model moeten gebruiken."

fouten ontstaan in berging en afvoercapaciteit door het afslanken van een netwerk (rioolleidingen, poldersloten).

Massa- of volumebalans

Niet alle beschikbare modellen garanderen een correct berekende massabalans. Soms is dit echter van essentieel belang bij het gebruik van de modelresultaten. Dit speelt bijvoorbeeld waar de bergingsparameter een sterk niet-lineair karakter heeft, zoals in rioolstelsels. Worden hier vergelijkende berekeningen gedaan om het effect van bergingsbassins te simuleren dan werkt een sluitfout in de massabalans gevoelig door in het ontwerp en dus in de kosten van het uit te voeren project. Een ander belang van een correcte massabalans (of volumebalans) doet zich voor waar de hydrodynamische berekening wordt gebruikt als onderdeel van waterkwaliteits simulaties. Het belang van een sluitende volumebalans moet ook worden afgezet tegen de nauwkeurigheid waarmee bepaalde gegevens bekend zijn. Notoir zijn de onzekerheden in laterale debieten en de topografie van het hoogwaterbed bij hoogwatervoorspellingen. Voor een dergelijk model is een door de rekenmethode veroorzaakte volumefout van enkele procenten dan ook niet zo'n probleem.

Garbage in - garbage out

Laat je niet te snel ontmoedigen door deze bekende slogan bij de keuze van het model. Wat zijn de kosten voor het krijgen van betere gegevens? Hoe werkt de kwaliteit van de gegevens door in de modelresultaten? Wat zijn de mogelijkheden om fout gemeten modelparameters of randvoorwaarden te verbeteren op basis van de interpretatie van calibratieresultaten? Als voorbeeld: toepassing van neurale netwerken bij regenval-afvoerberekeningen leidt tot herkenning van extrapolatiefouten in de afvoerkromme die bij de omzetting van waterstanden in debieten wordt gebruikt. Moet ons eigen neurale netwerk (gezond verstand) dan ook niet in staat zijn om deze fout te constateren en op basis hiervan aannamen te doen die leiden tot een verbeterde extrapolatie?

Numerieke parameters

Er moet zorg worden besteed aan de keuze van numerieke parameters. Van belang is het aantal rekenpunten op de te simuleren golflengte, zowel in de ruimte als de tijd. Zorg voor een voldoende aantal rekenpunten per golflengte waarvan de effecten moeten worden meegenomen in de berekening. Anders filtert het model deze golfcomponenten vaak uit. Optimaal is een gelijke dichtheid bij de beschrijving in de ruimte en de tijd. Vaak betekent dit een Courant-getal (verhouding tussen de numerieke tijdstap en de loopsnelheid van een golf door een afstandstap) groter dan één. Controleer de gekozen ruimtediscretisatie ook op basis van een voldoende nauwkeurige beschrijving van de topografie en speciale locale verschijnselen, zoals stuwkrommen. Vaak wordt een model gebruikt om situaties te vergelijken. Zorg er hierbij altijd voor dat het Courant-getal gelijk blijft. 2D- en 3D-modellen maken vaak gebruik van verborgen tussenstappen in de tijd. Informeer of de numerieke afhandeling niet kan leiden tot sterk afwijkende waarden van de modelvariabelen. Dit kan zich vooral voordoen bij de grotere Courantgetallen. Het is altijd raadzaam om het model te controleren op gevoeligheid voor de keuze van de numerieke parameters.

Stap 4: Analyseer de applicatie

Beginwaarden

Controleer hoelang er moet worden gerekend voordat de invloed van foute of inconsistente beginwaarden is weggeëbt. Globaal geldt voor getijdegebieden het volgende: waterstanden circa 2 getijden; snelheden en debieten circa 4 getijden en reststromen circa 12 getijden. Bij rivieren hangt de inspeeltijd die nodig is om de fouten het model uit te laten lopen af van de looptijd van de golf door het model. Denk er hierbij aan dat deze afhangt van de berging. Begin een hoogwaterberekening daarom altijd met water alleen in het zomerbed. Denk er ook aan dat bij systemen met weinig wrijving de aangenomen beginwaarden lang doorwerken in de simulatie (bijvoorbeeld in sluiskolken).

Calibratie

Weerstandscoefficienten zijn essentieel. Deze zijn niet meetbaar en moeten dus afgeleid worden. Controle vindt vooral plaats op basis van waterstanden (debieten worden minder nauwkeurig gemeten dan waterstanden). Houd rekening met het optreden van windeffecten op de waterstand. Vertaling van waterstanden naar debieten kan zo tot foutieve debieten leiden.

In getijdegebieden zitten de onzekerheden vooral in het bepalen van de effectieve diepte. Weerstandscoefficienten zijn dan minder belangrijk. Wanneer zandplaten door de gekozen gridgrootte niet realistisch in het model kunnen worden opgenomen, zal een zinvolle effectieve diepte gekozen moeten worden om toch rekening te kunnen houden met de effecten ten gevolge van de ligging van de plaat. In stormvloedmodellen zit de grootste onzekerheid in de wind-forcing. Kalmanfiltering kan hier een rol bij spelen.

Bij riviermodel-calibratie op basis van quasi-stationaire toestanden moet begonnen worden bij het laagste debiet. In volgorde van oplopend debiet worden de calibraties voor de hogere waterstanden uitgevoerd.

Houd de ruimtelijke variatie in parameterwaarden beperkt. Dit kan worden gerealiseerd door het gebied op te delen in grotere deelgebieden met dezelfde parameterwaarden. Deze gebiedsindeling kan worden gemaakt óf op basis van directe ruimteverdeling óf op basis van gebiedskenmerken (ecotopen). Te veel variatie in parameterwaarden leidt tot overparameterisering.

Ga na of sturing van kunstwerken geen verstorende invloed heeft op de consistentie van calibratiegegevens.

Voor bepaalde berekeningen wordt minder belang gehecht aan een gedetailleerde calibratie. In de rioleringswereld is het bijvoorbeeld gebruik een referentieberekening te maken op basis van het databestand van het rioolstelsel en standaard wrijvingswaarden. Van belang is alleen hoe de nieuwe situatie afwijkt van de bestaande. Bij hoogwaterberekeningen voor onze rivieren worden compensatieberekeningen gemaakt op basis van een vergelijking tussen een referentieberekening en de nieuwe situatie. Ook hier wordt het eenmaal gecalibreerde model niet continu aangepast aan de veranderingen.

Validatie

Negeer niet te gemakkelijk het belang van modelvalidatie. Validatie dient in eerste instantie om inzicht te krijgen in het proces van overparameterisering. Hierbij worden extrapolaties gemakkelijk onbetrouwbaar. Een goed beginsel zou daarom zijn om een extreme situatie in een set van veldwaarnemingen in eerste instantie te gebruiken om de calibratie op basis van de andere data sets te valideren.

Stap 5: Gebruik het model

Kies zorgvuldig de randvoorwaarden waarvoor een model wordt gedraaid. Let op de keuze van combinaties en let vooral op de afhankelijkheden (bijvoorbeeld regenval en windrichting). Ga ook na of moet worden gesimuleerd met randvoorwaarden bepaald op basis van een statistische voorbewerking óf dat op de randen werkelijke tijdreeksen worden gegeven en de statistische verwerking plaatsvindt op basis van modelresultaten. Door de toegenomen rekensnelheid van computers wordt dit laatste steeds gangbaarder bij de toepassing van 1D-modellen.

3.5.3 Literatuur

- Abbott, M.B., 1997.
- Babovic and Larsen, 1998.
- Cunge, J.A., F.M. Holly and A. Verwey, 1986.
- Hanif Chaudry, M., 1993.
- Kowalik, Z. and T.S. Murty, 1993.
- Verwey, A., A.W. Minns, V. Babovic and C. Maksimovic, 1994.
- Vreugdenhil, C.B., 1994.

3.6 Hoogwatervoorspellings- en operationele modellen

3.6.1 Algemeen

Aangezien het onderscheid tussen hoogwatervoorspellings- en operationele modellen niet altijd even eenvoudig is vast te stellen zijn de valkuilen en gevoeligheden ten aanzien van deze modellen gemeenschappelijk geïnventariseerd. Sturing op waterkwaliteit met behulp van operationele modellen is in Nederland nauwelijks aan de orde. Veelal vindt sturing plaats op basis van metingen en niet op basis van modelberekeningen (zie verder: calamiteitenmodellen). Hoogwatervoorspellings- en operationele modellen bestaan meestal uit een combinatie van een neerslag-afvoermodel en een waterbewegingsmodel. Momenteel worden voor de waterbeweging voornamelijk één-dimensionale modelprogramma's gebruikt als DUFLOW en SOBEK.

3.6.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Bij de opzet en keuze van het model is het van groot belang de karakteristieken van het systeem te kennen. Deze bepalen de benodigde gegevensdichtheid en -frequentie. Rioolstelsels hebben bijvoorbeeld vaak een erg korte responsietijd en dan zijn de effecten van korte intense regenbuien belangrijk. Dit vraagt om veel detail in ruimte en tijd. Voor polders is vooral de hoeveelheid neerslag van belang en speelt de verdeling van de neerslag in de tijd (en ruimte) een minder grote rol. In stroomgebieden is de verdeling van de neerslag in de ruimte en tijd juist wel van belang en bijvoorbeeld ook de richting van de bui. Hellende gebieden en vlakke gebieden vragen om specifieke benaderingen.

Blooper: "Het model was te goed".

"Al jarenlang werkten we met een bepaald hoogwatermodel, waarvan we wisten dat het in het algemeen net iets hogere waterstanden voorspelde dan dat ze in werkelijkheid optraden. Op een gegeven moment hebben we een nieuw model gemaakt, dat wel nagenoeg exact de waterstanden voorspelde. Het gevolg: een jaar later trad een overstroming op met relatief veel schade. Wat was er namelijk gebeurd: de gemeenten gingen er bij ons oude model vanuit dat het standaard een halve meter te hoog voorspelde. Van onze voorspelling met het nieuwe model hadden ze voor het gemak dus ook maar een halve meter afgetrokken. Nu de voorspelling opeens wel goed was, was niemand voorbereid op de overstroming."

Voorkom het opzetten van modellen die 'data-hongerig' zijn. Hieronder worden systemen verstaan die toelevering van actuele data verwachten in een tijdspanne of op een detailniveau die in werkelijkheid niet gerealiseerd kan worden. Houd rekening met het soort van noodsituaties waarvoor modellen eventueel worden ingezet. Welke gegevens zijn nodig, op wat voor termijn en hoe worden ze aangeleverd (telefoonlijnen kunnen bijvoorbeeld onbruikbaar worden)? Houd de schematisatie zo simpel mogelijk. Veelal ben je alleen geïnteresseerd in specifieke locaties in het systeem. Je bent niet geïnteresseerd in veranderingen als gevolg van ingrepen, zoals in plannings- of MER-studies, maar in effecten van een afvoergolf op het bestaande systeem. Wanneer vuistregels kunnen worden afgeleid, moeten deze ook worden toegepast.

Ook de rekensnelheid is van belang! Natuurlijk moeten de modeluitkomsten voor de geselecteerde locaties wel overeenkomen met de werkelijke situatie.

De acceptabele voorspellingstermijn van modellen is primair afhankelijk van de responsietijd van het systeem. De responsietijd bepaalt of je de modelvoorspelling kan of moet baseren op 'historische' meetreeksen, actuele neerslagcijfers of weervoorspellingen. Hoe korter de responsietijd hoe korter de voorspellingstermijn en/of hoe groter de onnauwkeurigheid van de voorspelling. Uiteraard hangt dit ook samen met het gebied waarvoor je voorspellingen wilt doen. Is het bovenstroomse deel van een stroomgebied zijn er meestal weinig 'historische' data beschikbaar en is de responsietijd klein, voor meer benedenstrooms gelegen delen kan altijd gebruik worden gemaakt van bovenstroomse data.

De modeluitkomsten kunnen sterk beïnvloed worden door fouten of onnauwkeurigheden in de schematisatie van de infrastructuur. Het over het hoofd zien van een bruggetje of het verkeerd invoeren van dijkhoogten kan tot geheel andere (over)stromingspatronen leiden! Wanneer er een dijk doorbreekt zijn de modelresultaten uiteraard ook niet langer bruikbaar.

De initiële waterstand in reservoirs of berging kan erg sturend zijn wanneer het bergingsvolume significant is ten opzichte van het volume van de afvoerpiek.

Waterbewegingsmodellen zijn dynamische modellen en daardoor, afhankelijk van de responsietijd van het systeem, over het algemeen niet erg gevoelig voor de initiële condities.

Stap 4: Analyseer het model

Calibratie gebeurt in hellende gebieden vooral op basis van debieten en in vlakke gebieden vooral op basis van waterstanden. Meetgegevens van extreme afvoersituaties ontbreken vaak. Dit maakt het moeilijk modellen goed te calibreren.

Wat betreft invoergegevens is het model over het algemeen het meest gevoelig voor de neerslaggegevens. Ook is het erg belangrijk te weten of de neerslag als regen of als sneeuw valt. De opgegeven bodemcondities bepalen hoe snel het water tot afstroming komt. Het neerslag/afvoer gedeelte is veelal het meest gevoelige onderdeel van hoogwatervoorspellings- en operationele modellen. Dit zijn veelal 'event'-modellen die erg afhankelijk zijn van de initiële condities.

3.6.3 Literatuur

- Brummelhuis, P.G.J. ten, 1996.
- Grijssen, J.G., X.C. Snoeker and C.J.M. Vermeulen, 1992.
- Kalman, R.E., 1960.
- Moll, J.R. and J.I. Crebas, 1989.
- Refsgaard, J.C. and E.A. Karalies, 1997.

3.7 Calamiteitenmodellen

3.7.1 Algemeen

Gangbare calamiteitenmodellen zijn: Versie 3 van het Rijnalarm-model (DBAM-shell op basis van Delft Tools (analytische oplossing 1,5D)); MARS en RAMFOS (deeltjesmodellen voor de Noordzee op basis van het modelprogramma DELPAR); TRANSSPILL (2D analytisch model voor drijvende stoffen op de Noordzee zonder getij); Maas-alarmmodel (1D analytisch model).

