



# TKI AI-kennis voor grondwaterverkenningen

*Projectgroepoverleg 9 + scopingssessie  
17 juli 2024*

HydroLogic

HKV  
LIJN IN WATER

Witteveen + Bos

Vitens

 Rijkswaterstaat  
Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat

 STICHTING  
TOEGEPAST ONDERZOEK WATERBEHEER

 HOOGHEEMRAADSCHAP  
DE STICHTSE  
RIJNLANDEN

Waterschap NOORDERZIJLVEST

 WATERSCHAP  
vechtstromen

WATERSCHAP  
ZUIDERZEE LAND

 Deltares

 enabling delta life

# Agenda

- |  |               |          |
|--|---------------|----------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05 | (5 min)  |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                        | 09:05 - 09:10 | (5 min)  |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25 | (15 min) |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                        | 09:25 - 09:35 | (10 min) |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                        | 09:35 - 09:45 | (10 min) |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55 | (10 min) |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                    | 09:55 - 10:00 | (5 min)  |
| 8. Rondvraag en afsluiting                                     | 10:00 - 10:05 | (5 min)  |

# Agenda

<b>1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen</b>	<b>09:00 - 09:05</b>	<b>(5 min)</b>
2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg	09:05 - 09:10	(5 min)
3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input	09:10 - 09:25	(15 min)
4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling	09:25 - 09:35	(10 min)
5. Real-world casussen, stand van zaken	09:35 - 09:45	(10 min)
6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)	09:45 - 09:55	(10 min)
7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg	09:55 - 10:00	(5 min)
8. Rondvraag en afsluiting	10:00 - 10:05	(5 min)

# 1. Opening, vaststellen agenda, mededelingen

## Mededelingen

### *Afmeldingen:*

- Martijn van Dijk (Witteveen+Bos)
- Michiel Pezij (HKV); Ron Bruijns neemt rol van Michiel over.
- Rob van den Hengel (HDSR)
- Ruben Boelens (Hydrologic)
- Saskia van Brenk (Vitens)

### *In-kind uren:*

- Graag Sharepoint-excelsheet bijwerken voor t/m juni 2024.
- *Bestuurs-/Directieverklaring i.h.k.v. de TKI-toeslagregeling* is rondgestuurd, graag z.s.m. ingevuld en ondertekend retour.

# Agenda

- |  |                      |                |
|--|----------------------|----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05        | (5 min)        |
| <b>2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg</b>                 | <b>09:05 - 09:10</b> | <b>(5 min)</b> |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25        | (15 min)       |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                        | 09:25 - 09:35        | (10 min)       |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                        | 09:35 - 09:45        | (10 min)       |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55        | (10 min)       |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                    | 09:55 - 10:00        | (5 min)        |
| 8. Rondvraag en afsluiting                                     | 10:00 - 10:05        | (5 min)        |

## 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg

- [Verslag vorig overleg](#) (d.d. 22-05-2024)
- Actielijst vorig overleg

Volgnr	Actie	Naam	Vervaldatum
1	In-kind uren registreren	Alle partners	
2	Navragen besluit Snellius	Ron	
3	Overleg over format inplannen volgende week donderdag met Ruben	Jonathan	
4	Navragen TKI toeslag en financiële injectie	Bennie	

# Agenda

1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen	09:00	-	09:05	(5 min)
2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg	09:05	-	09:10	(5 min)
<b>3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input</b>	<b>09:10</b>	-	<b>09:25</b>	<b>(15 min)</b>
4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling	09:25	-	09:35	(10 min)
5. Real-world casussen, stand van zaken	09:35	-	09:45	(10 min)
6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)	09:45	-	09:55	(10 min)
7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg	09:55	-	10:00	(5 min)
8. Rondvraag en afsluiting	10:00	-	10:05	(5 min)

### 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input



# Meeting Agenda

- Combining gridded input and time-series input in neural operator modelling
  - Time-series input as barcode representation
- Modelled using FNO and Adaptive-FNO (AFNO)

