

Zelfcorrigerende Real Time Control Systemen

Het filteren van simulatiefouten via een ARMA model

Jeroen Duel



Titel	Zelfcorrigerende Real Time Control Systemen
Opdrachtgever	Witteveen+Bos
Auteur(s)	Duel, Jeroen
Projectomschrijving	Mogelijkheden van AR en ARMA modellen voor het verbeteren van voorspelde waterbegingen door het simulatiemodel binnen een Real Time Control systeem
Aantal pagina's	50 (exclusief bijlagen)
Datum	28 augustus 2014

Impressum

Van Hall Larenstein
Land & Watermanagement
Larensteinselaan 26
Postbus 9001
6882 CT Velp
Telefoon +31 26 369 56 95 (receptie)
Fax +31 26 361 52 87

Inhoud

Voorwoord	V
Samenvatting	VII
Verklarende woordenlijst.....	IX
Verklarende symbolenlijst	XIII
1. Inleiding	1
2. Opzet Real Time Control systeem	5
2.1 Opzet simulatiemodel.....	5
2.2 Opzet foutmodel	7
3. Impulsrespons	9
3.1 Frequentiedomein	9
3.2 Z-domein	13
3.2.1 Convergentie	13
3.2.2 Polen en Nulpunten	16
3.3 Discrete tijdsdomein	17
3.3.1 Causaliteit en stabiliteit van LDI systemen.....	17
3.3.2 Witte ruis.....	18
3.3.3 Autoregressief model.....	18
3.3.4 Voortschrijdend gemiddelde	20
3.3.5 Autoregressief voortschrijdend gemiddelde	21
4 Initialisatie foutmodel.....	23
4.1 Ordegrootte	24
4.2 AR parameters	26
4.3 ARMA parameters.....	31
4.3.1 Meest aannemelijke schatter.....	31
4.3.2 Hannan-Risannen methode	31
5. Simulatiemodel.....	33
6. Resultaten foutmodel	35
6.1 Rainfall Runoff module	35
6.2 1D Flow module	37
7. Conclusies & discussies.....	45
Literatuurlijst.....	48

Bijlage	
A. Kaarten stroomgebied Mark-Vliet	51
B. Matrices.....	59
B.1 Transporteren.....	59
B.2 Determinant.....	59
B.3 Geadjugeerde matrix	59
B.4 Inverteren	59
B.5 Gauss eliminatie.....	60
B.6 Speciale Matrices.....	61
B.6.1. Symmetrische matrix	61
B.6.2. Diagonaal matrix	61
B.6.3. Eenheidsmatrix	62
B.6.4. Toeplitz matrix.....	62
B.6.5. Vandermonde matrix.....	63
B.6.6. Complexe getallen	63
B.7 Eigenwaarden	63
C. Gekwadrateerde residu.....	65
C.1 Normale kleinste gekwadrateerde residu	65
C.2 Gauss-Markov Theorie	67
C.3 Gegeneraliseerde kleinste kwadraten residu	68
D. Python en Extensies	71

Voorwoord

Dit rapport is een product van de zes maand durende afstudeerstage onder de studie Land & Watermanagement bij Witeveen+Bos. Ik wil de begeleiders vanuit Witeveen+Bos; Hans Korving en Herman Mondeel, en de begeleider en tevens mijn studieloopbaanbegeleider vanuit Van Hall Larenstein; Gertjan Koopman, bedanken voor hun tijd, begeleiding en vaktechnische feedback.

Samenvatting

Door de commissie Waterbeheer 21^{ste} Eeuw is een nieuwe aanpak voor het waterbeheer omschreven, naar aanleiding van wateroverlast en extreme waterstanden in het laatste decennium. Hierin worden structurele veranderingen in het beheer en de inrichting van de watersystemen aanbevolen. In 2003 hebben het Rijk, provincies, waterschappen en gemeenten in het Nationaal Bestuursakkoord Water (NBW) afspraken gemaakt voor het gezamenlijk op orde krijgen van de watersystemen in Nederland. Hierdoor is er vraag ontstaan naar nieuwe voorspellings- en sturingssystemen waarmee aan de nieuwe normen voldaan kan worden.

Om te voldoen aan de nieuwe NBW toetsingsnormen hebben de waterschappen De Dommel, Aa en Maas en Brabantse Delta samen met Rijkswaterstaat opdracht gegeven aan Witteveen+Bos om een gedetailleerd hydraulisch model van optredende waterstanden te voorspellen in stroomgebied Mark-Vliet en een bijbehorende sturingsoptimalisatie van de kunstwerken. In het kader van deze opdracht is Witteveen+Bos begonnen aan de ontwikkeling van een verbeterd Real Time Control (RTC) systeem; BOS 2.0 (Beslissings Ondersteunend Systeem).

In dit rapport is onderzoek gedaan naar de mogelijkheden om een autoregressief model, $AR(p)$, of autoregressief voortschrijdend gemiddelde model, $ARMA(p, q)$, te gebruiken als foutmodel om de zwak lineair stochastische fout tussen gesimuleerde waterbewegingen en gemeten waterbewegingen te filteren.

Het onderzoek is opgesplitst in twee delen. Het eerste deel is een literatuurstudie naar Real Time Control systemen, $AR(p)$ en $ARMA(p, q)$ modellen en bijbehorende methoden voor het opzetten daarvan. Het tweede deel is de theorie toetsen aan de praktijk. Dit is gedaan door de methoden naar Python te vertalen en deze te onderwerpen aan de berekende waterbewegingen van een versimpeld en een gedetailleerd simulatiemodel in SOBEK. Getracht wordt om de resultaten van een versimpeld simulatiemodel, waarbij minder geleverde kennis aanwezig is dan het gedetailleerde simulatiemodel, overeen te laten komen met het gedetailleerde simulatiemodel.

Het programmeren van een $ARMA(p, q)$ model die de gesimuleerde waterbeweging van het versimpelde simulatiemodel als invoer neemt en een uitvoer, waarbij ten opzichte van het gedetailleerde model een toename in coïntegratie geconstateerd kan worden zonder een sterke afname in de correlatie, levert is niet gevonden tijdens het onderzoek. Echter kan met behulp van de simulaties en literatuurstudie wel een selectie uit de onderzochte methoden gegeven worden.

De autocorrelatie en partieel autocorrelatie hebben een karakteristiek $ARMA(p, q)$ beweging. Hierdoor alleen al kan geconstateerd worden dat een $ARMA(p, q)$ als foutmodel voor het RTC systeem een beter resultaat zal geven dan wanneer alleen het autoregressief deel wordt meegenomen; $AR(p)$.

Het vervangen van de Rainfall-Runoff module van SOBEK door een autoregressief voortschrijdend gemiddelde foutmodel om neerslag naar afvoer op de 1D Flow module te vertalen is af te raden. Foutmodellen dienen ter verbetering van simulatiemodellen, maar hebben zelf niet de toestandsvariabelen en meegenomen kennis om ingewikkelde milieumodellen zoals oppervlakte-afvoer systemen na te bootsen. Vóór het gebruik van een

foutmodel bij oppervlakte-afvoer zal eerst een schatting gemaakt moeten worden door een simulatiemodel.

Het toepassen van een ARMA model voor het verbeteren van de gesimuleerde waterbewegingen in de 1D Flow module van SOBEK is mogelijk, maar niet zonder haken en ogen. Veelal wordt er in de methode van ARMA modellen van witte ruis uitgegaan, terwijl de waterbewegingen in de hydraulische simulatiemodellen veelal niet Gaussisch verdeeld is. De kwartiel-kwartiel plot laat zien dat de ruis niet normaal verdeeld is, maar T-student verdeeld. Het debiet is immers afhankelijk van de neerslagen en die zijn niet constant. Tevens is de residu van de serie heteroscedastisch en niet homoscedastisch. Daarom zal een methode met gewogen kleinste kwadraten methode toegepast moeten worden in plaats van de normale kleinste kwadraten methode.

Op basis van de literatuurstudie en voorgaande uitspraken is de meest belovende aanpak uit alle onderzochten methoden voor het initialiseren van het foutmodel om eerst via autocorrelatie en partieel autocorrelatie een afbakening te maken voor de ordeschatting. Daarna wordt binnen de afbakening parameterschattingen gedaan. Voor de parameterschatting is de combinatie van Levinson-Durbin en Hannan-Risannen met een gewogen kleinste kwadraten residu in plaats van een normaal kleinste kwadraten residu het meest belovend. De waarschijnlijkheid van de gevonden parameters worden daarna met behulp van informatiecriteria gewogen aan de ordegraote, waarna een zorgvuldige selectie kan worden gemaakt.

Verder onderzoek is nodig naar de uitwerking van de potentiële methodes. Hierbij wordt aanbevolen om alvorens het programmeren van de opzetten, deze eerst te toetsen in gespecialiseerde signaalverwerking software. Het programmeren is tijdrovend en weegt niet op tegen de kosten voor een licentie van professionele software.

Verklarende woordenlijst

Onderstaand staan begrippen zoals ze binnen het vakgebied veelvuldig worden toegepast.^{1,2,3,4}

Autocorrelatie

De correlatie tussen de waarden op verschillende tijdstappen in een stochastisch proces.

Achterwaartse koppelingscontrole

Aan de hand van de karakteristieke resultaten van een variabele met fluctuaties de compensatiemaatregelen tegen de fluctuaties van de variabele zelf bepalen.

Asymptotisch gelijk aan

Het linkerlid is zodanig voldoende gelijk aan het rechterlid, dat deze voor een bepaald praktisch doel dicht genoeg de exacte waarde nadert.

Complex

Uitbreiding van alle rationale en irrationele getallen door het toevoegen van een imaginair deel. Het symbool van een complex getallenstelsel is $\mathbb{C}$.

Correlatie

Lineaire, of bijna lineaire samenhang tussen twee reeksen metingen of mogelijke waarden van twee toevalvariabelen. Het geeft de sterkte van de samenhang aan.

Covariantie

Geeft aan in welke mate de beide toevalvariabelen lineair met elkaar samenhangen. Het geeft niet de sterkte, maar de richting van de samenhang aan.

Doorlooptijd

Duur van tijdsperiode waarover een voorspelling gedaan moet worden. In de modelleer is de doorlooptijd de tijd die nodig is voor het overbruggen tussen twee modelresultaten, ofwel de simulatie van een model.

Eenheidscirkel

Een eenheidscirkel is een cirkel met een straal waarvan de waarde één om de oorsprong. Hierdoor heeft de cirkel de volgende twee eigenschappen: $x^2 + y^2 = 1$ en $\cos^2(r) + \sin^2(r) = 1$.

Geleverde kennis

De geleverde kennis door hydraulische modellen is probabilistisch van aard. In theorie maakt het gebruik van een complex hydraulisch model het mogelijk om inzicht te krijgen wat de

¹ R.H. van Waveren e.a. ,*Vloeiend modelleren in het waterbeheer, Handboek Good Modelling Practice*, STOWA/RIZA 1999, STOWA rapport 99-05, Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036, ISBN-nr. 90-57773-056-1

² J. Doherty, *Methodologies and Software for PEST-based Model Predictive Uncertainty Analysis*, September 2010, Watermark Numerical Computing

³ Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc.

⁴ Ljung, L., Glad, T., *Modelling of dynamic systems*, 1994, P T R Prentice Hall

kennis daadwerkelijk is: een reeks van mogelijkheden dat (hopelijk) de werkelijke toestand van het model omvat.

Gemiddeld gekwadrateerde voorspellingsfout (Mean Squared Prediction Error)

De verwachte waarde voor het gekwadrateerde verschil tussen de regressieve waardes $\hat{x}$ en de waarneembare/gemeten waardes x .

Hogere Orde Statistiek (HOS)

Hogere orde statistiek is een wiskundige methode om (hogere orde) statistische eigenschappen, waaronder derde of hogere orde cumulanten en momenten, van een willekeurig proces te verkrijgen.⁵

Interventie

Ingrijpende gebeurtenis op de interne werking van het gesimuleerde (water)systeem, veelal door het milieu buitenstaande handelingen. Bijvoorbeeld het veranderen van kruinhoogtes van stuwen of het snoeien van waterplanten in waterlopen.

Lage Orde Statistiek (LOS)

Lagere orde statistiek zijn een wiskundige methode om (lage orde) statistische eigenschappen te bepalen. Hieronder vallen eigenschappen en functies zoals eerste en tweede orde cumulanten, correlaties en varianties.⁶

Limiet

Gegeven: $f(x)$ is een functie, gedefinieerd in een omgeving van a . f hoeft hierbij niet gedefinieerd te zijn. $f(x)$ heeft de limiet A als x tot a nadert, indien er bij elke willekeurig gekozen $\varepsilon > 0$ een omgeving O van a is, zodanig dat $A - \varepsilon < f(x) < A + \varepsilon$ voor alle x in O .

Indien a en q reële getallen $\mathbb{R}$ zijn en

als $f(x) = q$, dan is $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} q = q$,

als $f(x) = x$, dan is $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} x = a$

Linear tijdinvariant discreet systeem (LTD)

Een systeem verwerkt één of meerdere ingangssignalen, ook wel excitaties genoemd, op lineaire manier tot één of meerdere uitgangssignalen, ook wel responsen of responsies genoemd.

Neiging naar fouten

De resulterende 'onzekerheid' van de berekende uitkomst door Real Time Control, mede tot stand gekomen door in het model niet meegenomen oorzaken.

Onzekerheid

Onzekerheid van (bekende) eigenschappen van het systeem zelf, gebaseerd op vaktechnische kennis, of gebaseerd op informatie uit de metingen van het systeem. Deze vorm van onzekerheid is concreter dan de 'neiging naar fouten'.

Parameters

Parameters zijn de constanten in het model, waarvan de waarde niet nauwkeurig bekend is. Parameters kunnen onderscheiden worden in systeemp parameters en designparameters. De

⁵ Zhong, Y., Zheng, Z., Jiang, T., *Research on perfect binary correlation sequences based on higher-order cumulant*, mei 2013, Springer International publishing AG

⁶ Zhong, Y., Zheng, Z., Jiang, T., *Research on perfect binary correlation sequences based on higher-order cumulant*, mei 2013, Springer International publishing AG

systeemparemeters zijn constanten gegeven door het systeem en de designparameters zijn constanten die door een modelleur veranderd kunnen worden om het systeem andere eigenschappen te geven.

Recurisie

Een functie die in zijn definitie zichzelf aanroept. Zie recursie.

Reëel

Alle rationale en irrationele getallen. Het symbool van een reëel getallenstelsel is $\mathbb{R}$.

Residu

1. (simulatiemodel:) Het verschil tussen de uitkomsten van een model en de veldmetingen.
2. (foutmodel:) Hetgeen wat overblijft na het toepassen van een filter op een reeks.

Ruis

Verstorend signaal.

Standaardafwijking, standaarddeviatie

De maat van spreiding van een variabele of van een verdeling. De standaardafwijking is de wortel van de variantie.

Toestand

De toestand is een verzameling variabelen binnen het systeem op een bepaald tijdstip, waarin alle informatie van het verleden is opgeslagen die relevant is voor de toekomst van het systeem.

Variabelen / signalen

Een variabele of signaal is een hoeveelheid dat veranderd over de tijd. De variabelen en signalen kunnen onderverdeeld worden in externe signalen, verstorende signalen, uitvoer en interne variabelen. Een extern signaal is een variabele die niet wordt beïnvloedt door de rest van het model. Verstorende signalen zijn signalen die de modelleur niet kan beïnvloeden. De uitvoer is een variabele waarvan het gedrag van primaire interesse is voor het modelproject. Interne variabelen zijn variabelen in het systeem die geen uitvoer of extern signaal is.

Variantie

De maat van spreiding van een reeks waarden; het meet in hoeverre de waarden zijn gespreid.

Voorspelbaarheid

De mate waarin het model een correcte voorspelling levert.

Voorwaartse koppelingscontrole

Wanneer fluctuatie in een variabele niet veranderd kan worden, maar wel geobserveerd, dan bestaat de mogelijkheid dat de fluctuatie gecompenseerd kan worden door verandering in andere toestandvariabelen / parameters.

Verwachtingsfunctie

De verwachtingsfunctie heeft de vorm $E(X)$ en resulteert in de meest waarschijnlijke waarde voor X . Bij een steekproef over een gehele populatie zou dit het populatiegemiddelde μ zijn.

Verklarende symbolenlijst

Notatie

x, y, ξ, η
 $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}$
 $\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n, \boldsymbol{\xi}_n, \boldsymbol{\eta}_n$
 $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$
 $\sum_{i=0}^p a_i b_i$
 $\prod_{i=0}^p a_i b_i$
 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
 $f(x)$
 $(a_0, a_1, \dots)$
 $(a_0, a_1, \dots, a_n)$
 $\{a | a > 0\}$
 $a|_{a>0}$
 $a \begin{cases} 1 & b = 0 \\ 0 & b \neq 1 \end{cases}$

Betekenis

variabelen
 vectoren
 vectoren op moment n
 matrices
 Som van reeks variabelen a en b op tijdstappen 0 tot en met p
 Product van reeks variabelen a en b op tijdstappen 0 tot en met p
 Vector $\mathbf{x}$ is gelegen in $\mathbb{R}^n$
 functie f met argument x
 reeks variabelen a van stap 0 tot en met ∞
 reeks variabelen a van stap 0 tot en met n .
 reeks variabelen a die voldoen aan voorwaarde $a > 0$
 indien variabele a voldoet aan voorwaarde $a > 0$
 waarde van a is gelijk aan 1 als voorwaarde $b = 0$ waar is. Zo niet, dan wordt gekeken of aan de volgende voorwaarde $b \neq 1$ wordt voldaan.

Functie

$\max(a, b)$
 $\max(\mathbf{a})$
 $\min(a, b)$
 $\min(\mathbf{a})$
 $\delta_{a,b}$

Verklaring

$= a \begin{cases} a & a > b \\ b & b < a \end{cases}$
 $= a_n |_{a_n > a_i, i \neq n}$
 $= a \begin{cases} a & a < b \\ b & b > a \end{cases}$
 $= a_n |_{a_n < a_i, i \neq n}$
 $= \begin{cases} 1 & a = b \\ 0 & b \neq a \end{cases}$

Symbol	Grootheid	Eenheid
a	1. Versnelling 2. ligging ten opzichte van de reële as	m/s^2
A_f	nat oppervlak	m^2
$\mathbf{A}$	de toestand van de vorige tijdstap ten opzichte van de huidige bekeken tijdstap, waarbij ruis en sturende factoren zijn verwaarloost	
b	ligging ten opzichte van de imaginaire as	
$\mathbf{B}$	optionele sturing (interventie)	
C	getal van Chézy	$\text{m}^{1/2}/\text{s}$
$\mathbb{C}^n$	complexe ruimte met n dimensies	
$\mathbf{d}$	verstorende toestandsvariabelen	
g	Zwaartekrachtversnelling	m/s^2
$\mathbf{h}$	Impulsrespons	
$\mathbf{H}$	toestand van de metingen	
$H(z)$	z-transformatie van impulsrespons $\mathbf{h}$	
$H(\omega)$	Fourier-transformatie van impulsrespons $\mathbf{h}$	
i	1. Index/teller 2. Kolom index 3. Imaginair getal	$\sqrt{-1}$

Symbool	Grootheid	Eenheid
j	1. Index/teller 2. Rij index 3. Imaginair getal	$\sqrt{-1}$
k	periode k	
L	lag operator	
$\mathbb{R}^n$	reële ruimte met n dimensies	
N	Populatie	
$N(\mu, \sigma^2)$	normaalverdelingsfunctie; geeft de normaalverdeling van populatiegemiddelde μ en variantie σ^2	
$p(x)$	waarschijnlijkheidsfunctie; geeft de waarschijnlijke waarde van argument x	
p	Pool	
q_{lat}	debiet per lengte	m/s^2
Q	Debiet	m/s^3
$\mathbf{Q}$	procesruis covariantie	
R	Voerstraal	M
R	hydraulische straal	M
$\mathbf{R}$	metingruis covariantie	
s	complex getal	$\sqrt{-1}$
t	Tijd	S
T	Periode	S
t	~ op tijdstap t	
v	Snelheid	m/s
$\mathbf{v}$	Procesruis	
w_f	Windwrijvingscoëfficiënt	
$\mathbf{w}$	1. Metingruis (bij parameter schatting) 2. Uitvoer AR model (bij foutcorrectie)	
x	Afstand	M
$\mathbf{x}$	geschatte toestandsvariabelen / impuls	
$X(\mathbf{z})$	t-transformatie van impuls $\mathbf{x}$	
$X(\omega)$	Fourier transformatie van impuls $\mathbf{x}$	
$\mathbf{y}$	gestuurde toestandsvariabelen	
$\mathbf{z}$	gemeten toestandsvariabelen	
$\mathbf{z}$	complex getal	
$Z(\mathbf{z})$	z-transformatie van respons $\mathbf{z}$	
$Z(\omega)$	Fourier transformatie van respons $\mathbf{z}$	
$\mathfrak{z}$	Nulpunt	
$\mathbb{Z}$	gehele getallen (integers)	
$\sim$	~ gedeeld door het populatiegemiddelde μ	
$-$	gemiddelde van ~	
$\sim$	1. geschatte waarde van ~ 2. genormeerde ~	
γ_k	autocovariantie over periode k	
ε	witte ruis	
$\boldsymbol{\theta}$	voortschrijdend gemiddelde parameters	
$\theta(L)$	voortschrijdend gemiddelde functie	
μ	Populatiegemiddelde	

ρ_k	autocorrelatie over periode k	
Symbol	Grootheid	Eenheid
ρ_{wind}	Luchtdichtheid	kg/m ³
σ_n	afwijking van n	
τ_{wind}	Schuifspanningsweerstand	N/m ²
φ	autoregressieve parameters	
$\phi(L)$	autoregressieve functie	
ω	frequentie; radialen per seconde	2 π /s
Ω	Poolhoek	2 π

1. Inleiding

Naar aanleiding van wateroverlast en extreme waterstanden in het laatste decennium van de vorige eeuw is het besef bij waterbeheerders en beleidsmakers ontstaan dat de waterveiligheid in Nederland niet gewaarborgd is. Door de commissie Waterbeheer 21^{ste} Eeuw is een nieuwe aanpak voor het waterbeheer in Nederland beschreven.⁷ Om droge voeten te waarborgen zijn structurele veranderingen in het beheer en de inrichting van de watersystemen nodig. In 2003 hebben het Rijk, provincies, waterschappen en gemeenten in het Nationaal Bestuursakkoord Water (NBW) afspraken gemaakt voor het gezamenlijk op orde krijgen van de watersystemen in Nederland.⁸ Hierdoor is er vraag ontstaan naar nieuwe voorspellings- en sturingssystemen waarmee aan de nieuwe normen voldaan kan worden.

In het waterbeheer worden hydraulische modellen gebruikt voor het voorspellen of achterhalen van antwoorden op vragen over de waterbeweging. Wanneer men via een reeks gesloten algoritmes aan de hand van neerslagvoorspellingen, veldwaarnemingen en mogelijk meerdere sturingsmaatregelen met de meeste waarschijnlijkheid wil voorspellen, spreekt men van een Real Time Control (RTC) systeem. Hierbij voorspellen de algoritmes niet de toekomst, maar de uitkomst met de hoogste waarschijnlijkheid. Dit omdat het zowaar bijna, dan al niet geheel, onmogelijk is om een model op te zetten dat de milieutoekomst in een gebied kan voorspellen onder huidig of toekomstig management.⁹ Hieronder is een opsomming van voorkomende aanleidingen hiervan:

- De complexiteit van milieuprocessen is zodanig groot dat het aantal parameters die van invloed zijn op de processen grenzeloos is
- Niet alle eigenschappen van het milieusysteem bekend zijn
- De eigenschappen variëren met een grote waarde op een kleine schaal
- Sommige componenten van het systeem kunnen alleen indirect afgeleid worden
- Opschaling van de werkelijkheid door het model
- Schaarheid aan toestandsvariabelen om op te kunnen kalibreren
- Historisch land- en watergebruik is slechts deels bekend
- Andere belangrijke systeem variabelen, zowel historisch als heden, zijn vaak deels bekend
- Bij modelbeschrijvingen van gecompliceerde milieuprocessen komen vaak numerieke problemen aan bod

Ondanks dat een hydraulisch model niet exact kan voorspellen wat er zal gebeuren, kan het wel voorspellen wat wel en wat niet kan gebeuren. Daarom wordt bij een hydraulisch model niet alleen getracht het kleinste residu te behalen, maar ook de combinatie van onzekerheden te vinden dat leidt tot een modeluitvoer met de kleinste neiging naar fouten.

Om te voldoen aan de nieuwe NBW toetsingsnormen hebben de waterschappen De Dommel, Aa en Maas en Brabantse Delta samen met Rijkswaterstaat opdracht gegeven aan Witteveen+Bos om een gedetailleerd hydraulisch model van optredende waterstanden te voorspellen in

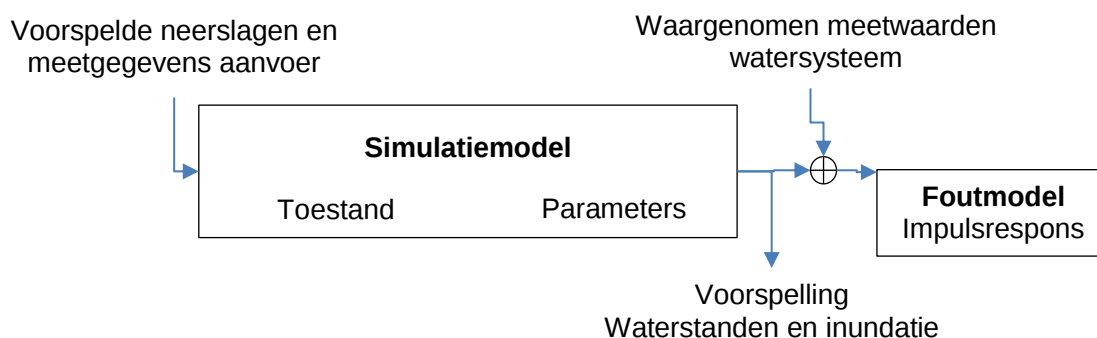
⁷ *Waterbeleid voor de 21^{ste} eeuw. Advies van de Commissie Waterbeheer 21^{ste} eeuw*, 31 augustus 2000

⁸ *Het Nationaal Bestuursakkoord Water*, 2003, Nederland leeft met Water

⁹ J. Doherty, *Methodologies and Software for PEST-based Model Predictive Uncertainty Analysis*, September 2010, Watermark Numerical Computing

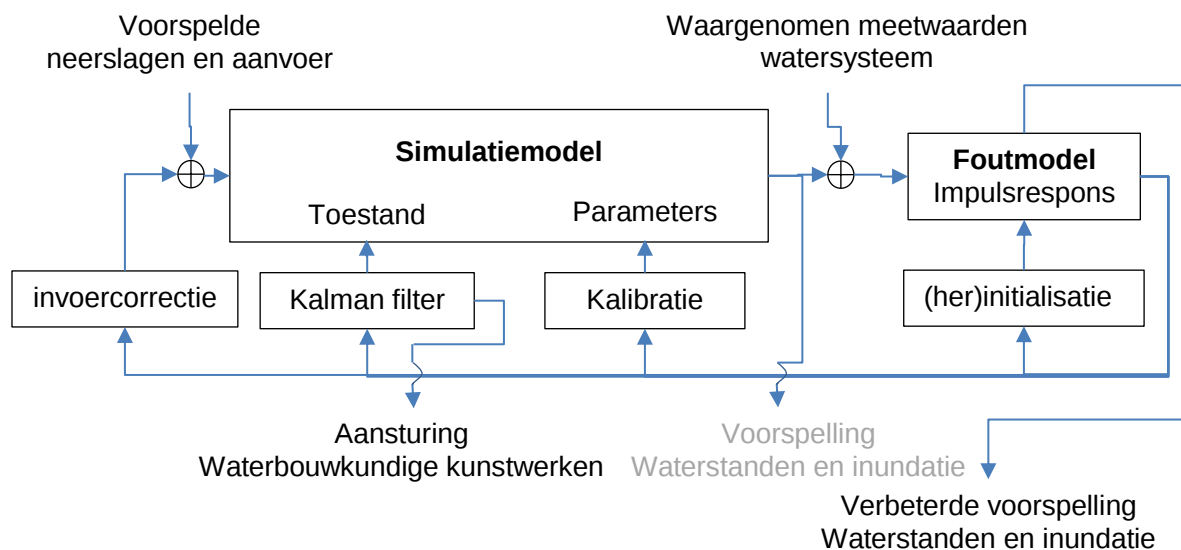
stroomgebied MARK en een bijbehorende sturingsoptimalisatie van de kunstwerken. Mogelijke inzetbare middelen voor sturing van het watersysteem zijn onder andere het verlagen of verhogen van de stuwen, inzet van waterbergingen en afvoeren naar de kanalen van Rijkswaterstaat. In kader van deze opdracht is Witteveen+Bos begonnen aan de ontwikkeling van een verbeterd Real Time Control (RTC) systeem; BOS 2.0 (Beslissings Ondersteunend Systeem).

Een Real Time Control systeem voor het voorspellen van waterstanden en daarop sluitende sturing van kunstwerken bestaat hoofdzakelijk uit twee modellen; een hydraulisch simulatiemodel die de werkelijkheid van de waterbewegingen in het systeem tracht te berekenen en een foutmodel die de voorspellingen toetst met de waargenomen waarden, zie figuur 1.1. Het simulatiemodel beschrijft het watersysteem, en wordt daardoor in dit rapport ook wel hydraulisch model genoemd, aan de hand van toestandsvariabelen en parameters. De toestand, de verzameling toestandsvariabelen, omvatten de staat van het model en de constante parameters de interacties tussen de toestandsvariabelen. De parameters kunnen onderscheiden worden in systeemparameters en designparameters. De systeemparameters zijn constanten gegeven door het systeem en de designparameters zijn constanten die door een modelleur veranderd kunnen worden om het systeem andere eigenschappen te geven.