Bij calamiteitenmodellen gaat het vaak om specifieke **operationele** modellen die snel gebruiksklaar zijn en weinig (additionele) informatie nodig hebben. De meeste inspanning zit in het opzetten van een dergelijk model. Er moet in noodsituaties ook met een beperkte hoeveelheid gegevensmateriaal kunnen worden gesimuleerd. De schatting van de looptijd wordt meestal (bij rivier- of 1D-modellering) veel belangrijker gevonden dan de maximale gehalten aan geloosde stoffen die op zullen treden: de tijd die de beheerder nog heeft om drinkwater innamepunten te beschermen en/of sluiten is van groot belang. Voor 2D-berekeningen is daarnaast nog onzeker **waar** de lozing terechtkomt en langskomt: getij, windkracht en windrichting zijn daarbij belangrijke grootheden. Voor de beschouwing van de concentraties die in het oppervlaktewater zullen optreden is het meemodelleren van de dispersie zeer belangrijk.

Bij calamiteiten is er altijd behoefte aan gedetailleerde informatie over de aard en het type van de geloosde stoffen (giftigheid). Informatie over vluchtigheid en/of afbraaksnelheid zijn meestal iets minder urgent omdat men meestal een 'worst case' analyse uitvoert (geen afbraak, sedimentatie of vervluchtiging). Gedetailleerde informatie over stoffen is opgeslagen in een aantal databases, waaronder een door TNO beheerde en bijgehouden database.

Gedetailleerde bemonstering van optredende lozingen/rampen is van groot belang voor de calibratie van dit soort modellen onder verschillende hydrologische en meteorologische omstandigheden.

3.7.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

De afhandeling van de dispersieterm kan grote invloed hebben op het eindresultaat. Processen en verschijnselen die een sterke relatie hebben met slib of de daaraan gehechte stoffen kunnen vaak minder nauwkeurig met een model worden gereproduceerd.

Stap 4: Analyseer het model

De berekende resultaten zijn altijd sterk afhankelijk van de betrouwbaarheid van de invoergegevens: met name emissies en waterkwantiteit (looptijd) zijn cruciaal. Indien men beschikt over meetgegevens van eerder opgetreden calamiteiten zal dat de betrouwbaarheid/nauwkeurigheid van het berekende resultaat aanzienlijk kunnen vergroten.

Stap 5: Gebruik het model

Er moet bij het gebruik van een calamiteitenmodel rekening mee worden gehouden dat een model meestal is ontworpen voor een vrij specifieke tijdschaal. Voor het Rijnalarm-model ligt die tijdschaal bijvoorbeeld tussen een paar dagen en een paar weken.

3.7.3 Literatuur

Spreafico, M. and A. van Mazijk, 1993.

3.8 Morfologische modellen

3.8.1 Algemeen

In tegenstelling tot bijvoorbeeld de hydrodynamica zijn er in de morfologie veel grotere onzekerheden ten aanzien van optredende processen en de manier waarop het systeem daarop reageert. Net als bij ecologie bevindt de morfologie zich aan het eind van een keten:

waterstanden => transport => stroomsnelheden => morfologie

De complexiteit en onnauwkeurigheid nemen sterk toe naarmate de keten verder doorlopen wordt. Er is een duidelijk onderscheid te maken tussen riviersystemen enerzijds en getijdesystemen anderzijds. In riviersystemen is de morfologische eindtoestand veel duidelijker dan in getijdesystemen en zijn de tijdschalen waarop gekeken wordt veelal langer. Dit vraagt een andere benadering van de morfologische modellering. Gangbare modelprogramma's zijn: SOBEK (1D), DELFT-3D, MIKE 21, UNIBEST, ESTMORF, EMPREL.

3.8.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Dominante afvoer

Berekeningen met een variabele afvoer verdienen de voorkeur omdat het principieel onmogelijk is om een zodanige constante afvoer ('dominante afvoer') te kiezen dat deze dezelfde bodemligging levert als een reeks variërende afvoeren. Gebruik van een variërende afvoer is thans gebruikelijk in ééndimensionale berekeningen, maar in twee- en driedimensionale berekeningen wordt uit praktische overwegingen meestal nog een constante afvoer gebruikt. Men kiest daarvoor een afvoer die hetzelfde jaartransport van sediment geeft als de hydrograaf van variërende afvoeren. Bij getijmodellen definieert men analoog aan de 'dominante afvoer' een representatief 'morfologisch getij'. Met de hierdoor geïntroduceerde onnauwkeurigheid wordt vervolgens in de interpretatie rekening gehouden.

Quasi-stationariteit

Een gebruikelijke aanname bij morfologische berekeningen van laagland-rivieren is dat de waterbeweging quasi-stationair is. Vergeleken bij de morfologische veranderingen in de rivier past de waterbeweging zich zo snel aan nieuwe randvoorwaarden aan, dat de hydrodynamische instationariteit van deze aanpassing te verwaarlozen is. Dit betekent dat men de stroming met een stationair waterbewegingsmodel kan berekenen. Variërende afvoeren laten zich dan benaderen met een serie stationaire afvoerniveaus. In getijgebieden wordt het begrip *quasi-periodiciteit* gehanteerd, uitgaande van het feit dat morfologische tijdschalen veel groter zijn dan de tijdschalen die bij de waterbeweging horen.

Terugkoppeling in estuaria

Een extra complicatie bij de hydrodynamische randvoorwaarden voor modellen met getijden is dat de hoeveelheden water die tijdens een getijcyclus door een estuarium stromen geen onafhankelijke grootheden vormen, maar beïnvloed worden door de morfologische ontwikkeling in het estuarium. Bij getijmodellen hangen bovendien de morfologische veranderingen samen met de residuele transporten tijdens een getijcyclus. Deze residuele transporten zijn het netto-effect van transporten naar binnen tijdens vloed en transporten naar buiten tijdens eb. De bepaling van sedimenttransporten vereist daarom bij estuaria een veel grotere nauwkeurigheid dan bij rivieren.

Stap 4: Analyseer het model

Bij morfologische modellen moet altijd eerst de waterbeweging gecalibreerd worden. In één dimensionale modellen kunnen de waterstanden afgeregeld worden met de bodemruwheidscoëfficiënt. In tweedimensionale modellen kunnen daarnaast ook stroombeelden afgeregeld worden met bodemruwheidscoëfficiënten en turbulente diffusiecoëfficiënten.

Morfologische calibratie kan vervolgens in eerste instantie plaatsvinden op de bodemligging: het *bodemlengteprofiel* in één dimensionale modellen, de *bodemtopografie* in twee- en driedimensionale modellen. In geval van gegradeerd sediment moet tevens calibratie plaatsvinden op *samenstelling* (kenmerkende sedimentkorrelgrootten) van de bodemtoplaag. Calibratie op basis van sedimenttransporten is geen geschikte methode.

Gemeten en berekende bodemlengteprofielen kunnen vergeleken worden op basis van gemiddelde liggingen. Daartoe filtert men:

- duinen en zandgolven uit de metingen;
- bodemgolven die door de één dimensionale schematisatie veroorzaakt worden uit de rekenresultaten.

Kwantitatieve criteria voor het ijken van bodemtopografieën kunnen gerelateerd worden aan dwarsbodemverhangen in bochten en locaties van bochtovergangen (die min of meer samenhangen met de lengte van de zandbanken in de binnenbochten).

Eén dimensionale morfologische modellen van zich vertakkende rivieren zijn uiterst gevoelig voor de op te geven empirische knooppuntsrelaties die aangeven hoe het aankomende sediment zich op splitsingen over de riviertakken verdeelt (zie PAO-syllabus 'Riviermorfologische randvoorwaarden - vervolg', bladzijde 6 en 8 en de daarin aangegeven literatuurverwijzing).

Zeer belangrijke parameters in twee- en driedimensionale morfologische modellen zijn de coëfficiënten voor het effect van bodemhellingen op het sedimenttransport. Van belang daarbij is tevens dat de parameter voor numerieke stabiliteit in feite een modificatie inhoudt van de coëfficiënt voor het effect van bodemlangshellingen op sedimenttransport. Daarnaast hebben ruimtelijke variaties in sedimentkorrelgrootte en bodemruwheid een grote invloed op twee- en driedimensionale morfologische berekeningen. Technieken om deze ruimtelijke

variaties in het veld te meten schieten thans voor een goede calibratie nog te kort. Modules die deze ruimtelijke variaties berekenen zijn thans in ontwikkeling.

Stap 5: Gebruik het model

Het in een later stadium uitbreiden van een gecalibreerd stromingsmodel met een morfologische module levert in het algemeen geen goed morfologisch model. In een dergelijk geval is een volledige hercalibratie en mogelijk zelfs het opzetten van een nieuwe schematisatie noodzakelijk.

Stap 6: Interpreteer de resultaten

Berekende initiële erosie en sedimentatie die niet gehoorzamen aan een overall trend hebben geen fysische betekenis. Ze zijn het gevolg van een aanpassing van de bodemligging aan de schematisatie.

3.8.3 Literatuur

- Mosselman, E., 1996a.
- Mosselman, E., 1996b.
- Vriend, H.J. de, 1996.
- Vriend, H.J. de, and J.S. Ribberink, 1996.

3.9 Waterkwaliteitsmodellen

3.9.1 Algemeen

Waterkwaliteitsmodellen zijn modellen waarmee de (meestal chemische) kwaliteit van watersystemen kan worden gesimuleerd. Dit gebeurt in het algemeen op basis van water- en slibbeweging, emissies en (chemische) processen. Waterkwaliteitsmodellen zijn grofweg in 2 categorieën in te delen:

- 'Near field' modellen, voor het bepalen van lokale effecten (mengzonebenadering). Dit zijn bijna altijd stationaire modellen, vanwege de kleine schaal van plaats en tijd. Ze worden vooral gebruikt voor toelatingsbeleid voor vergunningen,
- 'Far field' modellen, voor het doorrekenen van een heel watersysteem. Vaak zijn dit dynamische modellen, omdat processen en transport door stroming een grote rol spelen. Ze worden tevens gebruikt bij beleidsanalyses voor vergelijking van de effectiviteit van maatregelen/scenario's.

Gangbare modelprogramma's voor waterkwaliteit zijn: DELWAQ (ook SOBEK, DBS en Delft3D), DUFLOW, Mike*, Nuswa, PcDitch, PcLake, SOM3 en IMPACT. Deze programma's zijn ook bruikbaar voor bestrijdingsmiddelen. Daarnaast zijn SLOOT.BOX en TOXSWA (kavelsloot, voor toelating) specifieke modelprogramma's voor bestrijdingsmiddelen.

Een speciale categorie modellen die sterk aan de waterkwaliteitsmodellen is gelieerd, zijn de waterbodemmodellen. Soms zijn dit aparte modelprogramma's (bijvoorbeeld Horizon), soms zijn er geïntegreerde modules, bijvoorbeeld de module Switch binnen DBS.

Er zijn modelprogramma's die zelf geen water- en/of slibbeweging berekenen, maar die als invoer krijgen uit andere modellen. Wel is een trend te zien dat steeds meer programma's een geïntegreerd geheel vormen voor de hydrodynamica, morfologie en waterkwaliteit. Dit is bijvoorbeeld het geval bij DUFLOW, SOBEK en Mike. Programma's als Nuswa, PcDitch en PcLake maken gebruik van een gesimplificeerde waterbeweging.

De diverse modelprogramma's voor waterkwaliteit lopen sterk uiteen wat betreft (het aantal) opgenomen stofgroepen. Sommige modelprogramma's richten zich bijvoorbeeld alleen op bestrijdings-middelen, maar er zijn ook programma's die zich in principe richten op alle stofgroepen (nutriënten, metalen, organische micro-verontreinigingen, bestrijdingsmiddelen, enzovoorts) en de daarbij behorende proces-ormuleringen (bijvoorbeeld reaeratie vanuit de atmosfeer, netto bezinking van algen en detritus, mineralisatie, nitrificatie en denitrificatie,

Blooper: "Negatieve concentraties".

"Bij de oplevering van een waterkwaliteits-model bleken de stikstofconcentraties (nitraat en ammonium) in de grenslaag tussen water en bodem hevig te oscilleren. Nadere inspectie wees uit dat dit rond de waarde 0 gebeurde en dat er dus negatieve stikstofconcentraties door het model berekend werden. Dit kwam enerzijds door het gekozen integratiealgoritme en anderzijds doordat er geen mechanisme was ingebouwd om dit te voorkomen. Toen dit verholpen was, werd de performance van het model ook veel beter."

sedimentatie, resusptie, chemische en biologische afbraak, adsorptie en desorptie en vervluchtiging). Met betrekking tot eutrofiëring worden naast chemische processen dus ook biologische processen meegenomen (algen). Bij bepaalde modelprogramma's is het mogelijk zelf nieuwe processen in te voeren.

3.9.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Voordat gestart wordt met het modelleren van de waterkwaliteit moet er, net als bij alle andere typen modellen, worden geanalyseerd of er voldoende gegevens beschikbaar zijn. In dit geval zijn de meest relevante gegevens:

- waterbeweging (zie paragraaf 3.4 en 3.5 van Deel II);
- emissies (zie paragraaf 3.13 van Deel II);
- slibtransport (voor slibgebonden stoffen);
- processen (inclusief parameterwaarden);
- meetgegevens.

Het gebeurt nogal eens dat een prachtig gedetailleerd model gebouwd wordt, terwijl er niet of nauwelijks meetgegevens beschikbaar zijn om het model te calibreren.

Een vergelijkbaar probleem speelt ook bij de emissiegegevens. Met name diffuse bronnen zijn vaak moeilijk te kwantificeren, en als dat al lukt vaak met een grote mate van onbetrouwbaarheid. In dat soort gevallen is het verspilde moeite een buitengewoon gedetailleerd waterkwaliteitsmodel te bouwen. Indien lozingen al snel over de gehele breedte van de stroom worden gemengd, is een 1D model voldoende. In stagnante situaties en bij modellen voor een lokale schaal verdient een 2D model de voorkeur.

Bij het bouwen van het model moet er ook rekening mee worden gehouden dat sommige processen qua tijdschaal sterk van elkaar verschillen. Een voorbeeld hiervan is het sedimentatieproces onder invloed van het getij, waarbij de tijdschalen ordegrottes verschillen. De numerieke oplossing kan dan buitengewoon lastig worden, tenzij in een modelprogramma een optie is ingebouwd om verschillende processen met verschillende (numerieke) tijdstappen door te rekenen.

Tot slot kan de afhandeling van de dispersieterm grote invloed hebben op het eindresultaat.

Stap 4: Analyseer het model

Bij de analyse van het model is het verstandig middels een aantal testberekeningen de correctheid van het model aan te tonen. In dit geval zijn vooral de massabalansen en de verdringingskarakteristieken belangrijk. Een eenvoudige som met een conservatieve stof kan al veel inzicht opleveren. Als de resultaten (voor een deel) niet beantwoorden aan de verwachtingen is grote voorzichtigheid geboden en dient in detail te worden nagegaan waardoor dit wordt veroorzaakt.