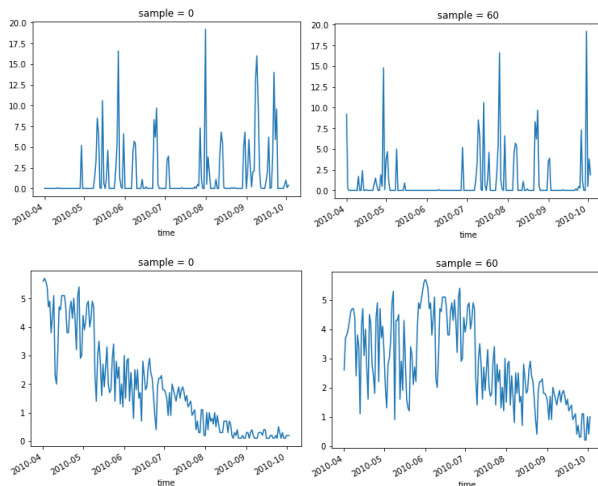
# Hypothetical case 4

Modelled using barcode representation of time-series

# Hypothetical case 4 (transient) - head

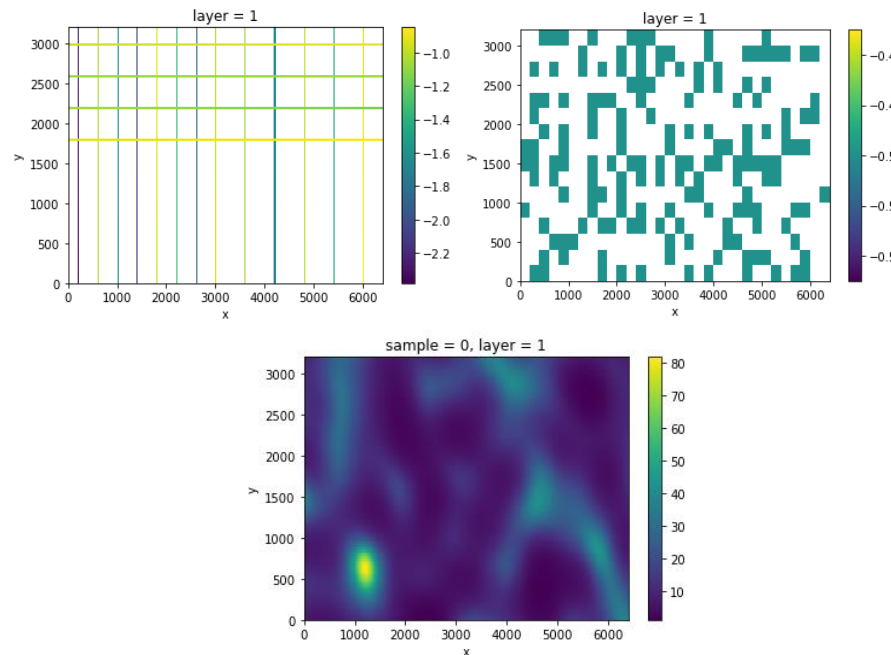
## Input:

- Permeability grid
- Precipitation
- Evapotranspiration
- Time series
- Varying over time



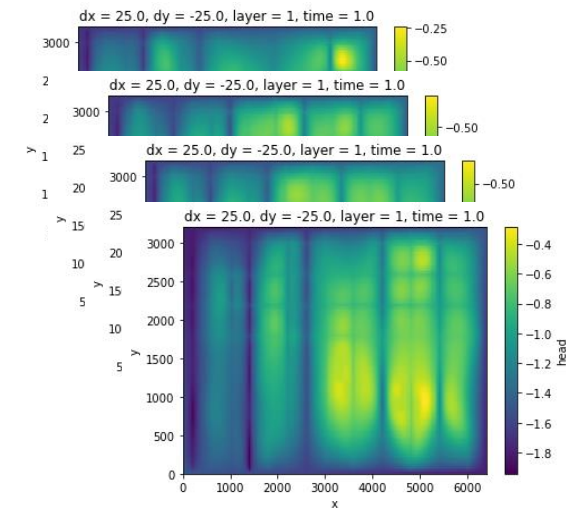
## Model:

- 128 x 256 x 1
- Structured network of rivers
- Random pattern of drains
- Surface run-off
- Transmissivity: **random field**