Figuur 1.1 Een RTC systeem bestaat uit een gekoppeld simulatie en foutmodel

Het simulatiemodel heeft als invoer de voorspelde neerslag en gemeten wateraanvoer en simuleert de waterbeweging in het milieusysteem en voert de voorspellende waterstanden en inundatie als resultaat uit. Het simulatiemodel maakt gebruik van discrete tijdstappen en zodoende zijn de in- en uitvoerwaarden dat ook. De voorspelde waterstanden kunnen op of na het plaats vinden van diens tijdstap vergeleken worden met de waargenomen waterstanden. Hiervoor wordt een foutmodel gebruikt. Een foutmodel tracht een constante fout uit het model te filteren. Aan de hand van de gevonden fout(en) kan er teruggekoppeld worden naar één of meerdere update procedures. De vier update procedures luiden invoercorrectie, toestandscorrectie (Kalman filter), en parametercorrectie (kalibratie) van het hydraulisch model en (her)initialisatie van het foutmodel, zie figuur 1.2. Een belangrijke updateprocedure in het BOS 2.0 systeem is de toestandscorrectie, waarbij door middel van een Kalman filter de gewenste 'toestand' van de waterbouwkundige kunstwerken wordt berekend.



Figuur 1.2 Een RTC systeem heeft vier correctie methodes voor het oplossen van fouten

Figuur 1.2 laat zien dat door het gebruik van een simulatiemodel en een foutmodel er een gesloten algoritme is gevormd, hetgeen wat een RTC onderscheid van een normaal simulatiemodel. Het achterliggende idee van een gesloten algoritme is dat er geen gebruik wordt gemaakt van externe handelingen en er geen invoer (door menselijke handeling) van de gebruiker wordt verlangd. Zelfs niet bij interventies in het watersysteem. Onder interventies worden ingrijpende gebeurtenissen op het watersysteem door externe factoren verstaan, zoals bijvoorbeeld het snoeien van waterplanten.

Probleemstelling en deelvragen

Kan met behulp van een AR of ARMA model de voorspelde waterstanden binnen een Real Time Control systeem (RTC) verbeterd worden?

- Hoe is een RTC systeem opgebouwd?
- Wat zijn de voorwaarden voor het gebruik van een AR of ARMA model?
- Welke methoden zijn er voor het afleiden van een ARMA model uit data en welke is geschikt voor dit project?
- Kan een AR of ARMA model de berekende waterbeweging van een versimpeld simulatiemodel beter overeen laten komen met de werkelijkheid, waarbij de werkelijkheid is vervangen door een gedetailleerd simulatiemodel?

Doelstelling

Doel van dit project is het onderzoeken van de mogelijkheden van een AR of ARMA model als foutmodel in een RTC systeem. Hierbij wordt gebruik gemaakt van een versimpeld simulatiemodel en een gedetailleerd simulatiemodel. Het simulatiemodel vervangt de waterbewegingen in het veld. Hierdoor bevat de onderzoeksopzet geen meetfouten. In dit project wordt onder andere onderzocht of gebruik van een AR of ARMA model tot betere voorspellingen kan leiden. Onder betere voorspellingen wordt een toename in coïntegratie, de mate waarin de twee signalen bij elkaar in de buurt blijven (overeenkomst in trend), zonder een sterke afname in de correlatie, de mate in gelijkmatige bewegingen van twee signalen, verstaan.¹⁰ Van secundaire interesse is of dit volledig in de open-source programmeertaal Python gerealiseerd kan worden.

¹⁰ Cate, A., ten, Draper, D.A.G., *Coïntegratie en foutencorrectiemodellen*, november 1989, Centraal Planbureau

Afbakening

In dit project is onderzoek gedaan binnen de Brabantse Delta. Als testgebied is de Mark, een beek stromend door Breda, genomen. Er is gewerkt met de modellen en gegevens zoals deze aangeleverd zijn door Witteveen+Bos. Juridische aspecten en kosten-bateanalyses van berging en stuwen zijn niet meegenomen in dit project. Dit project richt zich alleen op het ontwikkelen van een foutmodel op basis van wiskundige theorieën en berekeningen van bestaand SOBEK model.

Werkwijze

Dit project is begonnen met een literatuurstudie op het gebied van signaalverwerking en Real Time Control systemen. Na de literatuurstudie is met de opgedane kennis een foutmodel opgezet in de software. Vervolgens zijn er van één studiegebied, namelijk de Mark, twee verschillende simulatiemodellen gedraaid. Eén versimpeld simulatiemodel en één gedetailleerd simulatiemodel. Vervolgens zijn de gesimuleerde waterbewegingen in het foutmodel gestopt. Daarna is getoetst of de waterbewegingen van het versimpeld model na correctie door het foutmodel meer overeen kwamen met de waterbeweging van het gedetailleerd model.

Software gebruikt in dit project is Python 2.7, met uitbreiding van matplotlib, NumPy, SciPy, Pandas, StatsModels en alle extensies die benodigd zijn voor het draaien van deze software. Dit is op verzoek van de opdrachtgever. Python en diens extensies zijn namelijk gratis en open-source, en het gebruik hiervan heeft voorkeur over software als bijvoorbeeld Matlab in verband met hoge licentiekosten. Het verhelpen van hoge kosten zal ervoor zorgen dat het in het gebruik nemen van het verbeterde RTC systeem nauwelijks druk uitoefent op de hoogte van heffingen door het Rijk, waterschappen, provincies en/of gemeenten om de uitgaafposten te dekken.

Leeswijzer

In hoofdstuk 2 wordt de opzet van een Real Time Control systeem uitgezet. In hoofdstuk 3 wordt de theorie achter de AR en ARMA modellen behandeld, waarbij de voorwaarden voor het gebruik van het model worden geconstateerd. In hoofdstuk 4 wordt de initialisatie van het foutmodel beschreven, waarbij herhaaldelijk terug wordt verwezen naar de theorie in hoofdstuk 3. In hoofdstuk 5 is het simulatiemodel omschreven. In hoofdstuk 6 worden de resultaten van de proefopstellingen gepresenteerd. Hoofdstuk 7 vormt de conclusie van het rapport met aanbevelingen voor vervolgonderzoek.

De gerapporteerde theorie is een selectie uit de bestudeerde theorie op basis van de potentie om tot het gewenste ARMA model te komen. ARMA modellen worden in verschillende werkvelden gebruikt en zijn tot heden nog steeds een onderwerp waar wetenschappelijk onderzoek naar wordt gedaan. Hierdoor is er geen uniforme aanpak of notatie, waardoor het uitleggen van meerdere methoden kan leiden tot verwarring onder lezers die nog niet bekend zijn met de stof.

Doelgroep

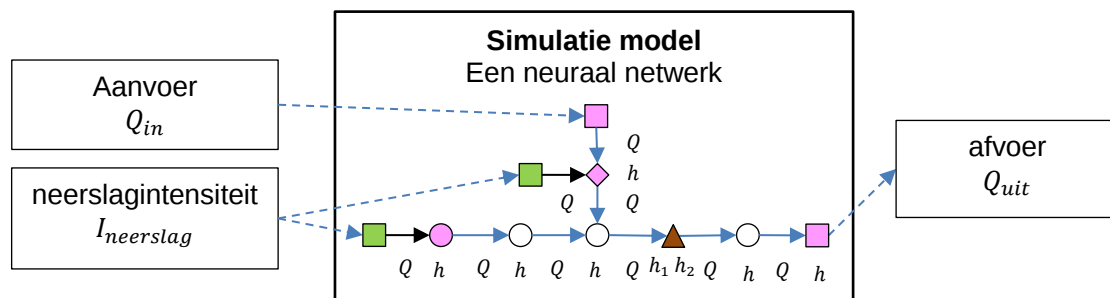
Dit onderzoek is gedaan in opdracht van Witteveen+Bos. Verder maakt dit onderzoeksrapport onderdeel uit het afstudeertraject van de studie Land- en watermanagement op Van Hall Larenstein. Er wordt ervan uitgegaan dat studenten van Van Hall Larenstein kennis hebben genomen van een wiskundige basis, waaronder matrices.

2. Opzet Real Time Control systeem

Een RTC systeem bestaat uit twee modellen; een simulatiemodel en een foutmodel. Deze vormen in het geheel een gesloten algoritme. In dit hoofdstuk zal kort de formule en opbouw van beide modellen gerepresenteerd worden, zodat de lezer nog onbekend met de stof op gebied van RTC een beeld verkrijgt van het systeemopzet alvorens op het foutmodel in te gaan. Lezers die al bekend zijn met de stof kunnen dit hoofdstuk overslaan onder aanname dat het simulatiemodel een neurale netwerk is basierend op de Saint Venant vergelijking, het foutmodel uit een ARMA model bestaat en de sturing van kunstwerken wordt bepaald met een Kalman Filter.

2.1 Opzet simulatiemodel

Voor het berekenen van het hydraulisch model, wordt gebruikt gemaakt van de De Saint-Venant formula.^{11,12} Deze bestaan uit de continuïteitsformule (2.1) en de momentumvergelijking (2.2). Voor een één dimensionaal model wordt veelal de relaties tussen input en output beschreven met behulp van een netwerk van knopen die ieder een gewicht hebben, zodanig dat het neurale netwerk bij een bekende input een bekende output levert.¹³ Op de knopen worden de waterhoogten bepaald en op de verbindingen tussen de knopen het debiet, zie figuur 2.1. Meer informatie over de formules die gehanteerd worden in het neurale netwerk model zijn te vinden in bijlage B.



Figuur 2.1 het simulatiemodel is een neurale netwerk van knopen

Continuïteitsformule:

$$\frac{\partial A_f}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q_{lat} \quad (2.1)$$

A_f	is het natte oppervlak in m^2
t	is de tijd in s
Q	is het debiet in m^3/s
x	is de afstand in m
q_{lat}	is uitgaand debiet per lengte in m^2/s

¹¹ SOBEK, *Hydrodynamics, Rainfall Runoff and Real Time Control, User manual*, 8 april 2013, Deltares

¹² Szymkiewicz, R., *Numerical Modelling in Open Channel Hydraulics*, 2010, Faculty of Civil and Environmental Engineering, Gdańsk University of Technology, Poland

¹³ v. Waveren, R.H., e.a. *Vloeiend modelleren in het waterbeheer, Handboek Good Modelling Practice*, STOWA/RIZA 1999, STOWA rapport 99-05, Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036, ISBN-nr. 90-57773-056-1

Momentenvergelijking:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A_f} \right) + g A_f \frac{\partial h}{\partial z} + \frac{g Q |Q|}{C^2 R A_f} - w_f \frac{\tau_{wind}}{\rho_{wind}} = 0 \quad (2.2)$$

De eerste term is het traagheidsmoment.

De tweede term is de convectie.

De derde term is het verloop van de waterspiegel.

De vierde term is de bodemwrijving.

De vijfde term is de windwrijving.

Alle termen tezamen moeten gelijk zijn aan nul (behoud van energie).

g	zwaartekracht versnelling in m/s^2
$ Q $	kardinaliteit debiet (aantal elementen in een reeks)
C	Getal van in Chézy $m^{1/2}/s$
R	Hydraulische straal in m
w_f	wind wrijvingscoëfficiënt
τ_{wind}	schuifspanningsweerstand in N/m^2
ρ_{wind}	luchtdichtheid in kg/m^3

In real een time control systeem kan het simulatiemodel verder worden geoptimaliseerd via:

Invoer correctie

Voordat data het model ingevoerd wordt, dient deze gecontroleerd te worden op foutieve (meet)waarden.

Data assimilatie / toestand actualisering

Bij data assimilatie wordt getracht de toekomstige toestand van het hydraulisch procesmodel te voorspellen, waarmee de sturing van stuwen bepaald kan worden.

Het Kalman Filter voorspelt de toekomstige toestand van een systeem in een discrete-tijd stochastisch proces door middel van een lineaire stochastische differentiaalvergelijking (1.1). De matrices $\mathbf{Q}$, $\mathbf{R}$, $\mathbf{A}$ en $\mathbf{H}$ zullen in werkelijkheid elke tijdstap veranderen, maar worden in het Kalman Filter als constant beschouwd.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &= \mathbf{A}\mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{B}\mathbf{u}_{k-1} + \mathbf{w}_{k-1}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^l \\ \mathbf{z}_k &= \mathbf{H}\mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k, \quad \mathbf{z}_k \in \mathbb{R}^m \end{aligned} \quad (1.1)$$

$\mathbf{x}_k$	vector met geschatte (voorspelde) toestandsvariabelen
$\mathbf{z}$	vector met gemeten toestandsvariabelen
$\mathbf{A}$	$n \times n$ matrix heeft betrekking op de toestand van de vorige tijdstap $k - 1$ ten opzichte van de toestand in huidige tijdstap k , waarbij er geen sturende functie of procesruis is.
$\mathbf{B}$	$n \times l$ matrix heeft betrekking op de optionele sturing van toestand x .
$\mathbf{w}_k, \mathbf{v}_k$	procesruis en metingruis met een normale kansverdeling; de variabelen zijn onafhankelijk van elkaar.

Waarvan:

$$p(\mathbf{w}) \sim N(0, \mathbf{Q}), \quad p(\mathbf{v}) \sim N(0, \mathbf{R})$$

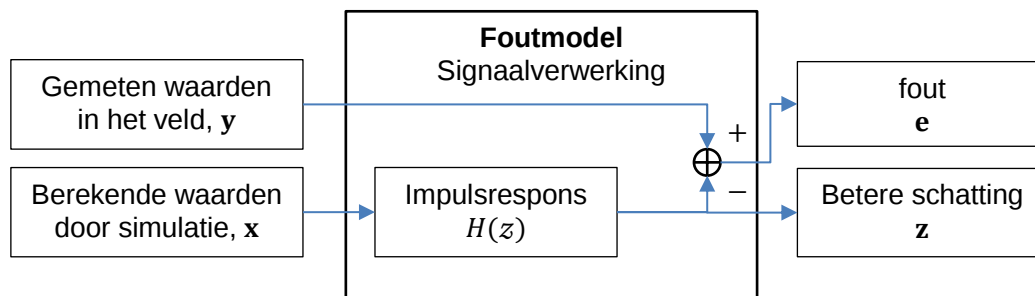
$\mathbf{Q}$	procesruiscovariantie
$\mathbf{R}$	metingruiscovariantie
$p(x)$	waarschijnlijkheidsfunctie van x ; de kans op x
$x \sim N(\mu, \sigma^2)$	normaalverdeling van x met als gemiddelde μ en variantie σ^2
$\mathbf{H}$	$m \times n$ matrix heeft betrekking op de toestand van de metingen $\mathbf{z}_k$.

Model kalibratie / parameter actualisering

Modelkalibratie is het vinden van een vooraf bepaalde mate van overeenkomst tussen het model en metingen in het veld te verkrijgen door het (systematisch) veranderen van onzekere factoren (vaak parameters), gevolgd door analyse van het residu.¹⁴

2.2 Opzet foutmodel

Het foutmodel berekent de constante fout tussen het simulatiemodel en de gemeten waarden van het watersysteem (figuur 2.2). De initialisatie van het foutmodel is door tussen het invoersignaal x , ook wel impuls genoemd, en uitvoersignaal z naar een (constante) formule $H(z)$ te zoeken die het respons op de impuls verklaart. Na initialisatie kan de impulsrespons gebruikt worden om de constant geformuleerde fout uit impuls x te filteren. Hierdoor wordt een 'betere' schatting z verkregen.



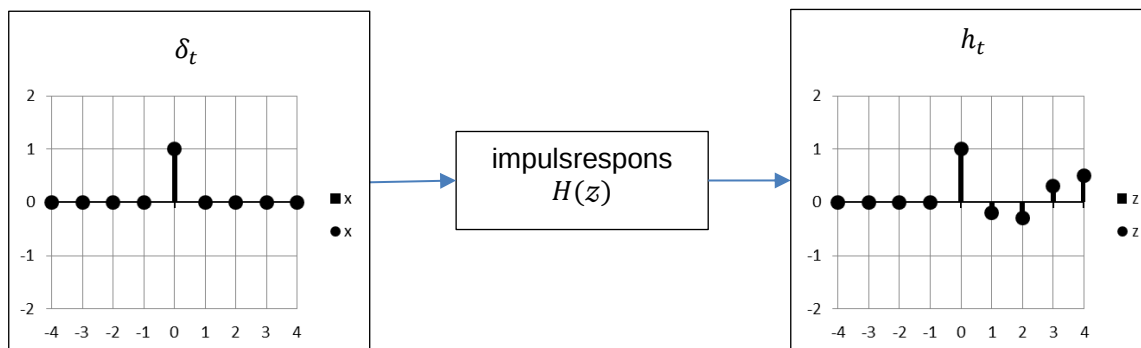
Figuur 2.2 het foutmodel is een respons op signalen

¹⁴ R.H. van Waveren e.a. ,*Vloeiend modelleren in het waterbeheer, Handboek Good Modelling Practice*, STOWA/RIZA 1999, STOWA rapport 99-05, Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036, ISBN-nr. 90-57773-056-1

3. Impulsrespons

In dit hoofdstuk worden de voorwaarden voor het gebruik van een AR, MA en ARMA modellen verklaart. Voor het vinden van de voorwaarden moet eerst dieper op de oorsprong van de theorie ingegaan worden.

De impulsresponsfunctie $H(z)$ berekent de respons van een systeem op impulsen. Zo zal een invoer van impuls $\delta_t = \begin{cases} 1 & t=0 \\ 0 & t \neq 0 \end{cases}$ leiden tot de impulsrespons h_t , zie figuur 3.1. Wetende dat één impuls δ_t een impulsrespons h_t oplevert, dan zal een gewogen serie impulsen; $\mathbf{x}$, een gewogen serie impulsresponsen; $\mathbf{z}$, opleveren.



Figuur 3.1 Respons op één ongewogen impuls

Het impulsrespons is gegeven door de functie $H(z)$. Hierbij is de invoer z een complex getal. Een impulsresponsfunctie kan opgesplitst worden in impulsfunctie $X(z)$ en responsfunctie $Z(z)$, zie figuur 3.2.¹⁵

$$\mathbf{x} \longrightarrow \boxed{H(z) = \frac{X(z)}{Z(z)} = \frac{\sum_{i=0}^q \theta_i z^{-i}}{\phi_0 - \sum_{i=1}^p \phi_i z^{-i}}, \quad \phi_0 = 1} \longrightarrow \mathbf{z}$$

Figuur 3.2 het impulsrespons in Z-domein

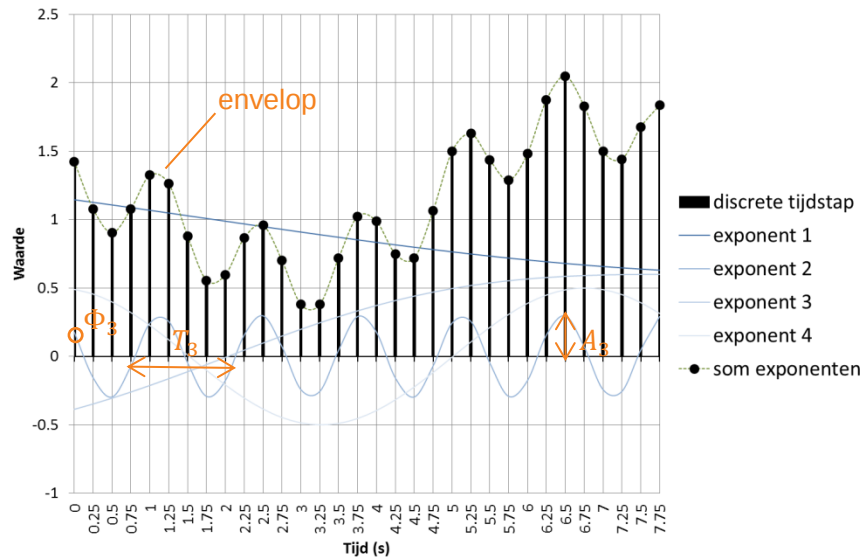
Alle drie de functies zijn van tijdsdomein naar Z-domein getransformeerd. Alvorens verder op de Z-transformatie in te gaan, zal eerst de Fourier transformatie behandeld worden, waarop de Z-transformatie een uitbreiding is. Met behulp van het Z-domein is het mogelijk om enkele belangrijke eigenschappen van de impulsresponsfunctie af te leiden. Na het Z-domein behandeld te hebben, zal de impulsrespons ook in het discreet tijdsdomein behandeld worden, gezien dat het domein is waarin de modellen draaien.

3.1 Frequentiedomein

Een willekeurig signaal over een tijdsdomein kan beschouwd worden als een sommatie van (oneindig) meerdere periodieke signalen, zie figuur 3.3, ook wel een Fourier serie genoemd. Elk periodiek signaal heeft een unieke amplitude A , periode T en fase Φ . De kromme lijnen worden

¹⁵ Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

ook wel de envelop genoemd. Het is een kromme lijn die alle (discrete tijdstap)punten snijdt van een serie. Over de punten gelegen tussen de discrete tijdstappen is geen data beschikbaar en de werkelijke waarden zijn daardoor ook niet bij definitie op de lijn gelegen.



Figuur 3.3 ruis in discrete tijd opgedeeld in een serie exponenten.

Veelal worden de volgende twee periodieke signalen gebruikt: sinusoiden $x_t = \cos \omega_0 t$ en periodieke complexe exponenten $x_t = e^{j2\pi t}$. Een bijzondere eigenschap van deze twee signalen is dat de uitvoer hetzelfde patroon heeft als de invoer, maar dan met een andere amplitude (3.1).¹⁶

$$x^{jt} \xrightarrow{\text{impulsreactie}} H(\omega)x^{jt} = z^{jt} \quad (3.1)$$

x^{jt} set van complexe exponenten
 j een complex getal
 $H(\omega)$ amplitude factor

Met deze eigenschap kan een Yule-Walker serie $z_t = \sum_{i=1}^T \phi_i z_{t-i}$ herschreven worden tot de Fourier synthese formule (3.2). In deze formule is de eigenschap van periodieke signalen duidelijk te zien.

$$z_t = \sum_{k=0}^{T-1} \phi_k e^{jk\omega t}, \quad \phi_k = \phi_{-k}, \quad z_k = z_{k+T}, \quad \omega \in \mathbb{R} \quad (3.2)$$

z impuls serie
 t tijd
 ϕ parameter serie
 $j = \sqrt{-1}$ imaginair getal (zie A.6.6)
 T periode
 $\omega = 2\pi/T$ fundamentele frequentie

¹⁶ Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I. T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice/Hall International, Inc., p. 167

De verzameling van periodieke complexe exponenten $\sum_{t=0}^{T-1} e^{j2\pi t}$ is een machtsenserie $\sum_{t=0}^{T-1} x^t$ met bijbehorende eigenschap (3.3).

$$\sum_{t=0}^{T-1} x^t = \begin{cases} T, & x = 1 \\ \frac{1-x^T}{1-x}, & x \neq 1 \end{cases} \quad (3.3)$$

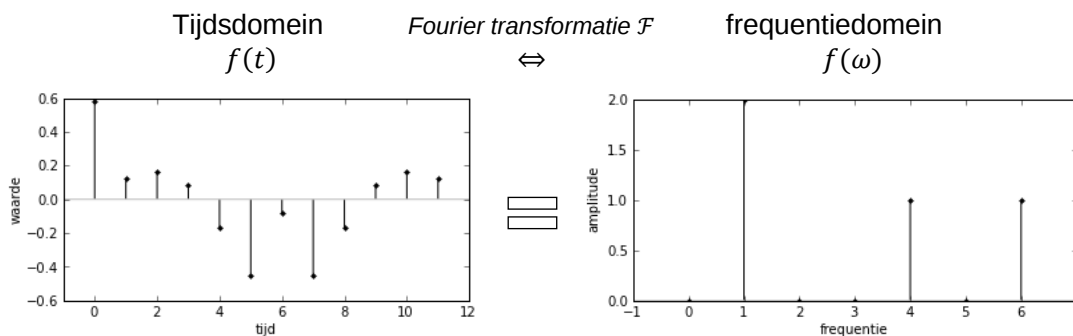
Als beide helften van de discrete tijd Fourier serie (3.2) met de periodieke complexe exponent $e^{-jr(2\pi/T)t}$ worden vermenigvuldigd en deze over een sommatie van T termen nemen, dan kan door het uitwisselen van de sommaties aan de rechterhand een vergelijking worden gevonden waarbij de sommatie van periodieke complexe exponenten vrij staat (3.4).

$$\sum_{t=0}^{T-1} z_t e^{-jr(2\pi/T)t} = \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{k=0}^{T-1} \phi_k e^{j(k-r)(2\pi/T)t} = \sum_{k=0}^{T-1} \phi_k \sum_{t=0}^{T-1} e^{j(k-r)(2\pi/T)t} \quad (3.4)$$

De aan de rechterhand vrijstaande periodieke complexe exponent $e^{j(k-r)(2\pi/T)t}$ is gelijk aan één als $j(k-r)(2\pi/T)t = 0$. Is $e^{j(k-r)(2\pi/T)t}$ op elke tijdstap t gelijk aan e^0 , dan is de sommatie van de reeks overduidelijk gelijk aan de periode, $\sum_{t=0}^{T-1} e^0 = T$. Dit kan gerealiseerd worden door de toegevoegde variabele r gelijk te zetten aan k . De rechterhand luidt nu $T\phi_k$. Door met de variabelen te schuiven kan de Fourier Analyse formule gevonden worden (3.5).

$$\phi_k = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} z_t e^{-jk(2\pi/T)t}, \quad \phi_k = \phi_{k+T} \quad (3.5)$$

Bij het transformeren van een reeks van tijdsdomein naar frequentiedomein, zie figuur 3.4, is het omhullende $O(\omega)$, $\omega = 2\pi/T$ van interesse. De envelop kan berekend worden door de periode T te vermenigvuldigen met ϕ_k . Door beide zijden van de Fourier analyse formule (3.5) te vermenigvuldigen met T , wordt de omhullende gevonden (3.6).



Figuur 3.4 Visualisatie van tijdsdomein naar frequentiedomein door Fourier transformatie.

Vergelijk de verkregen formule (3.6) met de Fourier analyse formule (3.5), en te zien is dat parameter ϕ_k berekend kan worden met $\phi_k = 1/T O(k\omega_0)$, waarbij ω_0 de nul nadert. Dit wordt gedaan omdat ω_0 de breedte is van het oppervlak (waarvan de bovengrens de omhullende is) waarover de formule rekt en er getracht wordt een punt te bereken. Figuur 3.3 visualiseert de situatie. Door de zwarte lijn smaller te maken, wordt het zwarte punt bij benadering exacter berekend.

Het veranderen van tijdsdomein naar frequentiedomein zou nooit zo interessant zijn als het niet mogelijk was om het domein weer terug te veranderen. Om deze formule te vinden, wordt eerst de parameter ϕ_k van de Fourier synthese gesubstitueerd door $\frac{1}{T}O(k\omega_0)$. Vervolgens substitueer de periode T voor $\frac{\omega}{2\pi}$. Om van grafiekoppervlaktes naar hoogtes te rekenen, laat men voor het

vinden bij benadering het omhulsel ω in de machtsenserie ook de nul naderen (zoals bij ω_0). Voor het oplossen van de benadering $\omega \rightarrow 0$ wordt de benadering in de formule verandert in een integraal. Gezien $\omega = 2\pi/T$ over een sommatie van T wordt genomen, zal de integraal altijd een breedte van 2π hebben. Een andere eigenschap dat uit $\omega = 2\pi/T$ afgeleid kan worden is dat de Fourier transformatie bij een periode van $T = 2\pi$ altijd periodiek ($\omega = 1$) is.

$$\mathcal{F}\{z_t, \dots, z_{t-N+1}\} = O(\omega) = \sum_{t=-\infty}^{+\infty} z_t e^{-j\omega t} \quad (3.6)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{Z(\omega)\} = z_t = \frac{1}{2\pi} \int_{2\pi} O(\omega) e^{j\omega t} d\omega$$

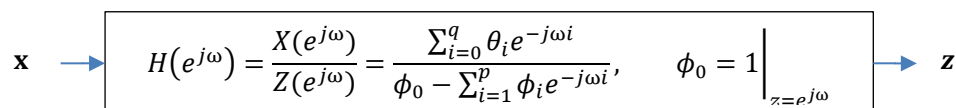
$O(\omega) = T\phi_k$	Discrete tijd Fourier transformatie, en resulteert in de omhullende
$e^{j\omega t}$	een complexe exponent
j	imaginair getal
t	tijd
$\omega = \frac{2\pi}{T}$	frequentie [s^{-1}]
Φ	fase (punt op $t = 0$)
A	de amplitude
T	de periode
$\int_{-\infty}^{\infty}$	Integraal. Tel alles op
$\mathcal{F}\{z_t, \dots, z_{t-N+1}\}$	Fourier transformatie
$\mathcal{F}^{-1}\{Z(\omega)\}$	inverse Fourier transformatie

Een andere interessante eigenschap is dat als de impulsserie geheel uit reële getallen bestaat, de serie gelijk wordt aan diens negatief complex geconjugeerde (3.7). Een complex geconjugeerde van een complex getal $z = e^{+j\omega t}$ is het complexe getal waarbij het (tijd-)stap afhankelijk deel is vervangen voor diens negatieve; $z^* = e^{-j\omega t}$. Hiermee kan gesteld worden dat het reële deel van de complexe serie een even functie van de frequentie ω is en het imaginaire deel een oneven functie van de frequentie ω .

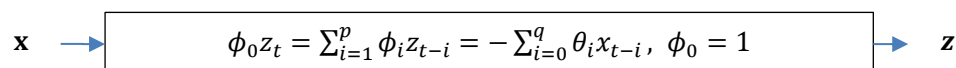
$$\mathcal{F}\{z_0, \dots, z_{t-1}\} = \mathcal{F}^*(-\{z_0, \dots, z_{t-1}\}), \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R} \quad (3.7)$$

$\mathbb{R}$	Reëel stelsel
z^*	complex geconjugeerde van z

Het complex getal z^{-t} in de impulsresponsfunctie (3.1) is gelijk aan $re^{-j\omega t}$.^{17,18} Stel dat $r = 1$, dan wordt $Z(z)|_{z=e^{j\omega}} = \mathfrak{F}\{z_t\} = Z(e^{j\omega})$. De impulsresponsfunctie kan dan dus naar het frequentiedomein vertaald worden, zie figuur 3.5. En door de zojuist bepaalde inverse Fourier transformatie kan het vervolgens terug naar een domeinfrequentie getransformeerd worden. Daarmee is de ARMA(p, q) formule in discrete tijdsdomein gevonden, zie figuur 3.6.