Voor de beschouwing van de stabiliteit en nauwkeurigheid van een modeltoepassing is het nuttig om de tijdstap/plaatsstap-verhouding te variëren om na te gaan of er een kritische grens is overschreden of genaderd. Met name bij sommige snelle processen (reaeratie, afbraak bacteriën) dient hiermee rekening te worden gehouden. Sommige oplossingsschema's hebben hier niet of nauwelijks last van, maar bij andere kunnen grote oscillaties optreden (zie de blooper op de vorige bladzijde).

Bij het analyseren van het model moet ook worden nagegaan welke invloed de initiële situatie heeft op het eindresultaat. Soms is de vereiste inspeeltijd zelfs langer dan de gesimuleerde periode. Daarnaast moet worden nagegaan wat de invloed van de randen op het eindresultaat is: liggen de randen voldoende ver van het te beschouwen modelgebied?

Nadat het model globaal is geanalyseerd, kan gestart worden met het calibreren. Bij de calibratie van een model verdient het voorkeur om eerst een gevoeligheidsanalyse uit te voeren en met de belangrijke parameters het model af te regelen.

Calibratiegrootheden zijn onder meer:

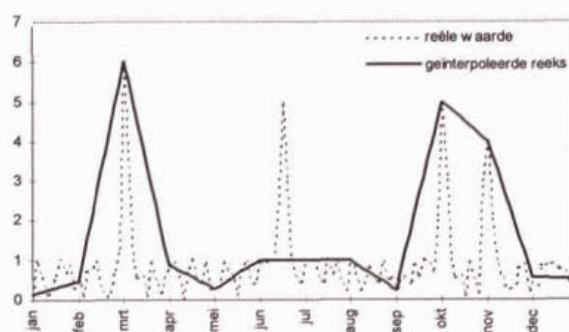
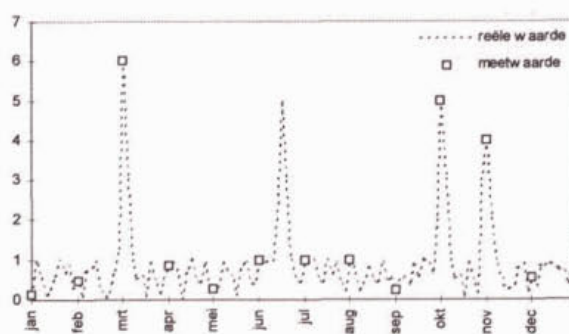
- procescoëfficiënten;
- transportgrootheden (water, slib/zwevend stof);
- emissies.

Van bovenstaande grootheden zijn de transportgrootheden en emissies vaak (maar niet altijd!) zeer gevoelig (zie ook paragraaf 3.4/3.5 en 3.13). In de praktijk wordt echter vaak toch de meeste energie gestoken in het goed afregelen van de procescoëfficiënten. Dat heeft echter alleen zin als ook goed naar de andere grootheden gekeken wordt. Onbekende parameters kunnen via expert-judgement worden ingeschat. Default-waarden zijn meestal niet toereikend, omdat ze op een algemeen/enkel systeem van toepassing zijn. Ook literatuurwaarden kunnen om dezelfde reden nogal eens misleidend zijn. Slecht begrepen/beschreven processen (BOD) of processen met een 'vuilnisbak'-karakter hebben altijd meer calibratie nodig (extinctie, mineralisatie, sedimentatie).

Blooper: "De stikstofbalans wilde maar niet sluiten".

"De stikstofbalans bleek maar niet sluitend te krijgen. Wat er ook geprobeerd werd er was altijd een forse hoeveelheid stikstof over of tekort, terwijl het koolstof en de overige nutriënten perfect klopten. Pas na een dagenlang durende balansanalyse kwam de aap uit de mouw. In de vergelijkingen voor stikstof was een keuze-mogelijkheid voor de opname van ammonium en nitraat door algen opgenomen. De keuze was geformuleerd met een 'if then' statement met een drempelwaarde voor de concentratie van ammonium. Geen enkel gangbaar numeriek schema kon overweg met zo'n typische formulering van de ecologische stofstroom-modellering. Door deze formulering te vervangen door een continue vergelijking was het probleem snel verholpen. Twee jaar later was het tijdens een workshop bij een ander instituut weer raak. Een gewaarschuwd mens telt voor twee, het probleem werd snel verholpen."

Een beruchte valkuil heeft te maken met de interpolatie van de meetgegevens waarop gecalibreerd wordt. Het lineair interpoleren is de meest eenvoudige manier om uit meetwaarden een meetreeks af te leiden. Hierbij moet men vooral verdacht zijn op het bestaan van pieken in de gekozen parameter en in hoeverre de gemeten waarden deze pieken bevatten. Een verkeerde manier van interpolatie kan een zware overschatting of onderschatting van een stofvracht geven, zoals bijgaande figuren aantonen.



Een laatste potentiële valkuil die er bij het analyseren van het model uitgehaald moet worden, heeft te maken met het fenomeen 'schieterend water'. Bij een waterkwaliteitsmodel

met een simpele bakjesbenadering wordt elke tijdstap berekend hoeveel water er met welke concentratie stoffen uit gaat en hoeveel er in komt. Aan de hand hiervan wordt de nieuwe concentratie in de bak berekend. Dit gaat goed zolang de stroomsnelheid niet te hoog is. Maar bij een hoog debiet kan het voorkomen dat meer dan de inhoud van de bak per tijdstap door de bak stroomt. Dit effect heet 'schieterend water' en geeft hele vreemde berekende concentraties. Het is altijd verstandig na te kijken of het debiet per tijdstap wel kleiner is dan de inhoud van de bakken.

Stap 5: Gebruik het model

Voordat het gecalibreerde model echt gebruikt wordt, moet nogmaals de inspeeltijd gecontroleerd worden. De verblijftijd en processnelheid geven meestal wel aanwijzingen over de lengte van deze periode. Zoals eerder gezegd kan de inspeeltijd langer zijn dan de gesimuleerde periode, en daarmee dus aanleiding zijn voor grote fouten.

Bij de toepassing van een waterkwaliteitsmodel moet er tevens rekening mee worden gehouden dat een model meestal is ontworpen voor een vrij specifieke tijdschaal. Dat geldt zowel qua processen als qua periode in het jaar. Om met het eerste te beginnen: waterbodemmodellen zijn soms ontworpen voor tijdschalen van tientallen tot honderden jaren. Het zal duidelijk zijn dat dit soort type modellen niet ingezet moet worden voor online-voorspellingen. Wat betreft de periode in het jaar: chemische processen kunnen sterk afhankelijk zijn van de meteorologische omstandigheden (temperatuur, neerslag/stroomsnelheid). Indien er meetgegevens zijn die de situatie in het projectgebied over een periode van minimaal 12 maanden beschrijven, zal dat de betrouwbaarheid/nauwkeurigheid van het berekende resultaat dus aanzienlijk kunnen vergroten.

Stap 6: Interpreteer de resultaten

Hou bij de interpretatie van resultaten rekening met de betrouwbaarheidsbandbreedte. Kijk bijvoorbeeld of er nog wel onderscheidend vermogen is tussen resultaten van verschillende scenario's, en of bijvoorbeeld de meetfout in de veldwaarnemingen niet groter is dan de betrouwbaarheidsmarge van het model.

3.9.3 Literatuur

Chapra, S.C., 1997.

Crank, J., 1975.

Fischer, H.B., E.J. List, R.C.Y. Koh, J. Imberger and N.H. Brooks, 1979.

Luiten, J.P.A. and S. Groot, 1992.

RIZA/DHV, 1996.

Thomann, R.V. and J.A. Mueller, 1989.

3.10 Afvalwaterzuiveringsmodellen

3.10.1 Algemeen

Bij de beschikbare modelprogramma's in de afvalwaterzuivering moet duidelijk onderscheid worden gemaakt tussen statische en dynamische modellen. De statische modellen worden uitsluitend toegepast voor ontwerpdoeleinden. De dynamische modellen worden gebruikt voor optimalisatie van bestaande RWZI's, ontwikkeling van regelstrategieën, optimalisatie van deelaspecten in ontwerpstudies en training. De dynamische modellering wordt veel toegepast voor scenariostudies.

Statisch modelleren

Hiervoor wordt in Nederland vooral gebruik gemaakt van het modelprogramma DenNi dat is gebaseerd op de HSA-methode (HochSchulAnsatz). Een ander, tevens op de HSA-methode gebaseerd programma, is ARA-BER dat door een aantal ingenieursbureaus in Nederland wordt gebruikt. Met een statisch model kan met de effluentkwaliteit als uitgangspunt het benodigd volume, benodigde zuurstofcapaciteit en slibproductie worden berekend. Hier wordt niet verder ingaan op de statische modellering, ook al omdat hier nauwelijks knelpunten over worden gemeld.

Dynamisch modelleren

In 1995 is in STOWA-verband besloten om voor de dynamische modellering van actief-slibsystemen over te gaan op een gestandaardiseerd gebruik van één model voor het actief-slibstelsel en één simulatieprogramma. De keuze is hierbij gevallen op het simulatieprogramma SIMBA (SIMulation von BelebungsAnlagen) waarin het IAWQ-model¹ als actief-slibmodel fungeert. Het IAWQ-model is een internationaal geaccepteerd modelprogramma en wordt op grote schaal toegepast. Het SIMBA-programma functioneert onder de simulatie-omgeving van MATLAB en SIMULINK. Reeds in 1996 had het overgrote deel van alle waterkwaliteitsbeheerders, ingenieursbureau's en onderzoeksinstituten het simulatieprogramma SIMBA aangeschaft en is er ruime ervaring opgedaan met het gebruik ervan.

Opmerkingen

In 1999 wordt er voor de gebruikers een protocol SIMBA-gebruik opgesteld in een STOWA-project. Hierin zullen alle valkuilen, knelpunten, gevoelheden en onnauwkeurigheden worden beschreven ten aanzien van het modelleren van actief-slibsystemen. In 1996 is door de STOWA reeds een handleiding gepubliceerd voor het bepalen van de influentkarakteristiek. Voor het modelleren van zuiveringssystemen leidt dit alles tot een meer verantwoord gebruik van modellen.

¹ Het IAWQ-Model is in de terminologie van dit Handboek eigenlijk een modelprogramma, maar omdat de term 'IAWQ-model' een algemeen bekend begrip is, wordt deze term ook in deze paragraaf verder gebruikt.

3.10.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 2: Zet het modelproject op

Omdat bij de interpretatie van modelresultaten naar de praktijk beslissingen genomen kunnen worden die grote financiële consequenties hebben of de garantie voor een zekere effluentkwaliteit in de waag stellen, is het accepteren van een zekere meetinspanning een eerste vereiste om te komen tot een verantwoord gebruik. Voor een afvalwaterzuivering betekent dit dat in het bijzonder aandacht moet worden besteed aan een gedegen influentkarakterisering en het vaststellen van het hydraulisch patroon. Wanneer deze inspanning niet wordt verricht, zijn de modelresultaten niet betrouwbaar en kan een model in principe alleen voor trainingsdoeleinden worden toegepast.

Stap 3: Zet het model op

Bij het opstellen van het model moet enigszins worden nagegaan of de zuivering volledig gemengd is of een propstroomkarakter heeft. Dit bepaalt namelijk het aantal te kiezen compartimenten in het model en kan een grote invloed hebben op de modelresultaten. Ook moet enigszins bekend zijn of er een zuurstofprofiel aanwezig is over de lengte en/of diepte van de reactor om de totaal beluchte en onbeluchte ruimte van de reactor vast te stellen.

Bij het opstellen van het model kan worden gekozen voor verschillende nabezinktank-modellen waarbij de één een meer dynamisch patroon heeft dan de ander. Omdat de betrouwbaarheid van nabezinktank-modellen nog te wensen overlaat, moet bij de keuze van het nabezinktank-model goed de beoogde doelstelling in ogenschouw worden genomen.

Het IAWQ-model is ontwikkeld voor de zuivering van huishoudelijk afvalwater omdat huishoudelijk afvalwater als modelsubstraat heeft gediend bij het vaststellen van de 'default' parameters. De meeste huishoudelijke afvalwatersamenstellingen vallen binnen de range van het IAWQ-model. Als een groot aandeel (>70%, arbitrair gekozen) van het afvalwater bestaat uit industrieel afvalwater kan dit tot onnauwkeurigheden leiden. Dit betekent ook dat het IAWQ-model niet direct geschikt is voor industrieel afvalwater (doorgaans hogere vuilbelasting, aanwezigheid van toxische componenten en afwezigheid van bepaalde nutriënten). Het IAWQ-model kan na gericht onderzoek wel geschikt worden gemaakt voor een bepaald type industrieel afvalwater maar is dan ook alléén geschikt voor dit type industrieel afvalwater.

Het IAWQ-model is een biologisch model, wat betekent dat fysisch- en chemische processen, zoals adsorptie, coagulatie, flocculatie en strippen, niet worden beschreven. Ten behoeve van de chemische fosfaatverwijdering zijn wel een aantal chemische reacties opgenomen (beperkt tot Fe^{3+}). Dit geeft nogmaals aan dat het huidige IAWQ-model niet direct geschikt is voor modelstudies met industrieel afvalwater. Naast de biologie in het actief-slibstelsel bestaat een zuivering bovendien uit een aantal mechanische procesonderdelen en de slibverwerking. Laatstgenoemden kunnen niet worden gemodelleerd met het IAWQ-model, maar dit is ook niet strikt noodzakelijk. Het karakteriseren van waterstromen die hiervan afkomstig zijn is doorgaans genoeg om hun invloed op de biologische zuivering te beoordelen.

Het IAWQ-model is opgesteld voor een temperatuurbereik van 10 tot 20 °C en bij een neutrale pH. Simulaties die buiten deze bereiken worden uitgevoerd kunnen tot een zekere onnauwkeurigheid leiden. Per simulatie heeft de temperatuur een constante waarde, zodat een plotselinge daling van de temperatuur in de reactor door regenwataanvoer niet kan worden meegenomen.

Als reeds eerder genoemd, zijn de nabezinktank-modellen in SIMBA nog niet zo geavanceerd. Dit betekent dat er niet te veel verwacht moet worden van voorspellingen met betrekking tot het zwevende-stofgehalte in het effluent. Hiervoor kan vooralsnog beter gebruik worden gemaakt van empirische relaties uit de praktijk tussen influentdebiet en zwevende-stofgehalte in het effluent. Omdat SIMBA onder MATLAB/-SIMULINK draait kan dit wel betrekkelijk eenvoudig in de opzet van het model worden geïmplementeerd. Voor de opgeloste stoffen is de keuze van het nabezinktank-model minder gevoelig.