## Output:

- Head
- $T=[14, 31, 62, \dots, 184]$
- 2D raster



# Barcode representation – how to

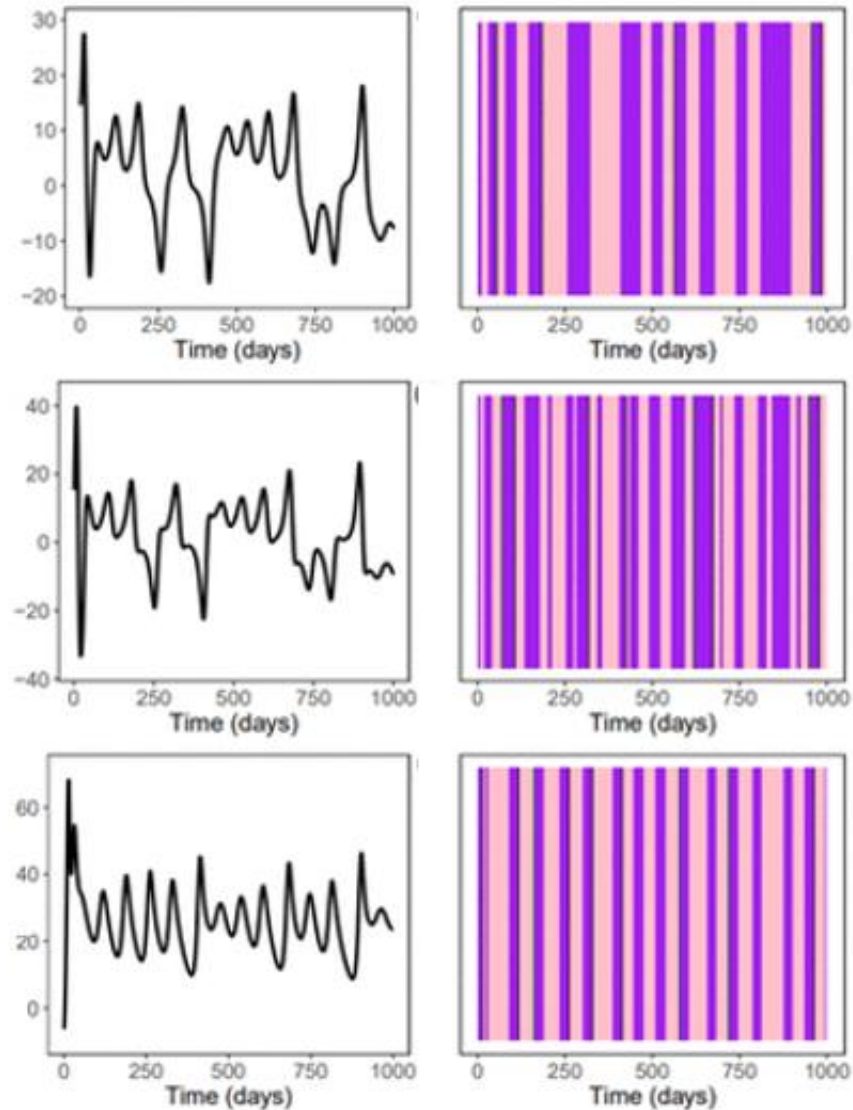


Image from:

