

RIJKSINSTITUUT VOOR VOLKSGEZONDHEID EN MILIEUHYGIENE
BILTHOVEN

Rapport nr. 723001007

**De Rol van Gevoeligheidsanalyse
en Identificeerbaarheidsanalyse
in Modelcalibratie**

P.H.M. Janssen, P.S.C. Heuberger

Maart 1992

Dit onderzoek werd verricht in opdracht en ten laste van de Stuurgroep Verzuring in het kader van het Additioneel Programma Verzuring 3-de fase, project nr. 723001.

Verzendlijst

1. Stuurgroep Verzekering
2. Directeur Generaal Milieubeheer
3. Plaatsvervangend Directeur Generaal Milieubeheer
4. Directeur Generaal van de Volksgezondheid
5. Drs. H. Marseille (VROM)
6. Ir. G.J. Heij (RIVM)
7. Dr. ir. F. Berendse (CABO)
8. Dr. ir. G.M.J. Mohren (De Dorschkamp)
9. Drs. J.R. van Veen (De Dorschkamp)
10. Dr. G.W. Heil (Resource Analysis)
11. Drs. H. Scholten (DIHO, Yerseke)
12. Dr. P. Herman (DIHO, Yerseke)
13. Ir. A.A.M. Jansen (GLW, Wageningen)
14. Dr. M.J.W. Jansen (GLW, Wageningen)
15. Dr. H. van der Voet (GLW, Wageningen)
16. Ir. J. Taat (Grondmechanica Delft)
17. Drs. C.I. Bak-Eijsberg (Rijkswaterstaat, DBW/RIZA, Lelystad)
18. Dr. ir. A.W. Heemink (Rijkswaterstaat, DGW-Den Haag)
19. Ir. J.W. Pulles (Projectleider MANS, Rijkswaterstaat, Directie Noordzee; Rijswijk)
20. Dr. A. Breeuwsma (Staring Centrum)
21. Ir. J. Kros (Staring Centrum)
22. Drs. C. van der Salm (Staring Centrum)
23. Ir. W. de Vries (Staring Centrum)
24. Dr. C.F. de Valk (Waterloopkundig Lab)
25. Dr. D. Dee (Waterloopkundig Lab)
26. Ir. T. Schilperoort (Waterloopkundig Lab)
27. Dr. ir. J. van Schuppen (CWI-Amsterdam)
28. Prof. dr. ir. J. Grasman (LU Wageningen)
29. Drs. E.M.T. Hendrix (LU Wageningen)
30. Prof. dr. L. Hordijk (LU Wageningen)
31. Dr. ir. K. Keesman (LU Wageningen)
32. Ir. S.L.J. Mous (LU Wageningen)
33. Prof. dr. G. van Straten (LU Wageningen)
34. Ir. L.G. Wesselink (LU Wageningen)
35. Dr. S.E.A.T.M. van der Zee (LU Wageningen)
36. Prof. dr. ir. drs. O.J. Vrieze (RU Limburg)
37. Depôt Nederlandse Publicaties en Nederlandse Bibliografie
38. Directie RIVM
39. Prof. dr. ir. C. van der Akker
40. Ir. F. Langeweg
41. Dr. Th.G. Aalbers
42. Drs. T. Aldenberg
43. Drs. A.H. Bakema
44. Ir. R. v.d. Berg
45. Ing. G.P. Beugelink
46. Drs. R.O. Blaauboer
47. Ir. K.F. de Boer
48. Ir. G.M.F. Boermans
49. Dr. L.C. Braat
50. Drs. J.H. Canton
51. Dr. ir. R.F.M.J. Cleven
52. Dr. ir. H.J.G.M. Derks
53. Ir. G. van Drecht
54. Drs. H.C. Eerens
55. Drs. M.G.J. den Elzen
56. Drs. J.C.H. van Eijkeren
57. Ir. B. Fraters
58. Drs. A. van der Giessen
59. Dr. L.A. van Ginkel
60. Ir. P. Glasbergen
61. Drs. J. de Greef
62. Dr. ir. J.J.M. van Grinsven
63. Ir. B.J. de Haan

64. Ir. C. van Heerde
65. Drs. O. van der Heijden
66. Dr. J.-P. Hettelingh
67. Drs. S.H. Heisterkamp
68. Drs. J.A. Hoekstra
69. Ir. R.T. Hoogenveen
70. Dr. R. Hoogerbrugge
71. Dr. J.C. Jager
72. Dr. O. Klepper
73. Drs. A.G.A.C. Knaap
74. Ir. O.M. Knol
75. Ir. J.M. Knoop
76. Drs. L.H.M. Kohsiek
77. Dr. ir. H.W. Köster
78. Drs. P.R.G. Kramer
79. Ir. G.J.J. Kreileman
80. Dr. H.A.M. de Kruijf
81. Dr. ir. E. Lebret
82. Dr. F.A.A.M. de Leeuw
83. Ir. G.M.H. Laheij
84. Ir. A. Leijnse
85. Dr. J.F.M.M. Lembrechts
86. Ir. A.M.A. van der Linden
87. Ir. J.B.H.J. Linders
88. Dr. ir. D. van Lith
89. Dr. ir. D. van der Meent
90. Drs. R. Meijers
91. Drs. A. Minderhoud
92. Ir. J. van Minnen
93. Ir. J.H.C. Mülschlegel
94. Drs. A.C.M. de Nijs
95. Drs. H. Noordijk
96. Drs. M.J. Postma
97. Dr. M.J.M. Pruppers
98. Dr. ir. J. Rotmans
99. Ir. F.J. Sauter
100. Drs. R. Sanders
101. Drs. H.J. van Scheindelen
102. Prof. dr. H.J. Scholten
103. Dr. H. Slaper
104. Dr. W. Slob
105. Ing. J. Slootweg
106. Ir. A.F.M. Slot
107. Ir. F. Swartjes
108. Drs. A. Tiktak
109. Ir. C. Toet
110. Dr. ir. G.J.M. Uffink
111. Dr. P.A.M. Uyt de Haag
112. Dr. E.J.M. Veling
113. Drs. K. van Velze
114. Drs. T.G. Vermeire
115. Dr. ir. C.W. Versluijs
116. Dr. H.J.M. de Vries
117. Ir. H.J. van de Wiel
118. Drs. W.J. Willems
119. Drs. F.G. Wortelboer
120. Drs. M.Z. Zeilmaker
121-126 Auteurs
127. Hoofd Bureau Voorlichting en Public Relations
128. Bureau Projecten- en Rapportenregistratie
129. Bibliotheek RIVM
130-135 Reserve exemplaren

Inhoudsopgave

Verzendlijst	i
Inhoudsopgave	iii
Abstract	iv
Samenvatting	v
1 Inleiding	1
2 Model en identificatiecriterium	4
3 De rol van gevoeligheidsanalyse in calibratie	10
4 Identificeerbaarheidsanalyse van het identificatiecriterium	15
4.1 Inleiding	15
4.2 Identificeerbaarheid	17
5 Conclusies en aanbevelingen	21
Appendices	23
A Gevoeligheidsanalyse voor modelcalibratie	23
B Uitwerking van een methode voor identificeerbaarheidsanalyse	26
B Enkele opmerkingen over identificeerbaarheid	28
Referenties	32

Abstract

Model calibration is usually an important part of the modelling process. Performing this activity in an adequate way will increase the model quality and renders useful information for further model analyses (e.g. for uncertainty analysis with the software package UNCSAM which has recently been released).

A well structured and directed approach, supported by general guidelines and techniques, will be especially beneficial for practical calibration studies.

Particularly the study of the sensitivity and the identifiability of the parameters (e.g. model coefficients, initial conditions) has to be a relevant part of model calibration. Such a study can reveal potential problems already during the early stages of the model calibration process, and can offer useful suggestions to prevent their occurrence (fixing insensitive parameters; additional data collection; improving the experimental design; model adaptation, software improvement). It will also be useful in post-calibration studies, e.g. when analysing the problems of unsuccessful calibration runs.

Several simple methods are suggested for performing these analyses for a general class of calibration problems. The advantages and disadvantages of these methods are briefly discussed. In particular attention is given to the problem of local versus global analyses in the parameter space. Currently much work is done in preparing these techniques for application in various calibration studies.

Samenvatting

Modelcalibratie vormt in veel gevallen een belangrijk onderdeel van het modelleringsproces. Een verantwoorde uitvoering van deze activiteit komt de kwaliteit van het verkregen model ten goede, en draagt bovendien nuttige informatie aan voor verdere modelanalyses (bijv. voor onzekerheidsanalyse met het recentelijk beschikbaar gekomen programma-pakket UNCSAM).

Bij het uitvoeren van modelcalibratie zal men, net als bij modelanalyse, veel baat hebben bij een gestructureerde en gerichte aanpak, ondersteund door algemeen bruikbare richtlijnen en technieken.

Met name zal het onderzoek naar de gevoeligheid en identificeerbaarheid van de parameters (bijv. modelcoëfficiënten, beginvoorwaarden) een belangrijk onderdeel van de modelcalibratie dienen uit te maken. Reeds in een vroeg stadium kan zo'n onderzoek informatie verschaffen over te verwachten problemen bij calibratie, en kunnen de bevindingen suggesties aandragen om deze problemen te voorkomen (fixeren van ongevoelige parameters; additionele data-verzameling; verbetering van experimenteel ontwerp; modelaanpassing; software verbetering). Ook bewijst zo'n onderzoek zijn nut bij het analyseren van de problemen bij niet succesrijke calibratie studies.

Enkele relatief eenvoudige methoden worden gesuggereerd die gebruikt kunnen worden om deze analyses uit te voeren bij een grote klasse van calibratieproblemen. De voor- en nadelen van deze methoden komen kort aan de orde. Met name wordt aandacht besteed aan de problematiek van locale versus globale analyses in het parameterdomein. Aan de operationalisering en het gebruik van deze technieken bij diverse calibratie-studies wordt momenteel volop gewerkt.

1 Inleiding

Wiskundige modellering speelt tegenwoordig een belangrijke rol in veel toepassingsgericht onderzoek. Enerzijds dwingt modelvorming de onderzoeker tot het structureren van het onderzochte probleem en het maken van gerichte en expliciete keuzes m.b.t. de belangrijke (deel)aspecten, tot het kwantificeren van relaties¹, tot het expliciet maken van veronderstellingen die anders vaag en verborgen blijven etc. Anderzijds kunnen modellen bijdragen tot het kwantitatief beschrijven van situaties, tot het verschaffen van dieper inzicht in een probleem, tot het verduidelijken van (onvermoede) relaties tussen diverse aspecten etc. (beschrijving; diagnose). Ook maakt het gebruik van modellen een onderzoek mogelijk naar de gevolgen van eventuele ingrepen of maatregelen zonder dat deze nog daadwerkelijk in de praktijk geactualiseerd zijn (prognose; simulatie; scenario-studies); bovendien kan worden nagegaan welke maatregelen genomen dienen te worden om gewenste situaties te bereiken (optimalisatie; regeling).

Bij het proces van modelvorming worden we geconfronteerd met het feit dat ten gevolge van o.a. de complexiteit van het beschouwde probleem, de onvolledigheid van onze kennis van de problematiek, de onvolledigheid en onnauwkeurigheid van beschikbare meetgegevens, het onzekere c.q. variabele karakter van de bestudeerde verschijnselen etc., enerzijds het model slechts een *benaderende* beschrijving van de werkelijkheid kan geven, en dat anderzijds het model een aantal grootheden bevat (bijv. beginvoorwaarden, modelcoëfficiënten) waarvan de waarden *niet* altijd in voldoende mate *bekend* zijn². Om toch tot voldoende nauwkeurige uitspraken te komen, probeert men daarom instelwaarden c.q. ranges voor deze grootheden te zoeken die ervoor zorgen dat de bijbehorende modeluitkomsten zoveel mogelijk overeenkomen met de beschikbare meetgegevens³. Dit belangrijke onderdeel van het modelleringsproces wordt vaak aangeduid met de term *modelcalibratie*⁴.

¹Het behoeft natuurlijk geen betoog dat een kwantitatieve aanpak niet altijd adequaat zal zijn. In diverse gevallen zal een kwantitatieve beschrijving onmogelijk zijn, c.q. slechts een magere afspiegeling geven van het wezen van het bestudeerde verschijnsel. Wiskundige modellering is in deze situaties vaak misplaatst ('Beter geen model, dan een slecht model', op basis waarvan onverantwoorde conclusies getrokken worden).

²Bovendien kan ook nog de specifieke structuur van een model ter discussie staan.

³In dit kader is het bovendien van belang om een indicatie van de betrouwbaarheid van de modelresultaten te kunnen geven, zeker in situaties waarin de onderliggende processen een grote variabiliteit vertonen.

⁴Het proces van het vastleggen van het model in een meer definitieve vorm d.m.v. het afstemmen van de modelresultaten op de meetgegevens, in het licht van de beoogde toepassing en op basis van a priori kennis, wordt in de literatuur ook aangeduid met het begrip *systeemidentificatie*. Dit proces heeft niet enkel betrekking op het kiezen/schatten van de onbekende parameterwaarden en begintoestanden. Ook de keuze van modelstructuur c.q. modelparametrisatie en identificatie criteria speelt een grote rol. Verder zijn ook experimenteel ontwerp en validatie onlosmakelijk verbonden met systeemidentificatie.