Figuur 3.5 het impulsrespons in frequentiedomein



Figuur 3.6 het impulsrespons in discrete tijdsdomein

¹⁷ Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I. T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice/Hall International Inc., p. 167

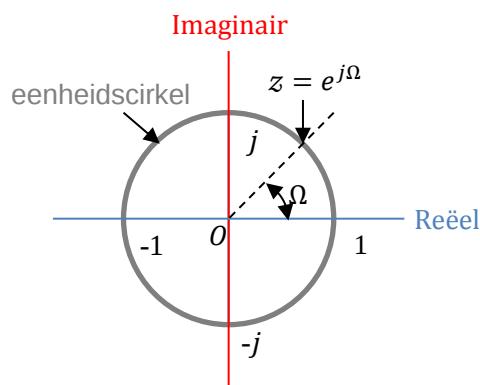
¹⁸ Zacknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, Springer-Verlag London

3.2 Z-domein

De Z-transformatie is een generalisatie van de Fourier transformatie. In plaats van een complexe functie over een reëel getal ω te nemen, wordt de complexe functie over een complex getal $z = re^{j\Omega}$ genomen. Hierdoor wordt de tijdserie vertaald naar een complex stelsel in plaats van het frequentie domein. De transformatie van frequentiedomein naar Z-domein is om de argumentserie van de Fouriertransformatie te vermenigvuldigen met de exponentieel r^{-t} (3.8).¹⁹

$$Z(re^{j\Omega}) = \mathcal{F}\{x_t r^{-t}\} \quad 3.8$$

Het complexe getal z is dus een getal in een eendimensionaal complex stelsel $\mathbb{C}^1$ en heeft daardoor overeenkomsten (maar ook verschillen) met een tweedimensionaal reëel stelsel $\mathbb{R}^2$. Zo is het mogelijk om een complex getal $z = (a, b)$ als poolcoördinaten van een reëel tweedimensionaal stelsel te noteren (3.9). De poolcoördinaat wordt dan gevormd door de poolhoek Ω ten opzichte van de positieve reële as en de voerstraal r die gelijk is aan de afstand tussen $z = (a, b)$ en de oorsprong $O = (0, 0)$.²⁰ Op de eenheidscirkel, een cirkel met een straal $r = 1$ en het middelpunt op de oorsprong O , is z uiteraard gelijk aan $e^{j\Omega}$. Dit komt overeen met de Fourier transformatie $\mathcal{F}\{z_t\}$.



$$z = re^{j\Omega} = r(\cos(\Omega) + j \sin(\Omega)) = a + bj \quad (3.9)$$

$r = \sqrt{a^2 + b^2}$ de voerstraal van z , afstand van (a, b) naar oorsprong $(0, 0)$
 $\Omega = \arctan\left(\frac{b}{a}\right)$ de poolhoek van z in radialen
 $j, j^2 = -1$ imaginair getal
 $a = r \cos(\Omega)$ coördinaten over reële as
 $b = r \sin(\Omega)$ coördinaten over imaginaire as

De z-transformatie van de impulsresponsfilter (2.30) kan ook gedefinieerd worden als de z-transformatie van $MA(q)$ gedeeld door de z-transformatie van $AR(p)$.

3.2.1 Convergentie

Complexe z -waarden binnen de regio van convergentie zullen convergeren. Ligt de straal buiten de regio van convergentie, dan zal de reeks divergeren.²¹ Dit geldt ook voor de eenheidscirkel. Ligt de eenheidscirkel binnen de straal van convergentie, dan zal de Fourier transformatie ook convergeren.

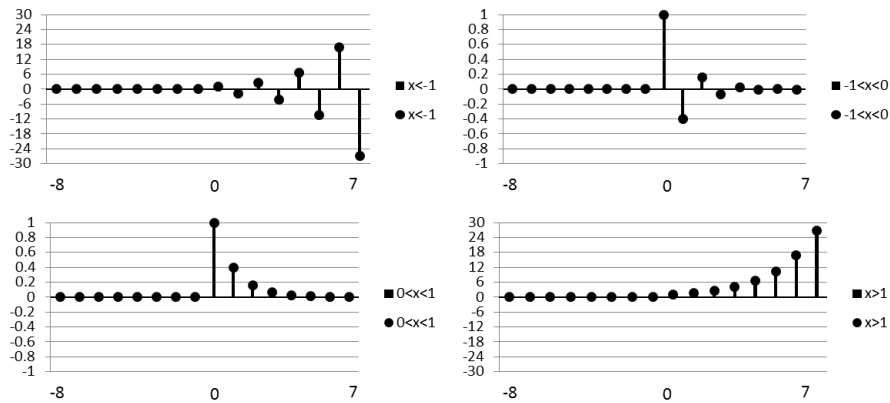
De Z-transformatie wordt over een oneindige tijd genomen in beide richtingen (verleden en toekomst). Echter is dit niet handig voor het voorbeeld en wordt de serie $\mathbf{h}$ tijdelijk als een causaal exponentieel beschouwt (3.10). Een causaal signaal heeft geen invloed op voorgaande tijdstappen, zie figuur 3.7.

¹⁹ Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I. T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice/Hall International, Inc., p. 167

²⁰ Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

²¹ Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I. T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice/Hall International, Inc., p. 629-643

$$h_t = \alpha^t u_t, \quad u_t = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

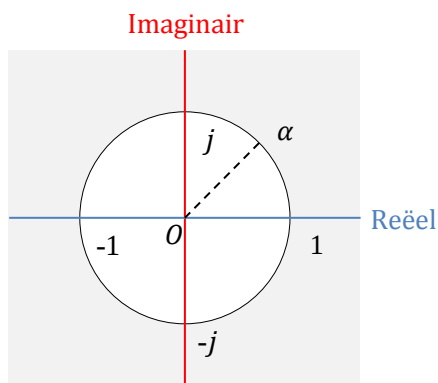


Figuur 3.7 causaal exponentiële. Van links naar rechts, $\alpha = \{-1\frac{6}{10}, -\frac{4}{10}, \frac{4}{10}, 1\frac{6}{10}\}$. Signalen met $|\alpha| < 1$ convergeren en $|\alpha| > 1$ divergeren. De Fourier transformatie is alleen mogelijk bij convergerende signalen.

Doordat één zijde nu eindig is, kan de serie herschreven worden tot een geometrische serie (3.11).

$$H(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} h_n z^{-n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^n z^{-n} = \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha z^{-1})^n \quad (3.11)$$

De regel van de geometrische serie is dat $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$, zodoende dat $\sum_{n=0}^{\infty} (\alpha z^{-1})^n$ herschreven kan worden tot $\frac{1}{1-\alpha z^{-1}}$. De geometrische serie is alleen oplosbaar indien $|\alpha z^{-1}| < 1$ en $|z| > |\alpha|$ (3.12).



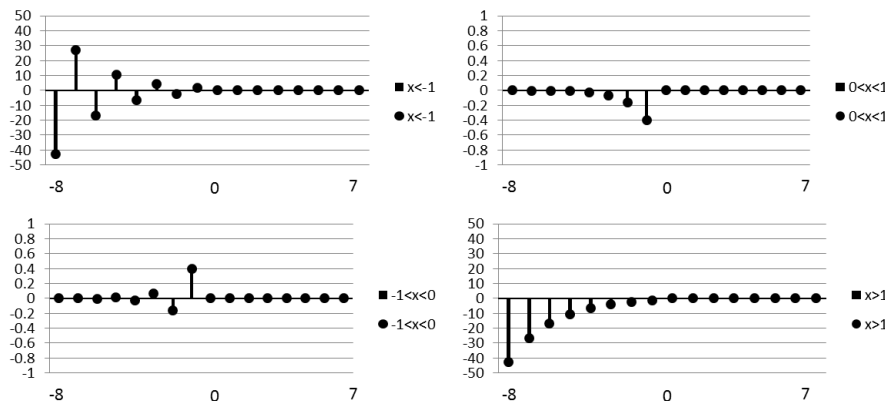
Figuur 3.8 In het grijs de Regio van Convergentie (ROC) van een causaal exponentieel.

$$\alpha^n u_n \xleftrightarrow{z} \frac{1}{1-\alpha z^{-1}} = \frac{z}{z-\alpha}, \quad \text{ROC: } |z| > |\alpha| \quad (3.12)$$

De z kan hierbij het best beschouwd worden als een ring. Als de amplitude (ofwel straal) van z groter is dan α , ligt deze in de regio van convergentie (ROC) en zal zodoende convergeren, zie figuur 3.8.

Als volgend voorbeeld wordt h gedefinieerd als een anti-causaal exponentieel (3.13). Een anti-causaal exponentieel heeft alleen invloed op voorgaande signalen, zie figuur 3.9.

$$h_t = -\alpha^t u_{-t-1}, \quad u_t = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$



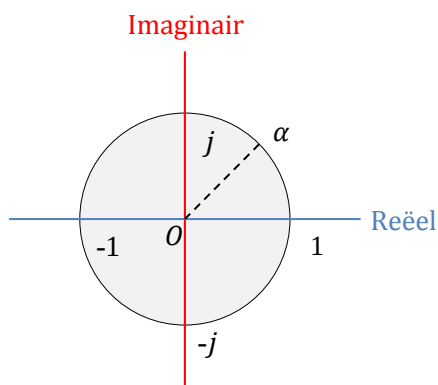
Figuur 3.9 anti-causaal exponentieel. Signalen met $|x| < 1$ convergeren en $|x| > 1$ divergeren. De Fourier transformatie is alleen mogelijk bij convergerende signalen. Van links naar rechts, $x = \{-1\frac{6}{10}, -\frac{4}{10}, \frac{4}{10}, 1\frac{6}{10}\}$

Doordat één zijde nu eindig is, kan de serie herschreven worden tot een geometrische serie (3.14).

$$H(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} h_n z^{-n} = \sum_{n=-\infty}^{-1} -\alpha^n z^{-n} = -\sum_{n=-\infty}^{-1} (\alpha^{-1} z)^{-n} \quad (3.14)$$

$$= -\sum_{l=1}^{\infty} (\alpha^{-1} z)^l = -\sum_{l=0}^{\infty} (\alpha^{-1} z)^l + 1$$

Door opnieuw de regel van de geometrische serie toe te passen, $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$, verandert $\sum_{n=0}^{\infty} (\alpha^{-1} z)^n + 1$ in $\frac{1}{1-\alpha^{-1} z} + 1$. De geometrische serie is alleen oplosbaar indien $|\alpha^{-1} z| < 1$ en $|z| < |\alpha|$ (3.15).



Figuur 3.10 In het grijs de Regio van Convergentie (ROC) van een anti-causaal exponentieel.

$$-\alpha^n u_{-n-1} \xleftrightarrow{z} \frac{1}{1-\alpha^{-1} z} + 1 = \frac{z}{z-\alpha}, \text{ ROC: } |z| < |\alpha| \quad (3.15)$$

Beschouw de z opnieuw als een ring. Als de amplitude (ofwel straal) van z kleiner is dan α , ligt deze in de regio van convergentie (ROC) en zal zodoende convergeren, zie figuur 3.10.

Te zien is dat beide exponentiële tot dezelfde Z-transformatie leiden. De Z-transformatie is dus niet-uniek. Echter verschillen beide Z-transformaties in regio van convergentie. Dus voor het vinden van het juiste tijdssignaal door middel van de inverse Z-transformatie is de ROC benodigd.

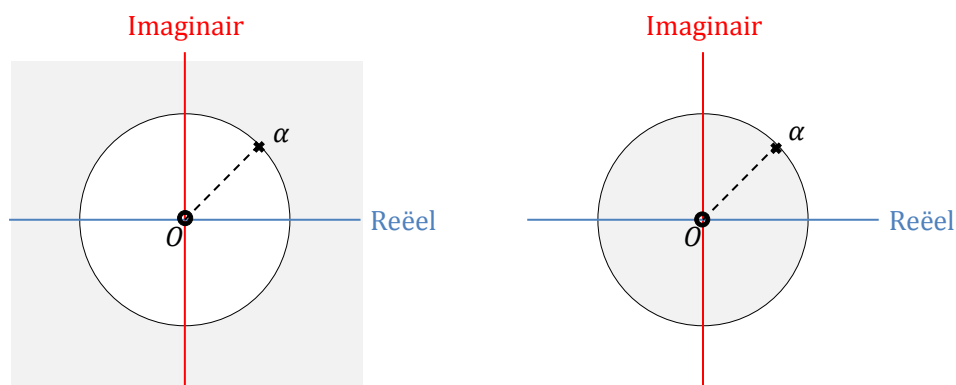
3.2.2 Polen en Nulpunten

De parameters van de invoer $Z(z)$ kunnen hervormd worden naar de polen $\mathbf{p}$ van het impulsrespons $H(z)$ en de parameters van $X(z)$ kunnen hervormd worden naar de nulpunten $\mathbf{z}$.²² Hierbij zijn de polen $\mathbf{p}$ de waarden voor z , onder voorwaarde dat $H(z) = \infty$, en zijn de nulpunten $\mathbf{z}$ de waarden voor z , onder voorwaarde dat $H(z) = 0$. Gezien de polen en nulpunten ook complex zijn is het mogelijk deze in het complexe stelsel $\mathbb{C}^1$ te visualiseren.

Het nulpunt $\mathbf{z}$ van de neuraal exponentieel (3.8) en niet-neuraal exponentieel (3.10) wordt gevonden door z gelijk te zetten aan nul (3.16). De pool $\mathbf{p}$ wordt gevonden door z gelijk te zetten aan α (3.17). In een polen-nulpuntenplot worden de nulpunten met rondjes weergegeven en de polen met kruisjes, zie figuur 3.11.

$$H(z) = \frac{X(z)}{Z(z)} = \frac{z}{z-\alpha} \xrightarrow{z=0} H(z) = \frac{0}{0-\alpha} = 0 \quad (3.16)$$

$$H(z) = \frac{X(z)}{Z(z)} = \frac{z}{z-\alpha} \xrightarrow{z=\alpha} H(z) = \frac{\alpha}{\alpha-\alpha} = \infty \quad (3.17)$$



Figuur 3.11 De polen-nulpuntenplots voor de neuraal exponentieel (links) en de niet-neuraal exponentieel (rechts).

In voorgaand voorbeeld was er slechts één nulpunt en één pool. Het komt vaak voor dat de noemer en/of deler uit meerdere termen bestaat (3.18). Iedere term heeft dan een eigen oplossing voor de formules 3.16 en 3.17. Immers voldoet elke waarde voor α die een term gelijk maakt aan nul aan de voorwaarde voor een pool of nulpunt.

$$H(z) = \frac{\prod_{i=0}^q z - \mathbf{z}_i}{\prod_{i=0}^p z - \mathbf{p}_i} = \frac{\theta_0 \prod_{i=1}^q 1 - \mathbf{z}_i z^{-1}}{\phi_0 \prod_{i=1}^p 1 - \mathbf{p}_i z^{-1}}, \quad \mathbf{p}, \mathbf{z} \in \mathbb{C}, \theta_0 \neq 0, \phi_0 = 1 \quad (3.18)$$

$H(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} h_n z^{-n}$ is de Z-transformatie (of Fourier transformatie wanneer $r = 1$) van impulsrespons h_n

θ_0 Voortschrijdend-gemiddeldecoëfficiënt op huidige tijdstap

ϕ_0 Autoregressiecoëfficiënt op huidige tijdstap

$\mathbf{z}$ nulpunt (in het Engels ook wel 'root' genoemd)

$\mathbf{p}$ pool

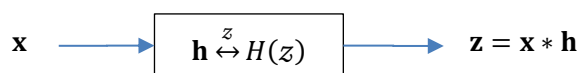
²² Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

3.3 Discrete tijdsdomein

In voorgaande paragrafen is gegeven dat de impulsrespons $H(z) = \frac{X(z)}{Z(z)}$ luidt. Het berekenen van de uitvoer kan dan door $Z(z) = H(z)X(z)$. Verplaats $\sum_{k=0}^p \phi_k z^{-k}$ naar de linkerzijde naast $Z(z)$. Door vervolgens aan beide zijden de inverse Z-transformatie te doen, wordt een lineair tijdsinvariant discreet systeem (LDI) in een (discrete) tijdsdomein gevonden.

$$\begin{aligned} H(z) &= \frac{X(z)}{Z(z)} = \frac{\sum_{k=0}^q \theta_k z^{-k}}{\sum_{k=0}^p \phi_k z^{-k}} \\ Z(z) &= \frac{\sum_{k=0}^q \theta_k z^{-k}}{\sum_{k=0}^p \phi_k z^{-k}} X(z) \\ \sum_{k=0}^p \phi_k z^{-k} Z(z) &= \sum_{k=0}^q \theta_k z^{-k} X(z) \\ \sum_{k=0}^p \phi_k z_k &= \sum_{k=0}^p \theta_k x_k \end{aligned} \quad (3.19)$$

Een lineair discreet tijdsinvariant (LDI) impulsrespons is de soort tijdsreeks die in dit rapport onderzocht wordt. In figuur 3.12 is de impulsrespons in Z-domein nogmaals weergegeven. Hierbij staat het asterisk voor convolutie. Alleen door middel van de Z-transformatie kunnen de eigenschappen van impulsrespons achterhaalt worden. Vandaar dat het Z-domein in voorgaande paragraaf is behandeld.



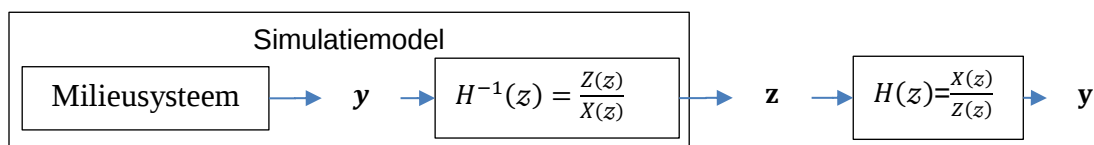
Figuur 3.12 de impulsrespons in discrete tijdsdomein.

3.3.1 Causaliteit en stabiliteit van LDI systemen

De impulsrespons heeft geen invloed gehad op voorgaande signalen; $h_n = 0, n < 0$. Het eerste wat geconstateerd kan worden is dat het impulsrespons causaal is. Hierdoor kan afgeleid worden dat de regio van convergentie buitenwaarts van de pool met de grootste radiaal ligt (3.20), zoals bij figuur 3.11 het geval was.

$$|z| > \max_i |p_i| \quad (3.20)$$

Daarnaast moet de impulsrespons stabiel zijn. Het impulsrespons is stabiel als $\mathbf{h}$ absoluut optelbaar is; $\sum_{n=-\infty}^{\infty} |h_n| < \infty$. Uit de RTC opzet in dit project is af te leiden dat de gewenste impulsrespons de fout tussen het milieusysteem en voorspelling ongedaan maakt, zie figuur 3.13. Ook de inverse impulsrespons dient stabiel te zijn; $\sum_{n=-\infty}^{\infty} |h_n^{-1}| < \infty$. Dit is alleen mogelijk als zowel $0 < |X(z)| < 1$, als $0 < |Z(z)| < 1$.



Figuur 3.13 het impulsrespons maakt de fout van het simulatiemodel, de inverse impulsrespons, ongedaan.

Tevens kan met behulp van de causaliteit (3.20) en stabiliteit van $\mathbf{h}$ gesteld worden dat de regio van convergentie van $H(z)$ ook de eenheidscirkel bevat. Doordat de inverse impulsrespons ook stabiel moet zijn, moet er ook een eenheidscirkel gelegen zijn in de ROC's van $X(z)$ en $Y(z)$.

3.3.2 Witte ruis

Impuls responsen maken vaak gebruik van witte ruis. Het gebruik van witte ruis is populair binnen de signaalverwerking, omdat de statistische eigenschappen ervan als relatief makkelijke oplossingen voor ingewikkelde vraagstukken kunnen dienen. Witte ruis heeft namelijk een gemiddelde $\bar{\varepsilon} = 0$ en een variantie σ_{ε}^2 .²³ Wordt het gemiddelde of covariantie van de witte ruis over de gehele serie berekend, dan zullen er andere waarden uit komen dan men zou verwachten. Dit komt omdat de witte ruis in elke stap een eigen populatie heeft.²⁴ De witte ruis ε heeft alleen een lineaire samenhang met de witte ruis ε uit zijn eigen populatie, waardoor de autocovariantie of gelijk is aan de variantie of gelijk is aan nul (3.21). Ofwel er is sprake van perfecte autocorrelatie, $\rho_0 = 1$, of geheel niet, $\rho_{k \neq 0} = 0$ (3.22).

$$\gamma_k = E(\varepsilon_t \varepsilon_{t+k}) \begin{cases} \sigma_{\varepsilon}^2 & k = 0 \\ 0 & k \neq 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

$$\rho_k \begin{cases} 1 & k = 0 \\ 0 & k \neq 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

3.3.3 Autoregressief model

Een autoregressief (AR) model is een representatie van een willekeurig proces (over tijd). Het model bestaat uit een veelvoud polen, $\mathbf{p}$, en één nulpunt, $\mathbf{z}_0$. Een autoregressief model baseert de uitkomsten letterlijk op de voorgaande berekende waarden. De functie $AR(p)$ staat voor een AR model waarbij $p = |\mathbf{p}| - 1$ de ordegraad representeert (3.23).²⁵ Het autoregressief model bestaat uit een Yule-Walker (YW) berekening en witte ruis, waarvoor veelal de Gaussian wordt genomen.²⁶ Het autoregressief model is de meest toegepaste foutmodel in de hydrologische software.²⁷

$$\phi_0 \tilde{z}_t = \varepsilon_t - \sum_{i=1}^p \phi_i \tilde{z}_{t-i}, \quad \phi_0 = 1 \quad (3.23)$$

$$\tilde{z}_t = \varepsilon_t - \mathbf{z} \boldsymbol{\Phi}, \quad \mathbf{z} = [z_{t-1}, z_{t-2}, \dots, z_{t-p}]^T, \quad \boldsymbol{\Phi} = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_p]$$

$\tilde{z}_t$ waarde z op tijdstap t min het (verwachte) gemiddelde μ van de serie z waardes.
 i aantal stappen (voor de huidige tijdstap) die invloed hebben op de waarde van de huidige tijdstap.
 $\tilde{z}_{t-i}$ waarde z op tijdstap $t - i$ min het (verwachte) gemiddelde μ van de serie z waardes.
 $\boldsymbol{\Phi} = \{\phi_{t-1}, \dots, \phi_{t-p}\}$ vector met de AR parameters in het model.
 ε_t is de witte ruis. $E(\varepsilon_t) = 0$, $\text{var } \varepsilon_t = \sigma_{\varepsilon}^2$

De variabele waarde $\tilde{z}$ op tijdstap $t - i$ kan opgesplitst worden in de variabelen lag L^i en de waarde $\tilde{z}$ op tijdstap op t (3.24). Een element $\tilde{z}_t$ in een tijdserie verveelduigen met lag L^i geeft het vorige element $\tilde{z}_{t-i}$. Doordat de lag een exponentiele functie is, zal de lag over een tijdstap 0 altijd in waarde één resulteren. Dit is een gewenst effect, omdat bij het ontbreken van een actie, in dit geval de verplaatsing door het tijdsdomein, ook geen reactie wordt verwacht. Veelal wordt

²³ Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I.T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice Hall International

²⁴ G. E. Box, G. M. Jenkins, and G. C. Reinsel, *Time Series Analysis, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons, Inc.

²⁵ G. E. Box, G. M. Jenkins, and G. C. Reinsel, *Time Series Analysis, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons, Inc.

²⁶ Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea

²⁷ Schwanenberg, D., v. Breukelen, A., Hummel, S., *Data Assimilation for Supporting Optimum Control in Large-Scale River Networks*, 2011, International Conference on Networking Sensing and Control, Delft, The Netherlands, 11-13 April 2011.

de lag variabele voor tijdstap nul geheel weggelaten, omdat het immers geen invloed heeft op de formule.

$$L^0 \tilde{z}_t = \varepsilon_t - \sum_{i=1}^p \phi_i L^i \tilde{z}_t, \quad L^0 = 1 \quad (3.24)$$

L is de lag variabele.

De formule kan ook in polynomiaal notatie gezet worden, waarbij de lag als variabele van de autoregressieve functie dient (3.25). Een autoregressief model kan hiermee gezien worden als uitvoer van een polynomiaal impulsresponsfilter, waarvan de invoer witte ruis is.

$$\phi(L) \tilde{z}_t = \varepsilon_t \quad (3.25)$$

L Lag variabele, reëel getal

$\phi(L) = 1 + \phi_1 L + \phi_2 L^2 + \dots + \phi_p L^p$ autoregressieve functie van orde p op basis van de lag variabele.

Autocorrelatie functie

Een belangrijke herhalende relatie (3.26) voor de autocorrelatie functie van een AR model (3.23) wordt gevonden door de gehele berekening te vermenigvuldigen met $\tilde{z}_{t-k}$. Neemt men de verwachte waarden als de ware waarden aan, $E(\varepsilon_t) = 0$, $E(z_t, z_{t-i}) = \gamma_i$, dan vindt men de autocovariantie (3.27). De vergelijking delen door $\gamma_0 = \sigma_z^2$ (2.12) resulteert in de autocorrelatie (2.28). Deze functie is exact hetzelfde als het AR proces op de witte ruis na.* De functie is ook wel bekend als de uitgebreide Yune-Walker berekening (EYW).²⁸

$$\tilde{z}_{t-k} \tilde{z}_t = \tilde{z}_{t-k} \varepsilon_t - \sum_{i=1}^p \phi_i \tilde{z}_{t-k} \tilde{z}_{t-i}, \quad k \geq 0 \quad (3.26)$$

$$\gamma_k = \sum_{i=1}^p \phi_i \gamma_{k-i}, \quad k \geq 0 \quad (3.27)$$

γ_k autocovariantie

$$\rho_k = \sum_{i=1}^p \phi_i \rho_{k-i}, \quad k \geq 0 \quad (3.28)$$

ρ_k autocorrelatie

Partieel autocorrelatie functie

Naast de autocorrelatie berekend over de reeks $z_t \dots z_{t+k}$, bestaat er ook de partieel autocorrelatiefunctie. Deze functie verschilt met de autocorrelatie dat de afhankelijkheid van $z_{t-1} \dots z_{t+k-1}$ is verwijderd. Een interessante eigenschap die hierdoor wordt verkregen is dat de partieel autocorrelatie van een AR-proces met een stap k groter dan p de waarde nul heeft.^{29,30} De partieel autocorrelatiefunctie vormt dan ook de basis voor het schatten van de AR-orde p . De formule heeft de vorm van Yune Walker berekeningen (3.29).

$$\rho_j = \phi_{k,1} \rho_{j-1} + \phi_{k,2} \rho_{j-2} + \dots + \phi_{k,k} \rho_{j-k}, \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (3.29)$$

k AR orde
 ρ_t autocorrelatie

* Voor alle duidelijkheid: de autocovariantie en autocorrelatie functies in formule 3.28 zijn van de variabele z en de autocovariantie en autocorrelatie in formule 3.21 zijn van de witte ruis ε .

²⁸ Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea, p. 2

²⁹ Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc., p. 68

³⁰ Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea, p. 30

$\phi_{k,1} \cdots \phi_{k,k}$ AR parameters

De Yule Walker berekeningen kunnen in één matrix en vectoren vorm gezet worden (3.30). De waarde 1 in de matrix is de waarde van variabel ρ_0 .

$$\mathbf{P}_k \boldsymbol{\phi}_{k,k} = \boldsymbol{\rho}_k \quad (3.30)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \rho_1 & \cdots & \rho_{k-1} \\ \rho_1 & 1 & \cdots & \rho_{k-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{k-1} & \rho_{k-2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{k1} \\ \phi_{k2} \\ \vdots \\ \phi_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \rho_k \end{bmatrix}$$

$\mathbf{P}_k$ Autocorrelatie matrix
 $\boldsymbol{\phi}_k$ AR parameters matrix
 $\boldsymbol{\rho}_k$ Autocorrelatie vector
 ϕ_{kk} partieel autocorrelatie van lag k.

De Yule Walker berekening kan gebruikt worden om de partieelcorrelatie ϕ_{kk} te berekenen. Voor het bepalen van de partieel autocorrelatie ϕ_{kk} dient substitutie te worden toegepast (3.31). De teller heeft dezelfde elementen als de noemer, behalve dat de laatste kolom vervangen is door $\boldsymbol{\rho}_k$. De formule maakt gebruik van determinanten, zie bijlage B.

$$\phi_{kk} = \frac{\begin{vmatrix} 1 & \rho_1 & \cdots & \rho_{k-1} \\ \rho_1 & 1 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \rho_1 \\ \rho_{k-1} & \cdots & \rho_1 & \rho_k \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \rho_1 & \cdots & \rho_{k-1} \\ \rho_1 & 1 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \rho_1 \\ \rho_{k-1} & \cdots & \rho_1 & 1 \end{vmatrix}} \quad (3.31)$$

3.3.4 Voortschrijdend gemiddelde

De moving-average (MA) model is de meest gebruikelijke benadering van een eendimensionale tijdserie. Het model bestaat uit een veelvoud nulpunten, $\mathfrak{z}$, en één pool, p_0 . Formule 3.32 geeft $MA(q)$ van de orde $q = |\mathfrak{z}| - 1$ weer.³¹

$$\tilde{z}_t = \theta_0 x_t + \theta_1 x_{t-1} + \cdots + \theta_q x_{t-q}, \quad \theta_0 = 1 \quad (3.32)$$

$\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1 \dots \theta_q\}$ de parameters in het model
 $\mathbf{x} = \{x_t \dots x_{t-q}\}$ Ruis in het model
 $\tilde{z}_t$ waarde z op tijdstap t min het (verwachte) gemiddelde μ van de serie z waardes.

