

Symposium 'de historie van tijdreeksmodellen' 18 april 2024

TOM HOOGLAND EN KOEN VAN DER HAUW

Op 18 april vond bij TNO in Utrecht een laatste, afsluitende bijeenkomst plaats van de NHV-werkgroep tijdreeksanalyse. Om deze mijlpaal op passende wijze te eren, is deze dag teruggedaan in de historie van de werkgroep én van het toepassen van tijdreeksanalyse in ons vakgebied. De methode van Box en Jenkins (1970), die de basis vormt van onze tijdreeksmodellen, krijgt speciale aandacht. In de ochtend starten we met een workshop van Eit van der Meulen. Tijdens een heerlijke lunch worden de discussies uit de workshop vervolgd. Daarna start het middagprogramma, met een korte inleiding van de voorzitter van de werkgroep, Stefanie Bus, een presentatie van Martin Knotters, een presentatie van Jos von Asmuth en een afsluitende borrel.

Verlag

Workshop 'ZEN & de kunst van de tijdreeksanalyse'

De 'nieuwe generatie' tijdreeksmodelleers, die gewend zijn te werken met PIRFICT-modellen (via bijv. Menyanthes, HydroMonitor of Pastas), konden kennismaken met de 'traditionele' tijdreeksmodellering van Box-Jenkins (BJ) via een workshop van Eit van der Meulen. Er waren 18 deelnemers, van jonge gretige hydrologen tot ervaren senioren in de tijdreeksmodellering. Eit voorzag de deelnemers vanaf het begin van prikkelende stellingen als: "vertrouw de data, wantrouw modellen". Hij ziet overal dualiteit en stelde vervolgens ook meteen de kwaliteit van de data ter discussie (let op veranderingen in metadata van de peilbuizen). De introductie van goedkope drukopnemers was volgens Eit een "zwarte bladzijde in de hydrologie", met als gevolg een overvloed aan grondwaterstanden en vaak twijfelachtige modellen op dagbasis. Dit alles leidde al snel tot een discussie over het weggooien van data en de betekenis daarvan voor je tijdreeksanalyse met discrete BJ-modellen of met continue PIRFICT-modellen.

Vervolgens besprak Eit de essentiële verschillen tussen continue PIRFICT-modellen en discrete BJ-modellen. Zo kunnen PIRFICT-modellen gefit worden op reeksen met wisselende frequenties, terwijl voor BJ-modellen equidistante reeksen vereist zijn, met een vaste meetfrequentie. Het blijkt overigens wel mogelijk om gaten in reeksen op te vullen met een speciale code voor ontbrekende waarden. Voor het transfermodel (het deterministische deel) en ruismodel (het stochastische deel), wordt in PIRFICT-modellen meestal een continue Gammafunctie en een eenvoudig autoregressief AR(1) model gebruikt, die beiden automatisch zijn te parametriseren. Voor BJ-modellen is juist een uitgebreide identificatiefase nodig waarin ook handmatig gezocht moet worden naar de juiste orden van de autoregressieve (AR) en moving average (MA) delen van het transfermodel en het ruismodel. Dit kost weliswaar meer tijd dan bij PIRFICT, maar geeft een

tijdreeksmodel dat meestal beter past bij het proces. Daardoor lukt het met BJ-modellen vaak beter dan met PIRFICT-modellen om te voldoen aan alle randvoorwaarden voor uitspraken over gekwantificeerde betrouwbaarheden. Het ruismodel speelt hier een belangrijke rol en is essentieel om meer te weten te komen over wat we niet zeker weten: de onzekerheid rond modelresultaten.