In de praktijk wordt een groot aantal methoden gebruikt voor modelcalibratie, variërend van eenvoudige handmatige procedures tot geavanceerde geautomatiseerde methoden. Gezien de nadelen die verbonden zijn aan handmatige procedures (sterk subjectief karakter; moeilijk reproduceerbaar; bewerkelijk en complex indien het aantal te calibreren parameters groot (> 2) is; niet voldoende kwantitatief inzicht in de nauwkeurigheid van de geschatte parameters), zal het gebruik van systematische en automatiseerbare procedures in veel gevallen de voorkeur verdienen. Dit zal zich weerspiegelen in de diverse fasen die doorgaans deel uitmaken van *modelcalibratie*, te weten

1. *Probleemformulering:*

Welke doelfunctie (*identificatiecriterium*) wordt gehanteerd om de discrepantie (fit) tussen model en werkelijkheid c.q. data te meten, ook met het oog op de later beoogde modeltoepassingen; welke modelgrootheden, c.q. resultaten, worden bij de definitie van deze doelfunctie beschouwd, en hoe worden ze meegewogen; hoe wordt vervolgens het calibratie-probleem gedefinieerd (bijv. als optimalisatie van de doelfunctie), etc.

2. *Data-acquisitie en -voorbewerking:*

Wat, waar, wanneer en hoe meten (experimental design⁵); welke data worden gebruikt voor calibratie c.q. validatie⁶?; het gebruik van data-filtering c.q. -smoothing; detectie outliers etc.

3. *Keuze van modelstructuur en parametrisatie:*

In welke modelset(s) wordt naar een adequaat model gezocht (*type* model, bijv. deterministisch/stochastisch; dynamisch/statisch; lineair/niet-lineair; etc.); hoe zijn deze modellen geparametriseerd; welke parameters dienen geschat te worden; welke beperkingen worden aan de parameters en de variabelen opgelegd (constraints) etc.

4. *Selectie van een geschikt model binnen de modelset(s):*

Bijv. keuze van zoekalgoritme t.b.v. optimalisatie van doel-functie; keuze van

Hoewel het begrip modelcalibratie (ook wel aangeduid als *model-ijking*) in een aantal studies in een nauwer verband gehanteerd wordt (enkel betrekking hebbend op het schatten van de parameters c.q. de beginvoorwaarden), zullen we het in dit rapport in breder verband gebruiken, en het als synoniem van het begrip systeemidentificatie opvatten.

⁵Soms is er van experimental design geen sprake en moet met de beschikbare data worden volstaan.

⁶Om een verantwoorde validatie van het gecalibreerd model te krijgen verdient het aanbeveling om de data, indien mogelijk, te splitsen in een deel dat voor calibratie gebruikt wordt en een deel dat voor validatie gebruikt wordt. Liefst dienen deze twee data-sets onafhankelijk van elkaar te zijn (kruis-validatie). Het behoeft geen betoog dat dit slechts mogelijk is indien er ruimschoots voldoende (representatieve) data beschikbaar zijn, een conditie die voor veel milieu- en volksgezondheidsstudies vaak niet opgaat.

methode voor nauwkeurighedsanalyse van geschatte parameters (betrouwbaarheidsintervallen), uitvoeren van de optimalisatie, indicatie van de betrouwbaarheid van geschatte parameters⁷, etc.

5. *Beoordeling (validatie)* van gecalibreerd(e) model(len):
Bijv. residuen-test; lack of fit tests; betrouwbaarheidsintervallen; kruis-validatie; etc.

Ten einde een meer gestructureerde en gerichte aanpak van modelcalibratie te stimuleren binnen het volksgezondheid- en milieu onderzoek bij het RIVM, wordt momenteel bij het CWM⁸ gewerkt aan het formuleren van richtlijnen en het operationaliseren van technieken die tijdens de diverse fasen van modelcalibratie nuttig gebruikt kunnen worden. In dit kader wordt in dit rapport ingegaan op de rol die gevoeligheidsanalyse en identificeerbaarheidsanalyse van parameters hierbij kunnen spelen, met name m.b.t. de punten 1-3 in het bovenstaande. Deze analyses richten zich o.a. op het schatbaar zijn van de parameters binnen de gegeven configuratie van data, model en identificatiecriterium, en kunnen nuttige suggesties aandragen m.b.t. de keuze van experimenteel ontwerp (data), modelparameters en identificatiecriteria.

We beperken ons tot modelcalibratie die verloopt via het *optimaliseren* van een doelfunctie (identificatiecriterium), een formulering die veelvuldig gehanteerd wordt bij calibratie (bijv. het bepalen van een model met de *beste fit* tot de data). In hoofdstuk 2 wordt hiervoor de context geschetst. Daarna wordt in hoofdstuk 3 de rol van gevoeligheidsanalyse besproken. Vervolgens komt in hoofdstuk 4 de identificeerbaarheidsanalyse aan de orde, waarbij een eenvoudige operationele definitie van het begrip identificeerbaarheid wordt gehanteerd die samenhangt met het lokaal uniek zijn van de minima van het identificatiecriterium. In hoofdstuk 5 volgen tenslotte de conclusies en aanbevelingen. De appendices bevatten enkele additionele beschouwingen en uitwerkingen van het materiaal uit de hoofdtekst.

Onze uiteenzetting is voornamelijk methodologisch georiënteerd en geeft inzicht in de aanpak die bij het ontwikkelen en operationaliseren van technieken voor calibratie-studies zal worden toegepast. Een expliciete illustratie aan de hand van praktijkvoorbeelden volgt in een later stadium, wanneer de geschetste methodieken daadwerkelijk gebruikt gaan worden, bijv. bij modelcalibratie studies voor diverse milieuthema's (verzuring, vermisting etc.).

⁷Deze informatie is o.a. van belang om (in een later stadium) de betrouwbaarheid/onzekeerheid van de modelresultaten te kunnen beoordelen. Hierbij kan nuttig gebruik worden gemaakt van het recentelijk beschikbaar gekomen programmapakket UNCSAM (zie Janssen et al. [1991]).

⁸CWM=Centrum voor Wiskundige Methoden

2 Model en identificatiecriterium

Vele soorten en vormen van wiskundige modellen worden gebruikt om diverse aspecten (bijv. toestand en gedrag) van velerlei processen en systemen te onderzoeken. De specifieke keuze voor een bepaald model, c.q. voor een bepaalde klasse van modellen wordt bepaald door een groot aantal factoren, bijv.

- Het beoogde gebruik/toepassing van het model⁹.
- De beschikbare kennis over de processen en systemen.
- De beschikbare data.
- De beschikbaarheid van tijd en middelen.
- De ervaring van de modelleur(s).
- Extern opgelegde randvoorwaarden m.b.t. modelleren (bijv. model dient gekoppeld te worden met andere modellen etc.; ondersteuning bij modelontwikkeling).
- De aanwezigheid van hardware en software faciliteiten (bijv. ‘modelbouw en optimalisatie tools’).
- De persoonlijke voorkeuren van de modelleur(s).

Het behoeft geen betoog dat deze factoren niet alle een even grote rol zullen spelen tijdens het modelleringsproces; helaas vindt in de praktijk hun onderlinge afweging niet altijd op rationele en/of eigenlijke gronden plaats.

Zo zien we vaak dat er een grote onbalans kan optreden tussen de complexiteit van een ontwikkeld model en de beschikbaarheid van data (meetgegevens). Vanuit bijv. een streven naar wetenschappelijke volledigheid worden modellen op een veel dieper detail-niveau ontwikkeld dan qua meetgegevens ooit kan worden ondersteund. Dit heeft tot gevolg dat men over een groot aantal aspecten van het model kwantitatief in het duister tast. hetgeen de voorspellingskracht van het model kan aantasten (grote onzekerheid). Het is ons inziens zinvol om bij het modelleren terdege rekening te houden met dit spannings-veld tussen modelcomplexiteit en data-beschikbaarheid, en daarbij met name het beoogde gebruik van het model als leidraad te laten fungeren.

Zo zal het vaak veel verstandiger zijn om het model zo ‘grof’ (robuust) mogelijk te houden (en daarmee het aantal parameters klein) en de aandacht te richten op de

⁹Dit hangt uiteraard nauw samen met de te beantwoorden vraagstelling. Daarbij dient onderkend te worden dat voor verschillende toepassingen ook vaak verschillende modellen gebruikt dienen te worden. Zo zal een model dat ontworpen is om korte termijn voorspellingen te verrichten, niet altijd geschikt zijn voor lange termijn predicties

grootheden die voor de studie direct van belang zijn¹⁰. Uiteraard zal e.e.a. gevolgen hebben voor het gebruik en de interpretatie van de modelgrootheden: bij werken op een ruw (hoog) aggregatieniveau dient men voorzichtig te zijn met het toekennen van fysische betekenis aan bepaalde grootheden, zeker als ze worden gebruikt om ‘acceptabele’ waarden van parameters te definiëren¹¹.

Terwille van de discussie hierna presenteren we allereerst het model en het identificatiecriterium in een meer expliciete vorm. We beperken ons bij de presentatie tot *deterministische* modellen.

We veronderstellen dat de *modeloutputs*¹² $y_M(\cdot)$ gegeven zijn als functie¹³ van de bekende c.q. gemeten modelinputs (external forcings) \mathcal{D}_{inp} , de onbekende (te schatten) parameters θ (bijv. beginvoorwaarden, randvoorwaarden, model-coëfficiënten etc.), en van additionele modelgrootheden α waarover in principe kennis/informatie beschikbaar is (bijv. beginvoorwaarden, modelcoëfficiënten etc. waarvan de waarden bekend zijn):

$$y_M(i; \theta) = H(\theta, \alpha, \mathcal{D}_{\text{inp}}(i)) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2.1)$$

De index i in bovenstaande vergelijking kan slaan op tijd en/of locatie en/of individu waarop de modeloutput betrekking heeft. De grootheid $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ geeft de modelinput weer, die betrekking heeft op de betreffende modeloutput $y_M(i; \theta)$. We nemen aan dat deze grootheid bekend is c.q. gemeten kan worden. Verder veronderstellen we dat de modeloutput $y_M(i; \theta)$ waarden aanneemt in R^q , d.w.z. y_M is een q -dimensionaal signaal (multi-sigitaal modeloutput; bijv. concentratie metingen van diverse stoffen), en dat de parameter vector θ waarden in R^p kan aannemen. Evenzo kunnen we veronderstellen dat de modelinputs $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$, respectievelijk de grootheden α waarden aannemen in R^{m_i} resp. R^s . Dit is echter voor de verdere discussie niet wezenlijk van belang. Bovendien zullen we voor de notationale eenvoud de afhankelijkheid van $y_M(\cdot; \theta)$ voor $\alpha, \mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ niet expliciet weergeven.

Verder nemen we aan dat er van bovenstaande modeloutputs N metingen¹⁴ beschikbaar zijn:

$$y(i) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2.2)$$

¹⁰Indien men bijv. uitspraken dient te doen over jaargemiddelde lange termijn verwachtingen, dan is het i.h.a. zinvoller om te werken met jaargemiddelden i.p.v. daggemiddelden. Dit ‘filter-effect’ voorkomt dat er allerlei extra onzekerheden geïntroduceerd worden door op een overbodig detail-niveau te werken.

¹¹Wat is bijv. de betekenis van een ‘karakteristieke’ diffusie-coëfficiënt, reactieconstante etc., en kan deze in de praktijk wel direct gemeten worden? Vergelijk het verwante probleem van het opschalen van laboratoriumresultaten naar een veldsituatie.

¹²Modelgrootheden die corresponderen met observeerbare/meetbare uitgangssignalen van het bestudeerde systeem, bijv. concentraties, hoeveelheden, fluxen, temperaturen etc.

¹³De preciese vorm van dit functionele verband laten we in het midden. Het model kan bijv. gegeven zijn in de vorm van een stelsel differentiaalvergelijkingen, algebraïsche vergelijkingen etc.

¹⁴Dit kunnen ook literatuurgegevens zijn of data/resultaten van referentie modellen.

Modelcalibratie vindt plaats door de modelresultaten $y_M(i; \theta)$ te vergelijken met de meetresultaten $y(i)$, en door een parameterwaarde θ te zoeken die een optimale, c.q. acceptabele *fit* geeft tussen model en meetresultaten.

In het algemeen wordt deze fit in een criterium uitgedrukt dat de *discrepantie* tussen data en model weergeeft. De keuze/vorm van dit criterium dient zoveel mogelijk de *beoogde modeltoepassing*¹⁵ te weerspiegelen (bijv. via de keuze en de weging van modeloutputs die een rol spelen). We geven ten behoeve van de verdere discussie het criterium weer als een specifieke functie $F(\cdot, \cdot)$ van de data $y(\cdot)$ en de modeloutputs $y_M(\cdot; \theta)$:

$$C(\theta) = F(y(\cdot), y_M(\cdot; \theta)) \quad (2.3)$$

waarbij we door $C(\cdot)$ als functie van θ te schrijven aangeven dat het criterium een functie is van de modelparameters θ (indirect via $y_M(\cdot; \theta)$ ¹⁶). Ook hier laten we de afhankelijkheid van het criterium voor de modelinput-data (\mathcal{D}_{inp}), en voor de a priori gegevens (α) terwille van de notationale eenvoud achterwege.

Een gangbaar voorbeeld van een criterium is het *gewogen kwadraten-som criterium*¹⁷ van de vorm:

$$C(\theta) = \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \|y(i) - y_M(i; \theta)\|_{\Omega}^2 \quad (2.4)$$

waarbij voor $x \in R^q$

$$\|x\|_{\Omega}^2 = x^T \cdot \Omega \cdot x \quad (2.5)$$

een (gewogen) maat is voor de lengte/grootte van x (x^T duidt op de getransponeerde vector x (rijvector)). Hierbij is Ω een $q \times q$ dimensionale symmetrische positief-definiëte matrix (weegmatrix); $w(i) \geq 0$ is een weegfactor die het belang van de diverse metingen $y(i)$ aangeeft.