De parameters $x_t \cdots x_{t-q}$ kunnen gesplitst worden in de variabelen witte ruis x_t en lag $L^0 \cdots L^q$, waarbij $L \neq 0$. Dit resulteert in een formule waarbij alleen de variabele x_t wordt gebruikt in plaats van de gehele serie, gezien met de lag L^n en het huidige laatste element in de tijdserie x_t het voorgaande element x_{t-n} berekend kan worden (3.33).³²

$$\tilde{z}_t = (\theta_0 L^0 + \theta_1 L^1 + \cdots + \theta_q L^q) x_t, \quad \theta_0 = 1, \quad L^0 = 1 \quad (3.33)$$

L is de lag variabele

³¹ Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc., p. 71

³² Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea

Wordt het sommatie teken voor de haakjes gewerkt, dan zal de polynomiaal notatie 3.34 volgen. Het voortschrijdend gemiddelde model is inverteerbaar (de argumentmatrix heeft een inverse) als $|L| > 1$.

$$\tilde{z}_t = \theta(L)x_t \quad (3.34)$$

$\theta(L) = 1 - \theta_1 L - \theta_2 L^2 - \dots - \theta_q L^q$ voortschrijdend gemiddelde functie van orde q op basis van de lag variabele.

Autocorrelatie functie

Bij het berekenen van de autocovariantie van het MA(q) model dient rekening gehouden te worden dat de ruis elke stap een unieke populatie heeft. Indien de autocovariantie over een proces langer dan de orde q wordt genomen, $k > q$, zal er geen variantie gevonden worden, $\gamma_k = 0$ (3.35). De vergelijking delen door $\gamma_0 = (1 + \sum_{i=1}^q \theta_i^2) \sigma_x^2$ resulteert in de autocorrelatie (3.36).

$$\gamma_k = \begin{cases} (-\theta_k + \theta_1 \theta_{k+1} + \theta_2 \theta_{k+2} + \dots + \theta_{q-k} \theta_q) \sigma_x^2 & k = 1, 2, \dots, q \\ 0 & k > q \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\rho_k = \begin{cases} \frac{-\theta_k + \theta_1 \theta_{k+1} + \dots + \theta_{q-k} \theta_q}{1 + \theta_1^2 + \dots + \theta_q^2} & k = 1, 2, \dots, q \\ 0 & k > q \end{cases} \quad (3.36)$$

3.3.5 Autoregressief voortschrijdend gemiddelde

Men kan het AR(p) model (3.23) en AM(q) model (3.32) samenvoegen tot het ARMA(p, q) model (3.37), bestaand uit p aantal autoregressieve elementen en q aantal voortschrijdende-gemiddelde elementen.³³ Het model heeft dan ook een veelvoud polen, $\mathbf{p}$, en veelvoud nulpunten, $\mathbf{z}$.

$$\phi_0 \tilde{z}_t = \theta_0 x_t + \sum_{i=1}^q \theta_i x_{t-i} - \sum_{i=1}^p \phi_i \tilde{z}_{t-1}, \quad \theta_0 = 1, \quad \phi_0 = 1 \quad (3.37)$$

$\tilde{z}_t$	waarde z op tijdstap t min het (verwachte) gemiddelde μ van de serie z waardes.
x	impuls
ϕ	zijn de parameters in het autoregressief deel
θ	zijn de parameters in het voortschrijdend gemiddelde deel
p	orde van het autoregressief deel
q	orde van het voortschrijdend gemiddelde deel
i	index (ondergrens)

Het combineren van de twee modellen door middel van de $\phi(L)$ -functie (3.25) en $\theta(L)$ -functie (3.34) leidt tot een overzichtelijkere formule met de $\psi(L)$ functie (3.38).

$$\tilde{z}_t = \phi^{-1}(L)\theta(L)x_t = \psi(L)x_t \quad (3.38)$$

z_t	respons op tijdstap t
x_t	impuls op tijdstap t
$\phi(L) = 1 + \phi_1 L + \phi_2 L^2 + \dots + \phi_p L^p$	autoregressieve functie van orde p op basis van de lag variabele.
$\theta(L) = 1 + \theta_1 L + \theta_2 L^2 + \dots + \theta_q L^q$	voortschrijdend gemiddelde functie van orde q op basis van de lag variabele.
$\psi(L) = \phi^{-1}(L)\theta(L)$	autoregressief voortschrijdend gemiddelde functie van orde p, q op basis van lag variabele

³³ Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc.

autocorrelatie functie

De autocorrelatie functie van het ARMA model wordt via dezelfde methode gevonden als bij het AR model (zie paragraaf 3.3.3). Door het vermenigvuldigen en aannemen van waarschijnlijkheden, wordt de berekening voor de autocovariantie gereduceerd tot onderstaande formule:

$$\gamma_k = \left(\sum_i^p \phi_i \gamma_{k-i} \right) + \gamma_{zx}(k) - \left(\sum_{j=1}^q \theta_j \gamma_{zx}(k-j) \right) \quad (3.39)$$

$\gamma_{ze}(k) = E(\tilde{z}_{t-k} x_t)$ covariantie tussen z en x

Gezien $\tilde{z}_{t-k}$ gelijk is aan $\sum_{j=0}^{\infty} \psi_j x_{t-k-j}$ (3.38), volgt dat k kleiner of gelijk moet zijn aan nul om aan een variantie te vinden (3.39). Door te stellen dat $\theta_0 = -1$ kan de formule zonder de $\gamma_{zx}(k)$ geformuleerd worden (3.40). Is $k \geq q+1$ dan wordt het MA gedeelte gelijk aan 0, en kan het weggelaten worden uit de formule. Hierdoor zorgt de ρ serie $\{\rho_q, \rho_{q-1}, \dots, \rho_{q-p+1}\}$ voor de benodigde startvariabelen voor $\phi(L)\rho_k = 0$ (3.41), waarmee de autocorrelatie op hogere lags voorspeld kan worden.

$$\gamma_{ze}(k) = \begin{cases} 0 & k > 0 \\ \psi_{-k} \sigma_x^2 & k \leq 0 \end{cases} \quad (3.39)$$

$$\gamma_k = \phi_1 \gamma_{k-1} + \dots + \phi_p \gamma_{k-p} - \sigma^2 (\theta_k \psi_0 + \theta_{k+1} \psi_1 + \dots + \theta_q \psi_{q-k}), \theta_0 = -1 \quad (3.40)$$

$$\rho_k = \phi_1 \rho_{k-1} + \dots + \phi_p \rho_{k-p}, \quad k \geq q+1, \theta_0 = -1 \quad (3.41)$$

Partieel autocorrelatie functie

De partiële autocorrelatie functie van het ARMA model is van oneindige grootte. Het zal naarmate de orde toeneemt zich meer als een puur voortschrijdend gemiddelde gedragen.³⁴

³⁴ Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc.

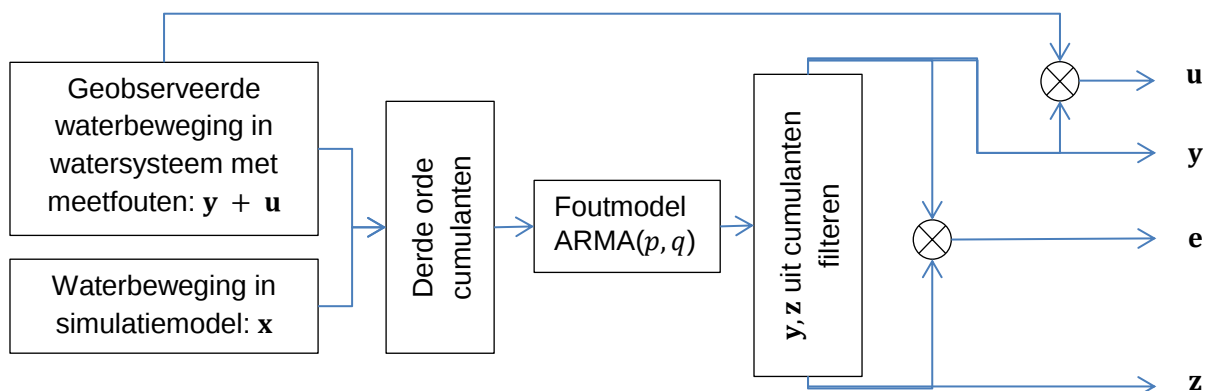
4 Initialisatie foutmodel

In dit hoofdstuk wordt getracht een initialisatiemethode van het foutmodel te vinden, waarbij het best werkende ARMA model uit de data gefilterd kan worden.

Het moeilijkste ontwerpproces van een AR of ARMA model is het opstellen van de initialisatie. Bij de initialisatie kampt de modelleur veelal met de volgende problemen:

- De geobserveerde waarden voldoen niet bij voorbaat aan de voorwaarden van een AR of ARMA model
- De geobserveerde waarden zijn niet altijd een representatie van de gehele populatie.
- De geobserveerde waarden kunnen verstoord zijn met onbekende ruis door meetfouten.
- Veel onbekende variabelen. Over het algemeen zijn zowel de ordegroottes, als de parameters onbekend.

In de onderzoeksofstelling van dit project is er geen vervuiling van meetfouten u , zie figuur 2.2. Toch is het van belang om bij de meetfouten stil te staan, omdat deze potentiële problemen in de praktijk een serieuze dreiging kunnen vormen voor het correct functioneren van het foutmodel. Al-smadi e.a. hebben een methode voorgesteld waar tweede orde cumulanten (varianties) worden vervangen door derde orde cumulanten, waardoor het effect van de meetfouten uit de data gefilterd kan worden (figuur 4.1).^{35,36,37,38,39}



Figuur 4.1 Schematisatie van een foutmodel, zoals voorgesteld door Al-Smadi, dat met de aanvoer van meetfouten kan verwerken.

³⁵ Al-Smadi, A., *Cumulant-based order selection of non-Gaussian autoregressive moving average models: the corner method*, August 2003, Signal Processing, vol. 85, Issue 3, 2005, p.p 449-456, Elsevier

³⁶ Al-Smadi, A., *ARMA model order estimation using third order computations*, 24 sept 2014, International Journal of General Systems, Taylor & Francis Groups

³⁷ Al-Smadi, A., Al-Zaben, A., *ARMA Model Order Determination Using Edge Detection: A New Perspective**, 2005, Circuits Systems Signal Processing, Vol24, No. 6, 2005, Pp. 723-732

³⁸ Giannakis, G. B., Mendel, J. M., *Identification of Nonminimum Phase Systems Using Higher Order Statistics*, maart 1989, IEEE Transactions on Acoestics, Speech, and Signal Processing, vol 37, No. 3

³⁹ Al-Smadi, A., Wilkes, D. M., *Robust and accurate ARX and ARMA Model Order Estimation of Non-Gaussian Processes*, 2005, Circuits Systems Signal Processing, Vol24, No. 6, 2005, Pp. 723-732

Na het weglaten van de meetfouten blijven er drie problemen over. In de meeste gevallen kiest een modelleur voor het oplossen van één van de probleemstellingen en lost deze op voor meerdere scenario's. Nadat het vraagstuk is beantwoord, zal de modelleur de volgende vraagstukken beantwoorden.

4.1 Ordegrootte

De klassieke methode voor het bepalen van de orde is het gebruik van de partieel autocorrelatie functie (3.42) en autocorrelatie functie (3.41) voor het bepalen van de AR-orde p en MA-orde q . Omdat er met gemonsterde waarden wordt gerekend, dient over een populatie gerekend te worden en niet over een steekproefsgewijze tijdstap (4.1). Hierdoor worden de statistische invloeden van de meetfouten in het monster op de serie (mogelijk) verkleind.⁴⁰

$$\hat{y}_k = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-abs(k)} \tilde{z}_{t+abs(k)} \tilde{z}_t, \quad -N < k < N \quad (4.1)$$

$\hat{y}_k$ monster autocovariantie functie over AR orde k
 N populatie
 $abs(x)$ resulteert in de absolute waarde van x
 $\tilde{z}_t$ residu van vector z

Zowel de autocorrelatie als de partieel autocorrelatie wordt daarna bepaald over de monster autocovarianties. Gezien er al een correctie voor de monsters in de autocorrelaties heeft plaatsgevonden, wordt niet opnieuw een correctie uitgevoerd in de monster autocorrelatie functie (4.2) en monster partieel correlatie functie (4.3).

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{\gamma}_k}{\hat{\gamma}_0} \quad (4.2)$$

$\hat{\rho}_k$ monster autocorrelatie functie over AR orde k

$$\hat{\Gamma}_k^{-1} \hat{\phi}_k = \hat{\gamma}_k, \quad z_{k+1} = \hat{\phi}_k^T z, \quad \phi_k = (\phi_{k1}, \dots, \phi_{kk}) \quad (4.3)$$

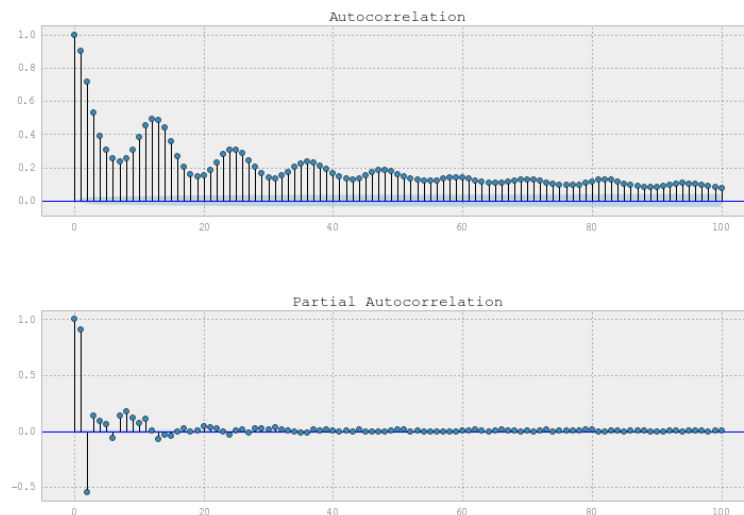
$\hat{\phi}_{00} = 1$
 ϕ_{kk} partieel autocorrelatie is de laatste coëfficiënt van de beste lineaire voorspelling

De waarden waarover geschat wordt is probabilistisch van aard en heeft niet dezelfde statistische eigenschappen als in de theorie. Zo zal de partieel autocorrelatie bij een lag $p + 1$ in de theorie nul naderen, maar zal in de werkelijkheid veelal rond de nul liggen (figuur 4.2). Dit geldt eveneens voor de autocorrelatie, die in theorie na MA orde q langzaam afneemt in amplitude. Bij een AR(p) model stopt de partieel autocorrelatie in theorie abrupt na p .

Hoewel dit door een menselijke handeling makkelijk kan worden verholpen, is dit niet een gewenste oplossing voor een RTC-systeem. Er wordt immers getracht het milieuproces na te bootsen in een gesloten algoritme.

Een geautomatiseerde methode voor het initialiseren van de ordegrootte is om eerst binnen een vooraf afgebakend ordegrootten de parameters te berekenen om vervolgens de resultaten te toetsen met behulp van een informatiecriterium. Bij deze vorm van ordebepaling wordt dus eerst ervan uitgegaan dat de ordegrootte al bekend is, waarna deze later met behulp van een criteria daadwerkelijk wordt bepaald.

⁴⁰ Indien er geen constante of exponentieel groeiende meetfout is, zal de invloed van een uitschieter naar waarschijnlijkheid gemiddeld minderen over een groeiende populatie.



figuur 4.2 Autocorrelatie, partieel autocorrelatie en AR-parameters berekend over een discrete tijdserie $\tilde{z} = \{\tilde{z}_0, \dots, \tilde{z}_N\}$.

Het informatie criterium geeft een indicatie van de pasbaarheid van het model ten opzichte van de data ten kosten van de ordegrootte. De pasbaarheid wordt bij toetsing altijd aan de ordegrootte verbonden, omdat een hogere orde altijd tot betere pasbaarheid leidt, zelfs bij overschatting van de ordegrootte.

De informatie criteria zijn geen nulhypothese. Wanneer er geen goede ordegrootte aanwezig is, zal de functie hiervan geen blijf geven.

De volgende drie informatie criteria worden veelvuldig gebruikt binnen de signaalverwerking; Akaike's informatie criterium (4.4), Bayesian's informatie criterium (4.5) en Hannan-Quinn's informatie criterium (4.6).⁴¹ Het verschil van de informatie criteria zit in de 'strafwaarde' van de ordegrootte. Bayesian's informatie criterium straft de ordegrootte harder dan Akaike's informatie criterium.

$$AIC = 2k - 2\ln(L_{max}) \quad (4.4)$$

AIC Akaike's informatie criterium
k aantal parameters
L maximale waarde van de aannemelijkheidsfunctie

$$BIC = \ln(n) k - 2\ln(L_{max}) \quad (4.5)$$

BIC Bayesian's informatie criterium
n aantal elementen in geobserveerde serie
k aantal vrije parameters die geschat moeten worden
L maximale waarde van de aannemelijkheidsfunctie

$$HQIC = 2 \ln(\ln(n)) k - 2\ln(L_{max}) \quad (4.6)$$

HQIC Hannan-Quinn's informatie criterium
n aantal elementen in geobserveerde serie
k aantal vrije parameters die geschat moeten worden
L maximale waarde van de aannemelijkheidsfunctie

⁴¹ Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea

Doordat de methode met informatiecriteria meerdere parameterberekeningen vereist, zijn deze bij lange tijdreeksen al snel tijdrovend. Een goede afbakening dient eerst door de modelleur gegeven te worden. Hiervoor wordt gebruikt gemaakt van de autocorrelatie en de partieel autocorrelatie, die rekenkundig minder zwaar zijn voor de computer. Het foutmodel zal dan tijdens de optimalisatieprocedure alleen parameters van in de buurt gelegen ordegroottes berekenen om de rekentijd te drukken.

4.2 AR parameters

Bij het schatten van de autoregressieve parameters in een AR model wordt gebruik gemaakt van het lineaire gedrag van het foutmodel. Op tijdstap $t = p + q + 1$ is de reeks formules voor de autocovariantie (4.7):

$$\begin{aligned} \gamma_{q+1} &= \hat{\phi}_1 \gamma_q + \hat{\phi}_2 \gamma_{q-1} + \dots + \hat{\phi}_p \gamma_{q-p+1} \\ \gamma_{q+2} &= \hat{\phi}_1 \gamma_{q+1} + \hat{\phi}_2 \gamma_q + \dots + \hat{\phi}_p \gamma_{q-p+2} \\ &\vdots \\ \gamma_{q+p} &= \hat{\phi}_1 \gamma_{q+p-1} + \hat{\phi}_2 \gamma_{q+p-2} + \dots + \hat{\phi}_p \gamma_q \end{aligned} \quad (4.7)$$

waarbij voor reeks γ de waarschijnlijke waarde $\gamma_i = E(\tilde{z}_t \tilde{z}_{t+1})$ wordt aangenomen. Hierdoor heeft het systeem van lineaire vergelijkingen nog maar één onbekende, namelijk reeks $\hat{\phi}$ (4.7). Een (door economen) veel toegepaste methode binnen de lineaire algebra voor het oplossen van een stelsel van lineaire vergelijkingen is deze als argumentatiematrix te noteren om de matrix vervolgens in Reduced Row Echelon Form om te zetten (bijlage B.5)(4.8).

$$\mathbf{B} = \text{ref}(\mathbf{A}), \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_q & a_{q-1} & \dots & a_{q-p+1} \\ a_{q+1} & a_q & \dots & a_{q-p+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{q+p-1} & a_{q+p-2} & \dots & a_q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{q+1} \\ a_{q+2} \\ \vdots \\ a_{q+p} \end{bmatrix}, \quad a_i = \gamma_i \quad (4.8)$$

Argumentatiematrix $\mathbf{B}$ kan herschreven worden naar een systeem van lineaire vergelijkingen:

$$\begin{aligned} b_{q+1} &= \hat{\phi}_1 b_q + \dots + \hat{\phi}_{p-1} b_{q-p+2} + \hat{\phi}_p b_{q-p+1} \\ &\vdots \\ b_{q+p-1} &= \hat{\phi}_1 0 + \dots + \hat{\phi}_{p-1} b_{q-2} + \hat{\phi}_p b_{q-1} \\ b_{q+p} &= \hat{\phi}_1 0 + \dots + \hat{\phi}_{p-1} 0 + \hat{\phi}_p b_q \end{aligned}, \quad b_i = \gamma_i^* \quad (4.9)$$

In dit lineair stelsel kan de reeks geschatte parameters $\hat{\phi}$ opgelost worden door van beneden naar boven de $\hat{\phi}$ te bepalen.

Echter blijkt de Gauss-eliminatie niet te werken voor het schatten van de AR-parameters van een milieumodel (bijlage B). Dit komt omdat de Gauss-eliminatie zich baseert op de theorie van de lineair kleinste kwadraten methode.⁴² De eerste reeks(en) impulsen $\tilde{z}$ zijn stochastisch* en daardoor probabilistisch van aard. Bij de Gauss-eliminatie wordt er echter van een impulsreeks $\tilde{z}$

* Er heeft zich waarschijnlijk nog geen lineair gedrag voorgedaan kenmerkend voor het systeem

⁴² Grcar, J. F., *Mathematicians of Gaussian elimination*, 2011, Notices of the American Mathematical Society, vol. 58, p. 782-792. (<http://www.ams.org/notices/201106/index.html>)

uit gegaan met statistische karakteristieken van de tweede orde, zodat er een schatting van de parameters gedaan kan worden.⁴³

Levinson en Durbin hebben een iteratieve methode afgeleid voor het oplossen van de Yule-Walker berekeningen. In plaats van het systeem van lineaire vergelijkingen onmiddellijk op te lossen, waarbij gebruik gemaakt wordt van een inverse $p \times p$ matrix, berekent de Levinson-Durbin recursie het systeem geleidelijk in toenemende orde AR(1), AR(2), ..., AR(p). De Levinson-Durbin algoritme is in tegenstelling tot de Gauss-eliminatie niet gebaseerd op de kleinste kwadraten methode, maar op de geminimaliseerde gemiddelde kwadraten methode.⁴⁴ De geminimaliseerde gemiddelde kwadraten methode kan ook met niet-witte ruis rekenen. De methode is hierdoor uitermate geschikt voor het schatten van parameters waarbij het model nog geen lineair gedrag heeft vertoond.

De Levinson-Durbin recursie maakt ook (herhaaldelijk) gebruik van de lineaire eigenschappen van het foutmodel. Echter begint het algoritme van Levinson-Durbin niet met een argumentatiematrix, maar met een autocorrelatiematrix (4.10).

$$\mathbf{R}_p = E(\tilde{\mathbf{z}}\tilde{\mathbf{z}}^T), \quad \rho_{i,j} = E(\tilde{z}_{t+i}\tilde{z}_{t+j}), \quad \mathbf{R}_p = \begin{bmatrix} \rho_{0,0} & \rho_{0,1} & \cdots & \rho_{0,n} \\ \rho_{1,0} & \rho_{1,1} & \cdots & \rho_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n,0} & \rho_{n,1} & \cdots & \rho_{n,n} \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

$\tilde{z}_t$ afwijking van z_t in vergelijking met populatiegemiddelde van eigen reeks $\mathbf{z}$
 $E(x)$ resulteert in de verwachte waarde van x
 $\rho_{i,j}$ autocorrelatie tussen $\tilde{z}_{t+i}$ en $\tilde{z}_{t+j}$
 $\mathbf{R}_p$ $n \times n$ autocorrelatie matrix

De autocorrelatie geeft het verband tussen twee punten in eigen reeks. Het is dan makkelijk te zien dat het verband tussen $\tilde{z}_{t+i}$ en $\tilde{z}_{t+j}$ identiek is aan het verschil tussen $\tilde{z}_{t+j}$ en $\tilde{z}_{t+i}$ (4.11). Matrix $\mathbf{R}_p$ heeft hierdoor duidelijk de vorm van een Toeplitz matrix (4.12). Wordt bovendien meegenomen dat binnen een tijdstap t de verwachte autocorrelatie over hetzelfde aantal stappen door de hele serie constant is, dan kan $\rho_{i,j}$ herschreven worden naar $\rho_{\text{abs}(i-j)}$. De Toeplitz matrix is hierdoor duidelijk een cyclische matrix (4.13).

$$\frac{E(\tilde{z}_{t+i}\tilde{z}_{t+j})}{\varepsilon_z^2} \equiv \frac{E(\tilde{z}_{t+j}\tilde{z}_{t+i})}{\varepsilon_z^2} \Rightarrow \rho_{i,j} \equiv \rho_{j,i} \quad (4.11)$$

$\tilde{z}_t$ afwijking van z_t in vergelijking met eigen reeks $\mathbf{z}$
 $E(x)$ resulteert in de verwachte waarde van x

$$\mathbf{R}_p = \begin{bmatrix} \rho_{0,0} & \rho_{1,0} & \cdots & \rho_{m,0} \\ \rho_{1,0} & \rho_{1,1} & \cdots & \rho_{m-1,1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{m,0} & \rho_{m-1,1} & \cdots & \rho_{m-1,m-1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_p = \mathbf{p}\mathbf{p}^T, \quad \rho_{i,j} \equiv \rho_{j,i} \quad (4.12)$$

$\mathbf{R}_p$ $m \times m$ Toeplitz autocorrelatie matrix
 $\rho_{i,j}$ autocorrelatie tussen $\tilde{z}_{t+i}$ en $\tilde{z}_{t+j}$

⁴³ Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

⁴⁴ Brockwell, P. J., Dahlhaus, R., *Generalized Durbin-Levinson and Burg Algorithms*, februari 2004, Journal of Econometrics volume 118, Elsevier, p. 129-149

$$\mathbf{R}_p = \begin{bmatrix} \rho_0 & \rho_1 & \cdots & \rho_m \\ \rho_1 & \rho_0 & \cdots & \rho_{m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_m & \rho_{m-1} & \cdots & \rho_0 \end{bmatrix}, \quad \begin{matrix} \rho_{i,j} \equiv \rho_{j,i} \\ \rho_{i,i} = \rho_{j,j} \end{matrix} \Leftrightarrow \rho_{\text{abs}(i-j)} \quad (4.13)$$

$\rho_{i,j}$ autocorrelatie tussen $\tilde{z}_{t+i}$ en $\tilde{z}_{t+j}$
 $\text{abs}(x)$ resulteert in de absolute waarde van x
 ρ_i autocorrelatie van $\tilde{z}$ genomen over i tijdstappen

Als de autocorrelatie-matrix de vorm van een cyclische Toeplitz matrix heeft, dan suggereren de autocorrelatie- (3.28) en autocovariantie functie (3.29) dat de autocovariantie-matrix ook de vorm van een cyclische Toeplitz matrix heeft (4.14).

$$\mathbf{C}_m = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \cdots & \gamma_{m-1} \\ \gamma_1 & \gamma_0 & \cdots & \gamma_{m-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{m-1} & \gamma_{m-2} & \cdots & \gamma_0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\gamma} \boldsymbol{\gamma}^T \quad (4.14)$$

$\boldsymbol{\gamma}$ $m \times 1$ vector met autocovarianties op huidige tijdstap.
 $\mathbf{C}_m$ $m \times m$ Toeplitz autocovariantie matrix op tijdstap m

Het probleem van parameter schatting is het bepalen van de beste lineaire voorspeller (4.15). Onder de beste lineaire voorspeller wordt verstaan dat de serie parameters $\boldsymbol{\Phi}_m$ voor iedere orde-stap zodanig is gekozen dat het de gemiddelde kwadratische fout minimaliseert.⁴⁵

$$\hat{z}_{n+1} = \sum_{j=1}^m \phi_m(j) \tilde{z}_{n+1-j} = \boldsymbol{\Phi}_m^T \tilde{\mathbf{z}}_n \quad (4.15)$$

$$\boldsymbol{\Phi}_m = \{\phi_{m,1}, \dots, \phi_{m,m}\}^T \quad \mathbf{z}_n = \{\tilde{z}_n, \dots, \tilde{z}_{n+1-m}\}^T$$

$\hat{z}$ geschatte impuls waarde $\tilde{z}$ voor volgende tijdstap
 $\mathbf{z}_n$ $m \times 1$ vector met impuls $\tilde{z}$
 $\boldsymbol{\Phi}$ $m \times m$ bovendreihoecksmatrix met AR-parameters, waarbij over de verticale i -as de orde p is geplaatst en over de horizontale j -as het aantal lags in de autoregressie functie.
 $\boldsymbol{\Phi}_m$ $m \times 1$ vector met autoregressieve parameters berekend op tijdstap m , met orde m

Het stelsel van lineaire vergelijkingen (4.7) kan met behulp van de autocovariantie-matrix of autocorrelatie-matrix herschreven worden tot een matrixvergelijking (4.16). De gemiddelde kwadratische fout e_m is ook hierbij geminimaliseerd.⁴⁶ De voorspelling $\hat{z}_{n+1} = \boldsymbol{\Phi}_m^T \tilde{\mathbf{z}}_n$ (4.15) zal altijd hetzelfde antwoord opleveren, ondanks dat voor de serie parameters $\boldsymbol{\Phi}_m = \mathbf{C}_m^{-1} \boldsymbol{\gamma}_m = \mathbf{R}_m^{-1} \boldsymbol{\rho}_m$ meerdere antwoorden mogelijk zijn. De Gauss-eliminatie is overigens volledig op deze eigenschap gebaseerd.