Eit stond daarom stil bij de vereiste randvoorwaarden voor een geschikt ruismodel, zo moeten onder andere de residuen (BJ-terminologie) gemiddeld nul zijn, een constante variantie hebben, geen autocorrelatie hebben (zogenaamde witte ruis) en normaal verdeeld zijn. Deze voorwaarden worden door argeloze tijdreeksmodelleers niet altijd gecontroleerd en dat kan grote gevolgen hebben voor een juiste inschatting van de onzekerheid en de daarop gebaseerde conclusies. Vooral als op dagbasis wordt gemodelleerd zit er vaak nog autocorrelatie in de residuen. Op dagbasis modelleren in trage grondwatersystemen levert echter meestal nauwelijks extra informatie op, omdat vandaag dan erg op gisteren lijkt. Modelleren met minder data levert dan meer op. Eit maakt er ook een punt van dat de veel gebruikte EVP (Explained Variance Percentage ofwel Verklaarde variantie, een maat voor de pasvorm van het tijdreeksmodel) niet alles verklaart als er nog kruiscorrelatie is tussen de deterministische component en ruismodel: de EVP geeft dan een te rooskleurig beeld. Nog iets om op te letten dus.

Uiteindelijk kunnen de deelnemers dan aan de gang met een oefenversie van Tijdreeksanalist, de door Eit en Paul Baggelaar ontwikkelde software om tijdreeksanalyse volgens de Box-Jenkins-methode uit te voeren. Daarmee is er ondersteuning voor de benodigde diagnostische checks en blijkt het schatten van orden toch te doen. Eit heeft allerlei aandachtspunten overgebracht, het ene complexer dan het andere. Het goed interpreteren ervan vraagt de nodige (basis)kennis van statistiek en tijdreeksanalyse. De belangrijkste boodschap is dat die kennis juist van groot belang is bij het maken en beoordelen van een tijdreeksmodel en het juist beoordelen van informatie over de onzekerheid. Met Tijdreeksanalist is er trouwens geen excuus om niet met Box-Jenkins-modellen aan de slag te gaan: het ondersteunt de fasen van tijdreeksanalyse goed en biedt veel gereedschappen voor analyse, controle, modelidentificatie, verificatie en voorspelling.

Symposiummiddag met presentaties en discussie

Met een welkom en korte inleiding van de voorzitter van de NHV-werkgroep tijdreeksanalyse, Stefanie Bus, starten we het middagprogramma.

Presentatie Martin Knotters: Fraeye historie ende al waer, mach ic v tellen hoort naer

Als eerste volgt de presentatie van Martin Knotters. Hij geeft een historisch overzicht van de tijdreeksmodellering van grondwaterstandsreeksen in Nederland, met een link naar belangrijke gebeurtenissen in deze jaren om alles in perspectief te plaatsen. De titel is 'Fraeye historie ende al waer, mach ic v tellen hoort naer: De geschiedenis van tijdreeksmodellering van grondwaterstanden

in Nederland' naar Karel ende Elegast. Naast belangrijke zaken als (basis)kennis van statistiek en het omgaan met onzekerheid komen terloops 9-11, de val van de muur en de vliegtuigramp bij Lockerbie voorbij.

1984 (De start van tijdreeksmodellering in de Nederlandse hydrologie): er was toen nog militaire dienstplicht en Martin had bivak ergens op de hei. Het rapport TNO verdroging NP Meijweg verscheen. Martin is gecharmeerd van de beknoptheid ervan. In dit rapport krijgt de onzekerheid (de stochastische component) nog maar beperkte aandacht, hoewel al duidelijk beschreven in het boek 'Timeseries analysis: forecasting and control' van Box en Jenkins (1976). Na de beschreven drie stadia van identificatie, parameterschatting en diagnose was voor reeks 58GP-45 een transfermodel gevonden. Dit betreft een reeks op maandbasis, blijkbaar van een traag systeem, want de pure delay parameter in het transfermodel is acht maanden. Bij de voorspellingen met het model werd ook al een betrouwbaarheidsinterval gegeven. Het model is gebruikt voor voorspellen buiten de waarnemingsperiode, maar toen gingen de voorspellingen uit de pas lopen. Door toevoegen van een transfercomponent als gevolg van een grondwateronttrekking gaat het daarna wél goed. En ten slotte kwam ook de ruïster aan bod, een eerste-orde autoregressief proces bleek de meest zinnige keuze voor het ruïstermodel. De backward shift operator was destijds blijkbaar bij iedereen bekend en hoefde niet uitgelegd te worden. In de vijfde editie van het boek van Box en Jenkins (2016) worden vijf fasen in de iteratieve aanpak voor modelbouw onderscheiden. Ook het onderscheiden van modelklassen en voorspellingen komen nu aan bod.