Calibratie (parameter-schatting) komt nu vaak neer op het minimaliseren van het criterium over de parameter-set Θ (ruimte van acceptabele parameter waarden), die een deel is van R^p ($\Theta \subset R^p$):

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta \in \Theta} C(\theta) \quad (2.6)$$

¹⁵Uiteraard kan de beschikbaarheid en representativiteit van de meetgegevens (van de modelinputs en outputs) hierbij een belangrijke beperkende factor vormen. Indien deze data niet voldoende representatief zijn om de *hele* range van het systeemgedrag adequaat te karakteriseren (de meetdata bestrijken bijv. slechts een klein deel van de hele model input-output ruimte), dan kan dit tot gevolg hebben dat het gecalibreerde model bij het doorrekenen van geheel nieuwe, nog niet opgetreden situaties, grote fouten/onzekerheden kan geven. Het is daarom van groot belang om aan te geven wat een adequate toepassingsrange voor het gecalibreerde model is. Met name bij toekomstverkenningen studies zullen deze zaken een grote rol spelen.

¹⁶We kunnen deze beschouwing eenvoudig uitbreiden tot de situatie waarbij C ook nog *direct* van θ afhangt [$C(\theta) = \tilde{F}(y(\cdot), y_M(\cdot; \theta), \theta)$]. Dit kan bijv. optreden in situaties waarbij a priori informatie over de onbekende parameters expliciet in het criterium wordt opgenomen.

¹⁷Dit criterium behoort tot de klasse van *output-error* criteria, omdat het gesteld is in termen van de 'modeloutput errors' $y(i) - y_M(i; \theta)$.

d.w.z. het zoeken van het model met de beste fit (volgens $C(\cdot)$ ¹⁸) op de data.

Voor het zoeken van de modelparameter $\hat{\theta}$ die de beste fit geeft, wordt veelal gebruik gemaakt van numerieke optimalisatie routines. Indien de functie $C(\theta)$ als functie van θ voldoende glad is, dan zijn met name optimalisatie methoden te prefereren die gebruik maken van informatie over de eerste c.q. tweede afgeleiden van $C(\theta)$ naar θ . Deze methoden zullen in het algemeen sneller naar een (locaal) minimum convergeren dan methoden die slechts gebruik maken van informatie over $C(\theta)$ zelf. Ook spelen de eerste en tweede afgeleiden een rol bij de operationele identificeerbaarheidsdefinitie die in hoofdstuk 4 gehanteerd zal worden. We werken daarom tot slot de uitdrukkingen voor deze afgeleiden uit voor het gewogen kwadraten-som criterium uit (2.4). Hierbij nemen we aan dat de afgeleiden die in de uitdrukkingen voorkomen alle bestaan (d.w.z. de modeloutput $y_M(i; \theta)$ is voldoende vaak differentieerbaar naar θ).

Onder deze aanname blijkt dat de eerste orde afgeleide van $C(\theta)$ naar de j -de component θ_j van de parametervector θ gelijk is aan:

$$\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_j} = -2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y(i) - y_M(i; \theta))^T \Omega \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \quad (2.7)$$

$$= -2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \text{trace} \left[\Omega \cdot \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \cdot (y(i) - y_M(i; \theta))^T \right] \quad (2.8)$$

waarbij de *trace*-operator van een $q \times q$ -matrix A gelijk is aan de som van zijn diagonaal-elementen:

$$\text{trace}(A) := \sum_{l=1}^q A_{l,l} \quad (2.9)$$

We werken tot slot de uitdrukking voor de *tweede orde* afgeleiden $\frac{\partial^2 C(\theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j}$ (Hessiaan) uit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C(\theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} &= 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \left(\frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_k} \right)^T \Omega \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \\ &\quad - 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y(i) - y_M(i; \theta))^T \Omega \frac{\partial^2 y_M(i; \theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} \end{aligned} \quad (2.10)$$

De eerste term van het rechter-lid in deze formule kan ook geschreven worden als $H_{k,j}^{(o)}(\theta)$, waarbij de $p \times p$ matrix $H^{(o)}(\theta)$ gedefinieerd is als:

$$H^{(o)} := 2 \cdot [X(\theta)]^T \cdot Q \cdot X(\theta) \quad (2.11)$$

¹⁸We veronderstellen dat $C(\theta)$ inderdaad een minimum aanneemt over Θ .

met $X(\theta)$ een matrix die is samengesteld uit de eerste orde afgeleiden van modeloutput y_M :

$$X(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_M(1;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial y_M(1;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial y_M(1;\theta)}{\partial \theta_p} \\ \frac{\partial y_M(2;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial y_M(2;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial y_M(2;\theta)}{\partial \theta_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_M(N;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial y_M(N;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial y_M(N;\theta)}{\partial \theta_p} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

en waarbij Q een $(q \cdot N) \times (q \cdot N)$ blok-diagonaal matrix is gevuld met de weegfactoren/matrices:

$$Q = \begin{bmatrix} w_1 \cdot \Omega & 0 & \dots & 0 \\ 0 & w_2 \cdot \Omega & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & w_N \cdot \Omega \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

$X(\theta)$ wordt ook wel de *gevoeligheidsmatrix* van $y_M(\cdot, \theta)$ genoemd.

Opmerking 2-1 $X(\theta)$ wordt gevoeligheidsmatrix genoemd omdat hij is uitgedrukt in termen van de partiële afgeleiden $\frac{\partial y_M(i;\theta)}{\partial \theta_j}$. Deze grootheden staan ook bekend als *gevoeligheidsfuncties*, en vormen in feite een maat voor de gevoeligheid van $y_M(i;\theta)$ voor variaties in θ_j . Immers, indien de grootheid $y_M(i;\theta)$ t.g.v. een variatie $\Delta\theta_j$ in θ_j een variatie vertoont van $\Delta y_M(i;\theta)$, dan is $\frac{\Delta y_M(i;\theta)}{\Delta \theta_j}$ een maat voor hoe gevoelig y_M op $\Delta\theta_j$ reageert. In de limiet $\Delta\theta_j \rightarrow 0$ wordt deze grootheid gelijk aan de eerste orde afgeleide $\frac{\partial y_M(i;\theta)}{\partial \theta_j}$.

■

We kunnen de matrix $H^{(\circ)}$ ook nog op een andere wijze schrijven, namelijk als:

$$H^{(\circ)} := 2 \cdot [\dot{X}(\theta)]^T \cdot \tilde{X}(\theta) \quad (2.14)$$

waarbij

$$\tilde{X}(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{y}_M(1;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \tilde{y}_M(1;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial \tilde{y}_M(1;\theta)}{\partial \theta_p} \\ \frac{\partial \tilde{y}_M(2;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \tilde{y}_M(2;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial \tilde{y}_M(2;\theta)}{\partial \theta_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \tilde{y}_M(N;\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \tilde{y}_M(N;\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial \tilde{y}_M(N;\theta)}{\partial \theta_p} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

de gevoeligheidsmatrix is in termen van de *getransformeerde* (c.q. gewogen) modeloutputs $\tilde{y}_M(i;\theta)$:

$$\tilde{y}_M(i;\theta) := \sqrt{w_i} \cdot R \cdot y_M(i, \theta) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2.16)$$

Hierbij is R een $q \times q$ -matrix, verkregen door decompositie van Ω (bijv. Cholesky decompositie; zie Golub en van Loan [1989]):

$$\Omega = R^T \cdot R \quad (2.17)$$

Bovenstaande afleidingen zullen ook een rol spelen in de identificeerbaarheidsbeschouwingen die in hoofdstuk 4 aan de orde komen. We merken tenslotte op dat men in de praktijk bij veel toepassingen in het algemeen niet in staat zal zijn de Hessiaan en de gevoeligheidsmatrices *exact* te bepalen. Voor hun berekening zal men toevlucht dienen te zoeken tot benaderende methoden. Zie hiervoor de volgende opmerking:

Opmerking 2-2 Er bestaan diverse methoden om de elementen van de gevoeligheids-matrix $X(\theta)$ te bepalen. We noemen er een viertal op (zie ook Yeh [1986]):

1. *Influence coefficient method*: De eerste orde partiële afgeleiden worden benaderd middels numerieke discretisatie, bijv. $\frac{\partial f(x)}{\partial x} \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2 \cdot \Delta x}$ voor een functie van een scalaire variabele x . Zie ook Gill et al. [1981].
2. *Local sensitivity analysis*: Indien men de parameters allereerst (locaal) simultaan varieert rondom een instelpunt θ^* , vervolgens de bijbehorende modeluitkomsten simuleert, en deze tenslotte via een eenvoudig lineair regressiemodel relateert aan de gevarieerde parameters:

$$y_M(i; \theta) \approx \beta_0 + \sum_{l=1}^p \beta_l \cdot \theta_l, \quad (2.18)$$

dan zullen de geschatte regressie-coëfficiënten β_l benaderingen zijn voor de partiële afgeleiden $\frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_l}$.

3. *Sensitivity equation method*: Via oplossing van de *gevoeligheidsvergelijkingen*, d.w.z. het stelsel vergelijkingen waaraan de gevoeligheidscoëfficiënten $(\frac{\partial y_M(\cdot; \theta)}{\partial \theta_j})$ voldoen. Zie bijv. Caracotsios en Stewart [1985], Janssen et al. [1990], voorbeeld 4.2-1.
4. *Variational method; adjoint state method*: Via het gebruik van een zogenaamd *geadjungeerd* model, dat sterk gelieerd is aan het oorspronkelijk model. De gevoeligheidscoëfficiënten kunnen nu uit de combinatie van het oorspronkelijke model met het geadjungeerde model worden opgelost. Zie Sun en Yeh [1990a], Yeh en Sun [1990] voor een toepassing hiervan bij grondwater-stromings en transport modellen.

De eerste twee methoden zijn i.h.a. minder nauwkeurig. Het additionele werk wat ervoor verricht hoeft te worden is echter gering, dit in tegenstelling tot de andere methoden die vereisen dat er extra stelsels vergelijkingen worden opgesteld en opgelost. Bij de derde methode kan in veel gevallen dankbaar gebruik worden gemaakt van de specifieke (d.w.z. lineaire) structuur van de gevoeligheidsvergelijkingen. De vierde methode resulteert vaak in het oplossen van een kleiner stelsel vergelijkingen dan de derde methode. Echter het opstellen (en oplossen) van deze vergelijkingen kan ingewikkeld zijn, met name bij gecompliceerde modellen.

De uiteindelijke keuze tussen deze methoden zal afhangen van een groot aantal factoren (vereiste nauwkeurigheid, vertrouwdheid met de methodiek, gecompliceerdheid van het oorspronkelijk model, vorm waarin het model beschikbaar is, ontwikkeltijd, rekentijd, aantal meetpunten, aantal parameters, verder gebruik van de informatie uit de gevoeligheidscoëfficiënten etc.). Op deze zaken zullen we hier niet nader ingaan.



3 De rol van gevoeligheidsanalyse in calibratie

Gevoeligheidsanalyse is gericht op het bestuderen van de vraag hoe modeloutputs (of functies daarvan) reageren op variaties in parameters, beginvoorwaarden, inputs etc.; zie ook Janssen et al. [1990]. Deze vraag is met name van belang in situaties waarin deze grootheden niet exact bekend zijn, c.q. niet rechtstreeks bepaald kunnen worden¹⁹.

Bij calibratie toepassingen is een dergelijke situatie aan de orde. Gevoeligheidsanalyse kan dan op een aantal punten een rol spelen:

1. Inzicht verschaffen in de keuze van het *experimenteel ontwerp* (d.w.z. wat, waar, wanneer, en hoe te experimenteren en meten).
2. Inzicht leveren in de keuze van *modeloutputs*, en het *identificatie-criterium*²⁰.
3. Inzicht geven in de keuze van de te schatten *parameters*.
4. Inzicht verschaffen in de gevolgen van *misspecificatie* van a priori gegevens (over bijv. inputs, parameters, etc.) voor model- en calibratie berekeningen.
5. Inzicht geven in de performance van de uitgevoerde calibratie studie (*post-calibratie studie*), en suggesties leveren voor verbetering.

Gebruik makend van de geschetste achtergrond uit hoofdstuk 2 bespreken we bovenstaande items in meer detail:

ad item 1: De resultaten van een gevoeligheidsanalyse kunnen op een eenvoudige en voor de hand liggende manier gebruikt worden t.b.v. het experimenteel ontwerp. Het is intuïtief duidelijk dat metingen van grootheden op tijdstippen en/of locaties waarop de parametergevoeligheden aanzienlijk zijn in het algemeen de meeste informatie over deze parameters zullen bevatten. Zie Beck [1987], Gentil [1982], Knopman en Voss [1987, 1988].

Naast deze heuristische techniek bestaan er ook diverse andere, meer formele aanpakken voor experimenteel ontwerp die gebaseerd zijn op het optimaliseren van een criterium. Dit criterium meet de performance van het experimenteel ontwerp m.b.t. een specifiek doel, bijv. model-discriminatie, parameter-schatting (nauwkeurigheid), model toepassing (predictie, monitoring, regeling).

¹⁹Ook speelt gevoeligheidsanalyse een rol in situaties waarin men via manipulatie/maatregelen de ingestelde waarden wil veranderen om het gedrag van het gemodelleerde proces/systeem te beïnvloeden.

²⁰In veel gevallen verloopt calibratie aan de hand van een criterium dat de fit/discrepancie beschrijft tussen meetdata en modelberekeningen. Calibratie wordt geformuleerd als het zoeken van het model met een 'acceptabele' fit (in het algemeen zoekt men naar de *beste* fit, via minimalisatie van het criterium). Zie ook hoofdstuk 2.