⁴⁵ Brockwell, P. J., Dahlhaus, R., *Generalized Durbin-Levinson and Burg Algorithms*, februari 2004, Journal of Econometrics volume 118, Elsevier, p. 129-149

⁴⁶ Brockwell and Davis, *Time Series: Theory and Methods*, 1991, Springer Series in Statistics, Springer

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_m \Phi_m &= \gamma_m, \quad \mathbf{C}_m = E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_n^T), \quad \gamma_m = E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_{n+1}), \\ \mathbf{R}_m \Phi_m &= \rho_m, \quad \mathbf{R}_m = \frac{E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_n^T)}{\sigma_z^2}, \quad \rho_m = \frac{E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_{n+1})}{\sigma_z^2}, \\ e_m &= E(\tilde{\mathbf{z}}_{n+1}^2) - \gamma_m^T \mathbf{C}_m^{-1} \gamma_m \end{aligned} \quad (4.16)$$

$\tilde{\mathbf{z}}_n$	$m \times 1$ kolomvector met impulswaarden op tijdstap m
γ_m	$m \times 1$ kolomvector met autocovariantie op tijdstap m
ρ_m	$m \times 1$ kolomvector met autocorrelatie op tijdstap m
$\mathbf{C}$	$m \times m$ cyclische Toeplitz autocovariantiematrix
$\mathbf{C}^{-1}$	inverse $m \times m$ cyclische Toeplitz autocovariantiematrix
$\mathbf{R}$	$m \times m$ cyclische Toeplitz autocorrelatiematrix
$E(x)$	resulteert in de verwachte waarde van x
e_m	geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout (Minimized Mean Squared Error)

De gemiddelde kwadratische fout is altijd een 1×1 matrix, ofwel een reëel getal, als oplossing. Stel dat $\tilde{\mathbf{z}}_n$ een $m \times 1$ kolomvector is, dan is $\gamma_m = E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_{n+1})$ dat ook: $(m \times 1)(1 \times 1) = (m \times 1)$. De Toeplitz autocovariantiematrix $\mathbf{C}_m = E(\tilde{\mathbf{z}}_n \tilde{\mathbf{z}}_n^T)$ heeft dan een $(m \times 1)(1 \times m) = (m \times m)$ formaat. De berekening voor het formaat van de geminimaliseerde gemiddelde gekwadrateerde fout $e_m = E(\tilde{\mathbf{z}}_{n+1}^2) - \gamma_m^T \mathbf{C}_m^{-1} \gamma_m$ luidt dan $(1 \times 1) - (1 \times m)(m \times m)(m \times 1) = (1 \times 1) - (1 \times m)(m \times 1) = (1 \times 1) - (1 \times 1) = (1 \times 1)$. De geminimaliseerde gemiddelde gekwadrateerde fout e_m wordt dus voor elk aantal observaties m gevonden, ook wanneer, in tegenstelling tot de kleinste gekwadrateerde fout LSE , er meer onbekenden zijn dan observaties.

Levinson en Durbin vervingen de verwachte autocorrelatie $E(z_{t+u} z_t)$ voor de gemonsterde autocorrelaties $\hat{\gamma}(u) = (\sum_{t=1}^{T-u} z_{t+u} z_t) / N$, $0 \leq u \leq N$. Hiermee is een stapsgewijze methode gevonden voor het AR-model (2.1), waarbij met toenemende orde $\{1, \dots, p\}$ onder andere de parameter, ruis en geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout wordt geschat (4.17).

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{z}}_{t+m} &= \hat{\Phi}_m^T \tilde{\mathbf{z}}_{t+m-1} + \varepsilon_{t+m} \quad \{\varepsilon_{t+m}\} \sim N(0, e_m) \\ \Phi_m &= \hat{\mathbf{C}}_m^{-1} \hat{\gamma}_m \quad e_m = \hat{\gamma}(0) - \hat{\gamma}_m^T \hat{\mathbf{C}}_m^{-1} \hat{\gamma}_m \end{aligned} \quad (4.17)$$

$\tilde{\mathbf{z}}_{t-1}$	$m \times 1$ kolomvector $\{z_{t-1}, \dots, z_{t-m}\}$ met impulswaarden
$\hat{\Phi}_m$	$m \times 1$ vector met geschatte autoregressieve parameters op tijdstap m , met orde m
$\hat{\gamma}_m$	$m \times 1$ kolomvector met geschatte autocovariantie
$\hat{\mathbf{C}}_m$	$m \times m$ geschatte cyclische Toeplitz autocovariantiematrix
$\hat{\mathbf{C}}_m^{-1}$	inverse geschatte cyclische Toeplitz autocovariantiematrix
$E(x)$	resulteert in de verwachte waarde van x
$N(\mu, \sigma^2)$	resulteert in de populatie met populatiegemiddelde μ en variantie σ^2
$MMSE_m$	geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout (Minimized Mean Squared Error)

De initiële waarden (waarden bekend op tijdstap $m = 0$), zijn $\phi_0 = 1$, $\rho_0 = 1$ en $\varepsilon_0 = r_0 = 1$.⁴⁷ De waarden op tijdstap $m = 1$ worden dan berekend met $\Phi_{1,1} = \rho_1 / \rho_0 = \rho_1$ en $\sigma_1 = \rho_0 - \Phi_{1,1} \rho_1$.

⁴⁷ Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

Daarna volgt de recursief zoals hieronder in pseudocode opgeschreven:

Voor k in serie $(2, \dots, p)$:

Bereken huidige parameter Φ_k van ordetap k ; $\Phi_{k,k}$

$$\Phi_{k,k} = (\rho_k - \Phi_{1,k-2}\rho_{k-1} - \dots - \Phi_{k-1,k-2}\rho_1)/e_{k-1}$$

De serie kan herschreven worden tot een matrixvergelijking. NumPy kan sneller matrices uitrekenen dan dat de reguliere Python de serie reeksen kan uitrekenen, waardoor deze kleine wiskundige herformuleringen bij, met name grote tijdseries, voor veel tijdswinst kunnen zorgen.

$$\Phi_{k,k} = (\rho_k - (\Phi_{1,k-2}\rho_{k-1} + \dots + \Phi_{k-1,k-2}\rho_1))/e_{k-1}$$

$$\Phi_{k,k} = (\rho_k - [\Phi_{1,k-2} \dots \Phi_{k-1,k-2}]^T \times [\rho_{k-1}, \dots, \rho_1])/e_{k-1}$$

Voor j in serie $(1, \dots, k-1)$:

Bereken parameters van de lags $j = 1, \dots, k-1$ op ordetap k :

$$\Phi_{j,k} = \Phi_{k,k-1} - \Phi_{k,k}\Phi_{k-j,k-1}$$

Bereken de geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout op ordetap k :

$$e_k = 1 - \Phi_{k,1}^2 - \dots - \Phi_{k,k}^2$$

[...] kan herschreven worden tot:

$$e_k = e_{k-1}(1 - \Phi_{k,k}^2)$$

De matrix met autoregressieve parameters heeft dus na de recursie een bovendriehoeksvorm gekregen, zie figuur 4.3. Over de diagonaal vindt men de partieel autocorrelatie voor tijdstappen $0, \dots, p$. De laatste kolom bevat de autoregressieve parameters. De parameter op tijdstap $k = 0$ wordt niet meegenomen. Tevens kan uit de serie geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout e de schatting voor de witte ruis variantie σ_ε^2 op tijdstap p afgelezen worden. Alleen de variantie op tijdstap p is van interesse, omdat de populatie van witte ruis over de tijdstappen niet gelijk is (2.8). Trekt men de wortel van σ_ε^2 , dan wordt de standaardafwijking van de witte ruis σ_ε gevonden.

$$\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_{0,0} = 1 & \phi_{0,1} & \dots & \Phi_{0,p-1} & \Phi_{0,p} \\ & \Phi_{1,1} = \rho_1 & \dots & \Phi_{p-1,p} & \Phi_{1,p} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \Phi_{p-1,p} & \Phi_{p-1,p} \\ & & & \Phi_{p-1,p} & \Phi_{p,p} \end{bmatrix} \quad e = \begin{bmatrix} e_0 \\ e_1 \\ \vdots \\ e_{p-1} \\ e_p \end{bmatrix}$$

Figuur 4.3 Links de bovendriehoeksmatrix met onder andere de partieel autocorrelatie serie en de autoregressieve parameter serie en rechts de foutserie met geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fouten voor iedere ordetap.

4.3 ARMA parameters

In deze paragraaf wordt ervan uitgegaan dat p en q bekend zijn. Tevens wordt er vanuit gegaan dat $\mathbf{x}$ en $\mathbf{z}$ beiden een populatiegemiddelde, μ , van nul hebben. Daarom dienen $\mathbf{x}$ en $\mathbf{z}$ eerst door een filter gehaald te worden die het gemiddelde van de serie onttrekt.

4.3.1 Meest aannemelijke schatter

De meest aannemelijke schatter is de schatting waarbij de aannemelijkheidsfunctie $L(\mathbf{x})$ maximaal is. De waarde van de aannemelijkheidsfunctie is het hoogst bij een steekproefuitkomst waar de kans op de getrokken waarden het grootst is.

$$L(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \sigma_x^2) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \|\boldsymbol{\Gamma}_n\|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{Z}^T \boldsymbol{\Gamma}_n^{-1} \mathbf{Z}\right) \quad (4.18)$$

$L(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \sigma_x^2)$	aannemelijkheidsfunctie van het ARMA model.
$\boldsymbol{\phi}$	autoregressieve parameters
$\boldsymbol{\theta}$	voortschrijdend gemiddelde parameters
σ_x^2	correlatie van de impuls
$\boldsymbol{\Gamma}_n^{-1}$	variantie/covariantie matrix van $\mathbf{X}$
$\mathbf{X}$	Argumentenmatrix van serie $\mathbf{x}$

Voordelen van de meest aannemelijkheidsfunctie is:

- Efficiëntie. De functie gebruikt lage variantieschattingen.
- Vaak is een Gaussische (populatiegemiddelde van nul) verdeling een redelijke aanname.
- Zelfs als $\mathbf{Z}$ niet Gaussisch verdeeld is, dan is de asymptotische verdeling van de schatters nogal altijd hetzelfde als bij een Gaussische verdeling.

Nadeel van deze methode is het ingewikkelde optimalisatieprobleem en de behoefte aan een goed startpunt. Om het startpunt te bepalen, zal gebruik gemaakt worden van de Hannan-Risannen methode.

4.3.2 Hannan-Risannen methode

De Hannan-Risannen methode wordt gebruikt voor het maken van een 'vóór'-schatting van de parameters. Het ARMA model (4.19) verschilt met de ARMA formule in hoofdstuk 3 dat bij beide reeksen ($\mathbf{z}$, $\mathbf{x}$) het populatie gemiddelde μ is afgehaald.

$$\tilde{z}_t = \phi^{-1}(L)\theta(L)\tilde{x}_t \quad (4.19)$$

Indien de serie $\mathbf{x}$ ongeobserveerd is, maakt de Hannan-Risannen methode gebruik van de eigenschap dat een $AR(m > \max(p, q))$ model met zeer grote orde, dezelfde eigenschappen vertoont als een $MA(q)$ model.⁴⁸ In het onderzoek van dit rapport wordt de maximale ordegraote van het $AR(m)$ model bepaald door de functie $m = f(N) = \left\lceil 12 \left(\frac{N}{100}\right)^{0,25} \right\rceil$, waarbij populatie N het aantal observaties is waarover wordt gerekend.

Nadat de maximale AR-orde m is bepaald, zal met behulp van BIC een betere orde geselecteerd worden. De Gauss-Markov theorie (zie bijlage C.2) bewijst dat de best geschatte autoregressieve parameters gevonden kunnen worden door middel van de normale kleinste kwadraten residu (Eng: Ordinary Least Squares) (zie bijlage C.1).

⁴⁸ Hannan, E. J., Risannen, J., *Recursive estimation of mixed autoregressive-moving average model*, 1982, Biometrika, vol 69, 1, pp. 81-94

De AR parameters kunnen geschat worden door middel van een Levinson-Durbin recursie (paragraaf 3.2) van orde p . Daarna kan via de Yule-Walker serie de ruis ε bepaald worden (4.20).

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} z_{t+1} & \cdots & z_{t+p} \\ \vdots & & \vdots \\ z_{t+m-p+1} & \cdots & z_{t+m} \end{bmatrix} \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_t \\ \vdots \\ z_{t+m-p} \end{bmatrix} \quad \hat{\boldsymbol{\Phi}} = \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1 \\ \vdots \\ \hat{\phi}_p \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_t \\ \vdots \\ \varepsilon_{t+m-p} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{z} - \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\Phi}}$$

Na het bepalen van een goede orde, kan diens parameters gebruikt worden voor het schatten van de niet geobserveerde ruis ε (4.21).

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} z_t & \cdots & z_{t+p} \\ \vdots & & \vdots \\ z_{t+m-p} & \cdots & z_{t+m-1} \end{bmatrix} \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_t \\ \vdots \\ \varepsilon_{t+m-p} \end{bmatrix} \quad \hat{\boldsymbol{\Phi}} = \begin{bmatrix} \hat{\phi}_0 \\ \vdots \\ \hat{\phi}_p \end{bmatrix}, \quad \hat{\phi}_0 = 1 \quad (4.21)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \hat{\boldsymbol{\Phi}}\mathbf{Z}$$

De series $\mathbf{z}$ en $\mathbf{x} \vee \boldsymbol{\varepsilon} \approx \mathbf{x}$ zijn nu bekend en kunnen gebruikt worden om een eerste schatting van de parameters $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} = \begin{bmatrix} \hat{\phi} \\ \hat{\theta} \end{bmatrix}$ te berekenen. Hierbij wordt opnieuw gebruik gemaakt van de normaal kleinste kwadraten residu.

Na analyse van de debietseries is gebleken dat de kansverdeling (en dus de correlatie) door de serie heen niet constant is. Het residu is wel afhankelijk van de afhankelijke variabele, waardoor deze heteroscedastisch is en niet homoscedastisch. Hierdoor dient binnen de Hannan-Risannen methode een gewogen kleinste kwadraten residu gebruikt te worden in plaats van een normale kwadraten residu. Zie hoofdstuk 6 voor meer informatie over de analyseresultaten. Zie bijlage C.3.1 voor meer informatie over de kleinste gewogen residu.

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \mathbf{z}$$

$\boldsymbol{\Omega}$ Nul-matrix met over de diagonaal de corrigerende gewichten

5. Simulatiemodel

Voor het testen van de AR en ARMA modellen zijn twee simulatiemodellen van één pilotgebied nodig. Van deze simulatiemodellen dient er één versimpeld te zijn en één gedetailleerd. Witteveen+Bos heeft voor dit onderzoek twee van zulke simulatiemodellen voor het gebied rondom de beek en rivier Mark en watergebied Vliet geleverd.

De Mark ontspringt in België als beek en stroomt ten Zuiden van Breda de landsgrens over. In Breda mondt de Aa of Weerijds uit op de beek, waarna deze als rivier verder stroomt. Benedenstrooms wordt de Mark Dintel genoemd en mondt deze uit via sluizencomplex Dintelsas op de Volkerak. De oorsprong van Aa of Weerijds ligt, net als de oorsprong van Mark, ook in België.

De Roosendaalse Vliet ontspringt nabij Kalmhout in België als Wildertse Beek en wordt naarmate het verder benedenstrooms afzakt Kleine Aa genoemd. Nog verder benedenstrooms heet de beek Molenbeek. Ten hoogte van Roosendal vindt het eindelijk zijn benaming Nieuwe Roosendaalse Vliet. Via het Mark-Vlietkanaal staat dit deel van de waterloop in verbinding met de Dintel. Bij sluizencomplex Bovensas verandert de Rosendaalse Vliet in de Steenbergse Vliet. Deze staat via sluizencomplex Benedensas in verbinding met Volkerak.

De studie beschreven in dit rapport gebruikt geen waargenomen meetwaarden uit het pilotgebied. De werkelijkheid wordt in de proefopstelling vervangen door het uitgebreide simulatiemodel van het pilotgebied. Hiervoor is gekozen omdat een simulatiemodel een constante meetfout heeft, terwijl metingen gedaan in het werkelijke veld stochastisch van aard zijn. Stochastische meetfouten zullen tot onzekere resultaten leiden, omdat stochastische waarden zich moeilijk laten voorspellen. Dit is niet handig bij het bestuderen van de foutmodellen zelf in plaats van de milieusystemen.

Naast de gesimuleerde werkelijkheid wordt in de proefopstelling ook het versimpeld simulatiemodel gebruikt. De afname in detail zal leiden tot andere uitvoerwaarden. In volgend hoofdstuk zal het residu tussen de twee uitvoeren van het model door een AR en ARMA model gehaald worden voor het analyseren van een eventuele 'constante' fout.

Een kaart van het uitgebreid simulatiemodel en een kaart van het versimpeld simulatiemodel zijn opgenomen in bijlage A. Tevens is er een kaart opgenomen genaamd de RR-grenzen. Op deze kaart staan de RR-grenzen van zowel het versimpelde als het uitgebreide model. Ook staan er alle 'links' en 'reaches' op weergegeven. Door middel van deze kaart kan een oplettende lezer zien dat het versimpelde model naast een drastische afname aan RainFall Runoff (RR) nodes en boundaries ook enkele zijtakken in de 1D Flow module mist.

6. Resultaten foutmodel

In dit hoofdstuk is het resultaat gerapporteerd uit het onderzoek met de vraagstelling of het mogelijk is om met een AR of een ARMA model de berekende waterbeweging van een versimpeld simulatiemodel beter overeen laten komen met de werkelijkheid, waarbij de werkelijkheid is vervangen door een gedetailleerd simulatiemodel. Hierbij zijn twee proefopstellingen gebruikt, waarbij het verschil zit in de in- en uitvoer van het foutmodel.

In de eerste proefopstelling heeft het foutmodel de neerslag als invoer en geeft het de wateraanvoer vanuit het veld op de waterloop als uitvoer. De doelstelling van deze proefopstelling is om te kijken of de Rainfall Run-off (RR) module van de simulatiemodellen vervagen kunnen worden door een foutmodel.

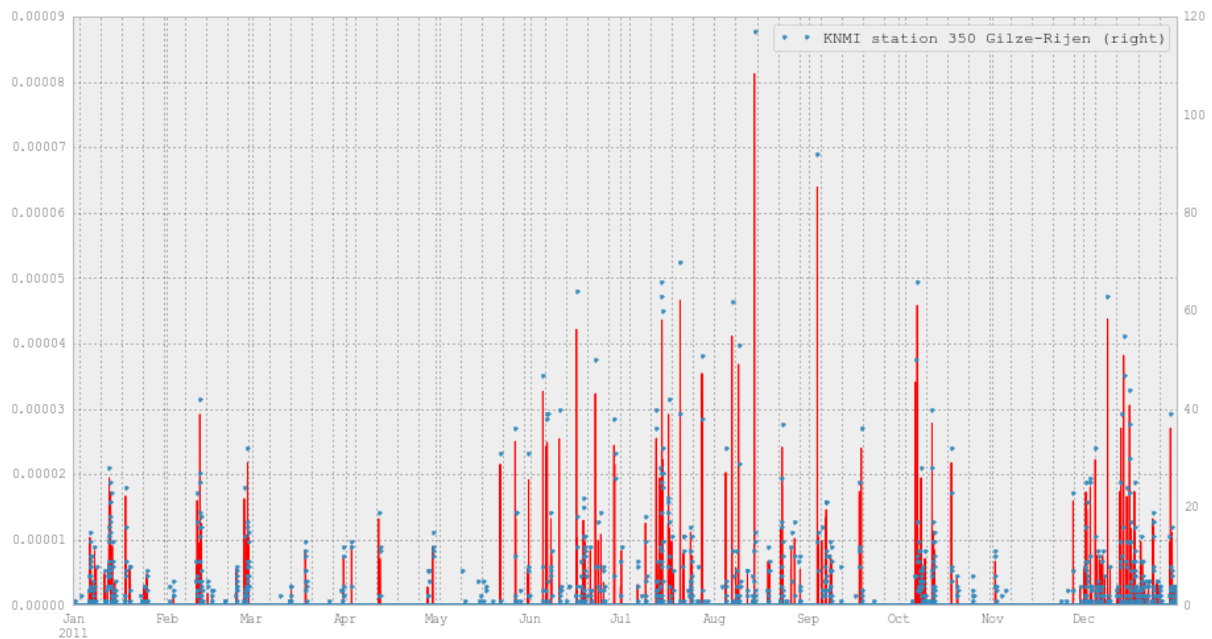
In de tweede proefopstelling heeft het foutmodel de gesimuleerde waterbewegingen van het versimpelde simulatiemodel als invoer en de gedetailleerde simulatiemodel als uitvoer. De doelstelling van deze proefopstelling is om te kijken of de gesimuleerde waterbewegingen verbeterd kunnen worden met behulp van een foutmodel.

De in het rapport behandelde theorie is toegepast op de proefopstellingen. De eerste proefopstelling wordt behandeld in paragraaf 6.1, de tweede proefopstelling in paragraaf 6.2.

6.1 Rainfall Runoff module

Gevraagd is of het mogelijk is om het verband tussen neerslag en afvoer in een ARMA model te vatten. Om deze vraag te beantwoorden is een simulatie gedraaid met het uitgebreide simulatiemodel met de gemeten neerslag (in mm per uursom) van KNMI station Gilze-Rijen over het jaar 2011. De debieten worden in SOBEK berekend op de 'reaches' en 'links' van het neurale netwerk. Echter is de in- en uitvoer van het RR model op de grens (knoop) van interesse. Als men het netwerk exporteert als shapefile, dan kan in menig programma gezien worden dat de 3b_link_l.dbf onder andere de volgende drie kolommen op na houdt: ID, FROM_ID, TO_ID. Met behulp van deze drie kolommen is het mogelijk om de debieten gelegen op de 'links' te koppelen aan de knopen aan beide uiteinden van een 'link'. Echter is niet elke knoop een grens, en sommige links lopen vanaf een grens het model in en andere vanuit het model naar de grens. Voor grote modellen is het inefficiënt om elke knoop handmatig na te lopen. Daarom is tijdens dit onderzoek in Python een filter geschreven die dit doet.

Hieronder een grafiek met de neerslag en uitstroom van de knoop '207' in 2011. Te zien is dat de neerslagafvoer snel op de neerslag reageert.



Figuur 6.1 Uursom neerslag (blauw punten) en gesimuleerde afvoer (rode lijn) vanuit het RR module op knoop '207' van de 1D Flow module.

Vervolgens is er een orde-initialisatie uitgevoerd waarbij de reeks uursom neerslag de invoer, x , is en het afvoerend debiet de uitvoer, z . Bij zowel de AIC als de BIC resulteren in de ordegrootte ARMA(3,2). De volgende parameters zijn berekend bij het ARMA(3,2) foutmodel:

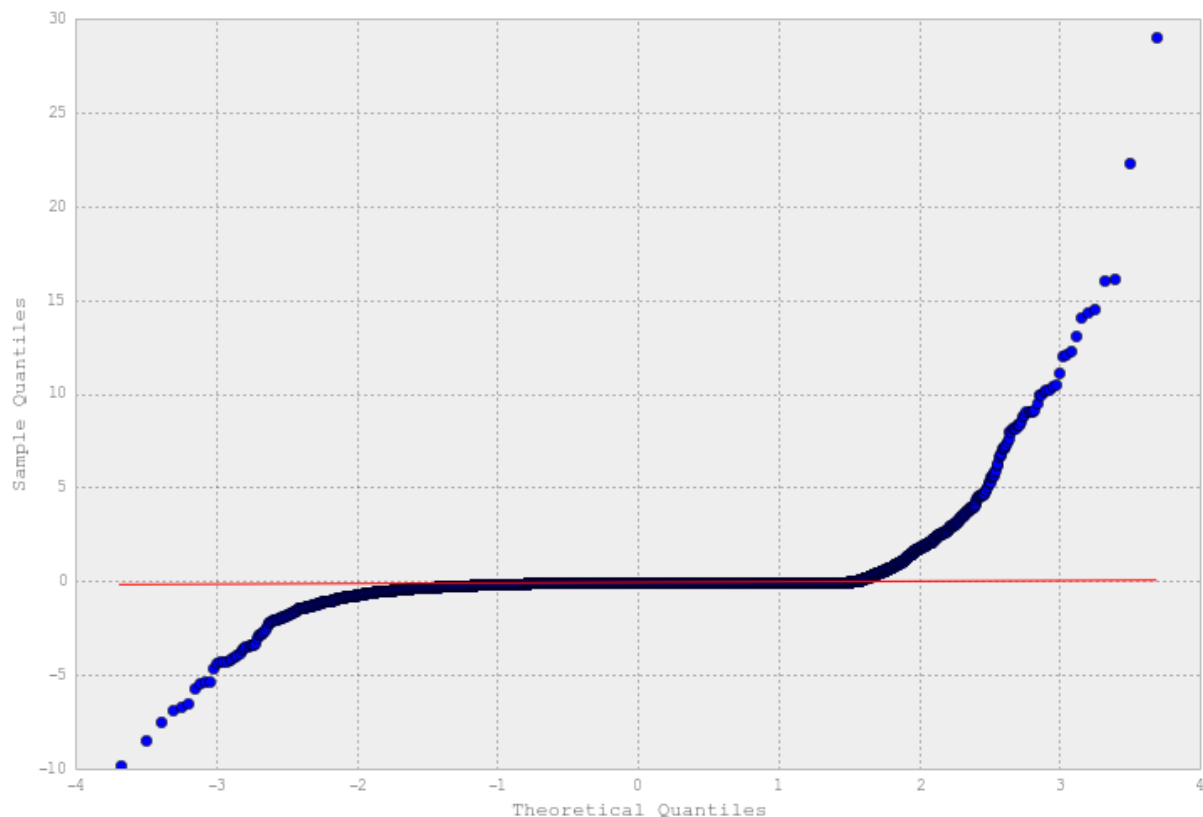
$$\phi = [\phi_1 = 0,273250 \quad \phi_2 = 0,624424 \quad \phi_3 = 0,046625]^T \text{ en}$$

$$\theta = [\theta_1 = -0,315154 \quad \theta_2 = -0,582372]^T.$$

Opmerking:

StatsModels heeft de parameters altijd zo geschaald dat $\phi_0 = 1$ en $\theta_0 = 1$.

Na het berekenen van het foutmodel, is het foutmodel in een kwartiel-kwartiel plot gezet, zie figuur 6.2.

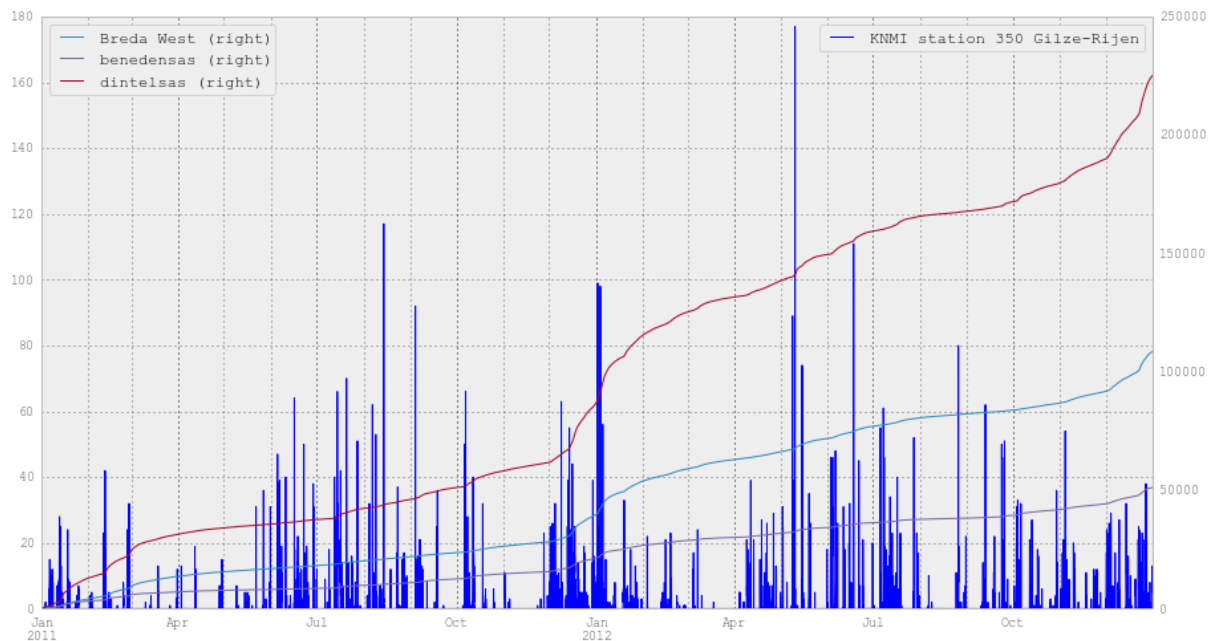


Figuur 6.2 Kwartiel-kwartiel plot van het foutmodel knoop '207'.

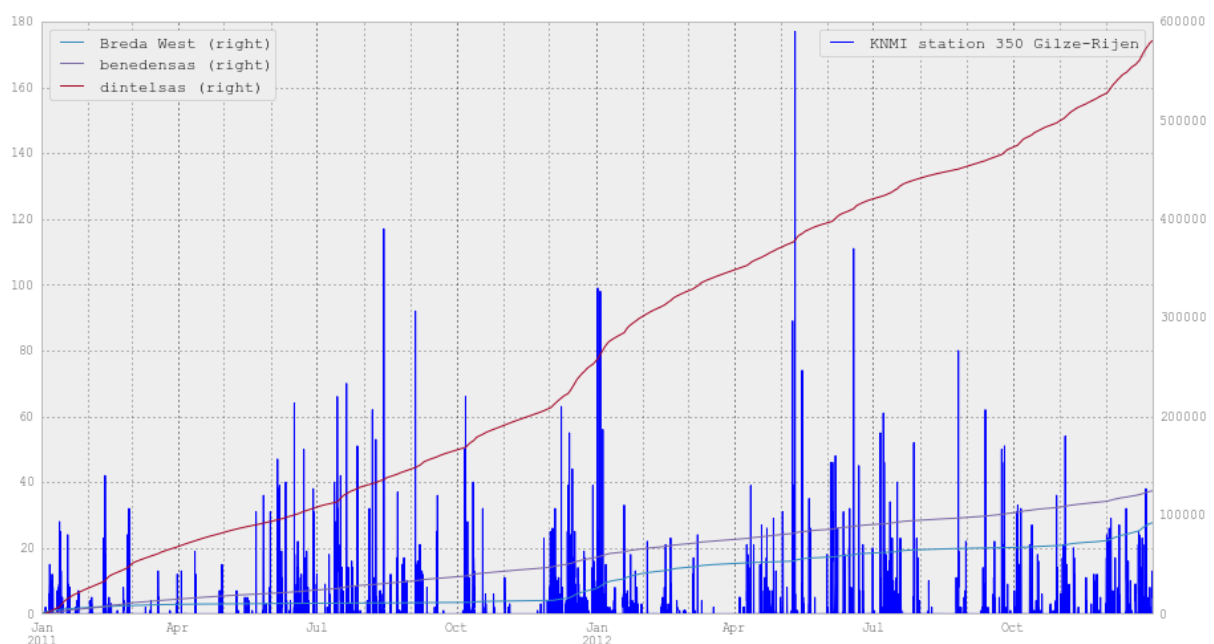
De kwartiel-kwartiel plot is een kansverdelingsdiagram waarbij over beide assen de kwartielen tegenover elkaar worden uitgezet. De rode lijn is de lineaire trend van de serie en dus normaal verdeeld. De blauwe punten zijn de kwartielen van de residu van het ARMA model. Te zien is het residu extreem zwaarder afstaart dan een normaalverdeling. Dit duidt op een normaalverdeling waarbij de gevoeligheid voor waarden uitschietend van het gemiddelde groter is. Deze verdeling staat bekend onder de namen 'T-verdeling' en 'studentverdeling'. De studentenverdeling heeft net als de normaalverdeling een normale populatieverdeling, maar dan over een onbekende populatie. Anders gezegd is de studentverdeling de steekproef variant van de normaalverdeling. Des te meer van de populatie wordt meegenomen in de steekproef, des te meer zal het de normaalverdeling lijken. Aannemelijk is echter gezien de maat van uiterste (de normaalverdeling is vrijwel horizontaal) dat het hier een stochastische verdeling betreft.