1988 (Lockerbie): drie zeer heldere, beknopte artikelen over TRA van Frans van Geer, Paul Baggelaar en Peter Defize. Frans van Geer was ook de oprichter van de NHV-werkgroep tijdreekanalyse in 2011.

1989 (val van de muur): en de verschijning van een rapport 'Verlaging van de grondwaterstanden in Nederland' van Harry Rolf. In de allerlaatste aanbeveling van dit rapport werd gewezen op de grote variëteit aan modelvormen en modelcoëfficiënten en werd aanbevolen om op zoek te gaan naar het verband tussen deze parameters en het hydrologische systeem.

1994: Publicatie van het boek 'Time series modelling of water resources and environmental systems' van Hipel en McCleod. Een verschil t.o.v. het boek van Box en Jenkins (1970, 1976) is dat Hipel en McCleod een automatisch selectie criterium (ASC), zoals Aikake's Information Criterion (AIC) introduceren bij modelselectie. Dergelijke criteria worden wel statistische equivalenten genoemd van Occam's Razor. William of Occam (1287-1347) was een monnik uit Engeland die stelde dat je niet moeilijker moet doen dan strikt noodzakelijk is. Simpelweg gesteld voegt een ASC penalties toe aan een maat voor goodness-of-fit, om te voorkomen dat je met een kanon op een mug gaat schieten met een te complex model.

1999: uitbreiding naar modellering van reeksen met drempel-nietlineariteit vond plaats, de zogeheten TARSO-modellen: Threshold Autoregressive Self-exciting Open loop, op basis van het boek over Non-linear Time Series van Howell

Tong (1990). Feitelijk gaat het hierbij om simpele vergelijkingen van basisschoolniveau, maar dan voor meerdere systemen, gescheiden door drempels. Martin somde ook proefschriften op die achtereenvolgens in verschillende rampjaren verschenen: Hans Gehrels (1999), Martin Knotters (2001), Wilbert Berendrecht (2004) (wat leidde tot een uitspraak van een lid van de commissie: "Nu is alles wel bereikt op het gebied van TRA..."), Rodrigo Lilla Manzione (2007), Jos von Asmuth (2012), Johan van de Wauw (2012), Christophe Oberfell (2019) en Raoul Collenteur (2022).

Martin stelt graag hoezo-vragen, bijvoorbeeld: "Hoezo black box?" Hij legt uit dat fysische modellen die 'wit' waren al snel 'grijs' worden als je ze gaat kalibreren op metingen, terwijl de parameters van empirische Box-Jenkinsmodellen zich fysisch laten verklaren. De informatie over nauwkeurigheid en onzekerheid in de ruiscomponent maakt deze modellen interessant voor toepassing in bijvoorbeeld onzekerheids- en risicoanalyse. Hoezo continu? (trekken van lijnen door puntjes). Zie wat dit betreft de leestip van Martin voor de zeer verhelderende beschouwing van Frans van Geer (2002) over het verschil tussen tijdreeksmodellen in het discrete en het continue domein (Stromingen 8 (2002), nr. 3).