Blooper: "De praktijk is weerbarstig".

"Bij het opstellen van het model moet de zuivering in compartimenten worden ingedeeld. Voor een RWZI met nitrificatie en denitrificatie betekent dit dat het model moet worden onderverdeeld in een aantal beluchte en onbeluchte compartimenten. In het model zijn de compartimenten volledig gemengd en wordt geen rekening gehouden met zuurstofprofielen over de diepte. In de praktijk kunnen zuurstofprofielen over de diepte wel degelijk voorkomen en als deze in de praktijk niet worden vastgesteld resulteert dit in een onjuiste modelopbouw en inadequate calibratie. Indien van een beluchte nitrificatieruimte in de praktijk slechts de bovenste helft een zuurstofgehalte heeft > 0,5 mg O₂/l is de onderste helft onbelucht, en zal hier dus denitrificatie plaatsvinden. Tijdens de calibratie zal gevonden worden dat in de praktijk meer denitrificatie plaatsvindt dan in het model omdat in het model de compartimenten volledig belucht zullen zijn. In vergelijking met de praktijksituatie bevindt zich in het model dus te weinig denitrificatieruimte en de parameters van het denitrificatieproces moeten nu buiten proportie worden bijgesteld om het model kloppend te krijgen met de praktijk."

Stap 4: Analyseer het model

Belangrijke calibratie-grootheden zijn:

- hydraulisch patroon van de gehele zuivering;
- influentkarakteristiek;
- mengkarakter (compleet gemengd of propstroom);
- gemeten slibproductie;
- organisch droge-stofgehalte ten opzichte van het totale droge-stofgehalte;
- temperatuur.

De calibratie van een actief-slibmodel voor stikstofverwijdering wordt gebaseerd op NH₄- en NO₃-gehalten in het effluent, op de slibproductie en eventueel op het zuurstofgebruik. Bij een actief-slibmodel met fosfaatverwijdering dient de calibratie bovendien te zijn gebaseerd op het PO₄-gehalte in de afloop van de anaërobe reactor en in het effluent.

Bij een statische calibratie wordt uitgegaan van een constant influentdebiet en constante afvalwatersamenstelling. Het nemen van dagmonsters is hiervoor voldoende. Bij een dynamische calibratie wordt uitgegaan van een variatie in het influentdebiet en afvalwatersamenstelling. Hiervoor moet een bemonsteringsfrequentie worden toegepast met een hogere frequentie (in ieder geval voor het hydraulisch aanvoerpatroon).

Omdat de verschillende processen in het actief-slibproces op elkaar ingrijpen is de volgorde in calibratiestappen zeer essentieel. Om fouten en onnauwkeurigheden in de simulatie te voorkomen moet eerst de slibproductie worden gecalibreerd, vervolgens de nitrificatie en tenslotte de denitrificatie. Door deze volgorde aan te houden wordt een calibratieprocedure via 'trial and error' voorkomen. Bij het calibreren moet de technologische achtergrond van de gebruiker constant worden aangesproken om de parameters in een rationele bandbreedte te houden. Automatische calibratieprogramma's worden daarom ook afgeraden omdat je een gebruiker met onvoldoende technologische kennis een instrument in handen geeft waarbij de realiteit volledig uit het oog wordt verloren. Toch worden, zoals bij alle calibratieprocedures, de meeste calibratiefouten gecumuleerd in processen waar de minste kennis van voorhanden is. In actief-slibprocessen betreft dit het hydrolyseproces, dat een belangrijke factor is in de beschikbaarheid van CZV voor micro-organismen.

3.10.3 Literatuur

Henze, M., C.P.L. Grady, W. Gujer, G.V.R. Marais, T. Matsuo, 1986.
STOWA, 1995.

3.1.1 Ecologische modellen

3.1.1.1 Algemeen

Omschrijven van algemene valkuilen en gevoeligheden voor ecologische modellen is moeilijk omdat:

- ‘ecologische modellen’ een verzamelnaam is voor een zeer diverse groep modellen;
- de ecologische processen die gemodelleerd worden over het algemeen zeer complex zijn en de onzekerheden hierin groot;
- ecologische modellen veelal aan het eind van een ‘modelketen’ worden ingezet en dus erg afhankelijk zijn van aannamen die in andere modellen gedaan zijn met de bijbehorende onnauwkeurigheden.

De volgende typen ecologische modellen kunnen worden onderscheiden:

- **Ecologische stofstroommodellen** waarbij de nadruk ligt op het modelleren van de voedselstroom naar de ‘primaire consumenten’. Voorbeelden van modelprogramma’s zijn ERSEM, PCLAKE, GEM en DBS;
- **Kringloop- of voedselwebmodellen** waarin gehele voedselketens worden gemodelleerd. Onder deze modellen worden ook de ecotoxicologische modellen gerekend. Voorbeelden van programma’s zijn CHEOPS, CATS en MC²;
- **Energiemodellen** waarin de energiestromen centraal staan in plaats van de stofstromen. Deze modellen worden in Nederland nog nauwelijks toegepast;
- **‘Probabilistische modellen’** is een verzamelgroep van zeer uiteenlopende expert- en empirische modellen die moeilijk onder één noemer zijn te vangen. Voorbeelden van dergelijke programma’s zijn: DEMNAT, NTM, NICHE, MOVE, LEDESS, ICHORS, ITORS, LARCH, METAPHOR en MORRES.

3.1.1.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 2: Zet het modelproject op

Het gebruik van ecologische modellen vergt een multidisciplinaire aanpak. Ecologische modellen dienen daarom gebruikt te worden door breed onderlegde deskundigen of modelgebruikers die worden ondersteund door een multidisciplinair team. Wanneer dit niet gebeurt ligt het gevaar op de loer dat oplossingsrichtingen alleen in het kennisgebied van de modelgebruiker gezocht worden.

Blooper: “De algen wilden niet groeien”.

“We hadden een model gemaakt om algen eens nader te beschouwen. De algen bleken echter niet te groeien. Bij nadere beschouwing bleek dat de verblijftijd van het meer (?) geringer dan een dag was. In het model kregen de algen dus geen kans om te groeien. In een soortgelijk model bleken de algen niet te groeien omdat.....de initiële algenconcentratie op nul was gezet. Je hoeft geen bioloog te zijn om in te zien dat algen niet kunnen groeien/delen als er nog geen alg is !”

Wanneer ecologische modellen als onderdeel van een modelketen worden ingezet, moet nauwkeurig worden nagegaan of de in de overige modellen toegepaste ruimte- en tijdschalen bruikbaar zijn voor de ecologische modellen. Ook moet de gebruiker in staat zijn een oordeel te vellen over de kwaliteit van de resultaten van de overige modellen die als invoer dienen voor het ecologische model.

Voordat überhaupt gestart wordt, moet goed nagedacht worden of de inzet van een model nuttig is, en vooral ook of de modelleur voldoende kennis heeft om verantwoord met het desbetreffende model om te gaan. Voor praktisch alle ecologische modellen geldt namelijk dat slechts een zeer beperkt percentage van de natuurlijke processen bekend is. Het zal daarom al snel gebeuren dat de modelleur in de processen zal willen wijzigen. Voor dit soort zaken en een juiste interpretatie van de resultaten is veel vakkennis vereist.

Bij ecologische modellen geldt in het algemeen dat een complexer model niet altijd beter is. Vaak geldt zelfs het omgekeerde. Omdat slechts een beperkt aantal processen bekend is, kan beter gekozen worden voor een simpele, doch wel inzichtelijke benadering dan voor een complex systeem met een warboel aan wel bekende processen, tenzij men zeer goed is ingevoerd in het model.

Stap 3: Zet het model op

Uitgezonderd voor bacteriën- en algenmodellen zijn ruimte- en vooral tijdschalen essentieel. De reactietijd van verschillende vegetatietypen en organismen is vaak nogal verschillend. Het is daarom erg belangrijk een passende tijdschaal te vinden bij het opstellen en toepassen van ecologische modellen.

Stap 4: Analyseer het model

Gezien de grote onzekerheden waarmee de modelgebruiker al snel te maken krijgt in het gebruik van ecologisch modellen is toetsing aan eigen (veld)kennis absoluut noodzakelijk. Bedenk voor uitvoering van de berekening wat je verwacht dat er uit zal komen.

Als randvoorwaarden dienen veelal tal van abiotische factoren. Deze moeten kloppen anders zijn de uitgangspunten voor de ecologische berekeningen onjuist.

In systemen met lange tijdschalen zijn de initiële condities veelal bepalend voor de uitkomsten. In ecologische modellen dienen deze dan ook nauwkeurig opgegeven te worden. Wanneer deze niet bekend zijn is een gevoeligheidsanalyse noodzakelijk.

Blooper: "Het model -ecosysteem functioneerde prima, maar de mosselen hadden onvoldoende te eten".

"In ecologische stofstroommodellen kan het gerechtvaardigd zijn om forcing functions voor biologische variabelen te gebruiken. Deze forcing functions oefenen invloed uit op het modelsysteem, maar deze biologische variabelen worden zelf niet beïnvloed door het modelsysteem. Een model waar de filtratie van fytoplankton door mosselen als een forcing function was opgelegd werd automatisch gecalibreerd. Uitstekende resultaten voor de gecalibreerde variabelen van het model-ecosysteem werden geproduceerd. Tijdens de workshop waar de resultaten gedemonstreerd werden, merkte een ervaren modelleur op dat de resultaten er prima uitzagen, maar dat in het echte ecosysteem de mosselen zullen uitsterven. Het bleek dat het modelsysteem onvoldoende algenproductie kon realiseren om de mosselen van voedsel te kunnen voorzien, terwijl de filtratiedruk dankzij de forcing function onveranderlijk te hoog bleef. Het ontbreken van een terugkoppeling op de groei van de mosselbiomassa was de oorzaak. Zes weken calibreren, inclusief de workshop diende opnieuw uitgevoerd te worden, waarbij naderhand het model ook op de voedselvoorziening voor de mosselen afgeregeld is."

De calibratie van ecologische modellen kan veelal niet los gezien worden van de calibratie van de overige modellen in de modelketen.

Over calibratiegrootheden valt aanvullend in algemene termen niets te zeggen. Die zijn sterk afhankelijk van het ecosysteem of de soorten/variabelen die gemodelleerd worden.

Stofstroommodellen

De water- en stofbalansen moeten kloppen. Gebruikers zijn meestal geneigd (te) veel aandacht te besteden aan concentraties en te weinig aan processnelheden omdat deze moeilijk verifieerbaar zijn.

Expert- en empirische modellen

Ecologische expertmodellen bevatten vaak vele aannamen die niet in alle gevallen volledig gedocumenteerd zijn. Bij gebruik van deze modellen is kennis omtrent de aannamen die aan het model ten grondslag liggen een vereiste. Calibratie kan alleen op basis van de 'echte vegetatie', bijvoorbeeld uit FLORBASE voor terrestrische natuur. Veel informatie is echter niet landsdekkend beschikbaar.

3.11.3 Literatuur

- Ek, R. van, 1999.
- Herman, P.M.J., 1994.
- Klepper, O., M.W.M. van der Tol, H. Scholten and P.M.J. Herman, 1994.
- Krebs, 1972.
- Odum, 1971.
- Raffaelli, D. and S. Hawkins, 1996.
- Ryding, S.O. and W. Rast, 1989.
- Scavia, D. and A. Robertson, 1979.
- Scheffer, M., 1998.
- Scholten, H. and M.W.M. van der Tol, 1994.
- Somlyódy, L. and G. van Straten, 1986.
- Verdonschot, 1992.
- WL | DELFT HYDRAULICS, 1996b.
- WL | DELFT HYDRAULICS, 1996c.

3.12 Economische modellen en gebruiksfunctiemodellen

3.12.1 Algemeen

Hoewel economische aspecten in het waterbeheer buitengewoon belangrijk zijn, zijn er maar weinig breedgedragen modellen en modelprogramma's. Wel zijn er zeer veel, vaak kleine modelletjes en spreadsheets voor deelterreinen, vaak per gebruiksfuncties. Ook bestaan er macro-economische modellen zoals 'Athena' bij het Centraal Plan Bureau (CPB). Hierin zijn vaak input/output analyses ingebakken in de vorm van kruistabellen. Bij een kruistabel is de productie van een specifieke industrietak gerelateerd aan de productie van toeleverende bedrijven. Daarnaast is er het MKM-milieukostenmodel (spreadsheet) dat geaggregeerde milieukosten beschouwt op nationale schaal zonder doorwerking naar andere sectoren.

Wat betreft de functiemodellen zijn er onder meer modelprogramma's voor Recreatie (onder andere voor het WGI-, TOUR-en SEO-model), voor Binnenvaart (PAWN-Scheepvaart), voor drinkwater (Atlantis en DRISIM) en voor landbouw (Agricom, DEMGEN).

Een laatste belangrijk instrument is de zogenaamde MIOW-analyse, die vooral bedoeld is om de (veranderende) concurrentiepositie van bedrijven of bedrijfssectoren te bepalen onder invloed van bijvoorbeeld milieumaatregelen. Die kunnen bedrijven veel geld kosten, en met dit instrument kan worden bepaald of dit de draagkracht van een bedrijf of sector niet te boven gaat.

3.12.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 3: Zet het model op

Met name de rente- en inflatieaspecten moeten heel goed worden aangegeven. Daarnaast zijn ook tijd- en ruimteschalen zeer belangrijk. Als voorbeeld kan worden genoemd het vergelijken van ongelijksoortige varianten zoals baggeren (discontinu in de tijd) en zuivering door industrie (continue proces met blijvende effecten). Daarnaast wordt vaak uitvoerig aandacht besteed aan de 'scope of analysis': de schaal is belangrijk. Voorbeeld is de BTW die nationaal niet belangrijk is (input is gelijk aan output), maar die voor een specifieke industrie wel van groot belang is. Een uitputtende beschrijving van de kosten die bij de analyse worden betrokken (zowel directe als indirecte) is essentieel om de resultaten op waarde te kunnen schatten. Macro-economisch zijn daarnaast 'substitutie-effecten' belangrijk: de bouw van een winkelcentrum is vaak lokaal van groot economisch belang, maar per streek is er alleen een wegzuigend effect.