6.2 1D Flow module

Figuren 6.3 en 6.4 visualiseren de gesimuleerde waterbeweging op Breda West, sluizencomplex Benedensas en sluizencomplex Dintelsas. Figuur 6.3 is het uitgebreid model, waarbij te zien is dat het debiet bij de Benedensas en Dintelsas groter is dan het versimpeld model, figuur 6.4, ondanks dat het debiet bij Breda West ongeveer gelijk is. Dit betekent dat de afvoer van de RR module op de Mark in het versimpeld model groter is dan in het gedetailleerd model.



figuur 6.3 Uursom neerslagen in gedetailleerd model en cumulatief diens gesimuleerde debieten op locaties Breda West, sluiscomplex Benedensas en sluiscomplex Bovensas.



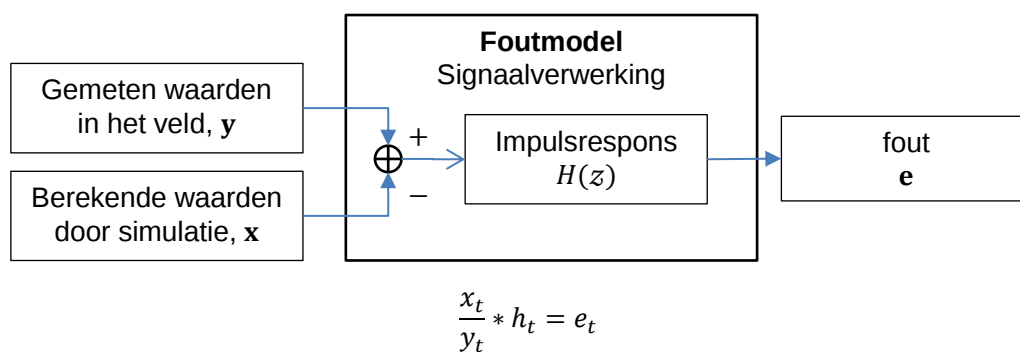
figuur 6.4 Uursom neerslagen in versimpeld model en cumulatief diens gesimuleerde debieten op locaties Breda West, sluiscomplex Benedensas en sluiscomplex Bovensas.

StatsModels verandert het ARMA automatisch in een ARMAX model als een onafhankelijk gewicht x wordt meegegeven in de initialisatie en voorwaartse voorspellingen.⁴⁹ Een ARMAX model is het ARMA model uitgebreid met een onafhankelijke externe tijdserie d met parameter β .

⁴⁹ J. Perktold, S. Seabold, J. Taylor, *Online documentatie Statsmodels*, 2013, http://statsmodels.sourceforge.net/devel/generated/statsmodels/tsa.arima_model.ARMA.html

$$\phi(L)(y_t - d_t\beta) = \theta(L)\varepsilon_t$$

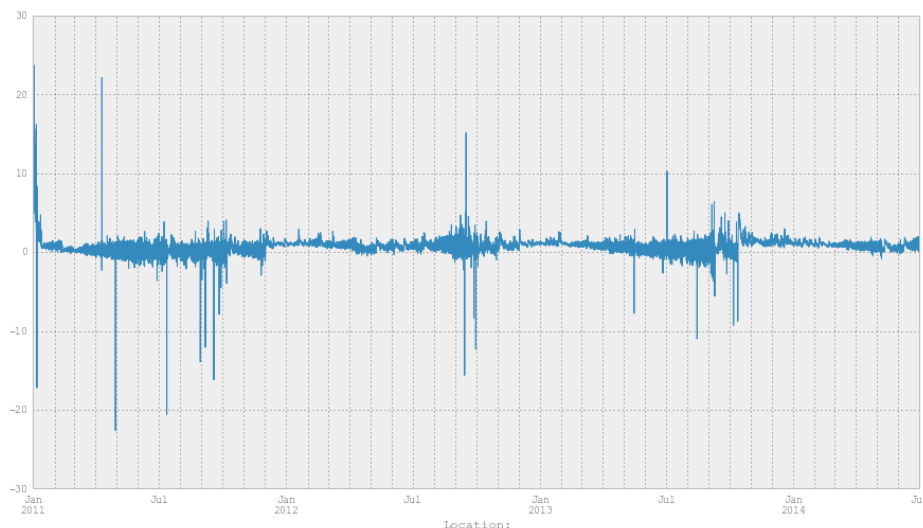
Dit is niet gewenst en de opzet van het foutmodel is daarom gewijzigd. Bij de initialisatie wordt de serie $\left\{\frac{y_t}{x_t}, \frac{y_{t+1}}{x_{t+1}}, \dots, \frac{y_{t+N}}{x_{t+N}}\right\}$ als input gebruikt, zie figuur 6.5. De serie x is hierdoor bij initialisatie al gewogen aan y . Dit zorgt er tevens voor dat het MA(q) gedeelte gemiddeld gelijk moet zijn aan nul, waardoor x in witte ruis ε verandert. Hiermee is de impulsrespons geïjkt. De uitvoer van het model is nu de fout e . Probleem is dat de impulsrespons nu afhankelijk is van een invoersignaal waarbij zowel serie x , als y bekend is. Hierdoor is het niet mogelijk om voorspellingen met het huidige foutmodel te doen, maar is het wel mogelijk om de verhouding tussen x en y te analyseren.



Figuur 6.5 Schamatisatie van de initialisatie in het foutmodel zoals het is uitgevoerd in Python

Breda West

Breda West heeft enkele extreme uitschieters, zie figuur 6.6. De partieel autocorrelatie suggereert een autoregressie van orde $p = 11$ door de nul te benaderen bij tijdstap $t = 11$. De autocorrelatie suggereert een voortschrijdend gemiddelde orde van $q = 0$, zie figuur 6.7. Gezien het model dus meerdere polen p en een enkel nulpunt z_0 betreft het dan een AR(p) model.



Figuur 6.6 Invoer bij initialisatie voor $\left\{\frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}}\right\}$ van foutmodel Breda West

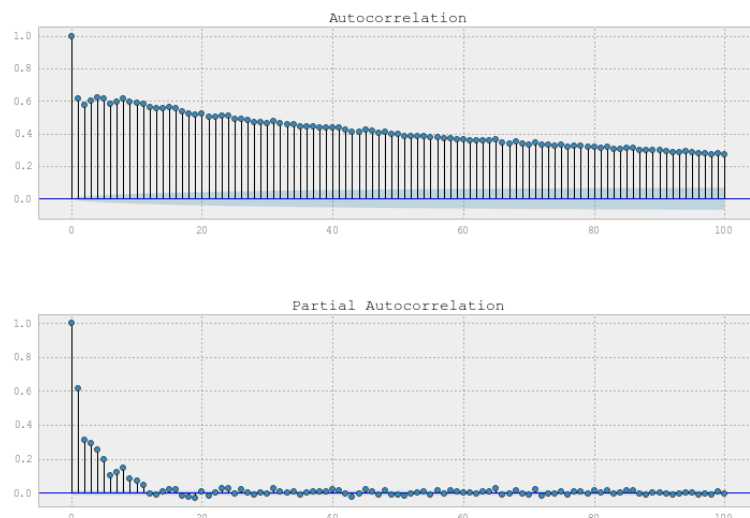
De Akaike's informatiecritrium, Bayesian's informatiecritrium en Hannan-Quinn's informatiecritrium bepalen echter dat $p = 11$ en $q = 1$ de juiste ordegraote is. Er blijkt toch een voortschrijdend gemiddelde in de serie te zitten.

De gevonden parameters bij deze orde grootte is:

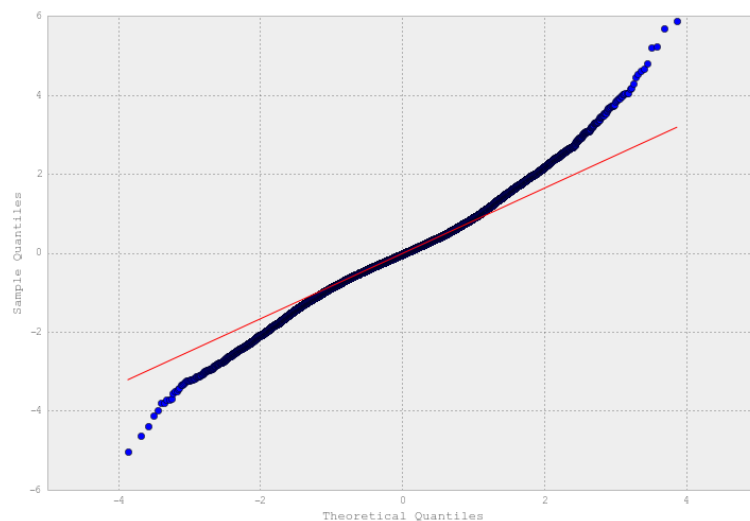
$$\Phi = \begin{Bmatrix} 1,00, & 2,30, & -1,87, & 0,56, & -0,09, & 0,31, \\ -0,35, & 0,06, & -0,11, & -0,00, & -0,01, & -0,03 \end{Bmatrix}$$

$$\theta = \{1,00, \quad 0,78\}$$

In figuur 6.8 is de serie in een kwartiel-kwartiel plot gezet. Te zien is dat de staarten van de serie naar buiten afwijken. Dit duidt op een T-verdeling. De T-verdeling is in verhouding met een normaalverdeling breder. Dit betekent dat er meer waarden bij het gemiddelde liggen dan wanneer de serie normaal verdeeld is.



Figuur 6.7 Autocorrelatie en partieel autocorrelatie van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Breda West.



Figuur 6.8 Kwartiel-kwartiel plot van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Breda West. De monster kwantielen zijn blauw gestippeld en de normaalverdeling is weergegeven als een rode lijn.

Benedensas

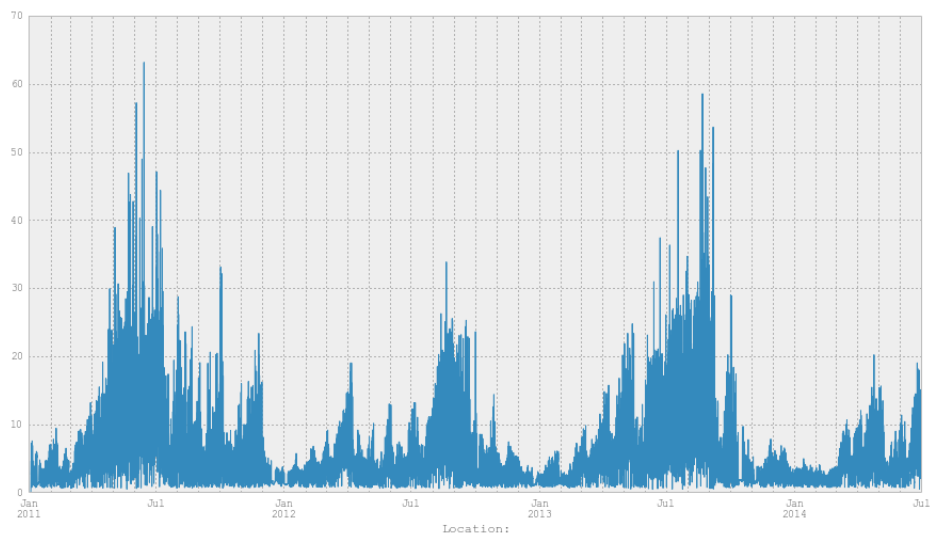
Bij stuwencomplex Benedensas heeft het verschil in debiet de vorm van een autoregressief voortschrijdend gemiddelde (figuur 6.9). De autocorrelatie en partieel autocorrelatie bevestigen dit door de karakteristieke vorm van een ARMA model aan te nemen (figuur 6.10).

Op basis van de partieel autocorrelatie is een $p = 17$ gekozen en op basis van de autocorrelatie een $q = 7$. De informatiecriteria bevestigen deze ordegrootte. De volgende parameters zijn bij deze orde berekend:

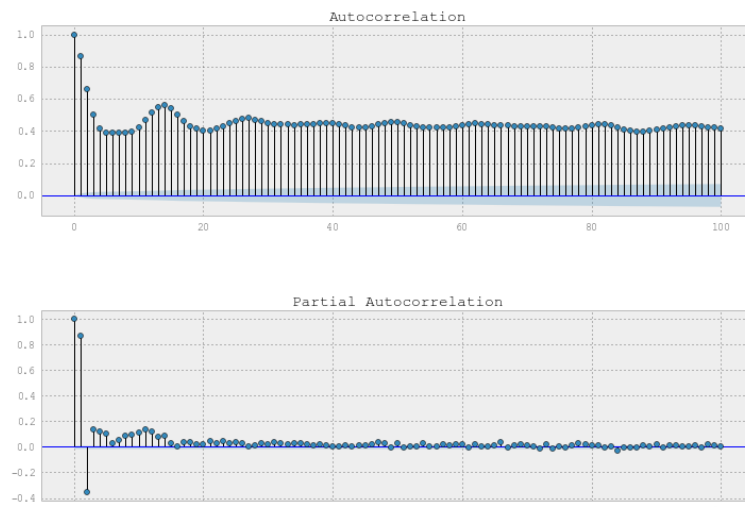
$$\phi = \begin{Bmatrix} 1,00, & -0,39, & -0,45, & 0,48, & -0,37, & -0,04, & 0,62, & -0,58, & 0,20, \\ -0,00, & 0,03, & 0,024, & -0,05, & 0,02, & -0,04, & -0,08, & 0,01, & -0,40, \\ & & & & 0,08, & 0,02 & & & \end{Bmatrix}$$

$$\theta = \{-0,41, \quad -0,52, \quad 0,08, \quad -0,19, \quad 0,18, \quad 0,31, \quad -0,41\}$$

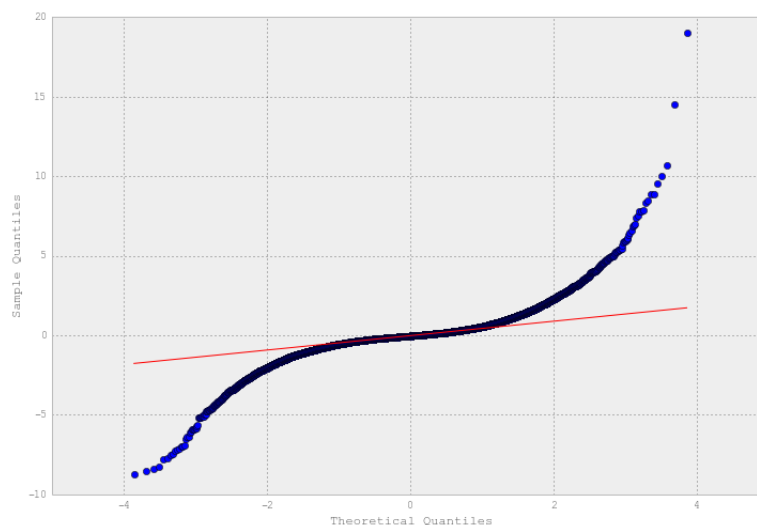
Figuur 6.11 laat een T-verdeling zien die zwaarder afstaart dan bij Breda West het geval was. Dit is te verklaren door middel van figuur 6.9. De grote van fluctuatie in variantie tussen meerdere perioden suggereert dat de kansverdeling van de populaties (iedere stap heeft een eigen populatie) van de ruis niet gelijk zijn over de tijd. Hierdoor is de ruis niet Gaussisch verdeeld en is de normaalverdeling niet van toepassing. Bovendien is het residu afhankelijk van de respons, waardoor er sprake is van hetroscedasticiteit in plaats van homoscedasticiteit.



Figuur 6.9 Invoer bij initialisatie voor $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Benedensas



Figuur 6.10 Autocorrelatie en partieel autocorrelatie van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Benedensas.



Figuur 6.11 Kwartiel-kwartiel plot van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Benedensas. De monster kwantielen zijn blauw gestippeld en de normaalverdeling is weergegeven als een rode lijn.

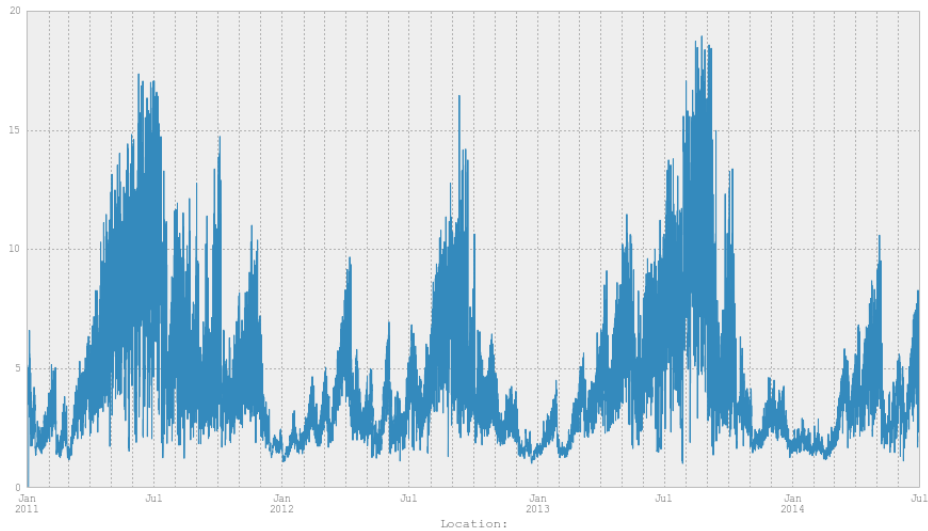
Dintelsas

Ook bij stuwcomplex Dintelsas heeft het verschil in debiet de vorm van een autoregressief voortschrijdend gemiddelde (figuur 6.12). De autocorrelatie en partieel autocorrelatie bevestigen dit door nogmaals de karakteristieke vorm van een ARMA model aan te nemen (figuur 6.13).

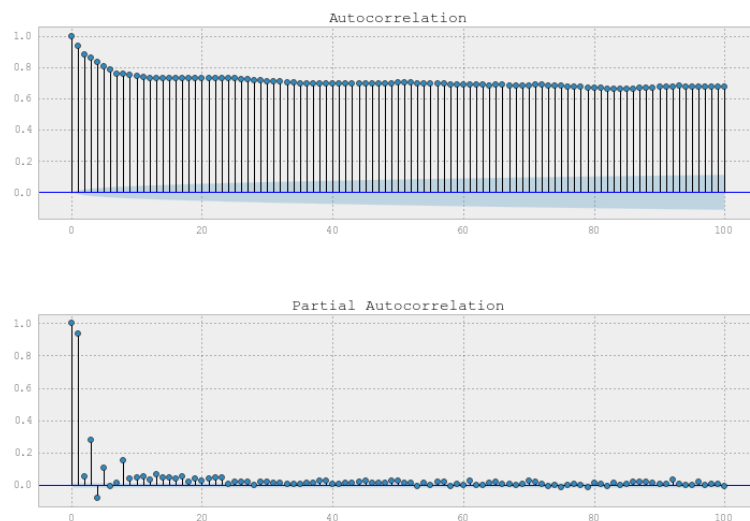
Op basis van de autocorrelatie is een $p = 9$ gekozen en op basis van de partieel autocorrelatie een $q = 6$. De volgende parameters waren bij deze orde berekend:

$$\begin{aligned}
 \Phi &= \{1,00, \quad 1,85, -1,44, \quad 1,36, \quad -1,33, \quad 1,10, \quad -0,82, \quad 0,34, \quad -0,06, \quad 0,01, \} \\
 \Theta &= \{1,00, \quad 0,97, \quad 0,33, \quad -0,48, \quad -0,34, \quad -0,48, \quad -0,15\}
 \end{aligned}$$

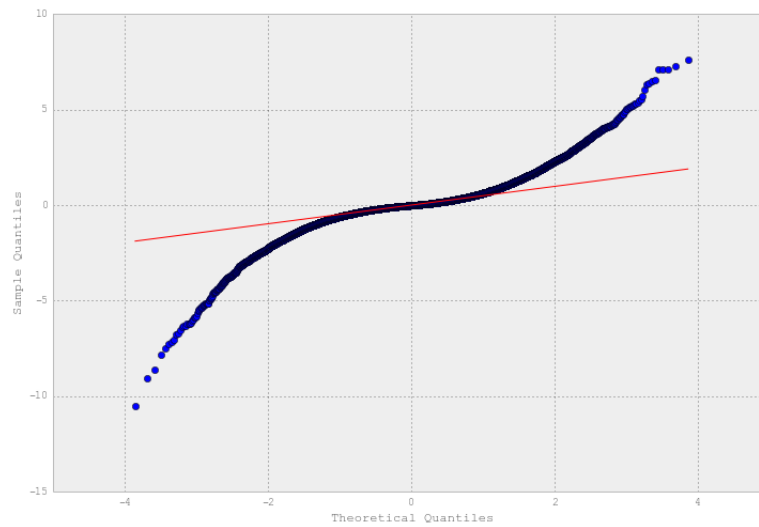
Ook bij Dintelsas is de ruis niet Gaussisch verdeeld en verschilt de variantie over de tijdperiodes, zie figuur 6.12. Opnieuw kan een T-student verdeling worden waargenomen in de kwartiel-kwartiel plot, zie figuur 6.14. Ook hier ziet het ernaar uit dat het residu afhankelijk van de respons, waardoor er sprake is van hetroscedasticiteit in plaats van homoscedasticiteit.



Figuur 6.12 Invoer bij initialisatie voor $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Dintelsas



Figuur 6.13 Autocorrelatie en partieel autocorrelatie van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Dintelsas.



Figuur 6.14 Kwartiel-kwartiel plot van de serie $\left\{ \frac{x_t}{y_t}, \frac{x_{t+1}}{y_{t+1}}, \dots, \frac{x_{t+N}}{y_{t+N}} \right\}$ van foutmodel Dintelsas. De monster kwantielen zijn blauw gestippeld en de normaalverdeling is weergegeven als een rode lijn.

7. Conclusies & discussies

Het RTC systeem bestaat uit een simulatiemodel en een foutmodel. Een simulatiemodel bestaat uit een toestand en parameters die de verhouding tussen de toestandsvariabelen representeren. In het simulatiemodel wordt de vaktechnische kennis opgenomen van de modelleur. Het foutmodel probeert de lineaire fout tussen de berekende waterbewegingen en gemeten waterbewegingen te vinden. Deze lineaire fout kan vervolgens teruggekoppeld worden naar één van de vier optimalisatiemethoden van het RTC model: invoercorrectie, data assimilatie (ook wel toestand correctie genoemd), kalibratie van het simulatiemodel en foutmodelcorrectie. De kunstwerken zijn onderdeel van de toestand van het simulatiemodel en de aansturing van de kunstwerken vind als zodanig plaats bij de data assimilatie.

Het onderzoek in dit rapport richt zich op het gebruik van autoregressief (AR) model en autoregressief voortschrijdend gemiddelde (ARMA) model als foutmodellen.

Het resultaat van een AR model heeft een lineair verband met voorgaande resultaten. Het model houdt echter geen lineair verband met toekomstige resultaten, waardoor het een model van een causaal proces vormt.

Een ARMA model gaat uit van een (zwak) lineair stochastisch proces bestaande uit twee veeltermen: autoregressie en een voortschrijdend gemiddelde. Een proces waarbij gebruik gemaakt kan worden van een ARMA model dient net als het AR model causaal te zijn. Het ARMA model in huidig onderzoekopzet dient tevens stabiel te zijn voor zowel de impulsrespons als de inverse impulsrespons. Dit is alleen mogelijk als zowel $0 < |X(z)| < 1$, als $0 < |Z(z)| < 1$. Ook dient de eenheidscirkel binnen de regio van convergentie te liggen, zodat de transformaties tussen discrete tijdsdomein en frequentiedomein mogelijk zijn.

De initialisatie van een AR of ARMA model kan opgesplitst worden in twee onderdelen: orde-initialisatie en parameterinitialisatie. Echter is de opzet van de initialisatie bij beide modellen verschillend.

Bij een AR model kan het best gekozen worden voor een Levinson-Durbin recursie. Hierbij dient een afbakening voor de autoregressie orde opgegeven te worden. De Levinson-Durbin recursie berekend de parameters en partieel autocorrelaties door stapsgewijs de ordegrootte te laten toenemen (tot de afbakening). Aan de hand van de partieel autocorrelaties kan de werkelijke ordegrootte bepaald worden, waarna de bijbehorende parameters afgelezen kunnen worden.

Een ARMA model is complexer in opzet, en zo is de initialisatie. Door middel van de autocorrelatie en partieel autocorrelatie kan de ordegrootte van het voortschrijdend gemiddelde en de autoregressie bepaald worden. De ordegroottes die uit deze plots afgelezen worden (veelal door een modelleur en niet door een algoritme) vormen de basis voor de afbakening van de zoekregio waarbinnen de werkelijke ordegrootte gezocht zal gaan worden. De modelleur dient deze afbakening aan het ARMA model mee te geven voordat het wordt gebruikt voor initialisatie. Daarna wordt door middel van de Hannan-Risannen methode de parameters berekend. Uit het resultaat van de tweede proefopstelling is gebleken dat bij initialisatie niet de normaal kleinste kwadraten methode gebruikt dient te worden, maar een gewogen kleinste kwadraten methode. Reden hiervoor is dat de variantie afhankelijk is van de afhankelijke variabele, ofwel hetroscedastisch is, waardoor de Gauss-Markov theorie niet van toepassing is. De gewichten dienen als correctie van het verschil in kansverdeling en eindige variantie. Na het bepalen van de parameters is het mogelijk om de waarschijnlijkheid van de resultaten te bepalen.

Met behulp van informatiecriteria wordt vervolgens de waarschijnlijkheid ten opzichte van de ordergrootte getoetst. De ordergrootte die het beste uit de criteria komt, is de meest waarschijnlijke ordergrootte.

Voor het beantwoorden van de deelvraag of een AR of ARMA model de berekende waterberging van een versimpeld simulatiemodel beter overeen te laten komen met de werkelijkheid, waarbij de werkelijkheid is vervangen door een gedetailleerd simulatiemodel, zijn twee proefopstellingen gebruikt. De eerste om te zien of het mogelijk is om de Rainfall Run-Off module van de simulatiemodellen vervangen kunnen worden door een AR of ARMA model. Het tweede model is gebruikt om te zien of de berekende waterbewegingen van de 1D Flow module van het versimpelde simulatiemodel beter de waterbewegingen van het gedetailleerde simulatiemodel kunnen laten benaderen door middel van een ARMA model.

Uit de eerste onderzoeksofstelling is gebleken dat noch AR, noch ARMA de Rainfall Run-off module van de simulatiemodellen kan vervangen. Reden hiervoor is dat door het weghalen van het simulatiemodel alle geleverde kennis verloren gaat. Gezien oppervlakte-afvoer een gecompliceerd proces is laat het zich niet door een AR of ARMA model alleen beschreven worden.

Het tweede onderzoek suggereert dat het verschil in de gesimuleerde waterbewegingen van de twee simulatiemodellen niet een ruis is met Gaussische verdeling. Ook blijkt bij de locaties Benedensas en Dintelsas over een lange tijdperiode een sterke fluctuatie in de kansverdeling te zijn. Bovendien vertoont het residu tekenen van afhankelijkheid tegenover het respons, waardoor de serie heteroscedastisch is. De Gauss-Markov theorie is daardoor niet geldig. Het ARMA model moet daarom gebruik maken van gewogen kleinste kwadraten methode in plaats van normale kleinste kwadraten methode.

Alhoewel het tijdens dit onderzoek dus niet gelukt is om een volledig functionerend ARMA model af te leveren voor de filter voor het filteren van het verschil (de ruis) tussen de twee simulatiemodellen, kan de vraag op basis van gevonden resultaten en literatuur wel beantwoord worden. Het AR model wordt al toegepast in RTC systemen en de resultaten daarvan zijn positief bevonden.⁵⁰ De informatiecriteria suggereren de aanwezigheid van voortschrijdend gemiddelde naast de autoregressie, waardoor een (correct geïnitieerde) ARMA model nog betere voorspellingen zal leveren. Het vinden van de correcte initialisatie blijft echter een knelpunt in het onderzoek.

Tijdens het onderzoek is het dus niet gelukt een volledig werkend ARMA model af te leveren. Dit komt omdat het schrijven en debuggen van de scripts zeer tijdsintensief is. StatsModels in Python levert enkele handige functies, maar het ARMA model zelf is niet bruikbaar voor het besproken onderzoeksofzet. In StatsModels wordt standaard witte ruis gebruikt in het model, hetgeen wat niet in de debietseries voorkomt. Er wordt nog verder van het gewenste ARMA model afgedwaald als geprobeerd wordt om de serie z op serie x te berusten. StatsModels verandert het ARMA model dan in een ARMAX model. Desondanks blijft de benaming van het object zelf in Python nog steeds ARMA, hetgeen wat alleen maar verwarring in hand werkt.

Desondanks heeft Python met uitbreidingen zoals Numpy, SciPy, matplotlib en Pandas zeker potentie voor het analyseren van signalen en het maken van foutmodellen. Echter dient wel

⁵⁰ Schwanenberg, D., v. Breukelen, A., Hummel, S., *Data Assimilation for Supporting Optimum Control in Large-Scale River Networks*, 2011, International Conference on Networking Sensing and Control, Delft, The Netherlands, 11-13 April 2011.

rekening gehouden te worden dat ondanks Python geheel open source is, de voorbeeldcodes, uitwerkingen en literatuur op het gebied van foutmodellen zeer schaars zijn.