Voor een recent overzicht zie Walter en Pronzato [1990]. Zie ook Sun en Yeh [1990b], Knopman en Voss [1989], Knopman et al. [1991]. In veel gevallen is het te optimaliseren criterium een functie van de gevoeligheidsfuncties van de modeloutputs (d.w.z. de partiële afgeleiden $\frac{\partial y_M}{\partial \theta_i}$; zie opmerking 2.1). Hiermee wordt in feite een expliciet verband gelegd tussen gevoeligheidsanalyse en experimenteel ontwerp.

ad item 2: Hoewel de keuze van het criterium voor een groot deel door het beoogde doel bepaald dient te worden tegen de achtergrond van de beschikbaarheid en nauwkeurigheid van meetdata en/of a priori kennis (bijv. welke modeloutputs moeten t.b.v. de toepassing goed gemodelleerd te worden, en hoe is hun onderling belang (weging)?), kan een gevoeligheidsanalyse als nuttige leidraad dienen bij het maken van deze keuze. Immers, de resultaten verschaffen informatie over de gevoeligheid van de diverse modeloutputs voor variaties in parameters etc. en verhelderen aldus of het voor calibratie van de modelparameters zinvol is om bepaalde modeloutputs (gewogen) mee te nemen.

ad item 3: Indien de gevoeligheid van de modeluitkomsten, c.q. het identificatiecriterium, gering is voor de variaties in bepaalde parameters, dan kunnen we verwachten dat deze parameters moeilijk te identificeren zijn (d.w.z. onnauwkeurig). Anderzijds zal het fixeren van deze ongevoelige parameters op een zelfgekozen vaste instel-waarde de schattingsresultaten vermoedelijk niet drastisch beïnvloeden (de fit zal hierdoor niet veel verslechteren). Op deze wijze kan door het vooraf fixeren van ongevoelige parameters het aantal te schatten parameters aanzienlijk worden ingeperkt.

Gevoeligheidsanalyse²¹ verschaft dus vooraf al een idee over de identificeerbaarheid van *sommige* parameters (nl. de ongevoelige parameters zullen slecht^{ook} identificeerbaar zijn). Omgekeerd is het echter *niet* zo dat gevoelige parameters per sé goed schatbaar zullen zijn! Er kunnen namelijk allerlei interacties c.q. compensaties met andere parameters optreden die het schatten moeilijk maken. Denk bijv. aan het ‘model’ $y_M = \theta_1 \cdot \theta_2$. θ_1 en θ_2 kunnen niet simultaan geschat worden, hoewel hun gevoeligheid [d.w.z. $\partial y_M / \partial \theta_1 = \theta_2$, respectievelijk $\partial y_M / \partial \theta_2 = \theta_1$] aanzienlijk kan zijn.

Dit eenvoudige voorbeeld maakt duidelijk dat een gevoeligheidsanalyse nog geen volledig beeld verschaft van de identificeerbaarheids problemen die er bij schatting kunnen optreden. Een afzonderlijke *identificeerbaarheidsanalyse* blijft dus gewenst. In het volgende hoofdstuk zal hierop nader worden ingegaan, en zal het verband tussen gevoeligheidsanalyse en identificeerbaarheidsanalyse

²¹In appendix A wordt in meer detail ingegaan op de mogelijkheden en complicaties van gevoeligheidsanalyse t.b.v. modelcalibratie. Met name blijkt het vaak problematisch te zijn om een uitspraak te doen over de gevoeligheid van de parameters die betrekking heeft op de gehele parameter range (globale analyse versus locale analyse).

expliciet aan de orde komen.

ad item 4: Om de modeloutputs $y_M(i, \theta)$ te berekenen als functie van de onbekende parameters θ zijn gegevens vereist over bijv. modelinputs $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$, modelcoëfficiënten, beginvoorwaarden (α) etc. Deze gegevens zijn in de praktijk vaak *niet exact bekend*. De vraag dringt zich nu op hoe gevoelig de modeluitkomsten, en uiteindelijk ook de schattingsresultaten zijn voor misspecificaties, c.q. (meet)fouten in deze grootheden.

De gevoeligheid/robuustheid van de *modeluitkomsten* voor fouten in deze a priori kennis kan in het algemeen worden vastgesteld door de grootheden α , en eventueel $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ mee te nemen in een gevoeligheidsanalyse²². Een dergelijke analyse zal inzicht geven in de vraag hoe verkeerd men kan zitten met de modelberekeningen indien men verkeerd zit in bijv. de specificatie van α en $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$.

Een analyse van de gevoeligheid/robuustheid van de *schattingresultaten* voor misspecificatie in $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ en α is daarentegen aanzienlijk bewerklijker dan een analoge analyse van de modeluitkomsten. Immers wil men dit goed doen, dan dient men telkens (d.w.z. voor elk van de beschouwde variaties in $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ en α) een modelcalibratie te laten plaatsvinden, resulterend in een schatting $\hat{\theta}$. Vervolgens kan men dan de gevoeligheid hiervan evalueren. In veel gevallen zal zo'n complete analyse teveel rekentijd en menskracht vergen. In de praktijk beperkt men zich daarom hooguit tot een studie van de schattingsresultaten bij een gering aantal alternatieve instellingen van $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ en α om een ruw beeld van de robuustheid voor misspecificaties te krijgen.

Natuurlijk kan men ook overwegen om, in plaats van de gevoeligheid van het *optimum* $\hat{\theta}$ te bestuderen, de gevoeligheid van het *identificatie-criterium* $C(\theta)$ zelf te evalueren (voor variaties in $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ en α). De waarde van zo'n analyse is echter beperkt, omdat uitspraken over de gevoeligheid van het criterium $C(\theta)$ voor variaties/misspecificaties in $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ en α , niet rechtstreeks kunnen/mogen worden doorvertaald naar uitspraken over de gevoeligheid van $\hat{\theta}$ hiervoor. Een eenvoudig voorbeeld kan dit verduidelijken. Veronderstel dat het criterium er uitziet als

$$C(\theta, \alpha) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \theta + \beta_2 \cdot \alpha + \beta_{1,1} \cdot \theta^2 + \beta_{1,2} \cdot \theta \cdot \alpha + \beta_{2,2} \cdot \alpha^2 \quad (3.1)$$

[Veronderstel dat θ, α reële getallen zijn; $\beta_{1,1} > 0$; $C(\cdot)$ is expliciet als functie van θ en α geschreven]. Bij vaste α wordt het minimum van $C(\cdot, \alpha)$

²²We dienen hierbij de kanttekening te maken dat het meenemen van $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ in zo'n analyse vaak op praktische problemen kan stuiten, omdat dit de dimensionaliteit van een volledige gevoeligheidsanalyse sterk kan opblazen, met name indien de modelinputs van de tijd en/of de locatie kunnen afhangen.

aangenomen in (d.w.z. los $\frac{\partial C}{\partial \theta} = 0$ op):

$$\hat{\theta} = -\frac{\beta_1 + \beta_{1,2} \cdot \alpha}{2 \cdot \beta_{1,1}} \quad (3.2)$$

Hieruit blijkt eenvoudig dat de gevoeligheid van het optimum $\hat{\theta}$ voor variaties in α gelijk is aan

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \alpha} = -\frac{\beta_{1,2}}{2 \cdot \beta_{1,1}} \quad (3.3)$$

Merk verder op dat de gevoeligheid van het criterium $C(\cdot, \cdot)$ voor variaties in α gelijk is aan:

$$\frac{\partial C}{\partial \alpha} = \beta_2 + \beta_{1,2} \cdot \theta + 2 \cdot \beta_{2,2} \cdot \alpha \quad (3.4)$$

Dit verduidelijkt dat de gevoeligheden van het optimum $\hat{\theta}$ en van het criterium $C(\cdot, \cdot)$ voor variaties in α niet gerelateerd hoeven te zijn: de ene kan groot zijn, terwijl de andere klein is, en omgekeerd.

Opmerking 3-1 Het aspect van robuustheid voor misspecificaties in α , $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$ komt in de literatuur over calibratie toepassingen niet of nauwelijks ter sprake. Vaak wordt er gehandeld alsof de (model)ingangen exact gemeten zijn, zonder het waarheidsgehalte en de consequentie van deze aanname te toetsen.

Een aspect dat veel meer aandacht krijgt is de consequentie van misspecificatie/fouten in de *output* data $y(i)$ voor de schattingsresultaten. Dit aspect is sterk gekoppeld met het vraagstuk van *nauwkeurigheid/precisie* (betrouwbaarheidsgebieden) van de geschatte parameters en zal op deze plaats verder niet besproken worden. We merken slechts op dat dit ten nauwste samenhangt met de vraag hoe sterk de geschatte parameters zullen veranderen indien men een andere realisatie van de experimentele data beschikbaar zou hebben.

■

ad item 5: Gevoeligheidsanalyse kan, tezamen met identificeerbaarheidsanalyse (zie volgend hoofdstuk), nuttig gebruikt worden om reeds uitgevoerde calibraties aan een nauwkeuriger onderzoek te onderwerpen (*post-calibratie studie*²³). Op deze wijze verkrijgt men inzicht in het gedrag en de gevoeligheid van het criterium rond de gecalibreerde parameter-waarden (bijv. via een lokale gevoeligheidsanalyse). Enerzijds maakt dit een grondige vergelijking van diverse

²³Uiteraard heeft een post-calibratie studie ook baat bij het maken van contourplots c.q. 'surfaceplots' van het criterium. Deze plots hebben echter tot nadeel dat ze eigenlijk slechts zin hebben indien we de parameters twee aan twee bekijken, terwijl de andere op een constante waarde worden gezet. Interacties in hoger dimensionale ruimtes kunnen dus niet gemakkelijk ontdekt worden. Verder vergt het maken van deze plots vaak veel criterium evaluaties, en gaat het aantal te beschouwen plots sterk omhoog met het aantal gecalibreerde parameters.

criteria mogelijk, anderzijds kan dit dienen om aspecten als lokale minima, gladheids-problemen (smoothness), slechte identificeerbaarheid etc. op te sporen. De aard van de interacties tussen de parameters kan bestudeerd worden, en er kan gechecked worden of dit overeenkomt met het begrip dat men van de achterliggende fysische aspecten heeft. Op deze wijze verkrijgt men meer vertrouwen in de geschatte parameters, of kunnen nuttige suggesties worden aangedragen voor verbetering van niet succesrijk uitgevoerde calibratie studies (bijv. door herparametrisatie, fixatie van modelparameters op een vaste waarde, additionele metingen, modelaanpassing etc.). Zie ook Sorooshian en Arfi [1982], Sorooshian en Gupta [1985].

4 Identificeerbaarheidsanalyse van het identificatiecriterium

4.1 Inleiding

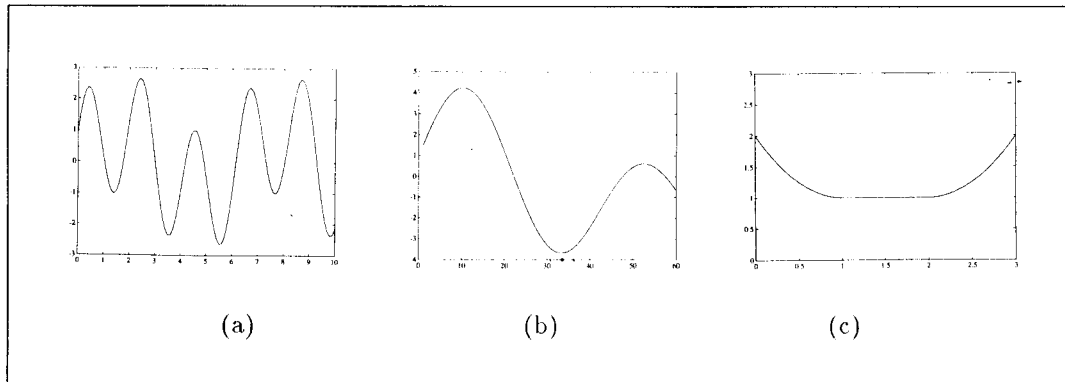
In het voorgaande hoofdstuk werd de rol van gevoeligheidsanalyse in calibratiestudies verduidelijkt. Met name kunnen de resultaten uit een gevoeligheidsanalyse nuttige aanwijzingen geven over welke parameters niet per sé meegenomen hoeven te worden bij calibratie: parameters waarvoor het criterium ongevoelig is kunnen zonder bezwaar op een vastgekozen waarde gefixeerd worden¹. Dit is van weinig invloed op de fit tussen het model en de data. In veel gevallen wordt hiermee reeds een aanzienlijke reductie verkregen van het aantal te calibreren parameters. Het is echter nog geen garantie dat de calibratie probleemloos zal verlopen.

De overgebleven onbekende modelparameters worden i.h.a. geschat door te zoeken naar het punt in de parameter-ruimte waarin het criterium zijn minimale waarde aanneemt (beste fit op data). Om dit minimale punt te bepalen wordt i.h.a. de toevlucht genomen tot numerieke optimalisatie technieken. Enkele belangrijke aspecten hierbij zijn (zie figuur 4.1-1):

1. Heeft het criterium meerdere minima (**multimodaliteit**)?
In dit geval loopt men de kans dat het verkregen optimum slechts een lokaal minimum is, en niet een globaal.
2. Zijn de minima van het criterium geïsoleerd (**locale uniciteit**), d.w.z. komen er in de omgeving van zo'n minimum enkel punten voor waarin het criterium strikt hogere waarden aanneemt (het minimum is lokaal uniek)?
Indien dit *niet* zo is dan kan men in de praktijk convergentie- en stabiliteitsproblemen verwachten bij gebruik van de gangbare numerieke optimalisatie-algoritmes.
Bovendien zijn de parameters dan niet eenduidig bepaalbaar (*identificeerbaarheidsproblemen*). Er zijn immers diverse parametercombinaties die dezelfde minimale fit geven. Welke zou men dan moeten kiezen voor de model-toepassing?
3. Zijn de minima van het criterium geprononceerd (**goed-gesteldheid**)?
Indien het criterium in de buurt van het minimum in sommige richtingen tamelijk vlak is (valleien), dan treden ook problemen op met het identificeren van de parameters. Deze kunnen dan niet nauwkeurig bepaald worden (slechte

¹Strikt genomen geldt dit natuurlijk slechts voor de calibratie. Bij verdere modeltoepassingen c.q. voorspellingen kunnen die ongevoelige parameters eventueel wel een rol spelen, met name als de bestudeerde situatie sterk afwijkt van de situatie waarop de calibratie betrekking heeft. In zo'n geval zijn de resultaten van de calibratie natuurlijk onvoldoende representatief voor het systeemgedrag over een bredere toepassingsrange.

identificeerbaarheid ten gevolge van een slecht geconditioneerd minimalisatie probleem; precisie verlies).