Het verzamelen van geschikte data is een groot probleem bij dit soort type modellen. Vaak moet die worden verkregen vanuit het bedrijfsleven. Cruciaal is dan ook dat (vertegenwoordigers van) gebruiksfuncties meewerken bij het ontwikkelen van het model. Al voordat begonnen wordt met het modelleren moet hier overeenstemming over zijn,

anders heeft het geen enkele zin überhaupt te gaan modelleren. Wel moet daarbij uiteraard de onafhankelijkheid van het onderzoek gewaarborgd blijven.

Tot slot vormen ook de CPB-scenario's, die gemiddeld eens in de vijf jaar verschijnen, een belangrijke bron van input voor economische modellen. Vaak zijn deze scenario's echter zo globaal, dat nog een vertaalslag nodig is richting water en de voor water relevante gebruiksfuncties. Dit is een stap die meestal door gespecialiseerde bureaus of instituten moet worden uitgevoerd en de nodige kosten met zich meebrengt.

Stap 4: Analyseer het model

Groot probleem bij het gebruik van economische modellen is dat er geen of nauwelijks calibratiegrootheden zijn. Een goede gevoeligheidsanalyse is heel belangrijk. Wel kan er uiteraard getoetst worden op basis van historische gegevens (trends), maar de gevoeligheid voor met name de (onzekere) economische scenario's is zo groot, dat meestal alleen een bandbreedte van de ontwikkeling kan worden gegeven. Voorkomen moet dan ook worden dat te veel in detail wordt getreden. Daarvoor zijn de onzekerheden te groot.

Voor de functiemodellen kan redelijk getoetst worden op voor de diverse gebruiksfuncties kenmerkende aspecten. Voor de binnenvaart is dat bijvoorbeeld het aantal scheepvaartbewegingen per scheepsklasse, voor drinkwater de kubieke meters drinkwater, voor landbouw de gewasopbrengst en voor recreatie het aantal recreatiedagen per type recreatie. Voor deze laatste categorie modellen moet overigens gewaakt worden voor een al te grove benadering. De verschillende typen recreatie zijn dermate verschillend, dat onderscheid moet worden gemaakt in bijvoorbeeld toervaren, zonnen en zwemmen en sportvisserij.

Calibratie en validatie op basis van expert judgement is vaak de beste methode om te komen tot een goed modelresultaat. Ook hierbij is samenwerking met gespecialiseerde bureaus en het bedrijfsleven (de sectoren) sterk aan te raden.

3.12.3 Literatuur

- Abrahamse et al, 1981-1983.
- Berkhout et al, 1995.
- Eulen, J.R., 1998.
- Goossen et al, 1996.
- IKM Engineering, 1995.
- Ministerie van Verkeer en Waterstaat, 1984.
- Pulles, J.P., 1985.
- Terveer, H.F., J.C. Duker en D. Cramer, 1987.
- Terveer, H.F., 1996.
- WL | DELFT HYDRAULICS, 1995.

3.13 Emissiemodellen

3.13.1 Algemeen

Emissiemodellen zijn modellen waarmee emissies naar het oppervlaktewater berekend kunnen worden. Ze worden vaak gebruikt voor het kwantificeren van diffuse bronnen, want die zijn meestal niet te meten. Daarnaast worden emissiemodellen gebruikt om het effect van emissiereducerende maatregelen te analyseren, bijvoorbeeld de effecten van een extra zuiveringstrap. Per stof wordt daartoe geprobeerd de bronnen en de diverse emissieroutes te bepalen, en daarmee dus de aangrijpingspunten voor maatregelen.

De meeste emissiemodellen kennen twee hoofdvariabelen: de emissieverklarende variabelen en de emissiefactoren. Door deze twee met elkaar te vermenigvuldigen, ontstaat een emissiecijfer. Onder een emissieverklarende variabele wordt het verschijnsel verstaan dat de emissie veroorzaakt (de bron), bijvoorbeeld een koe bij nutriëntenemissies of een schip als het gaat om uitloging van PAK uit scheepscoatings. Een emissieverklarende variabele produceert een bepaalde hoeveelheid van een (afval)stof. Dat hoeft echter niet allemaal in het oppervlaktewater te komen. Van de mest die een koe produceert komt, dankzij allerlei chemische, fysische en biologische processen, uiteindelijk maar een beperkt deel in het oppervlaktewater terecht. Ook van de PAK die op een scheepshuid wordt gesmeerd looft per jaar maar een beperkt percentage uit. Het percentage dat uiteindelijk in het water komt, noemen we de emissiefactor.

Zowel de emissieverklarende variabelen als de emissiefactoren vormen aangrijpingspunten voor emissiebeperkende maatregelen. Zo kan de totale emissie beperkt worden door het aantal koeien of scheepsbewegingen te reduceren, maar er kan ook geprobeerd worden de emissiefactor te reduceren. Als de koemest bijvoorbeeld wordt gebruikt op maispercelen, kan onder andere een vanggewas tussen de mais gezet worden waardoor de biologische opname van nutriënten wordt vergroot, en de hoeveelheid uitspoeling naar het oppervlaktewater dus wordt verkleind. Bij de scheepscoatings kan een coating gekozen worden die minder snel uitlooft of die minder PAK bevat.

Hoewel emissies al tientallen jaren hoog op de agenda staan van het waterbeheer, is de hoeveelheid emissiemodellen beperkt. Veelgebruikte modelprogramma's zijn Promise en het WLM (Waste Load Model). Voor bestrijdingsmiddelen is er het model PESCO, dat op een spreadsheet is gebaseerd. Daarnaast is er ook in het kader van Emissie-Registratie, een samenwerkingsproject van de ministeries van VROM en V&W, veel gemodelleerd aan emissies. De resultaten hiervan worden gebruikt voor het jaarlijks vullen van de emissiedatabase ER-C (Emissie-Registratie Collectief), waar in principe, zij het soms sterk geaggregeerd, alle emissies van alle bronnen voor alle Nederlandse oppervlaktewateren zijn opgenomen, ook de diffuse bronnen.

Een bijzondere groep van emissiemodellen vormen de grondwaterkwaliteitsmodellen, met name die voor het onverzadigde grondwater. Zij beschrijven de emissieroutes via het grondwater waarlangs stoffen uiteindelijk in het oppervlaktewater komen. Met name voor nutriënten en sommige bestrijdingsmiddelen zijn dit belangrijke emissieroutes.

Veelgebruikte nutriëntenmodellen en -modelprogramma's zijn ANIMO/STONE, FUSSIM-2, FLUSIM, NITSOL-PHOSOL, NITRIK-C, NPK en WAVE. Een veelgebruikt modelprogramma voor de af- en uitspoeling van bestrijdingsmiddelen is PESTLA.

Met name voor de nutriëntenmodellen geldt dat verschillende onderzoeks- en adviesgroepen een redelijk grote verscheidenheid aan simulatiemodellen gebruiken. De modellen verschillen onderling sterk van elkaar in het detail waarmee uitspoeling naar grond- en oppervlaktewater wordt beschreven. Redenen hiervoor zijn:

- de doelstellingen van het model voor wat betreft het type antwoorden;
- de resolutie van de te verwachten antwoorden en de uitgebreidheid van de vraagstelling (bijvoorbeeld alleen nitraatgehalte als gevolg van mest, of bijvoorbeeld alle nutriëntenemissieroutes als gevolg van bodem, gewas, waterhuishouding);
- beschikbare experimentele en literatuurgegevens;
- ambities en persoonlijke voorkeuren van de onderzoekers.

Het scala strekt zich uit van eenvoudige rekenregels of regressierelaties tot gedetailleerde deterministische modellen. Ter illustratie van de grote mate van variatie in met name modelprogramma's voor nutriënten, is onderstaand een beschrijving van de reikwijdte opgenomen:

- *In het platte vlak*: van enkele m² tot geheel Nederland;
- *In de diepte*: van de wortelzone en ongeveer het freatische vlak tot circa 50 meter onder het maaiveld (in diepe grondwatersystemen);
- *In de tijd*: van een groeiseizoen (om de nutriëntenopname van een gewas te berekenen of de uitspoeling in een validatiestudie) tot ongeveer 100 jaar (om de naijlings-effecten van mestreductie in relatie tot de fosfaatuitspoeling en de organische stofopbouw te voorspellen);
- *In inbedding*: van kale studies waarin alleen het effect van een veranderde mestgift op een perceel wordt gevolgd tot integrale studies waarin nutriëntenemissie als een schakel van een lange modelketen wordt berekend (EU-politiek => veranderde bedrijfsstructuur => veranderde nutriëntenstromen op een bedrijf => bemesting op perceel => nutriëntenuitspoeling naar perceel- en kavelsloten => waterkwaliteit op regionale schaal => waterkwaliteit op nationale schaal => vrachten naar de Noordzee);
- *Complexiteit*: van een kale modeluitgang (van bijvoorbeeld nitraatconcentratie in grondwater) tot een volledig overzicht van alle nutriëntenstromen in verschillende milieucompartimenten, met daarbij de samenhang tussen de balansposten.

3.13.2 Valkuilen en gevoeligheden

Stap 2: Zet het modelproject op

Gezien de veelzijdigheid van emissiemodellen dient men bij modelstudies een duidelijk beeld te hebben van de onderzoeksvraag. In de praktijk blijkt een aanvankelijke onderzoeksvraag uit te kunnen groeien naar een veel meer omvattende vraag (ruimtelijke resolutie, temporele resolutie, integraal karakter, emissie-routes, processen).

Voordat gemodelleerd kan gaan worden moet over vier aspecten goed worden nagedacht:

- wat zijn de bronnen;
- welke emissieroutes zijn er;
- welke emissieverklarende variabelen zijn er;
- wat zijn de emissiefactoren (meestal is een emissiefactor opgebouwd uit diverse deelfactoren in een emissieroute).

Hierbij kan gebruik worden gemaakt van elders ontwikkelde kennis, maar vaak blijkt het uitermate lastig van bovenstaande aspecten een compleet beeld te krijgen, zeker als er diffuse bronnen in het spel zijn. Hiermee is ook meteen de eerste valkuil beschreven: denk heel goed na over de vraag of het zin heeft te gaan modelleren als er twijfel bestaat over de compleetheid van bovenstaande gegevens.

Stap 3: Zet het model op

Als besloten is te gaan modelleren, begint het verzamelen van de benodigde gegevens. Veel emissiemodellen vergen een enorme hoeveelheid invoergegevens alvorens op veldschaal of op regionale schaal een simulatie kan worden uitgevoerd. Voor het afleiden van dergelijke gegevens worden vaak ook modellen gebruikt, in de vorm van simulatiemodellen (hydrologie als voorbewerking) of in de vorm van regressierelaties (pedo-transfer-functies). Veel van deze informatie berust dus op schattingen en bewerkingen van andere informatiebronnen. Aangezien de modellen gebruik maken van deze schattingen en bewerkingen, behoren deze methoden eigenlijk ook tot de modellen. Een model bestaat dus niet alleen uit een beschrijving van een concept in de vorm van wiskundige vergelijkingen, maar ook uit de methoden die ten grondslag lagen aan de invoergegevens.

Blooper: “Fosfaat en fosfor zijn toch wezenlijk verschillende dingen”.

“Bij emissies worden HEEL VEEL fouten met eenheden gemaakt. Bij (kunst)mest is een bekende dat men vergeet P_2O_5 om te rekenen naar P, en hetzelfde gebeurt bij NO_3 naar N. Hierdoor kunnen uitkomsten dus aanzienlijk worden onderschat of overschat.”

Ook hier geldt weer dat met name de diffuse bronnen de meeste problemen opleveren, zowel in het herkennen van de bronnen, het verkrijgen van inzicht in de juiste emissieroutes, het bepalen van de omvang van de emissieverklarende variabelen en vooral ook het bepalen van de emissiefactoren. Dit laatste geeft meestal nog de meeste problemen.

Belangrijk is vooraf een goede inschatting te maken van de bijdragen uit de diverse bronnen. Het heeft geen enkele zin veel tijd te stoppen in het verzamelen van gegevens voor een bron met een relatief kleine emissie als de gegevens van grote bronnen ontbreken. En zelfs als die gegevens er wel zijn, is het soms gewoon niet nodig om veel tijd te stoppen in het verzamelen van gegevens voor bronnen die nauwelijks bijdragen aan de totale emissie.

Een laatste valkuil bij het opzetten van een model is dat vaak vergeten wordt te onderzoeken of er voldoende materiaal is om de kwaliteit van het te bouwen model te toetsen. Vaak zijn er niet of nauwelijks meetgegevens voorhanden en moet worden uitgeweken naar andere methoden, bijvoorbeeld expert-judgement.

Stap 4: Analyseer het model

Het grootste probleem bij het analyseren van een emissiemodel is vaak dat er niet of nauwelijks meetgegevens zijn. Puntbronnen zijn nog wel te meten, maar diffuse bronnen in het algemeen niet. Die zijn alleen indirect te meten door bijvoorbeeld de waterkwaliteit te meten en terug te rekenen naar de emissies. Echter, daarmee bepaal je de som van alle bronnen bij elkaar, terwijl je vaak geïnteresseerd bent in de individuele bronnen. Als men zich dat niet vooraf realiseert, kan het hele modelproject op een teleurstelling uitlopen. De centrale vraag, welke bronnen aangepakt moeten worden, kan niet beantwoord worden.

Het bepalen van emissiefactoren is een punt waar veel wetenschappelijk onderzoek nodig is. Relatief eenvoudig is het om voor en na een zuivering te meten, waarmee de emissiefactor bepaald kan worden. Maar factoren als uitloging of uitspoeling zijn veel complexer, en vaak ook nog lokaal bepaald. Voor specifieke veldstudies kunnen enkele modeluitgangen worden gevalideerd. De afzonderlijke procesbeschrijvingen in deterministische/dynamische modellen zijn echter nagenoeg niet te valideren. Voor regionale studies kan soms een statistische validatie worden uitgevoerd waarbij de verdeling van gemeten waarden wordt vergeleken met een verdeling van berekende waarden.

Omdat er buitengewoon veel stoffen, emissieroutes, emissiefactoren en emissieverklarende variabelen zijn, is het ondoenlijk alle belangrijke calibratiefactoren op te sommen. Onderstaand beperken we ons daarom tot de nutriëntenmodellen. Specifieke calibratiegrootheden zijn daarbij:

- De nitraatconcentratie in het grondwater;
- De fosfaat-toestand van de bodem;
- De nutriëntenafvoer van het perceel;
- De nutriëntenafvoer van bedrijven (landbouwstatistiek);
- In mindere mate: de stikstof en fosfaatconcentratie in het oppervlaktewater.