Opvallend is dat er zelden wordt gerapporteerd over de modelverificatie. Is statistiek echt zo moeilijk: met basiskennis van statistiek (zoals lineaire regressie, autocorrelatie, kruiscorrelatie en toetsen) kom je al een heel eind. Waarom pakken hydrologen dat niet op? Volgens Martin zakt de basiskennis van statistiek weg omdat het te weinig in de praktijk wordt benut. Er is weinig vraag naar onzekerheids- en risicoanalyses in het Nederlandse (grond)waterbeheer. Er wordt liever gepraat over plausibiliteit en de statistische informatie over onzekerheid/nauwkeurigheid wordt niet benut. Zijn stelling is: als doelmatigheid echt belangrijk wordt in het waterbeheer, dan moeten hydrologen wel hun basiskennis van statistiek onderhouden, want dan zijn onzekerheids- en risicoanalyses hard nodig. De informatie die het model biedt over nauwkeurigheid of onzekerheid maakt een model statistisch. Deze informatie is heel nuttig in bijvoorbeeld statistische toetsen en risicoanalyse, mits die natuurlijk de modelveronderstellingen volgt. Het voldoet dan niet meer om alleen de deterministische component van een tijdreeksmodel te gebruiken.

Over modellen en hun beperkingen zei Martin eerder: "Er is geen koe zo bont of er zit wel een vlekje aan". George Box zei het destijds zo: "Essentially, all models are wrong, but some are useful". Validatie van een model is dan ook essentieel en geeft aan of het model toepasbaar is.

Martin sluit af met de wens en het advies voor een nieuwe NHV-werkgroep: ter bevordering, verspreiding en benutting van statistische kennis in de hydrologie en ter benutting van statistische kennis over onzekerheid bij het nemen van beslissingen in het (grond)waterbeheer. Martin sprak daarbij zijn voorkeur uit voor een studiegroep waarin inhoudelijke discussies worden gevoerd.

Presentatie Jos von Asmuth: Box-Jenkins versus PIRFICT in theorie en praktijk

Na een korte pauze volgt de beschouwende presentatie door Jos von Asmuth 'Het Box-Jenkins- versus PIRFICT-model in theorie en praktijk: integreren vs. differentiëren, wat is de toekomst?'

Jos staat allereerst stil bij het overlijden van Frans in 2022 en zijn oproep voor de werkgroep in 2011. Vervolgens benoemt hij de twee hoofdthema's van zijn verhaal: differentiëren en integreren. Differentiëren betreft onder andere verde- len of onderscheiden en integreren gaat over het samenvoegen van delen. Dit was ook de oproep van Frans: werk samen, je kunt het niet alleen!

Bij waarnemen is er vaak een verschil van focus: Forest or Trees (vrij vertaald: door de bomen het bos niet zien). De aanpak voor PIRFICT was enerzijds inte- greren (samenstellen van delen (invloeden)) en anderzijds differentiëren tussen verschillen in theorie en praktijk. De basis voor PIRFICT en van tijdreeksanalyse komt uit de statistiek, maar de begeleider van Jos, Kees Maas, introduceerde ook een fysieke, hydrologische component. De systeemtheorie (zie Wikipedia) vormt een belangrijk basis voor het samenstellen van de delen van PIRFICT en gaat over de onderlinge afhankelijkheid tussen en binnen systemen. Het ge- drag en de systeemgrenzen zijn dan belangrijk om te definiëren. Bronnen van inspiratie voor Jos waren het boek 'Signals & Systems: Continuous en Discrete' en de Unit Hydrograph (Nash, Dooge, Maas, Jury, etc.), die voortkomt uit de hydrologie: hoe vertaalt een eenheid neerslag zich in een afvoerreeks. Voor het integreren van statistiek en fysica zijn ook al suggesties te vinden in Box en Jenkins (1970), namelijk over gekoppelde reservoirs, of in Knotters en Bierkens (2000), over een ARX(1)-model voor een (lineaire) bodemkolom. Jos betoogt dat een grondwatermodel ook maar een tijdreeksmodel is en dat fysieke grondwa- termodellen baat kunnen hebben van integratie met een statistische aanpak. Porositeit kan bijvoorbeeld niet op microschaal (Navier-Stokes) gemodelleerd worden, maar wordt benaderd (Darcy en de waterbalans).