Figuur 4.1-1: Diverse aspecten van een identificatiecriterium:

multimodaliteit (a); locale uniciteit (b); goed-gesteldheid (c)

We richten ons in dit hoofdstuk voornamelijk op het tweede punt, de kwestie van de *identificeerbaarheid van de parameters*². Alvorens de parameters daadwerkelijk te gaan schatten is het wenselijk om een idee te hebben of ze überhaupt schatbaar/identificeerbaar zijn, en van welke factoren hun identificeerbaarheid kan afhangen. In het voorgaande hoofdstuk zagen we dat gevoeligheidsanalyse hierover geen uitsluitsel geeft (immers gevoelige parameters bleken niet per sé identificeerbaar te zijn). Een *identificeerbaarheidsanalyse* zal een noodzakelijk aanvulling vormen op eerder uitgevoerde gevoeligheidsanalyses. De resultaten van een identificeerbaarheidsanalyse kunnen vervolgens weer leiden tot betere suggesties voor experimenteel ontwerp, data-verzameling, her-parametrisatie, fixatie van waarden van parameters (mede op basis van de uitkomsten van vooraf uitgevoerde gevoeligheids-analyses).

In de volgende sectie zullen we een definitie van identificeerbaarheid presenteren die in de praktijk nuttig gebruikt kan worden om te beoordelen of parameters (of parametercombinaties) goed schatbaar zullen zijn. Deze definitie zal een lokaal karakter hebben (d.w.z. enkel betrekking hebben op één specifiek punt in de parameter ruimte, bijv. de beginschatting c.q. eindschatting), en kan voor een groot aantal toepassingen eenvoudig worden uitgewerkt tot een operationele methode voor identificeerbaarheidsanalyse. Een voorbeeld hiervan is te vinden in Mous [1991]. Zie ook Sorooshian en Gupta [1985] voor een specifieke toepassing.

²Hoewel we ons voornamelijk op dit aspect richten, zullen de in dit hoofdstuk behandelde zaken ook sterk betrekking hebben op het derde punt (operationele problemen bij minimalisatie t.g.v. slecht geconditioneerdheid). Zie ook opmerking 4.2-3(b).

4.2 Identificeerbaarheid

Het identificeerbaarheids-vraagstuk heeft in de literatuur veel aandacht gekregen. Diverse definities voor identificeerbaarheid worden hierbij gehanteerd en vele resultaten zijn afgeleid voor allerlei modellen (zie bijv. Walter [1982, 1987]; Godfrey en Chapman [1990]; Godfrey en DiStefano III [1987]; Chavent [1987,1991]; Sun en Yeh [1990b]).

Wij zullen onze aandacht richten op een eenvoudige identificeerbaarheids-definitie die met name zinvol is bij identificatie middels het minimaliseren van het criterium $C(\theta)$, dat in hoofdstuk 2 geïntroduceerd werd. Parameter-schatting komt in deze context neer op het zoeken van de parameter $\hat{\theta}$ uit de parameter-set $\Theta \subset R^p$ (ruimte van acceptabele parameter waarden), waarin het criterium $C(\theta)$ zijn minimale waarde aanneemt:

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta \in \Theta} C(\theta) \quad (4.2 - 1)$$

De vraag naar de identificeerbaarheid van de parameters hangt in deze context samen met de vraag of de oplossing van het minimalisatie probleem *eenduidig* is. Het is in het algemeen uiterst moeilijk om vooraf te bewijzen of het minimum eenduidig is over de gehele parameter-ruimte Θ (d.w.z. *globale* identificeerbaarheid; zie Walter [1982, 1987]). Daarom wordt veelal gekeken naar *locale* identificeerbaarheid: ‘Indien $C(\theta)$ in $\theta^* \in R^p$ een minimum aanneemt, is dit minimum dan in een *omgeving* van θ^* eenduidig?’

Om dit tot een hanteerbare definitie voor identificeerbaarheid om te smeden voeren we het volgende *gedachten-experiment* uit. We veronderstellen dat de meetdata afkomstig zijn van het achterliggend model met parameter-waarden $\theta^* \in \Theta$, d.w.z.:

$$y(i) = y_M(i, \theta^*) , \quad i = 1, \dots, M \quad (4.2 - 2)$$

De vraag is nu of het model aan de hand van het criterium teruggeschat kan worden uit deze data (d.w.z. is het model in staat om zichzelf terug te vinden m.b.v. het criterium).

In analogie met Bellman & Åström [1970], definiëren we:

Definitie 4.2-1 Laat het model gegeven zijn door de vergelijkingen die leiden tot y_M (zie formule (2.1)), en veronderstel dat we het criterium $C(\theta)$ uit (2.3) gebruiken ten behoeve van de parameter-schatting.

Het model heet dan *locaal identificeerbaar* in het parameter punt θ^* indien de functie²⁶

$$V(\theta) = F(y_M(\cdot, \theta^*), y_M(\cdot, \theta)) \quad (4.2 - 3)$$

in de omgeving van θ^* een eenduidig minimum heeft, dat in θ^* wordt aangenomen.

²⁶ $F(\cdot, \cdot)$ is de in (2.3) gedefinieerde specifieke functie van de data en de modeloutputs. Met hier als speciale toepassing dat de synthetische dataset $y_M(\cdot, \theta^*)$ als data gebruikt wordt.



Nadeel van deze identificeerbaarheidsdefinitie is zijn *locale* karakter: enerzijds heeft de definitie betrekking op één specifieke parameter punt $\theta^* \in \Theta$; anderzijds wordt de studie beperkt tot een *locale* omgeving²⁷ van dit punt θ^* .

Omdat op voorhand niet bekend is waar het uiteindelijke optimale parameter punt zal liggen, is men met name geïnteresseerd in de vraag of bovenstaande eigenschap van locale identificeerbaarheid geldig is voor *bijna alle*²⁸ parameter punten $\theta^* \in \Theta$ (zogenaamde *structurele locale identificeerbaarheid*; zie Walter [1982]). Bij praktische toepassingen is echter een waterdichte beantwoording van deze vraag meestal moeilijk en tijdrovend. Daarom volstaat men in de praktijk meestal met het onderzoeken van de identificeerbaarheid rondom een *nominaal* punt θ^* in de parameter-ruimte, hierbij hopend dat deze eigenschap ook in andere parameter punten overeenkomstig zal gelden. Als nominaal punt kan bijv. een initiële schatting θ_0 gekozen worden, of (a posteriori, na uitvoering van de schatting) de geschatte waarde $\hat{\theta}$ (zie Mous [1991]).

- Opmerking 4.2-1** (a) Een aspect dat bij bovenstaande definitie niet expliciet aan de orde kwam is de rol van de modelinputs $\mathcal{D}_{\text{inp}}(i)$. Uiteraard bepalen deze grootheden mede of het model identificeerbaar is in θ^* . Indien de inputs bijv. niet voldoende ‘rijk’ c.q. representatief zijn om sommige processen aan te sturen (te exciteren), dan zullen de onbekende parameters die met deze processen samenhangen niet geïdentificeerd kunnen worden. Dit maakt het belang duidelijk van een goed experimenteel ontwerp. In veel praktische situaties zullen de mogelijkheden voor het opzetten van experimenten echter beperkt zijn.
- (b) Merk op dat de functie $V(\theta)$ ontstaan is uit het criterium $C(\theta)$ door voor de ‘echte meetgegevens’ $[y(\cdot)]$ de modeloutputs in te vullen die gegenereerd zijn door het model met parameter θ^* (gedachten-experiment). Op deze manier kan de identificeerbaarheid los van de ‘echte meetgegevens’ bestudeerd worden, en in willekeurige punten θ^* van de parameter-ruimte.
- (c) Bovenstaande definitie is algemener dan de definitie die in Mous [1991] gegeven wordt. Mous [1991] beperkt zich tot ongewogen kwadraten-som criteria voor scalaire modeloutputs.
- (d) Het model kan om diverse redenen niet-identificeerbaar zijn. Twee belangrijke redenen zijn onvoldoende representatieve input-gegevens (slecht experimenteel ontwerp) en overgeparametriseerde modelstructuren (zie Mous [1991], Ljung [1987]). Een identificeerbaarheidsanalyse verschaft inzicht in de aard van deze problemen, en kan nuttige suggesties opleveren om de identificeerbaarheid te verbeteren. Zie o.a. Walter en Pronzato [1990] voor de relatie tussen experimenteel ontwerp en identificeerbaarheid.



²⁷De grootte van die omgeving is op voorhand onbekend, en kan sterk variëren afhankelijk van θ^* .

²⁸De eis dat locale identificeerbaarheid voor *elk* parameter punt dient te gelden is bij de meeste toepassingen te zwaar. In het algemeen zullen er altijd punten in Θ voorkomen waarin niet aan de locale identificeerbaarheids eis voldaan is. Dit is de reden dat we de eigenschap voor *bijna alle* punten eisen (d.w.z. de punten waarin de eigenschap niet geldt hebben Lebesgue maat 0).

Indien de functie $V(\theta)$ voldoende vaak differentieerbaar is naar θ dan kan de bovengenoemde lokale identificeerbaarheid nader onderzocht worden aan de hand van de gradiënt $(\frac{\partial V(\theta)}{\partial \theta_j})$ en de Hessiaan $(\frac{\partial^2 V(\theta)}{\partial \theta_j \partial \theta_k})$ van $V(\theta)$. Het nul zijn van de gradiënt en het positief definitief zijn van de Hessiaan in het parameter punt θ^* vormen tezamen *voldoende* voorwaarden voor lokale identificeerbaarheid (volgens bovenstaande definitie) van het model in θ^* .

We werken dit nader uit voor het gewogen kwadraten-som criterium $C(\theta)$ uit formule (2.4). De bijbehorende functie $V(\theta)$ die voor het onderzoek naar lokale identificeerbaarheid in θ^* gebruikt wordt, is dan gelijk aan:

$$V(\theta) = \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \|y_M(i; \theta^*) - y_M(i; \theta)\|_{\Omega}^2 \quad (4.2-4)$$

Er kan worden aangetoond dat de gradiënt gelijk is aan:

$$\frac{\partial V(\theta)}{\partial \theta_j} = -2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y_M(i; \theta^*) - y_M(i; \theta))^T \Omega \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \quad (4.2-5)$$

$$= -2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \text{trace} \left[\Omega \cdot \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \cdot (y_M(i; \theta^*) - y_M(i; \theta))^T \right] \quad (4.2-6)$$

terwijl de Hessiaan gelijk is aan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V(\theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} &= 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot \left(\frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_k} \right)^T \Omega \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \\ &\quad - 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y_M(i; \theta^*) - y_M(i; \theta))^T \Omega \frac{\partial^2 y_M(i; \theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} \end{aligned} \quad (4.2-7)$$

Hieruit blijkt eenvoudig dat de gradiënt van $V(\theta)$ in θ^* gelijk is aan nul, terwijl de Hessiaan-matrix van $V(\theta)$ in θ^* gelijk is aan de matrix

$$H(\theta^*) = 2 \cdot [X(\theta^*)]^T \cdot Q \cdot X(\theta^*) \quad (4.2-8)$$

$$= 2 \cdot [\tilde{X}(\theta^*)]^T \cdot \tilde{X}(\theta^*) \quad (4.2-9)$$

waarbij de betreffende matrices $X(\theta^*)$, Q , $\tilde{X}(\theta^*)$ gedefinieerd zijn in (2.12), (2.13) en (2.15). De conditie dat de Hessiaan $H(\theta^*)$ positief definitief is komt overeen met het volle rang²⁹ zijn van de gevoeligheidsmatrix³⁰ $X(\theta^*)$, c.q. de gevoeligheidsmatrix $\tilde{X}(\theta^*)$. In de praktijk zullen deze matrices slechts met eindige precisie berekend kunnen worden, t.g.v afbreek- en afrondfouten (zie ook opmerking 2.2). Dientengevolge

²⁹De *rang* van een matrix is gelijk aan het maximale aantal onafhankelijke rijen c.q. kolommen van de matrix.

³⁰De rol van de gevoeligheidsmatrices verduidelijkt ook enigszins de relatie tussen gevoeligheidsanalyse en identificeerbaarheidsanalyse.

zullen deze berekende matrices bijna altijd (d.w.z. generiek) volle rang hebben, ook al hebben hun exacte analoga niet-volle rang. Om in deze context toch nog zinvolle (numerieke) uitspraken over de rang te doen, verdient het aanbeveling om de *singuliere waarden decompositie* (SVD; singular value decomposition; zie bijv. Press et al. [1986], Golub en van Loan [1989]) van de matrix te berekenen. Dit wordt in appendix B verder uitgewerkt. In appendix C worden vervolgens enkele aspecten van de voorgestelde benadering in meer detail besproken.

Ons inziens is bovengeschetste, en in appendix B uitgewerkte, methode om de identificeerbaarheid van parameters te analyseren een nuttig hulpmiddel in modelcalibratie. Enerzijds kan zij in een vroeg stadium van de calibratie gebruikt worden, bijv. om op identificeerbaarheidsproblemen te anticiperen nog lang *voordat* men de parameters daadwerkelijk gaat schatten. De analyse zal dan veelal plaatsvinden in de buurt van de initiële parameterschatting θ_0 (d.w.z. $\theta^* = \theta_0$). Anderzijds kan men deze analyse ook laten plaatsvinden *nadat* men de parameters geschat heeft (post-calibratie studie) om inzicht te krijgen in mogelijke parameter-interacties c.q. identificeerbaarheidsproblemen etc. In dat geval zal de analyse plaatsvinden rond de geschatte waarde $\hat{\theta}$ (d.w.z. $\theta^* = \hat{\theta}$)³¹.