Voor vervolgonderzoek wordt aanbevolen om gebruik te maken van een gespecialiseerd wiskundig programma op het gebied van signaalverwerking. Al is het doel om uiteindelijk een eigen geschreven applicatie te leveren, het gebruik van gespecialiseerde software voor het testen van modelopzetten zal zeker tijdwinst leveren gezien de functies dan niet eerst (op laag niveau) geschreven hoeven te worden.

Literatuurlijst

A.

- Abo-Hammour, Z.S., e.a., *A Novel Technique for ARMA modelling with Order and Parameter Estimation using genetic algorithms*, 2010, Communications in Computer and information Science, volume 88, p.p. 564-576
- Al-Smadi, A., *Cumulant-based order selection of non-Gaussian autoregressive moving average models: the corner method*, August 2003, Signal Processing , vol. 85, Issue 3, 2005, p.p 449-456, Elsevier
- Al-Smadi, A., *ARMA model order estimation using third order computations*, 24 sept 2014, International Journal of General Systems, Taylor & Francis Groups
- Al-Smadi, A., Al-Zaben, A., *ARMA Model Order Determination Using Edge Detection: A New Perspective**, 2005, Circuits Systems Signal Processing, Vol24, No. 6, 2005, Pp. 723-732

B.

- Box, G.E.P., Jenkins, G.M., Reinsel, G.C., *Time Series Analysis, Forecasting and Control, Fourth Edition*, 2008, John Wiley & Sons Inc.
- Brockwell, P. J., Dahlhaus, R., *Generalized Durbin-Levinson and Burg Algorithms*, februari 2004, Journal of Econometrics volume 118, Elsevier, p. 129-149
- Brockwell and Davis, *Time Series: Theory and Methods*, 1991, Springer Series in Statistics, Springer
- Brown, R. G., Hwang, P. Y. C., *Introduction to Random Signals and Applied Kalman Filtering, Second Edition*, 1992, John Wiley & Sons, Inc.

C.

- Cate, A., ten, Draper, D.A.G., *Coïntegratie en foutencorrectiemodellen*, november 1989, Centraal Planbureau
- Choi, B.S., *ARMA Model Identification*, 1992, Department of Applied Statistics, Yonsei University, Korea
- Chow, T.W.S., Tan, H., Fei, G., *Third orde cumulant RLS algorithm for nonminimum ARMA systems*, august 1997, identification, volume 61, issue 1, pages 23-38

D.

- Dickey, D. A., Fuller, W. A., *Distribution of the Estimators for Autoregressive Time Series With a Unit Root*, juni 1979, Journal of the American Statistical Association, vol 74, No. 366, p. 427-431
- Dodge, Y., *The Concise Encyclopedia of Statistics*, 2008, Springer New York, pp.292-294
- J. Doherty, *Methodologies and Software for PEST-based Model Predictive Uncertainty Analysis*, September 2010, Watermark Numerical Computing

G.

- Gray, M. R., *Toeplitz and Circulant Matrices: A Review*, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford 94305, USA
- Grcar, J. F., *Mathematicians of Gaussian elimination*, 2011, Notices of the American Mathematical Society, vol. 58, p. 782-792. (<http://www.ams.org/notices/201106/index.html>)

K.

- Kruse, R., *Strong and Weak Approximation of Semilinear Stochastic Evolution Equations*, 2014, Department of Mathematics, Bielefeld University, Germany, Springer International Publishing Switzerland, ISBN 978-2-219-02230-7

L.

- H.P. Langtangen, *A primer on Scientific Programming with Python, second edition*, 2011, Springer
- Landsman, Z., Nešlehová J, *Stein's Lemma for elliptical random vectors*, juli 2006, journal of Multivariate Analysis, Elsevier
- Liang, G., Wilkes, D. M., Cadzow, J.A., *ARMA model orde estimation based on the eigenvalues of the covariance matrix*, oktober 1993, IEEE Trans. On Signal Processing, vol. 41, no. 10, pp. 3003-3009, October 1993
- Ljung, L., Glad, T., *Modelling of dynamic systems*, 1994, P T R Prentice Hall

M.

- Maybeck, P. S., *Stochastic Models, Estimation, and Control, Volume 1*, 1979, Academic Press, Inc.
- MCKinney, W. S., Perktold, J. S., Skipper, S., *Time Series Analysis in Python with statsmodels*, 2011, Proc. of the 10th Python in Science Conference (SciPy 2011)
- Moon and Stiling, T., *Mathematical Methods and Algorithms for Signal Processing*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 200

O.

- Overland, B., *C++ without fear, A Beginner's Guide that makes you feel smart*, Second Edition, 2011, Pearson Education, Inc.
- Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Young, I. T., *Signals and Systems*, 1983, Prentice/Hall International , Inc., p. 167

J.

- Jacobs, O. L. R., *Introduction to Control Theory, 2nd Edition*, 1993, Oxford University Press

S.

- Schwanenberg, D., v. Breukelen, A., Hummel, S., *Data Assimilation for Supporting Optimum Control in Large-Scale River Networks*, 2011, International Conference on Networking Sensing and Control, Delft, The Netherlands, 11-13 April 2011.
- Smith, A.E., Coit, A.W., *Handbook of Evolutionary Computation*, 1997, Institute of Physics Publishing and Oxford University Press, Bristol, Chapter C.5.2.
- Stepniak, C., *From Equivalent Linear Equations to Gauss-Markov Theorem*, 27 juni 2010, Journal of Inequalities and Applications, Volume 2010, Article ID 259672, Hindawi Publishing Corporation
- Szymkiewicz, R., *Numerical Modelling in Open Channel Hydraulics*, 2010, Faculty of Civil and Environmental Engineering, Gdańsk University of Technology, Poland

W.

- R.H. van Waveren e.a. , *Vloeiend modelleren in het waterbeheer, Handboek Good Modelling Practice*, STOWA/RIZA 1999, STOWA rapport 99-05, Rijkswaterstaat-RIZA-rapport 99.036, ISBN-nr. 90-57773-056-1
- Welch, G., Bishop, G., *An Introduction to the Kalman Filter*, 24 juli 2006, Department of Computer Science, University of North Carolina at Chapel Hill, TR 95-041
- Whittle, P., *Prediction and Regulation by Linear Least-Square Methods*, 1983, University of Minnesota Press

V.

- Vignat, C., Bercher, J.F., *On Fisher Information Inequalities and score functions in non-invertible linear systems*, 2003, Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics, vol. 4, issue 4, art. 71 , University of Michigan, France

Z.

Zhong, Y., Zheng, Z., Jiang, T., *Research on perfect binary correlation sequences based on higher-order cumulant*, mei 2013, Springer International publishing AG

Zaknich, A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, 2005, School of Engineering Science, Rockingham Campus, and, Centre for Intelligent Information Processing Systems, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia, Springer, ISBN-10 1-85233-984-5

Zonder auteur vermelding

Waterbeleid voor de 21^e eeuw, Advies van de Commissie Waterbeheer 21^e eeuw, 31 augustus 2000, Commissie Waterbeheer

Het Nationaal Bestuursakkoord Water, 2003, Nederland leeft met Water

SOBEK, Hydrodynamics, Rainfall Runoff and Real Time Control, User manual, 8 april 2013, Deltares

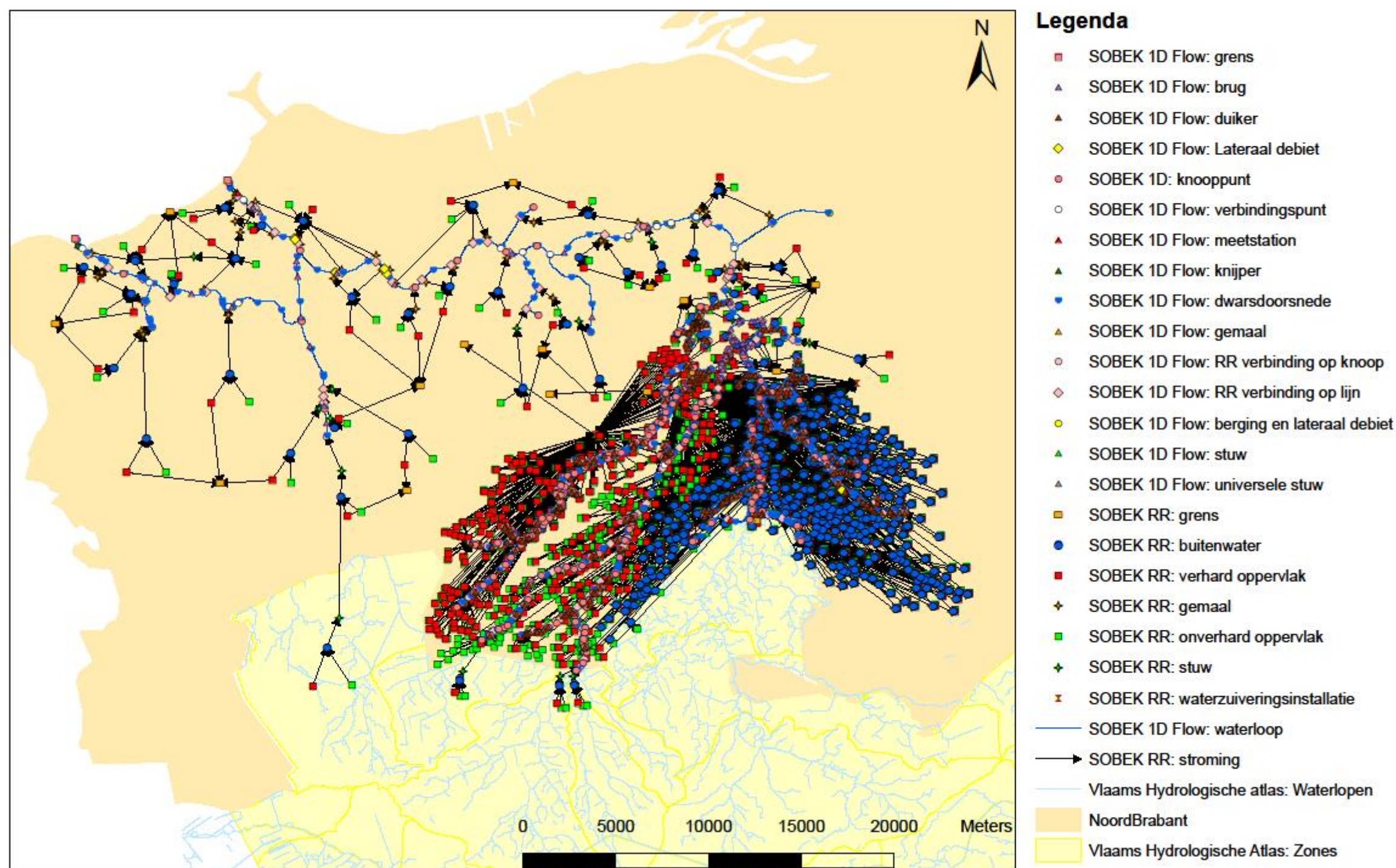
Bodematlas Provincie Noord Brabant, 2014, Provincie Noord Brabant,
<http://bodematlas.brabant.nl>

Blad 50 West, Breda, 1964, Bodemkaart van Nederland, Schaal 1:50000, Stichting voor bodemkartering STIBOKA, Wageningen

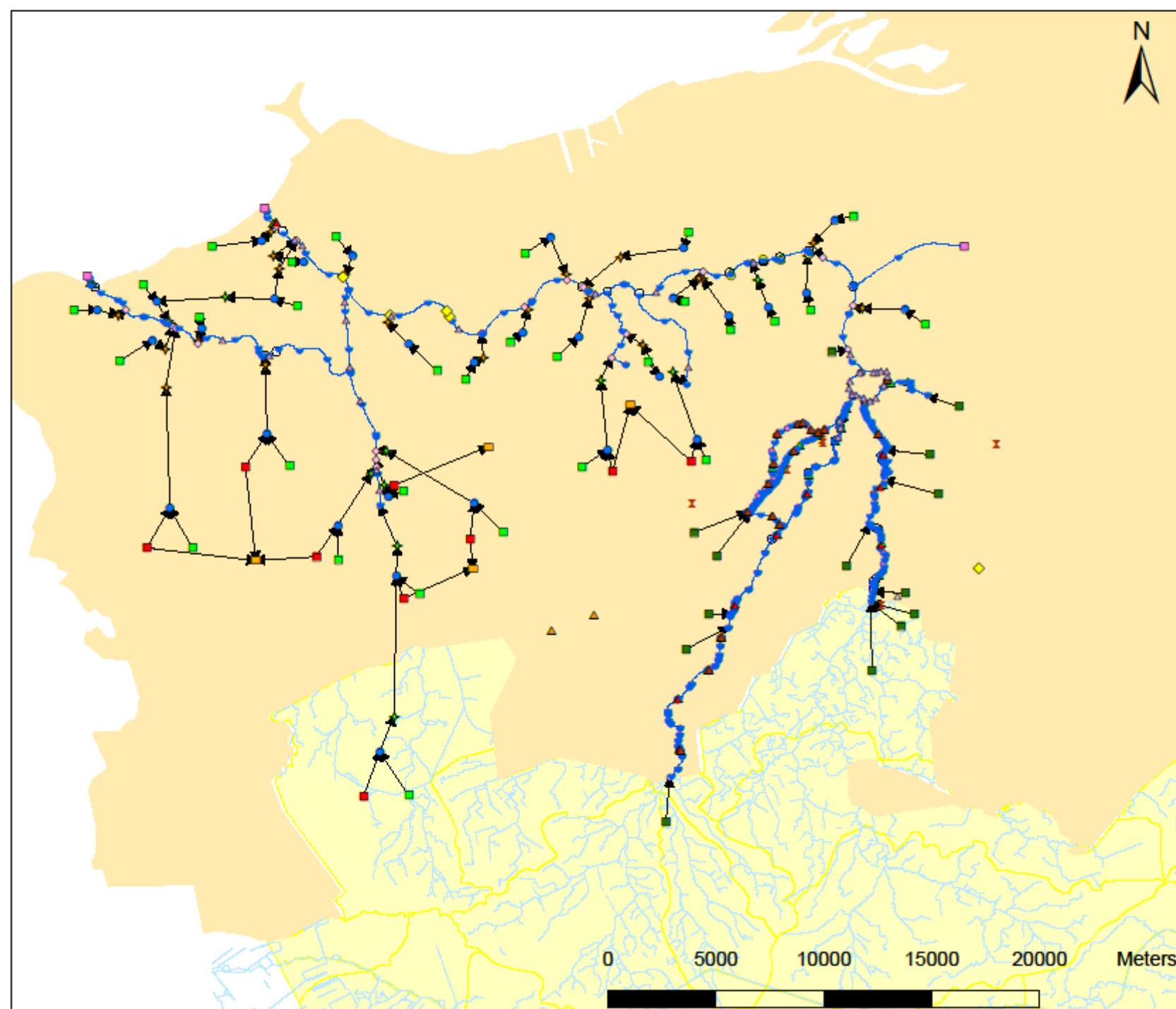
Blad 44 West, Oosterhout, 1987, Bodemkaart van Nederland, Schaal 1:50000, Stichting voor bodemkartering STIBOKA, Wageningen

A. Kaarten stroomgebied Mark-Vliet

Uitgebreid Sobek Model



Versimpeld SOBEK Model

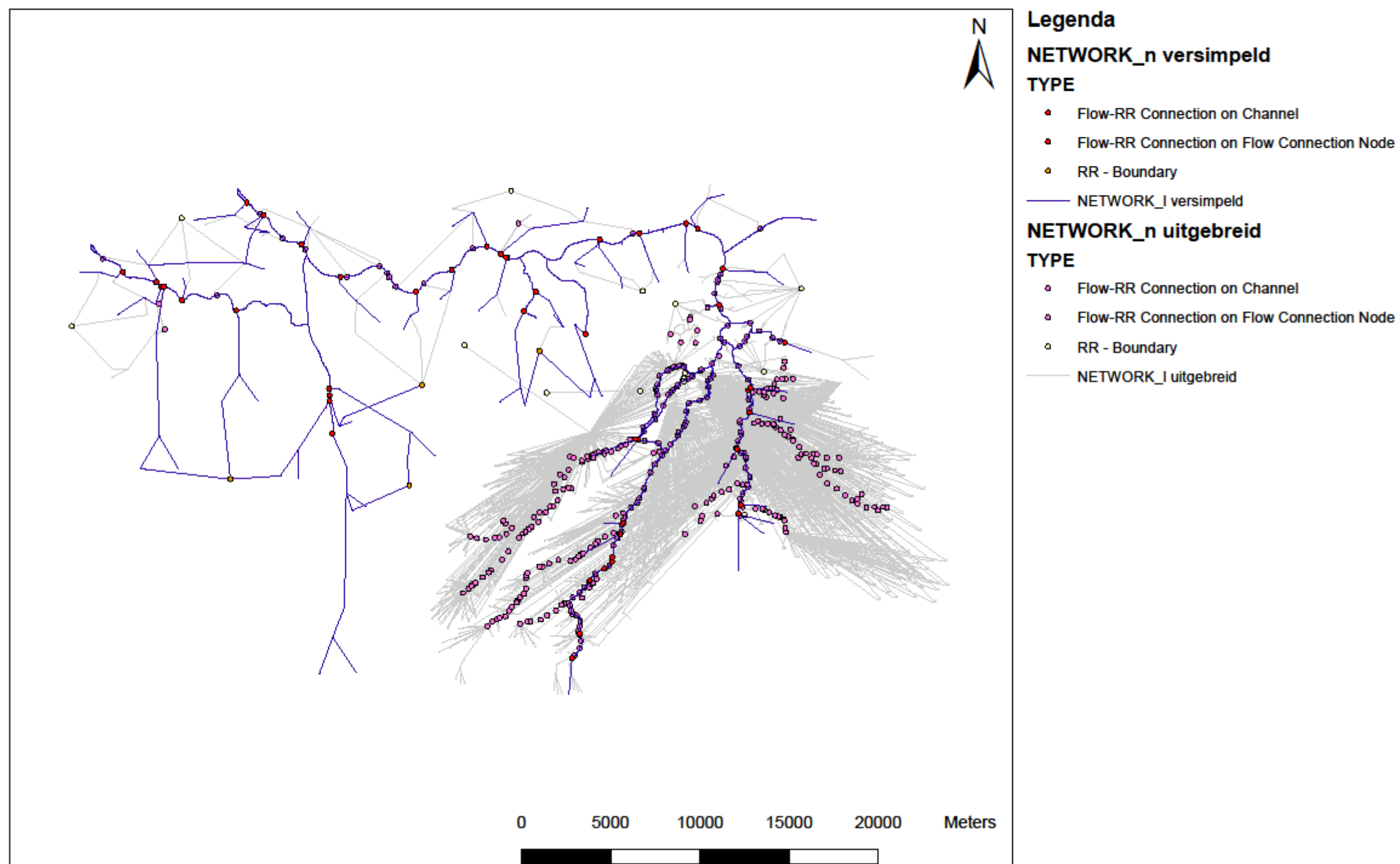


Legenda

TYPE

- SOBEK RR: sacramento
- SOBEK 1D Flow: grens
- ▲ SOBEK 1D Flow: brug
- ▲ SOBEK 1D Flow: duiker
- ◆ SOBEK 1D Flow: lateraal debiet
- ▲ SOBEK 1D Flow: meetstation
- ▼ SOBEK 1D Flow: dwarsdoorsnede
- ▲ SOBEK 1D Flow: gemaal
- SOBEK 1D Flow: RR verbinding op knoop
- ◇ SOBEK 1D Flow: RR verbinding op lijn
- SOBEK 1D Flow: berging en lateraal debiet
- ▲ SOBEK 1D Flow: stuw
- ▲ SOBEK 1D Flow: universele stuw
- ▲ SOBEK 1D Flow: knijper
- SOBEK 1D Flow: knooppunt
- SOBEK 1D Flow: verbindingspunt
- SOBEK RR: grens
- SOBEK RR: buitenwater
- SOBEK RR: verhard oppervlak
- ✦ SOBEK RR: gemaal
- SOBEK RR: onverhard oppervlak
- ✦ SOBEK RR: stuw
- ✦ SOBEK RR: waterzuiveringsinstallatie
- SOBEK RR: stroming
- SOBEK 1D Flow: waterloop
- NoordBrabant
- Vlaams Hydrologische Atlas: waterloop
- Vlaams Hydrologische Atlas: Zone

RR grenzen



B. Matrices

In dit hoofdstuk worden enkele matrixbewerkingen en matrixvormen nader toegelicht.

B.1 Transporteren

De getransporteerde matrix wordt gevonden door de matrix te spiegelen over de diagonaal die door a_{11} gaat (A.1). Een matrix van $m \times n$ is in getransporteerde vorm een $n \times m$ matrix.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}, \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{m1} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}, \mathbf{A} = (\mathbf{A}^T)^T \quad (\text{A.1})$$

B.2 Determinant

De determinant heeft een recursieve definitie: het gebruikt de functie in de definitie van de functie (A.2).⁵¹ Echter is dit geen oneindige lus, gezien de matrix die aan de nieuwe functie wordt gegeven is geslonken bij 1×1 . Dit proces wordt voortgezet tot een 2×2 matrix wordt gevonden, waarbij een relatief makkelijke definitie kan worden toegepast. Mocht de matrix 1×1 zijn, dan is determinant natuurlijk gelijk aan a_{11} .

$$|\mathbf{A}_{nn}| \begin{cases} a_{11}|\mathbf{C}_{11}| - a_{12}|\mathbf{C}_{12}| + \cdots \pm a_{1n}|\mathbf{C}_{1n}| & n > 2 \\ a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} & n = 2 \\ a_{11} & n = 1 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

In de formule refereert $\mathbf{C}$ naar $\mathbf{A}$ waarbij i en j niet naar een element verwijzen, maar naar de kolom en rij die worden verwijderd uit matrix $\mathbf{A}$.

B.3 Geadjugeerde matrix

De geadjugeerde matrix van $\mathbf{A}$ is een matrix waarbij alle elementen zijn vervangen door de cofactoren en in getransporteerde vorm zijn gezet (A.3).

$$\text{adj}(\mathbf{A}) = \begin{bmatrix} +|\mathbf{C}_{11}| & -|\mathbf{C}_{12}| & +|\mathbf{C}_{13}| & \cdots & \pm|\mathbf{C}_{1n}| \\ -|\mathbf{C}_{21}| & +|\mathbf{C}_{22}| & -|\mathbf{C}_{23}| & \cdots & \pm|\mathbf{C}_{2n}| \\ +|\mathbf{C}_{31}| & -|\mathbf{C}_{32}| & +|\mathbf{C}_{33}| & \cdots & \pm|\mathbf{C}_{3n}| \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \pm|\mathbf{C}_{n1}| & \pm|\mathbf{C}_{n2}| & \pm|\mathbf{C}_{n3}| & \cdots & \pm|\mathbf{C}_{nn}| \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

In de formule refereert $\mathbf{C}$ naar $\mathbf{A}$ waarbij i en j niet naar een element verwijzen, maar naar de kolom en rij die worden verwijderd uit matrix $\mathbf{A}$.

B.4 Inverteren

De geïnverteerde matrix van matrix $\mathbf{A}$ is de geadjugeerde matrix gedeeld door de determinant (A.4). Een matrix vermenigvuldigen met diens geïnverteerde leidt tot een eenheidsmatrix $\mathbf{I}$ (A.5). Op deze eigenschap is de Gauss-Jordan eliminatie gebaseerd. Door een identiteitsmatrix als voorwaarde op te geven bij een Gauss-eliminatie, wordt de geïnverteerde matrix $\mathbf{A}$ uitgerekend in de voorwaarde.

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \text{adj}(\mathbf{A}) \quad (\text{A.4})$$

⁵¹ Overland, B., *C++ without fear, A Beginner's Guide that makes you feel smart*, Second Edition, 2011, Pearson Education, Inc.

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}, \text{ ref }([\mathbf{A}|\mathbf{I}]) = [\mathbf{I}|\mathbf{A}^{-1}] \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \frac{1}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

B.5 Gauss eliminatie

Het doel van Gauss eliminatie is om met behulp van de matrixargumenten **A**, de matrix **B** in een matrix te veranderen waarbij voor elke rij de eerste niet-nul waarde vanaf de linker rij één is, ook wel de pivot variabele genoemd, en de pivotvariabelen in onderstaande rijen uitsluitend in een kolom rechts ten opzichte van bovengelegen pivotvariabelen zijn gelegen. In de literatuur wordt de nieuwe matrix **B** de row Echelon form (ref) van **B** genoemd. Er is geen standaard symbool in de wiskunde voor Gauss-eliminatie, maar het wordt veelal uitgedrukt als functie $\text{ref}(\mathbf{X})$ waarbij matrix **X** de in het kolom verlengde matrix **B** met matrix **A** is.

$$\mathbf{X} = \left[\begin{array}{cc|c} b_{11} & b_{12} & a_{11} \\ b_{21} & b_{22} & a_{12} \end{array} \right] \xrightarrow{\text{doel}} \text{ref}(\mathbf{X}) = \left[\begin{array}{cc|c} 1 & b'_{12} & a'_{11} \neq 0 \\ 0 & 1 & a'_{12} \neq 0 \end{array} \right]$$

A	argumentatiematrix behorend bij B .
B	matrix met argumenten A .
X	matrix B met matrix A in het kolom verlengde.
$\text{ref}(\mathbf{X})$	Gauss eliminatie functie die matrix X in gereduceerde Echelonvorm zet.

De volgende rijacties mogen worden uitgevoerd op de matrix om deze in echelonvorm te krijgen:

- twee rijen verwisselen;
- een rij met een scalair $c_s \neq 0$ vermenigvuldigen;
- bij een rij een veelvoud van een andere optellen of aftrekken.

Hoewel het mogelijk is om bovenstaande rijacties in elke willekeurige volgorde uit te voeren, is het verstandiger voor het vinden van een algoritme waarbij altijd de row Echelon form wordt gevonden, en dit in zo min mogelijks stappen. Het algoritme opgesteld voor de studie in dit rapport staat in pseudo code hieronder:

1. Zet teller c_i en c_j op waarde één. Creëer volgorde vector $\mathbf{o} = \{1, \dots, m\}$

Zolang kolom $c_i \leq i$ en $c_i \leq j$ in matrix **B**:

Als $b_{c_i c_j} \equiv 0$:

Als één van onderstaande rijen in kolom c_j een element hebben waarvan de waarde niet gelijk is aan één:

- i. Ruil rijen voor matrix **B**, **A** en **o**.

Anders:

- ii. Kolom heeft alléén nullen (er is geen vector die over deze as beweegt).
Verhoog c_j met één.

Anders:

2. Deel elke rij $\{b_{i,1}, \dots, b_{i,j} | a_{i,1} \dots a_{i,n}\}$, $i = c_i, \dots, m$, door het element van zijn eigen rij gelegen kolom c_j .

$$\{b_{i,1}, \dots, b_{i,n} | a_{i,1} \dots a_{i,n}\} \cdot \frac{1}{b_{i,c_j}}, \quad i = c_i, \dots, m$$

3. Trek bovenstaande rij $\{b_{i,1}, \dots, b_{i,j} | a_{i,1} \dots a_{i,n}\}$, $i = c_i, \dots, m$ van alle onderstaande rijen af.
4. Verhoog c_i en c_j beide met één

Wanneer $c_i > i$ en/of $c_j > j$ dan heeft de functie de matrix in rij Echelon vorm gezet zover dit mogelijk was. De matrix zal één van de onderstaande vormen hebben aangenomen (waarbij matrix A en matrix B andere $m \times n$ grootte kunnen hebben):

$$\begin{aligned} \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & b_{12}^* & \dots & b_{1n}^* & a_{11}^* \\ 0 & 1 & \dots & b_{2n}^* & a_{12}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & !0 \end{array} \right] & \Rightarrow \text{vals stelsel} \\ \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \dots & 0 & a_{11}^* \\ 0 & 1 & \dots & 0 & a_{12}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & a_n \end{array} \right] & \Rightarrow \text{unieke oplossing} \\ \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & b_{12}^* & \dots & b_{1n}^* & a_{11}^* \\ 0 & 1 & \dots & b_{2n}^* & a_{12}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{array} \right] & \Rightarrow \text{onbepaald stelsel (oneindig veel oplossingen)} \end{aligned}$$

In een vals stelsel kruisen niet alle vertexen elkaar. Bij een unieke oplossing kruisen de vertexen elkaar in één punt. Tenslotte kruisen de vertexen elkaar bij een onbepaald stelsel oneindig veel. Een voorbeeld van een oneindig stelsel zijn twee oneindige vlakken die elkaar kruisen in een driedimensionaal stelsel waardoor een oneindige kruisende lijn gevormd wordt.

Na controle worden de rijen weer terug verwisseld. Dit wordt gedaan met de omgekeerde stap i , waardoor vector $\mathbf{o}$ weer de vorm $\{1, \dots, m\}$ krijgt.

B.6 Speciale Matrices

In deze paragraaf zijn matrixvormen die regelmatig in de literatuur worden gebruikt nader verklaard.

B.6.1. Symmetrische matrix

Een symmetrische matrix is een matrix die symmetrisch ten opzichte van de hoofddiagonaal is.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{14} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{24} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{14} & a_{24} & \dots & a_{44} \end{bmatrix}$$

Bijzondere eigenschappen van een symmetrische matrix zijn als volgt:

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$$

B.6.2. Diagonaal matrix

Een diagonaal matrix is een matrix waarbij alle elementen buiten de hoofddiagonaal de waarde nul hebben. Hierdoor bepaalt de hoofddiagonaal het gedrag van de matrix.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix}$$

De bijzondere eigenschappen van een diagonaalmatrix zijn als volgt:

$$\text{diag}(\mathbf{D}^{-1}) = \{d_{11}^{-1}, d_{22}^{-1}, \dots, d_{nn}^{-1}\}$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{D}^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$$\text{diag}(\mathbf{D}^a) = \{d_{11}^a, d_{22}^a, \dots, d_{nn}^a\}$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{D}^a = \begin{bmatrix} 1/2^a & 0 \\ 0 & 3^a \end{bmatrix}$$

B.6.3. Eenheidsmatrix

Een eenheidsmatrix heeft alleen enen over de hoofddiagonaal en nullen buiten de hoofddiagonaal. In de wiskunde kan dit geformuleerd worden met behulp van Kroneckerdelta

$$\delta_{a,b} = \begin{cases} 1 & a=b \\ 0 & a \neq b \end{cases}$$

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad i_{i,j} = \delta_{i,j}$$

De bijzondere eigenschappen van een eenheidsmatrix zijn als volgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{I} &= \mathbf{I}\mathbf{A} = \mathbf{A} \\ \mathbf{I}^2 &= \mathbf{I} \\ \mathbf{I}^{-1} &= \mathbf{I} \\ \mathbf{I}^T &= \mathbf{I} \\ \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} &= \mathbf{I} \end{aligned}$$

B.6.4. Toeplitz matrix

Een Toeplitz matrix wordt gevormd door een vertex te (matrix-)vermenigvuldigen met diens getransporteerde.

$$\mathbf{T} = \mathbf{t}\mathbf{t}^T$$

$\mathbf{T}$ een $n \times n$ Toeplitz matrix
 $\mathbf{t}$ een $1 \times n$ vertex

Hierdoor heeft de Toeplitz matrix de bijzondere eigenschap dat $t_{i,j} = t_{j,i}$.