Jos benoemt het begrip emergentie (zie Wikipedia): een emergent verschijnsel doemt op door wisselwerking tussen de samenstellende onderdelen en heeft andere eigenschappen dan de componenten waaruit het is opgebouwd. Voor het gedrag op een hoger schaalniveau is niet per se kennis van de kleinere on- derdelen nodig. Soms worden complexiteit en andere patronen pas zichtbaar op een grovere schaal (bijvoorbeeld een mierenhoop). Op systeem-schaal kan je zo een eenvoudiger responsfunctie toepassen die voor een bepaald gebied geldt.

Jos refereert aan een stelling uit de brief van Frans van Geer in Stromingen over discrete versus continue transfer-ruismodellen: "continue tijdreeksmodellen leveren niet noodzakelijk betere resultaten op dan discrete tijdreeksmodel- len". Jos oppert dat wellicht een hybride benadering wenselijk is en pleit voor samenwerking vanuit de verschillende methoden. Als voorbeeld noemt hij een multilinear Nash-cascade model dat ook verschillende responsen samen neemt.

Vaak werken vakdisciplines langs elkaar, het biedt kansen om meer samen te werken (te integreren) en van elkaar te leren. Zo kan statistiek de fysica vooruit helpen. Bijvoorbeeld doordat het je in staat stelt beter gebruik te maken van de meetgegevens.

Er volgt een voorbeeld van een vergelijking tussen Box-Jenkins en PIRFICT. De responsfuncties in het voorbeeld kwamen qua vorm sterk overeen, een simulatie in de tijd gaf sterk vergelijkbare uitkomsten en ook de RMSE en RMSI toonden maar kleine verschillen. De BJ-modellen waren een fractie beter, maar de niet-equidistante mogelijkheden van PIRFICT gaven weer een (beperkte) meerwaarde. Bij valideren geeft het PIRFICT-model in dit voorbeeld iets betere resultaten. Dit komt volgens Jos vermoedelijk doordat er in het BJ-model meer parameters zijn gebruikt met risico van overfitting. Martin vraagt of er ook is gekeken naar de onzekerheidsinformatie die beide modellen bieden? Is er bijvoorbeeld gevalideerd dat 95% van de waarnemingen inderdaad binnen het 95%-betrouwbaarheidsinterval ligt? En Eit vraagt of er identificatie is geweest waarbij is geconstateerd dat 10 omega's het beste resultaat gaf? Hij verwacht dat er bij een optimaal model geen sprake is van overfitting.

Dat de Gamma-functie vaak zo goed werkt, ook voor verschillende processen, heeft volgens Jos met de Centrale limietstelling en de scheefnormale convolutielimiet te maken. Hij verwijst voor details naar zijn proefschrift. Jos nodigt uit zelf vergelijkingen uit te voeren met Menyanthes waarin ook functionaliteit zit voor Box-Jenkins. De data zijn nog beschikbaar en Menyanthes biedt functionaliteit voor zowel PIRFICT en Box-Jenkins. Hij verwijst nog naar de STO-WA-handleiding uit 2021 voor een overzicht van de voor- en nadelen van beide methoden.

Jos stelt nogmaals voor om methoden te integreren met een 'ensemblebenadering' of hybride aanpak (statistiek met machinelearning)? *Ensemble forecasting* kan wellicht een praktische methode zijn om inzichten te combineren. Hij roept op om het zo gemakkelijk mogelijk te maken. Zo kan zelfs het gemiddelde heel moeilijk worden in een uitspraak als "de gemiddelde mens heeft minder dan twee benen". Tom brengt hierop in dat versimpeling vaak samengaat met keuzes die vooraf al gemaakt zijn door anderen (zoals de softwareontwikkelaar) en kan zorgen voor een soort gemakzucht. Dit kan ervoor zorgen dat niet meer duidelijk is wat er onder de motorkap gebeurt terwijl hier essentiële keuzes gemaakt zijn. Jos antwoordt dat Pastas een mooi voorbeeld is van hoe het ook kan. Het is opensourcesoftware en je kan zien wat er onder de motorkap zit.