Behalve voor het beoordelen van de identificeerbaarheid van de parameters is de voorgestelde methode ook bruikbaar om de performance van een experimenteel ontwerp te beoordelen, t.a.v. schatbaarheid van de parameters c.q. nauwkeurigheid van de schattingen (zie Mous [1991]).

Bij het bovenstaande behoort de kanttekening gemaakt te worden dat de beoordeling van de locale identificeerbaarheid via de studie van de gradiënt en de Hessiaan slechts mogelijk is indien deze grootheden bestaan, d.w.z. indien $V(\theta)$ voldoende vaak differentieerbaar is in een omgeving van θ^* . In situaties waarbij dit niet zo is, bijv. bij het gebruik van ‘min-max’ criteria of ‘absolute-waarden-som’ criteria i.p.v. het kwadraten-som criteria, kan de analyse aanzienlijk gecompliceerder worden. Dit wordt in opmerking C-2 van appendix C nader belicht.

³¹Uiteraard is het ook nuttig om *tijdens* de calibratie mogelijke identificeerbaarheidsproblemen te anticiperen/detecteren. Bovengenoemde methode is dan echter minder goed bruikbaar; men heeft in dit geval veeleer baat bij een methode die het optimalisatieproces on-line volgt, bijv. middels het monitoren van het zogeheten conditie-getal van de (benaderde) Hessiaan.

5 Conclusies en aanbevelingen

De rol en het nut van gevoeligheidsanalyses en identificeerbaarheidsanalyses binnen modelcalibratie kwamen in het voorgaande duidelijk naar voren:

- Een *gevoeligheidsanalyse* kan reeds in een vroeg stadium duidelijkheid verschaffen over het modelgedrag, en over het belang van de diverse parameters voor dat gedrag. Op deze wijze kunnen suggesties verkregen worden t.b.v. experimenteel ontwerp, keuze van identificatiecriterium en de keuze van parameters die gecalibreerd dienen te worden. Ook kan een gevoeligheidsanalyse een nuttig instrument zijn in post-calibratie studies, en enig inzicht verschaffen in de gevolgen van misspecificatie van (a priori) gegevens die vereist zijn om modelberekeningen uit te voeren.

Het verdient aanbeveling om de gevoeligheidsanalyse allereerst op het *model* (de modeloutputs) zelf toe te passen. Vervolgens kan de gevoeligheidsanalyse van het *criterium* aan de orde komen. Met name in het laatste geval zal men in het algemeen toevlucht moeten nemen tot ingewikkeldere regressiemodellen die ook niet-lineaire functies van de parameters bevatten, om zinvolle uitspraken af te leiden. Het is echter niet altijd mogelijk om één geschikt regressiemodel te vinden dat als basis kan dienen voor gevoeligheids uitspraken over de *hele* parameter-ruimte (d.w.z. globale gevoeligheidsanalyse). Veelal zullen dan diverse locale analyses nodig zijn om tot betrouwbare uitspraken te komen over de totale gevoeligheid. De vraag hoeveel van dergelijke locale analyses dienen te worden uitgevoerd, en in welk gebied van de parameter-ruimte deze plaats dienen te vinden kan complex zijn, met name als het een parameter-ruimte betreft van grote dimensie en/of van gecompliceerde vorm.

Voor het daadwerkelijk uitvoeren van gevoeligheidsanalyse kan nuttig gebruik worden gemaakt van het software pakket UNCSAM (zie Janssen et al. [1991]). Hiermee kunnen allereerst parametertrekkingen worden verricht die de variaties in de parameters weerspiegelen; na de bijbehorende modeloutputs gesimuleerd te hebben kan vervolgens lineaire regressie worden toegepast m.b.t. de getrokken parameters. Mocht lineaire regressie niet adequaat zijn, dan dient men zelf, bijv. via gebruik van statistische pakketten (GENSTAT, SAS), ingewikkeldere regressiemodellen te proberen.

- De resultaten uit de gevoeligheidsanalyses geven echter nog geen volledige garantie dat het calibreren van de parameters zonder identificeerbaarheidsproblemen zal verlopen. Daartoe zal additioneel onderzoek nodig zijn, in de vorm van een *identificeerbaarheidsanalyse* die uitsluitel geeft over het identificeerbaar zijn van de parameters (d.w.z. zijn de minima van het identificatiecriterium lokaal uniek). Zo'n analyse is in het algemeen moeilijk globaal

(over de hele parameterruimte) uit te voeren. In de praktijk wordt daarom meestal volstaan met het verrichten van een *locale* analyse in de omgeving van een nominaal parameter punt (bijv. de (a priori) beginschatting, of de (a posteriori) eindschatting), hierbij hopen dat de resultaten ook voor andere parameter punten geldig zullen zijn.

De methode die in sectie 4.2 werd voorgesteld om identificeerbaarheid te checken kan voor toepassingen waarbij het identificatiecriterium voldoende glad³² is, eenvoudig operationeel gemaakt worden. Dit werd nader uitgewerkt voor een gewogen kwadraten-som criterium, en resulteerde in een methode die (via singuliere waarde decompositie) checkt of de bij het model horende gevoeligheidsmatrices volle (numerieke) rang hebben (zie appendix B).

Toepassing van de voorgestelde identificeerbaarheidsanalyse methode kan leiden tot nuttige suggesties voor verbetering van de identificeerbaarheidseigenschappen via additionele experimenten/metingen en her-parametrisatie van het model.

Dit alles maakt duidelijk dat het aanbeveling verdient om dergelijk gevoeligheids- en identificeerbaarheids onderzoek als essentieel onderdeel in de calibratie activiteiten op te nemen, niet alleen voordat men daadwerkelijk parameters gaat schatten, maar ook tijdens, en na afloop van het calibratie proces. De zo verkregen informatie kan nuttig gebruikt worden bij verdere modelontwikkeling, dataverzameling en verbeterde calibratie.

Hoewel het gepresenteerde materiaal voornamelijk een methodologisch karakter had, zijn de voorgestelde methodieken en technieken in de praktijk veelal relatief eenvoudig toepasbaar. Ze zullen in de nabije toekomst dan ook daadwerkelijk gebruikt worden bij diverse calibratie studies³³. Dit geldt al op korte termijn in het bijzonder bij modelonderzoek voor diverse milieuthema's. Met de op deze wijze opgedane ervaring hopen we verder vorm te kunnen geven aan een meer systematische aanpak van modelcalibratie, uiteindelijk resulterend in kwaliteitsverbetering van de modelvorming in verantwoorde afstemming met experimenteel onderzoek.

³²Indien het criterium niet glad is, dan kan een identificeerbaarheidsanalyse aanzienlijk gecompliceerder worden.

³³Een recente illustratie van het gebruik van gevoeligheidsanalyses bij modelcalibratie staat in Koopmans [1992].

Appendix A: Gevoeligheidsanalyse voor modelcalibratie

Gevoeligheidsanalyse voor modelcalibratie kan betrekking hebben op een tweetal aspecten:

- (a) Gevoeligheidsanalyse van het *identificatiecriterium* ($C(\theta)$).
- (b) Gevoeligheidsanalyse van het *model* (c.q. de modeloutputs $y_M(\cdot; \theta)$).

De voor- en nadelen van deze analyses zullen we vervolgens nader bespreken:

ad (a): De gevoeligheidsanalyse van $C(\theta)$ ligt uiteraard het dichtste bij de calibratie zelf: enerzijds worden de meetdata van de modeloutputs in de beschouwing betrokken, anderzijds levert de analyse direct informatie op over het te optimaliseren criterium. Nadeel bij deze gevoeligheidsanalyse is echter wel dat het vaak moeilijk is om tot algemene uitspraken over de gevoeligheid van de diverse parameters te komen, vooral als de analyse betrekking heeft op parametervariëaties die de hele parameter ruimte kunnen bestrijken (*globale* gevoeligheidsanalyse).

Immers, omdat het criterium i.h.a. een extra niet-lineariteit introduceert (bijv. kwadraten som), zullen de gangbare gevoeligheidsmaten (zie Janssen et al. [1990]) die gebaseerd zijn op *lineaire* regressie van $C(\theta)$ op de parameters θ weinig zin hebben omdat de fit van het lineaire regressiemodel

$$C(\theta) \approx \beta_0 + \sum_{l=1}^p \beta_l \cdot \theta_l \quad (\text{A} - 1)$$

vaak slecht zal zijn (d.w.z. een lage R^2), indien deze betrekking heeft op het hele parametergebied Θ (*globale* gevoeligheidsanalyse)³⁴.

Bij *locale* gevoeligheidsanalyses zal dit minder zwaar wegen, omdat $C(\theta)$ lokaal vaak redelijk goed benaderd kan worden door een lineair model. Dit geldt meestal echter niet in de buurt van de minima (c.q. maxima) van $C(\theta)$, waarden waarin we bij calibratie met name geïnteresseerd zijn.

Een en ander heeft dus als consequentie dat het aanbeveling verdient om enerzijds de parameter ruimte a priori zo klein mogelijk te kiezen, en dat anderzijds

³⁴Een gevoeligheidsmaat die ook bij een slechte lineaire fit bruikbaar is, is de *Kolmogorov Smirnov statistic* (zie Janssen et al. [1990]). Nadeel van deze maat is echter zijn heuristisch karakter; in feite zegt deze maat nog niets over de gevoeligheid van het criterium *nabij* het optimum. Scatterplots van het criterium naar de parameters kunnen behulpzaam zijn om het belang van de betreffende parameters beter in te schatten.

het gebruik van *ingewikkeldere* regressiemodellen veelal noodzakelijk zal zijn, met name bij globale gevoeligheidsanalyses.

Een *kwadratische* benadering

$$C(\theta) \approx \beta_0 + \sum_{l=1}^p \beta_l \cdot \theta_l + \sum_{j=1}^p \sum_{k \geq j} \beta_{j,k} \cdot \theta_j \cdot \theta_k \quad (\text{A} - 2)$$

zal vaak beter op zijn plaats zijn dan een lineaire (tenminste lokaal, in de buurt van een optimum bij continu differentieerbare criteria)³⁵. Vergelijk Kohberger et al. [1978].

Zo'n kwadratische benadering levert tevens (benaderde) informatie over de *Hessiaan* (tweede orde afgeleide $\frac{\partial^2 C(\theta)}{\partial \theta_j \partial \theta_k}$). Deze grootte speelt een cruciale rol in de context van minimalisatie van $C(\theta)$. Terwijl de (eerste-orde) gevoeligheden $\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_i}$ enkel iets vertellen over de veranderingen in $C(\theta)$ bij variaties in θ_i , verschaft de Hessiaan direct informatie over de mogelijkheid om het *optimum* te bereiken (convergentie snelheid; geconditioneerdheid; invloed afrondfouten; precisie/nauwkeurigheid; parameteridentificeerbaarheid). Zie ook het volgende hoofdstuk en de referenties Bard [1974], Sorooshian en Arfi [1982], Sorooshian en Gupta [1985], Thacker [1989].

Het voorgaande laat zien dat het aanbeveling verdient om bij gevoeligheidsanalyse van het criterium gebruik te maken van ingewikkeldere regressiemodellen (bijv. (A.2)). Dit zal echter in een aantal gevallen niet eenvoudig zijn. Het oorspronkelijk criterium $C(\theta)$ kan er bij diverse toepassingen/modellen gecompliceerd uitzien, met name indien het op de gehele parameter-ruimte Θ beschouwd wordt (bijv. meerdere minima/maxima; sterke niet-lineariteiten; plaatselijk niet differentieerbaar etc.). Een *globale* gevoeligheidsanalyse zal dan ook vaak niet goed mogelijk zijn (slechte fit, ondanks de keuze van een meer geavanceerd regressie model). Noodgedwongen zal men toevlucht moeten nemen tot diverse *locale* gevoeligheidsanalyses op gedeeltes van de parameter-ruimte. De gecombineerde resultaten van deze analyses kunnen vaak alsnog een beeld geven van de globale gevoeligheden. We merken echter op dat de vraag in welke locale gebieden van Θ deze analyses plaats dienen te vinden, complex kan zijn, met name als de parameter-ruimte een hoge dimensie en/of een gecompliceerde vorm heeft. Fysisch inzicht in het karakter van de parameters en ervaringen met reeds eerder uitgevoerde analyses (bijv. gevoeligheid-

³⁵Het is duidelijk dat het bepalen van een kwadratische benadering problemen kan opleveren bij grote aantallen parameters. Er zijn veel meer runs nodig om, via regressie-analyse, naast β_l ook nog alle $\beta_{j,k}$ te schatten. Op zijn minst zijn hiervoor $p + 1 + \frac{(p+1)p}{2}$ runs nodig; d.w.z. bij 40 parameters al meer dan 860 runs, bij 100 parameters al meer dan 5150 runs. Het zal dus noodzakelijk zijn om het aantal parameters waarvoor kwadratische relaties worden beschouwd op voorhand zo veel mogelijk te beperken.

sanalyses; scatterplots) kunnen bij beantwoording van deze vraag behulpzaam zijn.

ad (b): Een gevoeligheidsanalyse van de *modeloutputs* $y_M(\cdot; \theta)$ levert vaak minder complicaties op dan een gevoeligheidsanalyse van het criterium $C(\theta)$ ³⁶. Dit is te danken aan het feit dat we in dat geval geen last hebben van de extra niet-lineariteit die door het criterium geïntroduceerd wordt. In veel gevallen kan bij zo'n analyse van de modeloutputs, met name indien een *locale* analyse wordt uitgevoerd, volstaan worden met een simpel lineair regressiemodel en kunnen de gangbare maten uit Janssen et al. [1990] gebruikt worden om de gevoeligheid in uit te drukken³⁷.