Om bij nutriëntenmodellen een goed modelresultaat te kunnen bereiken moet men kunnen beschikken over betrouwbare gegevens over de volgende kritische factoren:

- Alle factoren die leiden tot een bepaald mestoverschot op perceelsniveau (bemesting minus gewasopname);
- Biologisch/chemische factoren in de bodem (mineralisatie, denitrificatie, binding en vastlegging van fosfaat);
- Hydrologische factoren (grondwaterstandsverloop, verdeling van waterafvoer over verschillende ontwateringsmiddelen, diepte van het beschouwde systeem);
- Initiële condities. De schatting van de initiële condities is in regionale modelstudies vaak een onderdeel van het model zelf. Hiervoor moet een strategie worden ontwikkeld welke afhangt van het model en de beschikbare basisgegevens.

Stap 6: Interpreteer de resultaten

Omdat emissiemodellen in het algemeen slecht zijn te calibreren, geldt dat de interpretatie buitengewoon zorgvuldig moet gebeuren. De grootste fout die gemaakt kan worden is het

overslaan van deze stap. In de praktijk gebeurt dat echter onder grote tijdsdruk toch regelmatig, net als overigens bij andere modellen.

Stap 7: Rapporteer

Net als bij de vorige stap geldt dat de rapportage zorgvuldig moet gebeuren in verband met de vaak grote onzekerheden. Die moeten ook duidelijk worden doorgegeven aan de opdrachtgever.

3.13.3 Literatuur

Ewijk, A.P.A. van, 1993.

Groenendijk, P. and J.G. Kroes, 1997.

Ministerie van V.R.O.M., 1991.

RIVM/RIZA, 1997.

Ruijgh, E.F.W., K.J. van Heeringen en G.F. Prinsen, 1998.

Smits, J.G.C., 1999.

Wagemaker, F., 1996.

Literatur

Literatuurlijst

- Abbott, M.B., 1997. Range of tidal flow modelling. *Journal of Hydraulic Engineering*. Vol. 123 (4), pp. 257-277.
- Abrahamse et al, 1981-1983. Policy Analysis of the water management for the Netherlands (part I-XXI), Randcorporation/Delft Hydraulics/Rijkswaterstaat.
- Ashby, M., A.J. Dolman, P. Kabat, E.J. Moors and M.J. Ogink-Hendriks, 1996. SWAPS version 1.0. Technical reference manual. Technical document 42, Winand Staring Centre, Wageningen.
- Babovic and Larsen (Editors), 1998. Proceedings of the Third International Conference on Hydroinformatics. Vol. I-II. Publisher: Balkema, Rotterdam/Brookfield, ISBN 90 54109831.
- Beck, M.B., 1987. Water quality modeling: a review of the analysis of uncertainty. *Water Resources Research*, 23: 1393-1442.
- Belmans, C., J.G. Wesseling and R.A. Feddes, 1983. Simulation of the water balance of a cropped soil: SWATRE. *J. Hydrol.*, 63, 271-286.
- Beltman, W.H.J., J.J.T.I. Boesten and S.E.A.T.M. van der Zee, 1995. Analytical modelling of pesticide transport from the soil surface to a drinking water well. *J. Hydrol.*, 169, 209-228.
- Berkhout et al, 1995, Het SEO - Waterrecreatiemodel, Model in het kader van het project WaterSysteemVerkenningen; Stichting voor Economisch Onderzoek, Amsterdam.
- Boesten, J.J.T.I., 1986. Behaviour of herbicides in soil: simulation and experimental assessment. Ph.D. thesis Winand Staring Centre, Wageningen.
- Bos, M.G., J. Vos and R.A. Feddes, 1996. CRIWAR 2.0. A simulation model on crop irrigation water requirements. ILRI publ. 46, Wageningen, The Netherlands.
- Brummelhuis, P.G.J. ten, 1996. Kalman filtering in real time control systems, *Hydroinformatics '96* (Editor A. Mueller), Balkema, Rotterdam, September 1996.
- Burnash, R., L. Ferral and R. McGuire, 1973. A generalized streamflow simulation model - conceptual modelling for digital computers. US National Weather Service.
- Carrera, J. and S.P. Neuman, 1986a. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions, 1, maximum likelihood method incorporating prior information. *Water Resources Research*, 22: pp. 199-210.
- Carrera, J. and S.P. Neuman, 1986b. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions, 2, uniqueness, stability, and solution algorithms. *Water Resources Research*, 22: pp. 211-227.
- Carrera, J. and S.P. Neuman, 1986c. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions, 3, application to synthetic and field data. *Water Resources Research*, 22: 228-242.
- Chapra, S.C., 1997. Surface water quality modelling. McGraw-Hill, ISBN 0-07-115242-3.
- Chow, V.T., D.R. Maidment and L.W. Mays, 1988. Applied hydrology. McGraw-Hill, New York. ISBN 0-07-100174-3.
- Crank, J., 1975. The mathematics of diffusion. Oxford University Press. ISBN 0-19-853344-6.

- Cunge, J.A., F.M. Holly and A. Verwey, 1986. Practical aspects of computational river hydraulics. Pitman Publishing Ltd., London, 1980 and Iowa Institute of Hydraulic Research, USA, 1986 (also in Russian).
- Dekker, C.M., A. Groenendijk en C.J. Sliggers, 1990. Kwaliteitscriteria voor modellen om luchtverontreiniging te meten, Ministerie van Volkshuisvesting en Ruimtelijke Ordening, Den Haag, Rapport Lucht 90, 52 pp.
- Doherty, J., 1994. PEST; Model Independent Parameter Estimation; Watermark Computing, Oxley, Australië. of URL: <http://www.ozemail.com.au/%7Ewcomp/>
- Ek, R. van, 1999. Gebruikershandleiding DEMNAT-2.1 op CD-Rom; RWS-RIZA/RIVM.
- Ernst, L.F., 1956. Calculation of the steady flow of groundwater in vertical cross-sections. Netherlands Journal of Agricultural Science 4, 126-131.
- Eulen, J.R., 1998, Handleiding PAWN - Scheepvaart Model; RIZA, Lelystad.
- Ewijk, A.P.A. van, 1993. Kosten Saneringstechnieken. RIZA werkdocument 94.005X.
- Feddes, R.A., P. Kabat, P.J.T. van Bakel, J.J.B. Bronswijk and J. Halbertsma, 1988. Modelling soil water dynamics in the unsaturated zone - state of the art. J. Hydrol., 100, 69-111.
- Fischer, H.B., E.J. List, R.C.Y. Koh, J. Imberger and N.H. Brooks, 1979. Mixing in inland and coastal waters. Academic Press, New York. ISBN 0-12-258150-4.
- French, R.H. (Editor), 1994. Open channel hydraulics. McGraw-Hill, ISBN 0-07-113310-0.
- Gelhar, L.W. and J.L. Wilson, 1974. Groundwater quality modelling. Ground Water, 12, 399-408.
- Genuchten, M.Th. van and R.J. Wagenet, 1989. Two-site/two-region models for pesticide transport and degradation: Theoretical development and analytical solutions. Soil Sci. Soc. Am. J., 53, 1303-1310.
- Giessen, A. van der, B.J. de Haan en P.E. Steinberger, 1992. Kwaliteitsborging van wiskundige modellen, RIVM, Bilthoven, report 959102001, 29 pp.
- Goossen et al, 1996. Het waterrecreatiegeschiktheidsmodel getoetst voor het IJmeer, Markermeer, de Randmeren en Oosterschelde; SC-DLO rapport 432.
- Goodman, A.S, 1984. Principles of Water Resources Planning. Kai Fa Book Company, Taipei, Taiwan. ISBN 0-13-710616-5.
- Grijssen, J.G., X.C. Snoeker and C.J.M. Vermeulen, 1992. An information System of Flood Early Warning, Proceedings Third International Conference on Floods and Flood Management, Florence, Italy.
- Groen, K.P., 1997. Pesticide leaching in polders. Field and model studies on cracked clays and loamy sand. PhD thesis, Wageningen Agricultural University, Wageningen, The Netherlands, 296 pp.
- Groenendijk, P. and J.G. Kroes, 1997. Modelling the nitrogen and phosphorus leaching to groundwater and surface water; ANIMO 3.5. Report 144, DLO Winand Staring Centre, Wageningen.
- Hall, W.A. and J.A. Dracup, 1970. Water resources systems engineering. McGraw-Hill, USA.
- Hanif Chaudry, M., 1993. Open-channel Flow. Prentice Hall, ISBN 0-13-637141-8.

- Hemker, C.J., 1997. De betrouwbaarheid van parameters bij automatische calibratie. In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), *Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen*, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 39-51.
- Hendrix, E.M.T., 1998. *Global optimization at work*, LUW, Wageningen, 248 pp.
- Henze, M., C.P.L. Grady, W. Gujer, G.V.R. Marais, T. Matsuo, 1986. *Activated Sludge Model No. 1*, IAWQ Scientific and Technological reports, No. 1, IAWQ, London, ISSN 1010-707X.
- Herman, P.M.J., 1994. The analysis of a dynamic simulation model for the Oosterschelde ecosystem. *Hydrobiologia*, 282/283: 431-436.
- Hutson, J.L. and R.J. Wagenet, 1992. *LEACHM: Leaching Estimation And Chemistry Model, Version 3*, Cornell University, Dept. of soil, Crop and Atmospheric Sciences Research series No. 92-3.
- IKM Engineering, 1995, *ATLANTIS gebruikershandleiding versie 1.0*.
- Janssen, P.H.M. en P.S.C. Heuberger, 1992a. De rol van gevoeligheidsanalyse en identificeerbaarheidsanalyse in modelcalibratie, RIVM, Bilthoven, Rapport nr. 723001007, pp 34.
- Janssen, P.H.M. en W. Slob, 1990a. *Onzekerheidsanalyse van wiskundige modellen*, RIVM, Bilthoven, 9 pp, (Intern rapport - CWM).
- Janssen, P.H.M., P.S.C. Heuberger en R. Sanders, 1992b. *UNCSAM 1.1: a software package for sensitivity and uncertainty analysis*, RIVM, Bilthoven, 286 pp.
- Janssen, P.H.M., W. Slob en J. Rotmans, 1990b. *Gevoeligheidsanalyse en onzekerheidsanalyse: een inventarisatie van ideeën, methoden en technieken*, RIVM, Bilthoven, rapport nr. 958805001, pp 119.
- Kalman, R.E., 1960. A new Approach to linear filter and prediction theory, *Journal of Basic Engineering*, 82D: 35-45, Easton, ASME.
- Kleijnen, J.P.C. en W.J.H. Groenendaal, 1988. *Simulatie: technieken en toepassingen*, Academic Services, Schoonhoven, 245 pp.
- Klepper, O., H. Scholten en J.P.G. van de Kamer, 1991. Prediction uncertainty in an ecological model of the Oosterschelde estuary, S.W. Netherlands. *Journal of Forecasting*, 10: 191-209.
- Klepper, O., M.W.M. van der Tol, H. Scholten and P.M.J. Herman, 1994. *SMOES: a Simulation Model for the Oosterschelde EcoSystem. Part I: description and uncertainty analysis*. *Hydrobiol.*, 282/283: 437-451.
- Kneese, A.V. and B.T. Bower, 1971. *Managing water quality economics, technology, institutions*. Johns Hopkins Press, Baltimore, USA.
- Knepell, P.L. and D.C. Arango, 1993. *Simulation validation: a confidence assesment methodology*, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, 150 pp.
- Kooiman, J.W., 1997. Een strategie voor het calibreren. In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), *Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen*, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 53-63.
- Kowalik, Z. and T.S. Murty, 1993. *Numerical modelling of ocean dynamics*. World Scientific Publishing, ISBN 98 102 13336, 98 102 13344.
- Krebs, 1972. *Ecology: the experimental analysis of distribution and abundance*. Harper and Row Publishers.

- Kropff, M.J., H.H. van Laar and H.F.M. ten Berge (Editors), 1993. ORYZA1 - A basic model for irrigated lowland rice production. IRRI, Los Banos, The Philippines.
- Lange, W.J. de, 1991. A groundwatermodel for the Netherlands; 1991; DBW/RIZA nota 90.066.
- Lange, W.J. de, 1997. MONA, an analytic-based interface for the connection between the Dutch nationwide models for unsaturated and saturated groundwater flow.; Reference companion part I; International conference: Analytic-based modeling of groundwater flow, Nunspeet.
- Luiten, J.P.A. and S. Groot, 1992. Modeling quantity and quality of surface waters in the Netherlands: Policy Analysis of Water Management for the Netherlands, EWPC, Vol. 2 (1992) nr. 6; p 23-33.
- Maass, A., M.M. Hufschmidt, R. Dorfman, H.A. Thomas, S.A. Marglin and G.M. Fair, 1966. Design of water resources systems. Harvard University Press, Cambridge, UK.
- Major, D.C. and R.L. Lenton, 1979. Applied water resources systems planning. Prentice-Hall.
- Ministerie van Verkeer en Waterstaat, 1984. Tweede Nota Waterhuishouding.
- Ministerie van V.R.O.M., 1991. Emissieregistratie en Informatiemanagement, Publicatie-reeks Emissieregistratie nr. 3.
- Miser, J. and E.S. Quade, 1985. Handbook of Systems Analysis. Vol. I-II. Chicester, Wiley.
- Molen, D.T. van der, 1999. The role of eutrophication models in water management. Thesis LUW, Wageningen.
- Moll, J.R. and J.I. Crebas, 1989. An operational management system for river flows, 3rd Assembly of the International Association of Hydrological Sciences, May 16-18, Baltimore, USA.
- Mosselman, E., 1996a. Morfologische modellen. Syllabus cursus: Moderne rivierwaterbouwkunde; van korset naar lossere veters. Onderdeel MRW5, Stichting Postacademisch Onderwijs Civiele Techniek en Bouwtechniek, Delft.
- Mosselman, E., 1996b. Riviermorfologische randvoorwaarden. Syllabus cursus: Moderne waterbouwkunde; van korset naar lossere veters. Onderdeel MRW3, Stichting Postacademisch Onderwijs Civiele Techniek en Bouwtechniek, Delft.
- Mous, S.L.J., 1994. On identification of non-linear systems, LUW, Wageningen, thesis, 129 pp.
- NOBIS, 1995. Restrisk; verspreiding en risico's van restconcentraties in bodem en grondwater. Fase 1. Ontwikkeling van een beoordelings methodiek voor locaties met stagnerende grondwatersanering. NOBIS 95-2-11. CUR/NOBIS. Gouda.
- Odum, 1971. Fundamentals of ecology. Saunders College Publishing.
- Olsthoorn, T.N., 1997. Calibratiegereedschappen. In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 67-73 (met schema).
- Power, M., 1993. The predictive validation of ecological and environmental models. Ecological Modelling, 68: 33-50.
- Pulles, J.P., 1985. Beleidsanalyse Waterhuishouding Nederland, Ministerie van Verkeer en Waterstaat.
- Querner, E.P., 1988. Description of a regional groundwater flow model SIMGRO and some applications. Agric. Water Man. 14: 209-218.