Afsluiting

In de vragenronde volgt nog een korte discussie als Eit benoemt dat het (continue) ruismodel van PIRFICT uitgaat van een e-macht. Bij modelleren op dagbasis is er vaak veel autocorrelatie en gaat het ruismodel bijna alles verklaren, op maandbasis is dat al veel minder. Dit is ook bekend als het unit root probleem. Jos geeft aan dat phi (een parameter van het ruismodel) nooit exact 1 wordt doordat je met een e-macht werkt. Eit stelt vervolgens dat bijna 1 al fout is, waarop Jos aangeeft dat Menyanthes dit pragmatisch oplost door het ruismodel pas te bepalen ná het deterministische model omdat het zonde is om data weg te gooien. Eit reageert dat er vaak geen aanvullende informatie zit in die extra

metingen. Zelf zorgt hij dat phi niet hoger wordt dan 0,9 (bij modellering op dagbasis). Jos sluit af met de oproep van Frans: de toekomst maak je samen! Dan volgt een dankwoord van Koen namens de werkgroep aan Stefanie Bus voor het voorzitterschap en het organiseren van deze laatste discussiemiddag van de NHV-werkgroep tijdreeksanalyse. Ze krijgt het boek van Box en Jenkins, afkomstig uit de bibliotheek van Londen (echter nooit uitgeleend). En dan begint de borrel.

Alle presentaties worden beschikbaar gesteld via de NHV-website. Geïnteresseerden in een nieuwe werkgroep naar het voorstel van Martin worden opgeroepen om zich te melden bij het NHV-bestuur.

Literatuur

Boek:

- Box, G.E.P., G.W. Jenkins, G.C. Reinsel en G.M. Ljung** (2016) Time series analysis: forecasting and control. Fifth edition. Wiley, Hoboken, New Jersey.
- Howell Tong** (1990) Non-Linear Time Series: A Dynamical System Approach (Oxford Statistical Science Series, 6). Oxford University Press (UK)
- Hans Gehrels** (1999) Groundwater level fluctuations. Separation of natural from anthropogenic influences and determination of groundwater recharge in the Veluwe area, the Netherlands
- Martin Knotters** (2001) Regionalised time series models for water table depths
- Wilbert Berendrecht** (2004) State space modeling of groundwater fluctuations
- Rodrigo Lilla Manzione** (2007) Regionalized spatio-temporal modelling of water table depths in the Brazilian cerrado
- Jos von Asmuth** (2012) Groundwater system identification through time series analysis
- Johan van de Wouw** (2012) Spatial prediction of water table dynamics in Flanders
- Christophe Oberfell** (2019) Time-series analysis to estimate aquifer parameters, recharge, and changes in the groundwater regime
- Raoul Collenteur** (2022) Improved time series analysis of groundwater data through open-source software and better process representations

Tijdschrift:

- Knotters, M. en M.F.P. Bierkens** (2000) Physical basis of time series models for water table depths, Water Resources Research 36(1): 181-188.
- Frans van Geer, Paul Baggelaar en Peter Defize** (1988) Toepassing van tijdreeksanalyse op meetreeksen van de stijghoogte; in: H2O (21), 1988, nr. 16
- Frans van Geer** (1988) Verlagsingsberekening met transfermodellen rond de winplaats Spannenburg; in: H2O (21), 1988, nr. 16
- Frans van Geer** (2002) Over discrete en continue Transfer/ruis modellen; in: Stromingen 8 (2002), nr. 3
- Paul Baggelaar** (1988) Tijdreeksanalyse bij verlagsingsonderzoek: principe en voorbeelden; in: H2O (21), 1988, nr. 16

Auteurs

TOM HOOGLAND

Specialist Hydrologie bij Vitens

tom.hoogland@vitens.nl

KOEN VAN DER HAUW

Adviseur Geohydrologie bij SWECO

koen.vanderhauw@sweco.nl