De uitspraken over de gevoeligheden hebben uiteraard direct betrekking op de grootheden $y_M(i; \theta)$, $i = 1, \dots, N$, en niet zozeer op het criterium $C(\theta)$ zelf. Deze uitspraken kunnen zinvolle informatie verschaffen over wat, waar en wanneer gemeten dient te worden. Bovendien leveren ze informatie over de parameters etc. waarop we ons bij verder onderzoek/dataverzameling/calibratie moeten richten om betrouwbaardere resultaten te krijgen.

Indirect kunnen deze uitspraken natuurlijk ook iets zeggen over de gevoeligheid van het criterium $C(\theta)$ voor bepaalde parameters. $C(\theta)$ is immers een functie van $y_M(\cdot; \theta)$, en als zodanig is de kans groot dat het criterium ongevoelig zal zijn voor parameters waarvoor ook *alle* $y_M(i; \theta)$ ongevoelig zijn. Absolute zekerheid hierover is er echter niet. Dit zal toch o.a. afhangen hoe het model zich t.o.v. de data gedraagt. Dit kan deels geïllustreerd worden aan de uitdrukkingen uit (2.7) en (2.8). Hanteren we namelijk de eerste orde afgeleide $\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_j}$ als (eerste orde) gevoeligheidscoëfficiënt van C voor variaties in θ_j , dan leveren (2.7) en (2.8) een uitdrukking van $\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_j}$ op in termen van de gevoeligheidscoëfficiënten $\frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j}$ van y_M . Merk echter op dat ook de output-errors ($y(i) - y_M(i; \theta)$) een belangrijke rol in deze relatie spelen. Die zouden er bijv. voor kunnen zorgen dat kleine gevoeligheden in y_M (in termen van $\frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j}$) toch nog 'opgeblazen' worden tot grote gevoeligheden in $C(\cdot)$ (in termen van $\frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_j}$). Dit aspect, waar we niet verder op zullen ingaan, illustreert nog eens het belang van de kwaliteit van de meetgegevens.

³⁶Gevoeligheidsanalyse op de modeloutputs is echter i.h.a. *bewerkelijker* dan een gevoeligheidsanalyse op het criterium. Men dient immers in feite voor elke $y_M(i; \theta)$ een analyse te verrichten.

³⁷Indien we echter ook te maken hebben met modellen waarin de relatie tussen $y_M(\cdot; \theta)$ en $\theta \in \Theta$ een sterk niet-lineair karakter heeft, dan zullen we onze toevlucht moeten zoeken tot ingewikkeldere regressiemodellen. Uiteraard komen we dan analoge complicaties tegen als bij de analyse van $C(\theta)$.

Appendix B: Uitwerking van een methode voor identificeerbaarheidsanalyse

Uit hoofdstuk 4 kwam naar voren dat voor het kwadraten-som criterium $C(\theta)$ uit formule (2.4), het checken van identificeerbaarheid neerkwam op het checken van het volle rang zijn van de gevoeligheidsmatrix $X(\theta^*)$, c.q. de gevoeligheidsmatrix $\hat{X}(\theta^*)$. De praktische uitvoering hiervan verloopt via het gebruik van de *singuliere waarden decompositie* (SVD; singular value decomposition; zie bijv. Press et al. [1986], Golub en van Loan [1989]) van de gevoeligheidsmatrix:

Stelling B-1 Singular Value Decomposition (SVD)

Als A een reële $m \times n$ matrix is, dan bestaan er orthogonale³⁸ matrices:

$$U = [u_1 \cdots u_m] \in R^{m \times m} \quad (\text{B-1})$$

$$V = [v_1 \cdots v_n] \in R^{n \times n} \quad (\text{B-2})$$

zodat

$$A = U \cdot \Sigma \cdot V^T \quad (\text{B-3})$$

waarbij³⁹

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in R^{m \times n} \quad p = \min(m, n). \quad (\text{B-4})$$

met $\sigma_1 \geq \sigma_2 \cdots \geq \sigma_p \geq 0$.

■

De σ_i zijn de *singuliere waarden* van A en de vectoren u_i en v_i zijn respectievelijk de *i*-de *linker singuliere vector* (left singular vector) en de *i*-de *rechter singuliere vector* (right singular vector). Aan de hand van de singuliere waarden kan een gefundeerde uitspraak gedaan worden over de rang van een matrix. Wiskundig gezien is de rang namelijk gelijk aan het aantal singuliere waarden dat ongelijk is aan nul. In de praktijk is t.g.v. afbreek- en afrondfouten (bij het berekenen van de SVD) en t.g.v. onnauwkeurige data (bij het samenstellen c.q. representeren van de matrix A) een exacte bepaling van de rang vaak moeilijk. In deze context wordt veelal een alternatief begrip gehanteerd, namelijk de ϵ -rang van een matrix (*numerieke rang*; zie Golub en van Loan [1989], sectie 2.5.4 en sectie 5.5.8):

Definitie B-2 Laat A een reële $m \times n$ matrix zijn, en laat $\epsilon \geq 0$. De ϵ -rang (*numerieke rang*) van matrix A wordt gedefinieerd als⁴⁰

$$\text{rang}(A, \epsilon) = \min_{\|A-B\|_2 \leq \epsilon} \text{rang}(B) \quad (\text{B-5})$$

³⁸Een $n \times n$ reële matrix W is *orthogonaal* indien $W \cdot W^T = I_n$.

³⁹De notatie $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)$ voor een $m \times n$ -matrix duidt er op dat $\Sigma = (\sigma_{ij})$, waarbij $\sigma_{ij} = 0$ als $i \neq j$, en $\sigma_{ij} = \sigma_i$ als $i = j$, voor $i = 1, \dots, p$, waarbij $p = \min(m, n)$.

⁴⁰De $\|\cdot\|_2$ norm voor matrices is de norm die geïnduceerd is door de Euclidische norm (l_2 -norm) op de vectoren in de domein- en beeld ruimte. Zie Golub en van Loan [1989].



Deze grootte geeft weer wat de minimale rang is van een matrix die ‘in de buurt’ (d.w.z. in een ϵ -omgeving) van de matrix A ligt. Ook de ‘numerieke rang’ van een matrix kan eenvoudig worden afgeleid uit de SVD. Immers, indien de singuliere waarden geordend zijn als $\sigma_1, \dots, \sigma_p$, dan is $r_\epsilon := \text{rang}(A, \epsilon)$ gelijk aan het aantal singuliere waarden dat groter is dan ϵ (d.w.z. $\sigma_{r_\epsilon} > \epsilon \geq \sigma_{r_\epsilon+1}$).

Bij gebruik van het begrip ‘numerieke rang’ zal de *keuze van de tolerantie* ϵ een belangrijke rol spelen. Deze keuze dient de nauwkeurigheid te weerspiegelen waarmee de matrix A verkregen is, c.q. verder verwerkt (d.w.z. berekend) wordt. Dit betekent dat de tolerantie ϵ in ieder geval consistent dient te zijn met de machine-nauwkeurigheid⁴¹, bijv.⁴² $\epsilon = \mathbf{u} \|A\|_\infty$. Als echter het algemene niveau van nauwkeurigheid waarmee A verkregen is (d.w.z. onnauwkeurigheid in de data) hoger is dan \mathbf{u} , dan dient ϵ dienovereenkomstig groter gekozen te worden, bijv. $\epsilon = 10^{-2} \|A\|_\infty$ indien de elementen van A slechts op twee cijfers correct zijn.

Passen we het begrip ‘numerieke rang’ toe op de gevoeligheidsmatrices $X(\theta^*)$, respectievelijk $\tilde{X}(\theta^*)$ uit (2.12) en (2.15), dan weerspiegelt r_ϵ (voor adequate keuze van ϵ) in feite het aantal parameters dat geschat kan worden. Indien dit aantal kleiner is dan het totaal aantal te schatten parameters, dan is het model numeriek niet lokaal identificeerbaar in het parameter punt θ^* . Op deze wijze kunnen gefundeerde uitspraken over de identificeerbaarheid van de parameters gedaan worden. Vergelijk de aanpak die in Mous [1991] beschreven is.

⁴¹Als maat voor de machine-precisie wordt de grootte \mathbf{u} gehanteerd. \mathbf{u} is de *unit roundoff* die gedefinieerd is als $\frac{1}{2}\beta^{1-t}$ indien afrond-aritmetiek gebruikt wordt, en als β^{1-t} indien afbreek-aritmetiek gehanteerd wordt. Hierbij is β de machine basis, en t de precisie (bijv. $\beta = 16, t = 14$ voor IBM370 lange precisie berekeningen). Zie Golub en van Loan [1989].

⁴²De matrix-norm $\|A\|_\infty$ is gedefinieerd als $\max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ voor $m \times n$ matrices A .

Appendix C: Enkele opmerkingen over identificeerbaarheid

In deze appendix gaan we middels enkele opmerkingen nader in op de identificeerbaarheidsdefinitie die in sectie 4.2 voorgesteld werd:

Opmerking C-1 -a- In wezen checkt de definitie 4.2-1 een tweetal aspecten:

1. Wordt de ‘echte’ modelparameter θ^* die ten grondslag ligt aan de (synthetische) data inderdaad teruggevonden door minimalisatie van het criterium $V(\theta)$ (*consistentie-eigenschap*)?
2. Is de via minimalisatie van $V(\theta)$ verkregen parameter lokaal eenduidig (*uniciteits-eigenschap*)?

Deze aspecten hebben betrekking op een *geïdealiseerde* situatie waarbij de (output) data in wezen ‘synthetische data’ ($y_M(\cdot, \theta^*)$) zijn die afkomstig zijn van het model.

In de praktijk hebben we natuurlijk te maken met echte data, die meetfouten bevatten. Bovendien zal het model de werkelijkheid niet exact beschrijven (modelfouten). Tegen deze achtergrond betoogt Chavent [1987] dat een alternatieve identificeerbaarheidsdefinitie adequater is. Hij stelt naast uniciteit, ook nog het aspect van *goed-gesteldheid* van het minimalisatie probleem uit (4.2-1) aan de orde (d.w.z. hangt de gevonden optimale parameter $\hat{\theta}$ ‘continu’ af van de data $y(\cdot)$?). Deze eigenschap is o.a. nuttig om convergentie- en stabiliteitsproblemen te voorkomen indien men het criterium gaat minimaliseren met gangbare numerieke optimalisatieprocedures zoals gradiënt methodes.

Een andere benadering van identificeerbaarheid, die ook toelaat dat er een bepaalde mate van niet-uniciteit in de te schatten parameters mag optreden (*Interval Identificeerbaarheid*), wordt gehanteerd door Sun en Yeh [1990b] (vergelijk ook Godfrey en DiStefano, III [1987]). Daarnaast behandelen Sun en Yeh [1990b] ook nog identificeerbaarheidsdefinities die sterk gekoppeld zijn aan het *gebruik* van het gecalibreerde model (t.b.v. predictie- c.q. management toepassingen). Deze alternatieve definities laten we buiten beschouwing.

- b- De praktische uitwerking van de identificeerbaarheidsdefinitie 4.2-1 resulteerde voor het kwadraten-som criterium uit formule (2.4) uiteindelijk in het bepalen van de ‘numerieke rang’ van de gevoeligheidsmatrix $X(\theta^*)$, respectievelijk $\tilde{X}(\theta^*)$, via gebruik van de SVD (zie appendix B).

Uit deze SVD kan tevens nuttige informatie verkregen worden over het minimaliseren van het criterium $V(\theta)$ in de buurt van θ^* . De goed-gesteldheid van dit minimalisatie probleem wordt immers bepaald door het conditie-getal van de Hessiaan $H(\theta^*)$, terwijl een eigenwaarden-eigenvector decompositie van $H(\theta^*)$ inzicht in de nauwkeurigheid van de verkregen schattingen levert. [Voor uitgebreidere informatie hierover zie met name Gill et al. [1981], secties 8.2.2 en 8.3.3; vergelijk ook Press et al. [1986], secties 14.4 en 14.5; Thacker [1989].] Nu volgt uit (4.2-9) eenvoudig dat de SVD van de matrix $\tilde{X}(\theta^*)$ rechtstreeks bruikbaar is om deze informatie over $H(\theta^*)$ te verkrijgen: immers indien de SVD van $\tilde{X}(\theta^*)$ gelijk is aan:

$$\tilde{X}(\theta^*) = U\Sigma V^T \quad (\text{C} - 1)$$

dan is

$$H(\theta^*) = 2V\Sigma^T\Sigma V^T \quad (\text{C} - 2)$$

een eigenwaarden-eigenvector decompositie van $H(\theta^*)$.

Het voorgaande maakt duidelijk dat de hier gehanteerde identificeerbaarheids-definitie, die met name gericht was op het tweede aspect (locale uniciteit) uit sectie 4.1, ook sterk betrekking heeft op het derde aspect (goed-gesteldheid) uit sectie 4.1. Bovendien brengt bovengaande redenering onze definitie in verband met de definitie gegeven in Chavent [1987] (zie opmerking (a) hierboven).

- c- Onze definitie van identificeerbaarheid was gebaseerd op een gedachten-experiment waarbij de meetdata exact verondersteld werden, en afkomstig waren van het achterliggende model met parameter-waarden θ^* . Dit resulteerde in een nadere studie van het minimalisatieprobleem voor het (kunstmatige) criterium $V(\theta)$.

Indien we daadwerkelijk met calibratie bezig gaan hebben we echter niet met het criterium $V(\theta)$ te maken, maar met het criterium $C(\theta)$ dat gebaseerd is op *echte* meetdata. De vraag is nu gerechtigd wat onze beschouwingen op basis van $V(\theta)$ vertellen over de te verwachten identificeerbaarheidsproblemen bij het minimaliseren van $C(\theta)$.