- Querner, E.P., 1997. Description and application of the combined surface and groundwater flow model MOGROW. *J. of Hydrology* 192: 158-188.
- Querner, E.P., J.A. Morábito, H. van den Oever and M. Menenti, 1997. The use of the hydrological model SIMGRO as a support tool for groundwater management in an irrigated area of Mendoza, Argentina. In: *Groundwater Management: Sharing Responsibility for an Open-access Resource* (Editor A. Schrevel). ILRI Wageningen, 13-15 Oct 1997: pp. 71-80.
- Querner, E.P., J.A. Morábito, M. Manzanera, J.A. Pazos, N.C. Ciancaglini and M. Menenti, 1997. The use of hydrological models in the irrigated areas of Mendoza, Argentina. *Agric. Water Man.* 35:11-28.
- Raffaelli, D. and S. Hawkins, 1996. *Intertidal Ecology*. Kluwer Academic Publishers.
- Rand Corporation, 1983. *Policy Analysis for the Water management of the Netherlands, Volume XV, The Water Distribution Model*.
- Refsgaard, J.C. and E.A. Karalies (Editors), 1997. *Proceedings European Water Resources Association Conference - Copenhagen, Denmark*, Balkema, Rotterdam, ISBN 90 5410 897 5.
- RIVM/RIZA, 1997. *Promise/RIM+; Een scenario model voor de berekening van de belasting van het oppervlaktewater*; RIVM-LAE.
- RIZA/DHV, 1996. *Handleiding HORIZON versie 6.2; update aug. 1995, nov. 1996*, RIZA en DHV.
- Rolf, H.L.M., 1997. Hoezo... 'een goed model'. In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), *Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen*, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 7-19.
- Ruijgh, E.F.W., K.J. van Heeringen en G.F. Prinsen, 1998. Integrated modelling of hydrodynamics and waste loads from point, diffuse and scattered sources. *Proceedings IAWQ Conference Edinburgh*.
- Ryding, S.O. and W. Rast (Editors), 1989. *The control of eutrophication of lakes and reservoirs. Man and the biosphere series, Vol. I*, Parthenon Publishing Group.
- Rykiel, E.J., 1996. Testing ecological models: the meaning of validation. *Ecological Modelling*, 90: 229-244.
- Sargent, R.G., 1982. Verification and validation of simulation models. In: F.E. Cellier (Editor), *Progress in modelling and simulation*, Academic Press, London, etc, 159-169.
- Sargent, R.G., 1984a. A tutorial on verification and validation of simulation models. In: S. Sheppard, U. Pooch and D. Pegden (Editors), *Proceedings of the 1984 winter simulation conference*, pp 115-121.
- Sargent, R.G., 1984b. Simulation model validation. In: T.I. Ören, B.P. Zeigler and M.S. Elzas (Editors), *Simulation and model-based methodologies: an integrative view*, 10 in the series: NATO ASI Series F: Computer and Systems Sciences, Springer Verlag, Berlin, etc., pp 537-555.
- Sargent, R.G., 1986. An exploration of possibilities for expert aids in model validation. In: M.S. Elzas, T.I. Ören en B.P. Zeigler (Editors), *Modelling and simulation methodology in the Artificial Intelligence era*, Elsevier, Amsterdam, 19-40.
- Scavia, D. and A. Robertson, 1979. *Perspectives on lake ecosystem modelling*. Ann Arbor Science Publishers Inc., Michigan. ISBN 0-250-40248-3.

Scheffer, M., 1998. Ecology of shallow lakes. Population and community biology series, Vol 22. Chapman and Hall, ISBN 0-412-74920-3.

Schlesinger, S., R.E. Crosbie, R.E. Gagne, G.S. Innis, C.S. Lalwani, J. Loch, R.J. Sylvester, R.D. Wright, N. Kheir and D. Bartos, 1979. Terminology for model credibility. Simulation, 32: 103-104, (SCS Technical Committee on Model Credibility).

Scholten, H. and A.J. Udink ten Cate, 1998. Quality assessment of the simulation modeling process. Computers and electronics in agriculture, (accepted; = improved from proc. ICCTA).

Scholten, H. and M.W.M. van der Tol, 1994. SMOES: a Simulation Model for the Oosterschelde EcoSystem. Part II: calibration and validation. Hydrobiologia, 282/283: 453-474.

Singh, V.P. (Editor), 1995. Computer Models of Watershed Hydrology. Water Resources Publications, Colorado, USA. ISBN 0-918334-91-8.

Smith, M., 1992. CROPWAT, a computer program for irrigation planning and management. FAO Irrigation and Drainage Paper 46. Rome, Italy.

Smits, J.G.C., 1999. Instrumentarium voor analyse van bronnen van verontreiniging en waterbodempkwaliteit. Land Water Milieu Informatietechnologie (LWI) publicaties.

Somlyódy, L. and G. van Straten, 1986. Modelling and Managing shallow lake eutrophication - application to Lake Balaton. Springer-Verlag, New York. ISBN 0-387-16227-5.

Spreafico, M. and A. van Mazijk, 1993 (Editors). Alarm model 'Rhine': a model for the operational prediction of the transport of pollutants in the river Rhine. ISBN 90-70980-18-5.

STOWA, 1995. Modelleren van actiefslibsystemen, keuze van model en programmatuur. Nr. 95-01.

Summers, J.K., H.T. Wilson and J. Kou, 1993. A method for quantifying the prediction uncertainties associated with water quality models. Ecological Modelling, 65: 161-176.

Tarantola, A., 1987. Inverse problem theory. Methods for data fitting and model parameter estimation, Elsevier, Amsterdam, 613 pp.

Terveer, H.F., J.C. Duker en D. Cramer, 1987. EPRAC, Modelbeschrijving en gebruikershandleiding koelwatermodel, DBW/RIZA nota 87.055.

Terveer, H.F., 1996. Doelgroepstudie electriciteitsvoorziening (WSV*gebruik); Bijlage 5: beschrijving van het Electriciteitsmodel; RIZA-werkdocument 97.021X.

Te Stroet, C.B.M., 1995. Calibration of stochastic groundwater flow models: estimation of system noise and model parameters, Eburon, Delft, thesis Technische Universiteit Delft, 208 pp.

Thomann, R.V. and J.A. Mueller, 1989. Principles of surface water quality modelling and control. Harper and Row Publ. Inc., New York.

Verdonchot et al, 1992. Aanzet tot een ecologische indeling van oppervlaktewater in Nederland, RIN-rapport 92/1, CML report 78.

Verwey, A., A.W. Minns, V. Babovic and C. Maksimovic (Editors), 1994. Hydroinformatics State of the Art, Proceedings of the First International Conference on Hydroinformatics, Vol. I-II. Publisher: Balkema, Rotterdam/Brookfield, ISBN 90 54105127.

Vogel, T., K. Huang, R. Zhang and M.Th. van Genuchten, 1996. The HYDRUS code for simulating one-dimensional water flow, solute transport, and heat movement in variably saturated media. Research Rep. 140, U.S. Salinity Laboratory, ARS-USDA, Riverside, California, 130 p.

Vreugdenhil, C.B., 1994. Numerical method for shallow water flow. Kluwer Acad. Publishing, ISBN 07923 31648.

Vriend, H.J. de and J.S. Ribberink, 1996. Mathematical modelling of meso-tidal barrier island coasts. Part I: Process-based simulation models. In Liu, P.L.F. (Editor): Advances in coastal and Ocean Engineering, World Scientific, pp. 151-197.

Vriend, H.J. de, 1996. Mathematical modelling of meso-tidal barrier island coasts. Part I: empirical and semi-empirical models. In Liu, P.L.F. (Editor) Advances in coastal and Ocean Engineering, World Scientific, pp. 115-149.

Wagemaker, F., 1996. PESCO, Beschrijving van een screeningsmodel voor emissies van bestrijdingsmiddelen naar oppervlaktewater; RWS-RIZA.

Walker, A., 1974. A simulation model for prediction of herbicide persistence. J. Environ. Qual., 3, 396-401.

Wallach, D. and B. Goffinet, 1989. Mean squared error of predictions as a criterion for evaluating and comparing system models. Ecological Modelling, 44: 299-306.

Walsum, P.E.V. van en A.A. Veldhuizen, 1997. Gestructureerde calibratie van een geïntegreerd model (Simgro): praktijkvoorbeeld (Fochteloërveen en omgeving). In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 101-115.

WL | DELFT HYDRAULICS, 1995. AGRICOM gebruikershandleiding (Agrarisch Economisch Model), WL-rapport T1605.

WL | DELFT HYDRAULICS, 1996a. Gebruikershandleiding MOZART, WL-rapport T1606.

WL | DELFT HYDRAULICS, 1996b. MORRES: Software voor Habitat Evaluatie, User manual.

WL | DELFT HYDRAULICS, 1996c. Gebruikershandleiding EKOS, versie 2.1 juni 1996, WL-rapport T1610.

WL | DELFT HYDRAULICS, Cap Gemini, Coopers & Lybrand, NITG-TNO en RWS MD, 1997. Aquest IT-verkenning. Inventarisatie.

Zaadnoordijk, W.J. en A. Stein, 1997. Doelfunctie en parameters. In: M.R. van der Valk en H. Boukes (Editors), Modelcalibratie: het automatisch ijken van grondwatermodellen, Nederlandse Hydrologische Vereniging, Utrecht, 21-38.

Zeigler, B.P., 1976. Theory of modelling and simulation, Robert E. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 435 pp.

Bjälagen

Inhoud

Bijlage 1: Schalen.....	1
1.1 Inleiding.....	1
1.1.1 Processchaal.....	1
1.1.2 Informatieschaal	1
1.1.3 Modelschaal.....	2
1.1.4 Bemonsteringsschaal	2
1.2 Omgaan met schalen.....	2
1.3 Problemen met schalen	3
Bijlage 2: Data-assimilatie	4
2.1 Inleiding.....	4
2.2 Wat is data-assimilatie?	4
2.3 Technieken.....	5
2.4 Valkuilen en gevoeligheden	6

Bijlage I: Schalen

I.1 Inleiding

Schaalaspecten spelen bij het modelleren op veel punten een belangrijke rol. Er kan dan ook veel mee misgaan. In de literatuur wordt het onderwerp schalen van verschillende kanten benaderd. In dit Handboek wordt getracht een overzicht te geven van de schaalaspecten. Hiertoe worden vier verschillende typen schalen onderscheiden: de processchaal, de informatieschaal, de modelschaal en de bemonsteringsschaal.

I.1.1 Processchaal

Modellen ten behoeve van het waterbeheer geven een beschrijving van een (natuurlijk of kunstmatig) proces. Veel van deze processen kennen variaties in de ruimte en/of de tijd. De schaal waarop de variaties zich manifesteren wordt processchaal genoemd. In ruimtelijke zin kan deze processchaal uiteenlopen van klein (bijvoorbeeld korrels van het sediment) tot groot (bijvoorbeeld een stroomgebied). Hiertussen kunnen zich allerlei intermediaire schalen bevinden, zoals bijvoorbeeld drainage, sloten, kavels, beken en watervoerende pakketten. Ook in de tijd kunnen verschillende schalen worden onderscheiden, uiteenlopend van minder dan een minuut (neerslagintensiteit tijdens een bui) tot een geologische tijdschaal. Veel processen vertonen een continu spectrum van schalen. Echter, niet alle schaalniveau's zijn even sterk aanwezig. Meestal wordt een proces gekenmerkt door een beperkt aantal dominante schalen. In de tijd is het meest duidelijke voorbeeld hiervan de tijdschaal van één jaar (seizoensverloop). Ook in de ruimte zijn er dominante schalen. Bijvoorbeeld kenmerkende ruimtelijke dimensies van kleilagen in rivierafzettingen. De processchaal is voor de waterbeheerder in vrijwel alle gevallen autonoom. Dit type schaal kan niet beïnvloed worden door waarnemen of modelleren en zal derhalve als een gegeven uitgangspunt voor de waterbeheerder gelden.

I.1.2 Informatieschaal

De waterbeheerder heeft behoefte aan informatie over het proces vanuit een perspectief dat wordt bepaald door zijn specifieke taakveld. Het gaat daarbij nooit om een volledige beschrijving van de processen, maar om informatie op een beperkt schaalbereik. In het algemeen kan worden gesteld dat een strategische waterbeheerder (bijvoorbeeld rijksoverheid) behoefte heeft aan informatie op grote schaal, terwijl de operationele waterbeheerder (bijvoorbeeld binnen een waterschap) behoefte heeft aan kleinschalige informatie. Dit type schaal wordt informatieschaal genoemd (de schaal waarop informatie is gewenst).

Alle variatie van het proces op een kleinere schaal dan waarin de waterbeheerder is geïnteresseerd, wordt gezien als “storende ruis”, terwijl variaties op grotere schaal zich manifesteren als (ruimtelijke of temporele) trend. Voor bijvoorbeeld het karakteriseren van de neerslag in Nederland is het niet nodig om informatie te verzamelen over individuele regendruppels (regenmeters meten een hoeveelheid over een groter oppervlak gedurende een zekere tijd). Van belang zijn de variaties op een schaal van enkele tientallen meters tot een paar honderd kilometer. Grootschalige variatie (structurele verschillen tussen de neerslag in Nederland en bijvoorbeeld Rusland) zijn weer niet relevant. Ook de informatieschaal is voor de waterbeheerder in de meeste gevallen een gegeven. Dit type schaal is afhankelijk van de taakstelling van de waterbeheerder en wordt opgelegd door maatschappelijke en politieke stromingen.

1.1.3 Modelschaal

Een model bevat vaak beschrijvingen van een proces. Bij het modelleren dient gekozen te worden welke schalen van het proces beschreven moeten worden. Het meest relevant bij de modelschaal is de keuze van de ruimtelijke en temporele discretisatie. Ook interpolatie en het niveau waarop informatie wordt geaggregeerd komen voort uit keuzen voor de modelschaal.