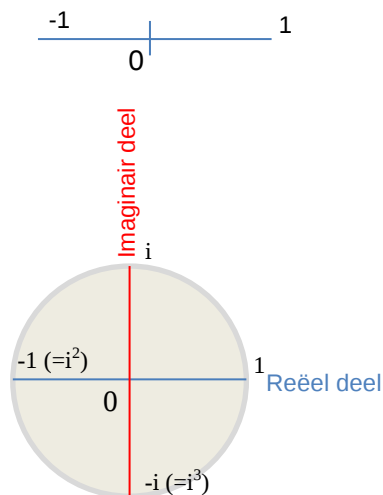
$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} & \cdots & t_{1,n} \\ t_{1,2}^T & t_{2,2} & \cdots & t_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1,n}^T & t_{2,n}^T & \cdots & t_{n,n} \end{bmatrix}$$

B.6.5. Vandermonde matrix

Een $n \times n$ matrix. Verticaal over de kolommen neemt de index van v toe, en horizontaal over de rijen neemt de macht van v toe. Een element wordt berekend door $V_{i,j} = z_i^{j-1}$. De elementen in de eerste kolom hebben altijd de waarde één, omdat $z^0 = 1$.

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} z_1^0 & z_1^1 & \dots & z_1^{n-1} \\ z_2^0 & z_2^1 & \dots & z_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_n^0 & z_n^1 & \dots & z_n^{n-1} \end{bmatrix}, \quad z_i^0 = \{1, 1, \dots, 1\}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

B.6.6. Complexe getallen



Figuur B.1. Bovenstaand een 1-dimensionaal reëel stelsel en onderstaand een 1-dimensionaal complex stelsel bestaande uit een 2 assen, waarvan één imaginair is.

Een complex getal is een uitbreiding van de reële getallen. Reële getallen worden gebruikt om een punt op een rechte lijn weer te geven ($\mathbb{R}^1$), terwijl een complex getal een punt is op een vlak ($\mathbb{R}^2$). Een complex getal is een verzameling van twee reële getallen a, b en een imaginair getal i met een lineair verband. Voorgesteld wordt dat $i^2 = -1$, zodat slechts met één complexe getal ($a + bi$) naar een punt in een vlak kan worden verwezen ($\mathbb{C}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$). Een complex getal kan herschreven worden tot een 2×2 matrix. Het complexe getal zorgt dus voor een transformatie. Worden reële getallen voor de matrix equivalenten vervangen (bijvoorbeeld $1 = \mathbf{I}$), dan is het mogelijk om complexe getallen met elkaar te vermenigvuldigen door wijze van matrixvermenigvuldiging.

$$(a + bi) = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix}, \quad 1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad i = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(a + bi)(c + di) = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & -d \\ d & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ac - bd & -ad - bc \\ ad + bc & ac - bd \end{bmatrix} = (ac - bd) + (ad + bc)i$$

B.7 Eigenwaarden

Een Eigenvector van een vierkante matrix is een vector waarbij een matrixvermenigvuldiging van de matrix met de vector leidt tot een constant geschaalde versie van de vector. De vermenigvuldiger wordt veelal genoteerd met lambda λ en wordt de Eigenwaarde genoemd.

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \Leftrightarrow \mathbf{0} = \lambda\mathbf{I}_n\mathbf{v} - \mathbf{A}\mathbf{v} \Leftrightarrow \mathbf{0} = \underbrace{(\lambda\mathbf{I}_n - \mathbf{A})}_{|\lambda\mathbf{I}_n - \mathbf{A}|=0}\mathbf{v}$$

$\mathbf{A}$	$n \times n$ matrix
$\mathbf{v}$	$1 \times n$ Eigenvector
λ	Eigenvalue
$\mathbf{0}$	nulvector

Stel $\mathbf{A}$ is een 3×3 matrix, dan is $(\lambda\mathbf{I}_n - \mathbf{A})$:

$$\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & -a_{13} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} & -a_{23} \\ -a_{31} & -a_{32} & \lambda - a_{33} \end{bmatrix}$$

Voor het berekenen van de determinant, gebruiken we in dit voorbeeld de regel van Sarrus,

$$|\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A}| = \begin{bmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & -a_{13} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} & -a_{23} \\ -a_{31} & -a_{32} & \lambda - a_{33} \end{bmatrix} \begin{matrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} \\ -a_{31} & -a_{32} \end{matrix}$$

$$|\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A}| = (\lambda - a_{11})(\lambda - a_{22})(\lambda - a_{33}) + (-a_{12} \cdot -a_{23} \cdot -a_{31}) + (-a_{13} \cdot -a_{31} \cdot -a_{32}) - (-a_{12} \cdot -a_{21} \cdot (\lambda - a_{33})) - ((\lambda - a_{11}) \cdot -a_{23} \cdot -a_{32}) - (-a_{13} \cdot (\lambda - a_{22}) \cdot -a_{31})$$

Stel dat $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}$ was, dan leidt de regel van Sarrus:

$$|\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A}| = (\lambda + 1)(\lambda - 2)(\lambda - 2) + 4 + 4 - 4(\lambda - 2) - (\lambda + 1) - 4(\lambda - 2)$$

$$|\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A}| = (\lambda + 1)(\lambda - 4\lambda + 4) + 8 - 4\lambda + 8 - \lambda - 1 - 4\lambda - 8$$

$$|\lambda \mathbf{I}_3 - \mathbf{A}| = \lambda^3 - 4\lambda^2 + 4\lambda + \lambda^2 - 4\lambda + 4 - 9\lambda + 23$$

$$p(\lambda) = \lambda^3 - 3\lambda^2 - 9\lambda + 27 = 0$$

Vul formule $p(\lambda)$ voor elke schaler in, en kijk of er één gelijk is aan nul.

$$\begin{array}{lcl} 1: & 1 - 3 - 9 + 27 & \neq 0 \\ 3: & 27 - 27 - 27 + 27 & = 0 \\ 9: & 729 - 162 - 729 + 27 & \neq 0 \\ 27 & 19683 - 729 - 243 - 27 & \neq 0 \end{array}$$

Bij een eigenwaarde $\lambda = 3$, is de regel van Sarrus gelijk aan nul. Echter is er nog een niet-nul waarde mogelijk voor λ waarbij de reeks gelijk is aan 0. Deze kan gevonden worden door de reeks te delen door $\lambda - 3$.

$$\begin{array}{rcl} \lambda^3 - 3\lambda^2 - 9\lambda + 27 & / & \lambda - 3 = \frac{\lambda^2 + 9}{\lambda^2} \\ \underline{\lambda^3 - 3\lambda^2} & & \\ -9\lambda + 27 & & \\ \underline{-9\lambda + 27} & & 9 \\ 0 & & \end{array}$$

Gevonden is de volgende formule:

$$p(\lambda) = (\lambda - 3)(\lambda^2 - 9) = 0$$

Splits $(\lambda^2 - 9)$:

$$(\lambda - 3)(\lambda + 3)(\lambda - 3) = 0$$

De eigenwaardes van $\mathbf{A}$ zijn dus $\lambda = 3$ of $\lambda = -3$.

C. Gekwadrateerde residu

In deze bijlage worden de kleinste kwadraten residu nader verklaart. In paragraaf C.1 zal het normaal kleinste kwadraten residu verklaard worden door middel van het filteren van lineaire trend. In paragraaf C.2 wordt bewezen dat onder de juiste condities de normaal kleinste kwadraten residu gebruikt kan worden voor het vinden van de meest zuivere schatting van veelterm parameters. Paragraaf C.3 behandelt gewogen parameters voor als de observaties heteroscedastisch zijn in plaats van homoscedastisch.

C.1 Normale kleinste gekwadrateerde residu

Een lineaire trend $l_t = c_2 + c_1 t$ wordt veelal berekend door de normale kleinste kwadraten (Eng: Ordinary Least Squares) methode. De normaal kleinste kwadraten methode is veelal een belangrijk onderdeel in berekeningen. Van zowel lineaire als niet lineaire stelsels. Hierbij moeten de meetfouten wel dicht bij Gaussian liggen, anders leidt dit tot problemen.⁵² De kwadraatfout wordt, zoals de naam al suggereert, gedefinieerd door de sommatie van de serie gekwadrateerde fouten te nemen.

$$SE_{z-l} = (z_1 - (c_1 t_1 + c_2))^2 + (z_2 - (c_1 t_2 + c_2))^2 + \dots + (z_n - (c_1 t_n + c_2))^2 \quad (C.1)$$

SE_{z-l} gekwadrateerde fout van lineaire trendlijn
 z Invoerend signaal. Bestaat uit een herhalend patroon en witte ruis

De eerste ontbinding in factoren leidt tot:

$$SE_{z-l} = z_1^2 - 2z_1(c_1 t_1 + c_2) + (c_1 t_1 + c_2)^2 + \dots + z_n^2 - 2z_n(c_1 t_n + c_2) + (c_1 t_n + c_2)^2 \quad (C.2)$$

En de tweede ontbinding in factoren leidt tot:

$$SE_{z-l} = z_1^2 - 2z_1 c_1 t_1 - 2z_1 c_2 + c_1^2 t_1^2 + 2c_1 t_1 c_2 + c_2^2 + \dots + z_n^2 - 2z_n c_1 t_n - 2z_n c_2 + c_1^2 t_n^2 + 2c_1 t_n c_2 + c_2^2 \quad (X.3)$$

Herstructureren op basis van parameters in plaats van de tijdstap levert de volgende vectorformule:

$$SE_{z-l} = \{z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_n^2\} - 2c_1\{z_1 t_1 + z_2 t_2 + \dots + z_n t_n\} - 2c_2\{z_1 + z_2 + \dots + z_n\} + c_1\{t_1^2, t_2^2, \dots, t_n^2\} + 2c_1 c_2\{t_1 + t_2 + \dots + t_n\} + n c_2^2 \quad (C.4)$$

Ofwel een punt kan berekend worden door onderstaande formule:

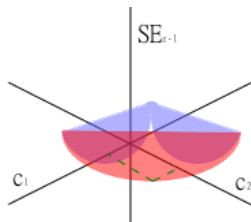
$$SE_{z-l} = \bar{z}^2 - 2c_1 \bar{z} \bar{t} - 2c_2 \bar{z} + c_1 \bar{t}^2 + 2c_1 c_2 \bar{t} + n c_2^2 \quad (C.5)$$

Gezocht wordt naar een punt die voor een minimale fout zorgt. Deze wordt gevonden door de afgeleide gekwadrateerde fout in verhouding tot c_1 op nul te zetten en door de afgeleide gekwadrateerde fout in verhouding tot c_2 op nul te zetten.⁵³ Onderstaande afbeelding is een visualisatie van de methode. De visualisatie is in een drie dimensionaal stelsel met op de assen

⁵² Zaknich A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, ..., p. 95

⁵³ Zaknich A., *Principles of adaptive filters and self-learning systems*, ..., p. 142

c_1, c_2 en SE_{z-l} . In het rode vlak zijn alle punten van de gekwadraterde fout gelegen. Het heeft een kom vorm (het rode vlak) en is oneindig groot, maar wel eindig klein op de SE_{z-l} as. De groen gestippelde lijn die loodrecht aan de c_1 as loopt is de afgeleide gekwadraterde fout in verhouding tot c_1 . De groen gestippelde lijn loodrecht aan de c_2 as stelt de afgeleide gekwadraterde fout in verhouding tot c_2 voor. Het punt waar deze twee lijnen kruisen is de Least Square Error (LSE).



Bij de spanbreedte $\langle \mathbf{z}, \mathbf{t} \rangle = E(\mathbf{z}\mathbf{t}^T)$

$$\frac{\partial SE}{\partial c_1} = 0 \text{ \& } \frac{\partial SE}{\partial c_2} = 0$$

figuur 1. Visualisatie least squared error

De formule van de afgeleiden luidt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial SE}{\partial c_1} &= -2\bar{n}\bar{z}\bar{t} + 2\bar{n}\bar{z}^2 c_1 + 2c_2 \bar{n}\bar{z} = 0 \\ \frac{\partial SE}{\partial c_2} &= -2\bar{n}\bar{z} + 2c_1 \bar{n}\bar{t} + 2c_2 \bar{n} = 0 \end{aligned} \Leftrightarrow \begin{aligned} c_1 \bar{z}^2 + c_2 \bar{z} &= \bar{z}\bar{t} \\ c_1 \bar{z} + c_2 &= \bar{t} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Wordt van de afgeleide $\frac{\partial SE}{\partial c_2}$ de afgeleide $\frac{\partial SE}{\partial c_1}$ afgehaald dan wordt een formule verkregen met twee bekenden, z en t , en één onbekende c_1 .

$$c_1 \left(\bar{z} - \frac{\bar{z}^2}{\bar{z}} \right) = \bar{t} - \frac{\bar{z}\bar{t}}{\bar{z}} \quad (\text{C.7})$$

Werk c_1 buiten haakjes en vermenigvuldig met $\frac{\bar{z}}{\bar{z}} = 1$ levert een formule op waarmee de onbekende c_1 berekend kan worden. Stop c_1 in één van de afgeleide formules en c_2 kan berekend worden. De vector $\mathbf{c}$ is nu bijgewerkt.

$$c_1 = \frac{\bar{t} - \frac{\bar{z}\bar{t}}{\bar{z}}}{\bar{z} - \frac{\bar{z}^2}{\bar{z}}} = \frac{\bar{z}\bar{t} - \bar{z}^2}{\bar{z}^2 - \bar{z}^2} \quad (\text{C.8})$$

Het script maakt gebruik van de formule in matrix vorm. Hieronder staat de gevonden formule hiervoor. Als eerst wordt een matrix $\mathbf{M}$ gemaakt voor orde p . De eerste rij bestaat geheel uit enen en de tweede rij uit de stappen 0 tot p . De eerste rij zal gebruikt worden voor het bepalen van de tijdsafhankelijke c_2 en de tweede rij voor de tijdafhankelijke c_1 .

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & \cdots & p \end{bmatrix}^T \quad (\text{C.9})$$

$\mathbf{M}$ $p + 1 \times 2$ matrix waarbij de eerste kolom alleen enen bevat en de tweede kolom de waarden waarden $0, 1, \dots, p$
 p orde van AR-model

De matrixvermenigvuldiging voor het vinden van $\mathbf{l} = [l_t, \dots, l_{t+k}]^T$ luidt dan:

$$\mathbf{l} = \mathbf{M}\mathbf{c}$$

Gezocht wordt naar de functie $f(\mathbf{c}) = \mathbf{M}\mathbf{c} - \mathbf{e}_t = 0$, waarvan de geminimaliseerde gemiddelde kwadratische fout $\min(g(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\mathbf{c}^T\mathbf{c})$ het kleinst is. De oplossing kan gevonden worden door het creëren van een nieuwe functie, de Lagrangian functie $\Lambda(\mathbf{c}, \lambda)$, met de onbekende parameters, Lagrang vermenigvuldigers λ (C.10).⁵⁴ Vind de $\partial\mathbf{c}$ afgeleide functie van $\Lambda(\mathbf{c}, \lambda)$ (C.11). De gevonden functie kan herschreven worden tot $\mathbf{c} = \mathbf{M}^T\lambda$. Substitueer de functie in het functie $f(\mathbf{c})$ en de formule van $\mathbf{e}_t$ is gevonden (C.12). Vermenigvuldig beide helften met $\mathbf{M}\mathbf{M}^T$, en een formule voor de onbekende Lagrang vermenigvuldigers λ is gevonden (C.13). Substitueer deze functie terug in de afgeleide functie en de coëfficiënten kunnen berekend worden (C.14).

$$\Lambda(\mathbf{c}, \lambda) = g(\mathbf{c}) - f(\mathbf{c})\lambda \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{c}}\Lambda = \frac{\partial}{\partial\mathbf{c}}\left(\frac{1}{2}\mathbf{c}^T\mathbf{c} - (\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{e}_t)^T\lambda\right) \quad (\text{C.11})$$

$$\mathbf{e}_t = \mathbf{M}\mathbf{M}^T\lambda \quad (\text{C.12})$$

$$(\mathbf{M}\mathbf{M}^T)^{-1} + \mathbf{e}_t = \lambda \quad (\text{C.13})$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{M}^+\mathbf{e}_t \quad (\text{C.14})$$

$\mathbf{M}^+ = (\mathbf{M}\mathbf{M}^T)^{-1}\mathbf{M}^T$ pseudo-inverse van matrix $\mathbf{M}$

In bovenstaand voorbeeld is de kleinste kwadratenmethode gebruikt voor het vinden van lineaire trend. In volgend paragraaf zal bewezen worden dat de formule ook gebruikt kan worden voor de meest zuivere schatting van coëfficiënten bij veeltermen.

C.2 Gauss-Markov Theorie

De Gauss-Markov theorie luidt dat de beste zuivere lineaire schatting van veeltermcoëfficiënten gevonden kan worden door middel van de OLS-schatters (C.15)(C.16).⁵⁵

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}} + \mathbf{u} \quad (\text{C.15})$$

$\mathbf{y}$	uitvoerend signaal
$\mathbf{X}$	invoerend signaal
$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$	parameters door middel van OLS-schatters
$\mathbf{u}$	residu (fout)

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T \quad (\text{C.16})$$

In deze theorie wordt een tweede parameterserie geïntroduceerd, namelijk $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$. Deze is hetzelfde als de OLS, maar met een extensie $\mathbf{D}\mathbf{y}$, waarbij $\mathbf{D}$ een willekeurige matrix is. Omdat beide termen de vector $\mathbf{y}$ hebben, is het mogelijk om de twee termen als $\mathbf{C}\mathbf{y}$ samen te vatten (C.17).

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} + \mathbf{D}\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{y} \quad (\text{C.17})$$

Substitutie van (C.15) en (C.16) in (C.17) geeft (C.18).

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{I}\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{u} + \mathbf{D}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{D}\mathbf{u} \quad (\text{C.18})$$

⁵⁴ Dodge, Y., *The Concise Encyclopedia of Statistics*, 2008, Springer New York, pp.292-294

⁵⁵ Stepniak, C., *From Equivalent Linear Equations to Gauss-Markov Theorem*, 27 juni 2010, Journal of Inequalities and Applications, Volume 2010, Article ID 259672, Hindawi Publishing Corporation

Omdat de verwachte waarde van u gelijk is aan diens populatiegemiddelde $\mu_u = 0$, vallen deze termen weg wanneer de verwachte waarde van $\tilde{\beta}$ wordt berekend (C.X19). Hieruit volgt dat $\mathbf{DX}$ gelijk moet zijn aan nul, om de formule oplosbaar te maken.

$$E(\tilde{\beta}) = \beta + \mathbf{DX}\beta \rightarrow \mathbf{DX} = 0 \quad (\text{C.19})$$

Standaard matrixregels gebruikt in de Gauss-Markov theorie:

$$\begin{aligned} \text{var}(\mathbf{AX}) &= \mathbf{A}\text{var}(\mathbf{X})\mathbf{A}^T \\ (\mathbf{AB})^T &= \mathbf{B}^T\mathbf{A}^T \\ (\mathbf{A}^{-1})^T &= (\mathbf{A}^T)^{-1} \end{aligned}$$

In formule (C.17) was de matrix $\mathbf{C}$ geïntroduceerd. Door middel van deze matrix kan de formule van de parametervariantie in een overzichtelijke vorm worden genoteerd.

$$\text{var}(\tilde{\beta}) = \mathbf{C}\text{var}(\mathbf{y})\mathbf{C}^T = \mathbf{C}\sigma_y^2\mathbf{I}\mathbf{C}^T = \sigma_y^2\mathbf{C}\mathbf{C}^T$$

waarbij in formule (C.17) $\mathbf{C}$ gedefinieerd is als:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{D} \\ \mathbf{C} &= \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} + \mathbf{D} \end{aligned}$$

Substitueer de definities van $\mathbf{C}$ in C.X3 en verwijder alle eenheidsmatrices en termen met $\mathbf{XD}=0$.

$$\begin{aligned} \text{var}(\tilde{\beta}) &= \sigma_y^2((\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{D})(\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} + \mathbf{D}^T) \\ \text{var}(\tilde{\beta}) &= \sigma_y^2(\cancel{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}} + \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{D} + \mathbf{D}\mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} + \mathbf{D}\mathbf{D}^T) \\ \text{var}(\tilde{\beta}) &= \sigma_y^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} + \sigma_y^2\mathbf{D}\mathbf{D}^T \end{aligned}$$

De eerste term van C.17 is gelijk aan de OLS en de tweede term is een positief eindige matrix. Hiermee is het bewijs geleverd voor de Gauss-Markov theorie dat de beste lineaire voorspeller voor een ongewogen schatter wordt gegeven door de OLS-schatter.

$$\text{var}(\tilde{\beta}) \geq \text{var}(\hat{\beta}_{OLS})$$

C.3 Gegeneraliseerde kleinste kwadraten residu

De generaliseerde kleinste kwadraten methode wordt gebruikt onder de aanname dat de variantie van de observaties ongelijk zijn (heteroscedasticiteit); $\mathbf{\Omega} \neq \sigma^2\mathbf{I}$, waardoor de formule $\text{var}(\tilde{\beta}) \neq \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$ niet geldig is.

Voor elke symmetrische en positieve en p.d. matrix, zoals $\mathbf{\Omega}$, kan een niet-enkelvoudig matrix $\mathbf{P}$ gevonden worden waarvan de waarden zodanig zijn dat deze aan de eigenschap $\text{var}(\) = \mathbf{\Omega} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ voldoen. Hieruit kan de formule $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{\Omega}(\mathbf{P}^T)^{-1} = \mathbf{I}$ afgeleid worden.

Het originele model luidde:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{X}\beta + \mathbf{u} \\ \text{var}(\mathbf{u}) &= \mathbf{\Omega} \neq \sigma^2\mathbf{I} \\ \text{var}(\tilde{\beta}) &= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{\Omega}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Hieronder de methode voor het veranderen van heteroscedasticiteit naar homoscedasticiteit:

Voor het gemak wordt er tijdelijk van strikte exogeniteit, $u \sim N(0, \Omega)$, uitgegaan. Wanneer een geschaalde versie van u , genaamd v , gemaakt wordt, en door de regel van een constante scalair c , $a \sim N(\mu, \sigma^2) \leftrightarrow c \cdot a = N(c\mu, c^2\sigma^2)$ toe te passen, is het mogelijk om het volgende af te leiden:

$$\mathbf{v} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{u}$$

$$v \sim N(0, \mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{P}^T)^{-1})$$

Als $\mathbf{P}$ is gekozen zodanig dat deze voldoet aan $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$, dan $v \sim N(0, \mathbf{I})$. De identiteitsmatrix $\mathbf{I}$ zorgt voor homoscedasticiteit.

Vermenigvuldig het originele model (C.20) met $\mathbf{P}^{-1}$ en de formule $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{P}^{-1}\mathbf{u}$ is gevonden. Voor de leesbaarheid wordt de formule ingekort door het introduceren van de volgende variabelen: $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{y}$, $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}$. De formule luidt nu:

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{v}, \text{ var}(\mathbf{v}) = \mathbf{I} \quad (\text{C.21})$$

De formule voldoet nu aan de Gauss-Markov voorwaarden. Hierdoor zal door gebruik van normaal kleinste kwadraten methode op bovenstaande formule een blauwe $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ leveren.

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} = (\tilde{\mathbf{X}}^T \tilde{\mathbf{X}})^{-1} \tilde{\mathbf{X}}^T \tilde{\mathbf{y}}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} = (\mathbf{X}^T (\mathbf{P}^{-1})^T \mathbf{P}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{P}^{-1})^T \mathbf{P}^{-1} \mathbf{y}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \mathbf{y} \quad (\text{C.22})$$

Substitueer (C.X1) in voorgaande formule. $\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS})$ is een efficiënte variantie, waardoor het kleiner zal zijn dan $\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS})$.

$$\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS}) = (\mathbf{X}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \quad (\text{C.23})$$

Omdat $\boldsymbol{\Omega}$ onbekend is (niet geobserveerd), kan deze niet geïmplementeerd worden in de algoritmes. Echter zijn de volgende eigenschappen bekend:

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_N^2 \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_N \end{bmatrix}$$

Voor het oplossen van bovenstaand probleem, wordt de volgende aanname gedaan: d_i is proportioneel met σ_i , maar niet gelijk aan.

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & d_N \end{bmatrix}, \quad d_i = \text{abs}(d_i), \quad \text{var}(u_i) = g(\sigma_i)$$

Door de aanname heeft $\tilde{\mathbf{y}}$ nu de volgende eigenschap:

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & d_N \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1/d_1 \\ y_2/d_2 \\ \vdots \\ y_n/d_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{d_2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{d_N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \quad (\text{C.24})$$

Te zien is dat $\mathbf{P}^{-1}$ een gewicht geeft aan de ongewogen $\mathbf{X}$ en $\mathbf{y}$.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{p2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & \cdots & x_{pN} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \frac{1}{d_1} & \frac{x_{11}}{d_1} & \cdots & \frac{x_{p1}}{d_1} \\ \frac{1}{d_2} & \frac{x_{12}}{d_2} & \cdots & \frac{x_{p2}}{d_2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{1}{d_N} & \frac{x_{1N}}{d_N} & \cdots & \frac{x_{pN}}{d_N} \end{bmatrix} \quad (\text{C.25})$$

D. Python en Extensies

Hieronder de tabel met gebruikte software voor het programmeren in Python. Voor Statsmodels is gebruik gemaakt van een 'nightly build'. Dit is een onstabiele uitgave van de meest actuele versie. Deze onstabiele uitgave was gebruikt in plaats van een stabiele uitgave, omdat de functionaliteit van de laatste voorgaande stabiele uitgave, namelijk 10.5, beduidend lager was.

Gekozen is voor Python 64 bits naast een Python 2.7 (32-bits), omdat de 32 bits versie als optionele installatie-optie wordt aangeboden door ESRI bij ArcGIS 10.1 voor het creëren van compatibele plug-ins.⁵⁶ Het gebruik van alleen 32-bits Python27 was niet mogelijk doordat bij het analyseren van SOBEK resultaten Pandas 32 bits al snel tegen diens datalimiet oploopt.

Indien men verschillende python versies op één computer heeft dient met het volgende rekening gehouden te worden om conflicten te voorkomen:

- Elke Python versie heeft een eigen doelmap (root).
- De %path% omgevingsvariabele van Windows mag geen verwijzingen naar één of meerdere Python doelmappen bevatten (of deelmappen daarvan). Dit leidt anders tot naamconflicten in de command prompt, doordat het dan niet meer kan onderscheiden welke Python versie aangeroepen moet worden bij het commando Python.
Door het ontbreken van de %path% omgevingsvariabele dient bij het oproepen van Python in command prompt nu eerst de doelmap meegegeven te worden.

Naam	Versie	Binary	Bron	n-bit	Notitie
Python	2.7	Yes	Esri.com Python.org	32/64	Compiler en tekstverwerker 32 bits Python is een optionele installatie bij ArcGIS10.1
Patsy	0.2.1	No	Pypi.python.org	32/64	Statistische modellen en ontwerpmatrices Gebruik <i>Python setup.py install</i> in (Windows) command prompt
Cython	0.20.2	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Extensie voor het schrijven van Python C extensies
IPython	1.2.1	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Interactieve computeromgeving
Numpy	1.8.0-sse3	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Fundament voor wetenschappelijk computergebruik
Pandas	0.13.1	Yes	Pypi.python.org	32/64	Dwarsdoorsnede en tijdserie data-analyse instrumentarium
PIL	1.1.7	Yes	Pythonware.com/ products/pil	32/64	Breidt het beeldverwerking uit
Pip	1.5.4	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Extensie voor het installeren van pakketten
Psutil	1.2.1	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Leverd informatie over huidig proces en systeemgebruik
Pywin32	2.1.8	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32	Extensie voor Windows
ScientificPython	2.9.3	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32	Collectie modules voor wetenschappelijk computergebruik
SciPy	0.13.3	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32/64	Software voor wiskundigen, wetenschappers en ingenieurs
SciTools	0.9.0	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/ pythonlibs/	32	Instrumentarium voor wetenschappelijk computergebruik

⁵⁶ *What's new for geoprocessing in ArcGIS 10.1?*,
<http://resources.arcgis.com/en/help/main/10.1/index.html/>, 17 december 2012, ESRI

Naam	Versie	Binary	Bron	n-bit	Notitie
Setuptools	2.2	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/pythonlibs/	32	Extensie voor het installeren van pakketten
Sphinx	1.2.2	Yes	lfd.uci.edu/~gholke/pythonlibs/	32	Documentatie generator
Statsmodels	1.6.0	Yes	Statsmodels/ sourceforge.net/ binaries/	32/64	Statistisch instrumentarium Nightly build, bevat fouten.
Jinja	2.7.2	No	Pypi.python.org	32/64	Template designer Pip install
Tornado	4.0	No	Pypi.python.org	32/64	Python web raamwerk en niet-synchroon netwerk Pip install
W9xpopen		Yes		32	Zorgt ervoor dat Python ook op Windows 95/98 draait. Wordt standaard bij pakketten geleverd

Figuur D.1 Tabel met software en diens versies, bron en installatiemethode.