Om hierover enig licht te doen schijnen werken we de relatie tussen de gradiënt en Hessiaan van $V(\theta)$ en $C(\theta)$ uit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(\theta)}{\partial \theta_j} &= \frac{\partial V(\theta)}{\partial \theta_j} \\ &- 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y(i) - y_M(i; \theta^*))^T \Omega \frac{\partial y_M(i; \theta)}{\partial \theta_j} \end{aligned} \quad (\text{C-3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C(\theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} &= \frac{\partial^2 V(\theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} \\ &- 2 \cdot \sum_{i=1}^N w(i) \cdot (y(i) - y_M(i; \theta^*))^T \Omega \frac{\partial^2 y_M(i; \theta)}{\partial \theta_k \partial \theta_j} \end{aligned} \quad (\text{C-4})$$

Noemen we de tweede term in het rechterlid van de vergelijkingen (C.3) en (C.4) respectievelijk r_1 en r_2 , dan kan worden aangetoond dat voor grote N (asymptotische analyse), de bijdrage r_1/N en r_2/N in veel gevallen naar nul zal tenderen indien de residuen $y(i) - y_M(i; \theta^*)$ als onderling onafhankelijk en identiek verdeeld beschouwd kunnen worden. Dit maakt aannemelijk dat de identificeerbaarheidsbeschouwingen op basis van $V(\theta)$ rechtstreeks bruikbaar zijn voor het criterium $C(\theta)$.

- d- Om de invloed van *herparametrisatie* na te gaan op de identificeerbaarheid, veronderstellen we dat de getransformeerde parameter-vector gegeven wordt door $\tilde{\theta} = g(\theta)$, waarbij $g : R^p \rightarrow R^p$ een voldoende gladde één-één transformatie is. Laat $h : R^p \rightarrow R^p$ de corresponderende inverse transformatie zijn (d.w.z. $\theta = h(\tilde{\theta})$), dan kan via de ketting-regel worden afgeleid dat de Hessiaan van $V(h(\tilde{\theta}))$ in $\tilde{\theta}^* (= g(\theta^*))$ gelijk is aan:

$$\frac{\partial^2 V(h(\tilde{\theta}))}{\partial \tilde{\theta}^2} \Big|_{\tilde{\theta}^*} = \left[\frac{\partial h^T(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}} \right] \Big|_{\tilde{\theta}^*} \cdot \frac{\partial^2 V(\theta)}{\partial \theta^2} \Big|_{\theta^*} \cdot \left[\frac{\partial h^T(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}} \right]^T \Big|_{\tilde{\theta}^*} \quad (\text{C-5})$$

Beperken we ons nader tot het gewogen kwadraten-som criterium uit (2.4), dan kan een alternatieve uitdrukking worden afgeleid: Geheel in analogie met de uitdrukkingen (4.2-8) en (4.2-9) kan de Hessiaan van $V(h(\tilde{\theta}))$ in $\tilde{\theta}^*$ uitgedrukt worden in termen van de eerste orde afgeleide $\frac{\partial y_M^T(i; \tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}}$ m.b.t. de getransformeerde parametervector $\tilde{\theta}$. Via de ketting-regel

kan worden afgeleid dat deze grootheid gelijk is aan:

$$\frac{\partial y_M^T(i; \tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}} = \left[\frac{\partial h^T(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}} \right] \cdot \frac{\partial y_M^T(i; \theta)}{\partial \theta} \quad (\text{C-6})$$

Bovenstaande transformatie-formules vormen de ingrediënten om te onderzoeken hoe de identificeerbaarheid beïnvloed wordt via herparametrisatie (zie Sorooshian en Gupta [1985]).

- e- Sorooshian en Gupta [1985] gebruiken de Hessiaan $H(\theta^*)$ ook als uitgangspunt voor hun identificeerbaarheidsanalyse. Voor elke *afzonderlijke* parameter worden een tweetal geometrische grootheden gedefinieerd waarvan de ratio als maat wordt gehanteerd voor de mogelijke effecten van parameter-interactie en compensatie op de identificeerbaarheid van deze parameter.

■

De uitwerking die in appendix B gegeven werd van de identificeerbaarheids definitie had betrekking op kwadraten-som criteria die aanleiding gaven tot een voldoende gladde geassocieerde functie $V(\theta)$. Locale uniciteit van het minimum θ^* kon onderzocht worden op basis van het positief zijn van de Hessiaan. In situaties waarin $V(\cdot)$ niet voldoende glad is kan deze benadering niet rechtstreeks gehanteerd worden. In de nu volgende opmerking gaan we in op de mogelijkheden die we dan hebben.

Opmerking C-2 Het lokaal uniek zijn van een continue functie $V(\theta)$ in de buurt van het parameterpunt θ^* kan onderzocht worden door vanuit θ^* in een willekeurige richting, gekarakteriseerd door de 'richtingsvector' $c \in R^p$, te 'vertrekken' en door de onderzoeken hoe de functie langs die richting verandert. Definieer daartoe de continue functie:

$$V_c(h) := V(\theta^* + h \cdot c) \quad (\text{C-7})$$

waarbij $h \geq 0$ de stapgrootte in de richting c weergeeft. Indien de eerste twee afgeleiden $V_c'(h)$ en $V_c''(h)$ voor $0 < h < \delta$ bestaan, en indien tevens hun limieten bestaan voor $h \downarrow 0$, dan zal de functiewaarde $V(\cdot)$ toenemen 'lopend' in de richting c (vanuit θ^*), als er voldaan wordt aan de volgende (voldoende) voorwaarde(n):

$$\lim_{h \downarrow 0} V_c'(h) > 0 \quad (\text{C-8})$$

$$\text{òf} \quad (\text{C-9})$$

$$\lim_{h \downarrow 0} V_c'(h) = 0 \quad \wedge \quad \lim_{h \downarrow 0} V_c''(h) > 0$$

Indien deze eigenschap voor *willekeurige* richtingen $c \in R^p$ geldt, dan zal θ^* een lokaal uniek minimum van $V(\theta)$ zijn. Het checken van deze voorwaarde kan voor speciale situaties vereenvoudigd worden tot:

- Voor functies $V(\theta)$ die tweemaal continu differentieerbaar zijn in een omgeving van θ^* kan eenvoudig worden aangetoond dat bovenstaande eisen overeenkomen met het nul zijn van de gradiënt en het positief definit zijn van de Hessiaan in θ^* . Dit resulteert in wezen in de procedure die in de hoofdttekst werd gepresenteerd.

- Indien echter de eerste en tweede afgeleiden van $V(\theta)$ in de omgeving van θ^* bestaan⁴³, maar *niet* continu zijn in θ^* , dan kunnen de bovenstaande voorwaarden in veel gevallen nader uitgewerkt te worden tot een set eenvoudiger condities. Dit kan evenwel een bewerkelijke taak zijn.

Als bovenstaande vereenvoudigingen niet haalbaar/geldig zijn, dan dienen alternatieve wegen bewandeld te worden om de locale uniciteit van een minimum aan te tonen. Indien kan worden aangetoond dat minimalisatie van $V(\theta)$ in de buurt van θ^* theoretisch gezien neer komt op het minimaliseren van een andere functie $W(\theta)$ in de buurt van θ^* , dan kan een studie van de locale uniciteit van het minimum van $W(\theta)$ uitsluitel geven over $V(\theta)$. Met name indien $W(\theta)$ tweemaal continu differentieerbaar is, dan kan dit onderzocht worden op basis van de gradiënt en Hessiaan van $W(\theta)$ in θ^* .

Deze techniek kan bijv. worden toegepast voor de niet-gladde ‘min-max’ (l_1 -norm) en ‘absolute waarden-som’ (l_∞ -norm) criteria (zie Gill et al. [1981], sectie 4.2.3). Minimalisatie van de bijbehorende $V(\theta)$ zal i.h.a. *theoretisch*⁴⁴ gezien equivalent zijn met de minimalisatie van een kwadraten-som criterium, zodat de theoretische identificeerbaarheidsbeschouwingen aan de hand van gradiënt en Hessiaan van dit kwadraten-som criterium kunnen plaats vinden.

■

⁴³Uitgezonderd in θ^* zelf.

⁴⁴Dit betekent evenwel niet dat de praktische aspecten van het daadwerkelijk optimaliseren van het ‘min-max’ of ‘absolute waarden-som’ criterium ook equivalent zullen zijn met het geassocieerde kwadraten-som criterium. Veelal zullen er andere numerieke procedures nodig zijn, en zal ook de geconditioneerdheid van het optimalisatieprobleem verschillen.

Referenties

- Bard Y. [1974]. *Nonlinear Parameter Estimation*. Academic, New York.
- Beck M.B. [1987]. Water quality modelling: a review of the analysis of uncertainty. *Water Resources Research*, Vol. 23, pp. 1393-1442.
- Belman R., Åström K.J. [1970]. On structural identifiability, *Math. Biosci.*, Vol. 7, pp. 329-339.
- Caracotsios M., Stewart W. E. [1985]. Sensitivity analysis of initial value problems with mixed ODE's and algebraic equations. *Computers & Chemical Engineering*, Vol 9, pp. 359-365.
- Chavent G. [1987]. Identifiability of parameters in the output least squares formulation. In *Identifiability of Parametric Models*; ed. E. Walter; pp. 67-84. Pergamon Press, Oxford.
- Chavent G. [1991]. On the theory and practice of non-linear least-squares. *Adv. Water Resources*, Vol. 14, pp. 55-63.
- Gentil S. [1982]. Identifiability study of an aquatic ecosystem model. *Int. J. Systems Science*. Vol. 13, pp. 881-895.
- Gill P., Murray W., Wright M.H. [1981]. *Practical Optimization*. Academic Press, New York.
- Godfrey K.R., Chapman M.J. [1990]. Identifiability and indistinguishability of linear compartmental models. *Mathematics and computers in Simulation*, Vol. 32, pp. 273-295.
- Godfrey K.R., DiStefano, III J.J. [1987]. Identifiability of model parameters. In *Identifiability of Parametric Models*; ed. E. Walter; pp. 1-20. Pergamon Press, Oxford.
- Golub G.H., Loan van F. [1989]. *Matrix Computations*. Second Edition, The John Hopkins University Press, Baltimore.
- Janssen P.H.M., Slob W., Rotmans J. [1990]. Gevoeligheidsanalyse en onzekerheidsanalyse: een inventarisatie van ideeën, methoden en technieken. *RIVM rapport nr. 958805001*, Bilthoven.
- Janssen P.H.M., Heuberger P.S.C., Sanders R. [1991]. *UNCSAM 1.0: a Software Package for Sensitivity and Uncertainty Analysis; Manual*. Concept rapport, RIVM, Bilthoven.
- Ljung L. [1987]. *System Identification: theory for the user*, Prentice Hall.
- Knopman D.S., Voss C.I. [1987]. Behavior of sensitivities in the one-dimensional advection-dispersion equation: Implications for parameter estimation and sampling design. *Water Resour. Res.*, Vol. 23, pp. 253-292.

- Knopman D.S., Voss C.I. [1988]. Further comments on sensitivities, parameter estimation and sampling design in one-dimensional analysis of solute transport in porous media. *Water Resour. Res.*, Vol. 24, pp. 225-238.
- Knopman D.S., Voss C.I. [1989]. Multiobjective sampling design for parameter estimation and model discrimination in groundwater solute transport. *Water Resour. Res.*, Vol. 25, pp. 2245-2258.
- Knopman D.S., Voss C.I., Garabedian S.P. [1991]. Sampling design for groundwater solute transport: tests of methods and analysis of Cape Cod tracer test data. *Water Resour. Res.*, Vol. 27, pp. 925-949.
- Kohberger R.C., Scavia D., Wilkinson J.W. [1978]. A method for parameter sensitivity analysis in differential equation models. *Water Resources Research*, Vol. 14, pp. 25-29.
- Koopmans W. [1992]. *Calibratie van een vermistingsmodel*. Stageverslag Faculteit Toegepaste Wiskunde; Universiteit Twente.
- Mous S.L.J. [1991]. Identification of the movement of water in unsaturated soils: the problem of identifiability of the model. *Technical Note 91-05*, Dept. of Mathematics; Wageningen Agricultural University.
- Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T. [1986]. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. Cambridge University Press.
- Sorooshian S., Arfi F. [1982]. Response surface parameter sensitivity analysis methods for post-calibration studies. *Water Resources Research*, Vol. 18, pp. 1531-1538.
- Sorooshian S., Gupta V.K. [1985]. The analysis of structural identifiability: theory and application to conceptual rainfall-runoff models. *Water Resources Research*, Vol. 21, pp. 487-495.
- Sun N-Z., Yeh W. W-G. [1990a]. Coupled inverse problems in groundwater modeling: 1. Sensitivity analysis and parameter identification. *Water Resources Research*, Vol. 26, pp. 2507-2525.
- Sun N-Z., Yeh W. W-G. [1990b]. Coupled inverse problems in groundwater modeling: 2. Identifiability and experimental design. *Water Resources Research*, Vol. 26, pp. 2527-2540.
- Thacker W.C. [1989]. The role of the Hessian matrix in fitting models to measurements. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 94, pp. 6177-6196.
- Walter E. [1982]. *Identifiability of state space models*. Springer Verlag, New York.
- Walter E. [1987]. *Identifiability of Parametric Models*. Pergamon Press, Oxford.
- Walter E., Pronzato L. [1990]. Qualitative and quantitative experiment design for phenomenological models - a survey. *Automatica*, Vol. 26, pp.195-213.

- Yeh W. W-G. [1986]. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem. *Water Resources Research*, Vol. 22, pp. 95-108.
- Yeh W. W-G., Sun N-Z. [1990]. Variational sensitivity analysis, data requirements, and parameter identification in a leaky aquifer system. *Water Resources Research*, Vol. 26, pp. 1927-1938.