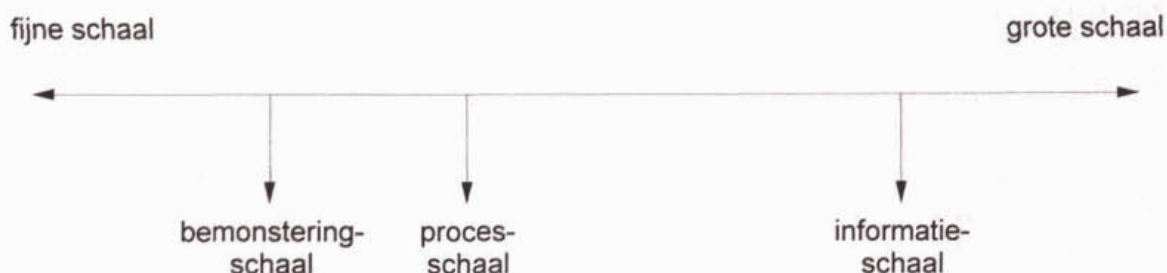
1.1.4 Bemonsteringsschaal

Het laatste schaaltype dat van belang is, is de bemonsteringsschaal. Eigenlijk bestaat dit schaaltype uit twee onderdelen. Ten eerste is er de schaal waarop monsters genomen worden. Dit loopt uiteen van “puntwaarnemingen” (bijvoorbeeld een temperatuurmeting op een bepaalde locatie) tot oppervlakken en volumes van tientallen tot honderden meters (pompproeven en remote sensing beelden) en zelfs kilometers. Ten tweede wordt de bemonsteringsschaal bepaald door dichtheid van het meetnet en de meetfrequentie).

1.2 Omgaan met schalen

Een belangrijke taak van de modelleur is om de modelschaal zodanig te kiezen dat het model informatie levert op de gewenste informatieschaal, waarbij rekening wordt gehouden met de aanwezige processchalen, in samenhang met de bemonsteringsschaal. Hierbij is het ook van belang te onderkennen dat er ook situaties voorkomen die onmogelijk te modelleren zijn.

De relatie tussen de typen schalen is symbolisch in figuur 1 weergegeven. Op de horizontale as staat de grootte van de schaal (links fijn en rechts grof).



Figuur 1: Symbolische weergave van de relatie tussen de verschillende typen schalen.

De situatie zoals die is gegeven in figuur 1 treedt bijvoorbeeld op als er van een bepaald bodemkenmerk informatie is gewenst op regionale schaal. De bemonstering vindt plaats op een schaal van millimeters, terwijl de (relevante) natuurlijke variatie in de orde van grootte ligt van enkele tientallen meters. In dit geval zal de modelschaal zo gekozen moeten worden dat de processen en metingen worden opgeschaald tot de gewenste informatieschaal. Meer voorbeelden staan beschreven in de inventarisatie van Wösten et al (1998).

1.3 Problemen met schalen

Het is niet altijd mogelijk om de type schalen met elkaar in overeenstemming te brengen. Dit wordt geïllustreerd met twee voorbeelden.

Voorbeeld 1: Informatieschaal kleiner dan de processchaal.

Stel dat een waterbeheerder anti-verdrogingsmaatregelen wil evalueren op een termijn van 5 jaar in een gebied zoals de Veluwe. We beperken ons tot de variatie in de grondwaterstand. De maatregelen moeten resulteren in een verhoging van de grondwaterstand in de orde van decimeters. De gewenste informatieschaal is 5 jaar. De grondwaterstand wordt gekenmerkt door zeer trage respons en de relevante (temporele) processchaal van de grondwaterstand ligt in de orde van 15 tot 20 jaar. De variatie van de grondwaterstanden over die periode, is in de orde van meters. Hoe de meetfrequentie (bemonsteringsschaal) en de modelschaal ook wordt gekozen, het is niet mogelijk om binnen de periode van 5 jaar een uitspraak te doen ten aanzien van de structurele veranderingen als gevolg van anti-verdrogingsmaatregelen.

Voorbeeld 2: Bemonsteringsschaal groter dan de processchaal en informatieschaal.

Ten behoeve van het bodem- en grondwaterbeheer in een stedelijk gebied kan het wenselijk zijn om een “vlakdekkend” beeld (interpolatie) te hebben van het verloop van concentraties van bepaalde stoffen. De informatieschaal ligt dus in de orde van enkele tientallen meters. Nu vertonen verschillende stoffen een ruimtelijk variatiepatroon met eveneens een samenhang van enkele tientallen meters, hetgeen overeenkomt met de relevante processchaal. Echter vanwege logistieke en budgettaire overwegingen is het niet mogelijk om de bemonsteringsdichtheid kleiner te maken dan een paar honderd meter. Aangezien de bemonsteringsschaal veel groter is dan de processchaal kan geen zinvolle interpolatie worden uitgevoerd. Wel kunnen karakteristieken van de concentraties worden berekend.

Bijlage 2: Data-assimilatie

2.1 Inleiding

In dit Handboek is data-assimilatie gedefinieerd als: 'Een benaderingswijze waarbij data wordt geïntegreerd met fysisch/chemisch procesbeschrijving, zodanig dat de informatieinhoud van zowel de data als de procesbeschrijving expliciet wordt gemaakt en gewogen'. In deze bijlage wordt geprobeerd deze enigszins cryptische definitie op een aantal hoofdlijnen toe te lichten. Een volledige beschrijving van data-assimilatie valt buiten het kader van dit Handboek.

2.2 Wat is data-assimilatie?

Zoals de definitie al aangeeft is data-assimilatie geen afzonderlijke techniek, maar een benaderingswijze. Data-assimilatie omvat een klasse van technieken. Het uitgangspunt hierbij is dat er twee bronnen van informatie zijn, namelijk een procesbeschrijving en meetinformatie:

Procesbeschrijving.

In het kader van dit Handboek geschiedt procesbeschrijving door middel van een model. Bij modelleren wordt de realiteit nagebootst, met het doel om inzicht te krijgen in het gedrag van het (deel)systeem dat beschreven wordt. Kennis van de te beschrijven processen wordt ingebracht via fysische en chemische wetmatigheden, in de vorm van theoretische en/of empirische vergelijkingen. Om verschillende redenen van zowel theoretische als praktische aard wordt de complexe werkelijkheid hierbij altijd vereenvoudigd, onder meer door schematisatie en discretisatie. Bovendien zijn de eigenschappen die het systeemgedrag bepalen (parameters) en drijvende krachten niet exact bekend. Dit brengt met zich mee dat een model een benadering van de werkelijkheid zal zijn, en de beschrijving van het systeem met een model dus altijd zal afwijken van het werkelijke systeem.

Meetinformatie.

Naast de procesbeschrijving kan er ook aan het systeem worden gemeten. Vrijwel alle metingen zijn behept met meetfouten en nooit wordt er zoveel gemeten dat het systeem uitsluitend op basis van de meetinformatie exact gereproduceerd kan worden.

Metten en procesbeschrijving zijn twee verschillende manieren om inzicht te verkrijgen in de toestand van een watersysteem, die beide behept zijn met onzekerheden. Op basis van verschillen tussen de gemeten systeemvariabelen en de hiermee corresponderende berekende modelvariabelen kan, rekening houdend met de onzekerheden in beide, het model of de met het model berekende toestand worden gecorrigeerd. Dit principe staat ook wel bekend als data-assimilatie (meetinformatie wordt geassimileerd in het model).

Een belangrijkste kenmerk van data-assimilatie is dat getracht wordt optimaal gebruik te maken van zowel de procesbeschrijving als de meetinformatie. Hiertoe dienen de onzekerheden in beide informatiebronnen te worden gekwantificeerd en hiermee corresponderend met één of andere vorm van optimale weging te worden gecombineerd. Veelal wordt daarbij onderscheid gemaakt tussen off-line methoden voor het calibreren van modellen en on-line methoden die met name in operationele beheerssystemen worden toegepast, bijvoorbeeld voor de voorspelling van hoogwatergolven in rivieren en de voorspelling van de stormopzet in het Nederlandse kustgebied.

2.3 Technieken

Een belangrijke techniek binnen data-assimilatie is Kalman-filtering. Op basis van een statistische beschrijving van de meet- en modelfouten worden metingen in real-time op zodanige wijze in het model geassimileerd dat de consistentie tussen de gecorrigeerde modeltoestand (dat wil zeggen de berekende toestand na assimilatie) en de modeldynamica behouden blijft. De meerwaarde van deze integratie van meetinformatie en proceskennis komt dan primair tot uitdrukking in de vorm van een nauwkeuriger beschrijving van de beginsituatie voor voorspellingen op basis van modelberekeningen. Een bijkomend voordeel van met name statistische data-assimilatiemethoden zoals Kalman-filtering is dat, behalve een verbeterde beschrijving van de modeltoestand, ook een expliciete maat voor de onzekerheid in deze toestand wordt verkregen en de informatieinhoud van metingen kan worden gekwantificeerd. Dit laatste kan worden gebruikt om meetnetten te ontwerpen, evalueren en optimaliseren.

Voorbeeld Kalman Filter.

Om de werking enigszins te verduidelijken wordt Kalman-filtering met een eenvoudig voorbeeld geïllustreerd. Stel dat er in een rivier ergens bovenstrooms een lozing van een bepaalde stof heeft plaatsgevonden en er moet een voorspelling komen van het verloop van concentraties op een aantal punten langs de rivier. Hier wordt niet ingegaan op de specifieke modellering van het oppervlaktewater. Voldoende is te weten dat de basis van de voorspelling een differentiaalvergelijking is. Hierin zijn te onderscheiden: parameters (bijvoorbeeld bodemruwheid), drijvende krachten (bijvoorbeeld het bovenstroomse debiet) en toestandsvariabelen (in dit geval het verloop van de concentratie benedenstrooms). Voorts worden er op gezette tijden en op een beperkt aantal plaatsen waarnemingen gedaan van de concentraties. In een "klassieke" modelbenadering worden waarnemingen op drie manieren gebruikt:

1. Voor het vaststellen van de beginvoorwaarden (bijvoorbeeld debieten en concentratie op $t = 0$).
2. Voor het invoeren van randvoorwaarden (bijvoorbeeld debieten en concentraties van zijrivieren).
3. Voor het calibreren van de parameters. Hiervoor worden waarnemingen gebruikt in het gebied dat gemodelleerd wordt.

Bij Kalman-filtering is er nog een vierde manier om meetinformatie te gebruiken. Dit kan worden geïllustreerd door het Kalman-filter te zien als een predictor-corrector methode. Op een bepaald tijdstip ($t = t_0$) wordt met een reeds gecalibreerd model een voorspelling gemaakt voor één tijdsperiode vooruit ($t = t_1$). Het resultaat is een concentratieverdeling langs de rivier op t_1 alsmede de corresponderende onzekerheid. Deze wordt de a priori onzekerheid genoemd. Op het tijdstip t_1 worden er waarnemingen van de concentraties gedaan. De voorspelling en de waarnemingen vertonen een verschil als gevolg van enerzijds onvolkomenheden in het model, en anderzijds meetfouten. Als het model goed is gecalibreerd, strookt dit verschil echter met de statistische kansverdeling van de onzekerheden van model en meting. De modelvoorspelling wordt nu gecorrigeerd aan de hand van de waarnemingen. Dit geschiedt op basis van de weging tussen modelonzekerheid en meetfout. Stel dat de meetfouten verwaarloosbaar klein zijn ten opzichte van de modelfouten, dan wordt veel waarde toegekend aan de meting. Ter plaatse van de meting zal de gecorrigeerde voorspelling dan ook dicht bij de meting liggen. Op locaties waar niet gemeten wordt, vindt ook een correctie plaats, maar de invloed van een meting neemt af naarmate de afstand tussen het meetpunt en het beschouwde punt groter wordt. De mate waarin deze invloed afneemt wordt bepaald door de ruimtelijke en temporele correlatiestructuur van het onderliggende proces. Het resultaat van de correctie is een betere schatting voor de concentratieverdeling op het tijdstip t_1 . Dit wordt gekwantificeerd door een kleinere onzekerheid (posteriori onzekerheid). De gecorrigeerde schatting van het concentratieverloop op t_1 wordt gebruikt voor de voorspelling in de volgende tijdsperiode ($t = t_2$). Deze voorspelling wordt weer gecorrigeerd met waarnemingen op t_2 , enzovoorts. De schatting van het concentratieverloop wordt dus telkens bijgesteld als er nieuwe meetinformatie beschikbaar komt. Bovendien geeft de techniek inzicht in de representativiteit van de meetpunten voor de schatting.

Het voert te ver om in dit Handboek een voorbeeld te geven van data-assimilatie. Een voorbeeld hiervan wordt uitgebreid behandeld in Te Stroet (1995).

2.4 Valkuilen en gevoeligheden

De meerwaarde van data-assimilatie komt pas naar voren als aan een aantal voorwaarden voldaan is. Men dient rekening te houden met de volgende valkuilen en gevoeligheden:

- Toepassing van data-assimilatietechnieken is alleen dan zinvol indien er voldoende inzicht bestaat in de meet- en de modelfouten. Anders gezegd, er dient enige 'zekerheid over de aard en de grootte van de onzekerheden' te bestaan. Het is dus essentieel te weten hoe de oorzaak-gevolg relaties in elkaar steken. Indien er onzekerheid aan modelberekeningen wordt toegekend, dan is het van belang te weten welke invoerparameters of modelparameters daarvoor verantwoordelijk gesteld kunnen worden.
- De impact van data-assimilatie (lees: invloedsgebied van de correcties in ruimte en tijd) wordt, naast de aannames omtrent de ruimtelijke en tijdsrelatie van de meet- en modelfouten, bepaald door de ruimtelijke en tijdsrelatie in de onderliggende modeldynamica. Begrip van de belangrijkste fysische relaties is dus vereist om het effect van data-assimilatie goed te kunnen inschatten.

- Ook het type systeemvariabelen waarvan de meetgegevens geassimileerd worden, beïnvloedt de mate van effect van data-assimilatie. Zo zal het effect van assimilatie van een waterstand, gemeten op een bepaalde locatie, anders zijn dan het effect van assimilatie van een op dezelfde locatie gemeten debiet.
- Data-assimilatie kan gezien worden als een additionele modelleerstap waarmee voor een deel de tekortkomingen in de eerdere modelleerfases gecompenseerd kan worden. Bovendien kan er een bewuste afweging worden gemaakt tussen het gebruik van een gedetailleerder procesbeschrijving versus het assimileren van metingen, uiteraard afhankelijk van het modelleerdoel. Deze afweging kan slechts gemaakt worden indien voldaan is aan de voorwaarden die in de vorige aandachtspunten zijn genoemd.