<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.04.07.487508v1.full>

# Prediction for Date No.1

Precipitation

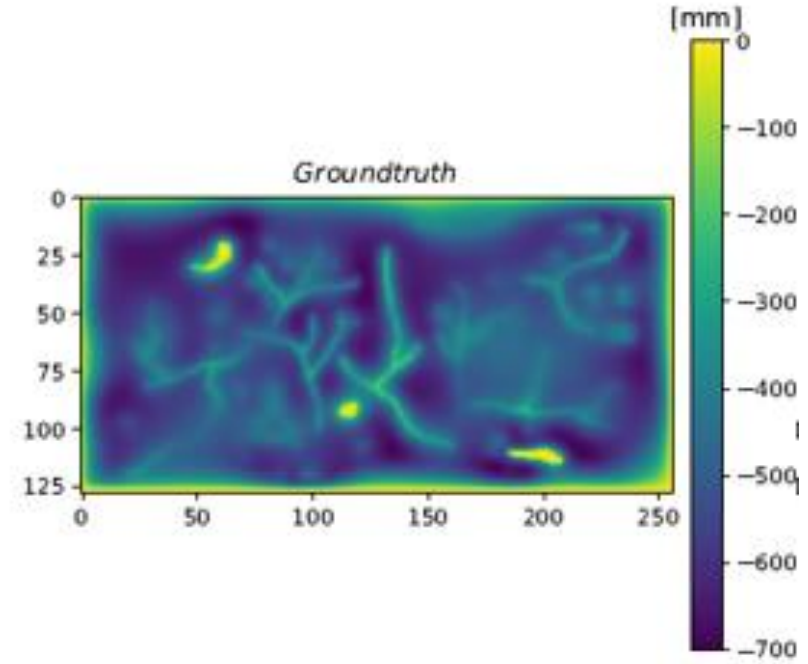


ETp

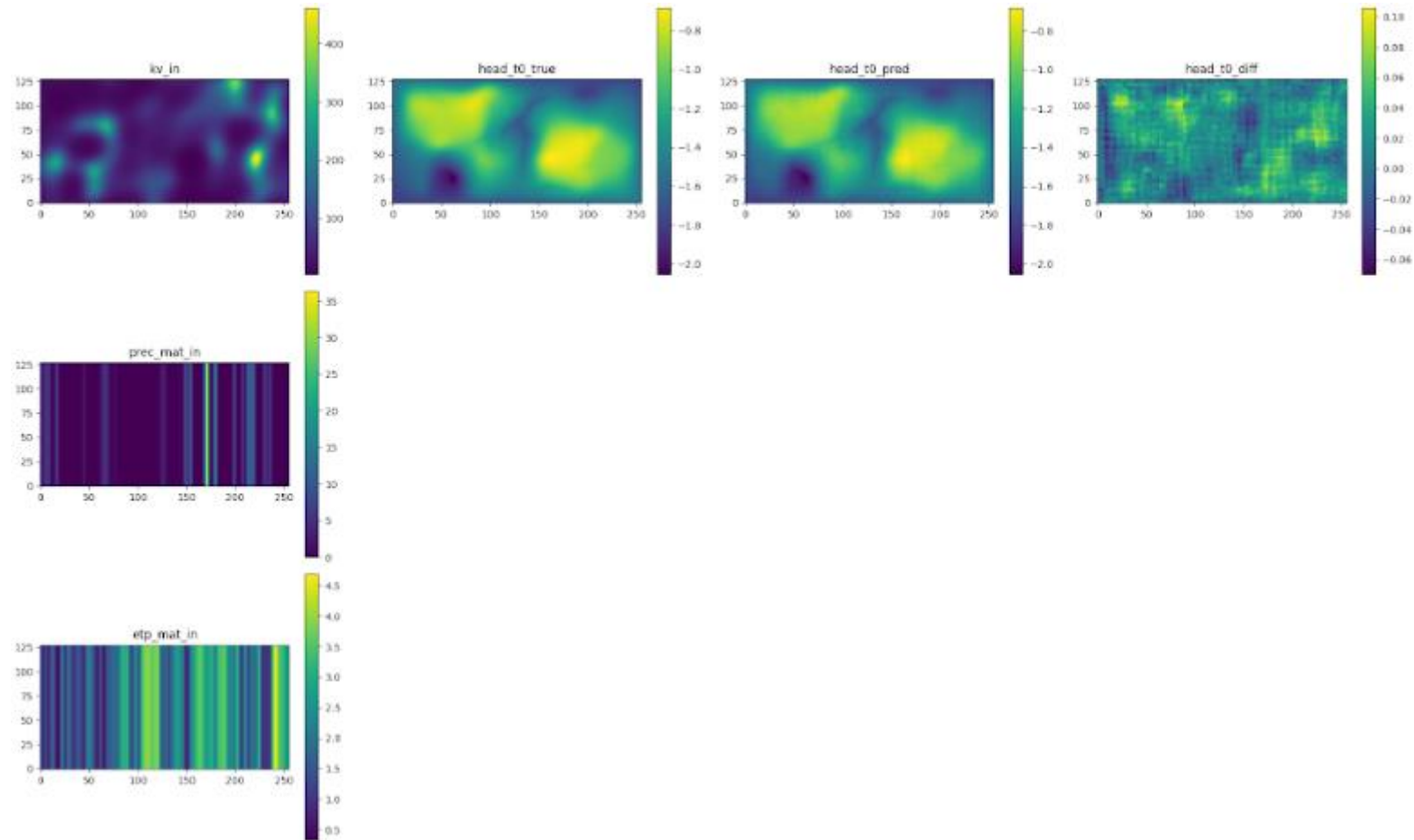


14 days

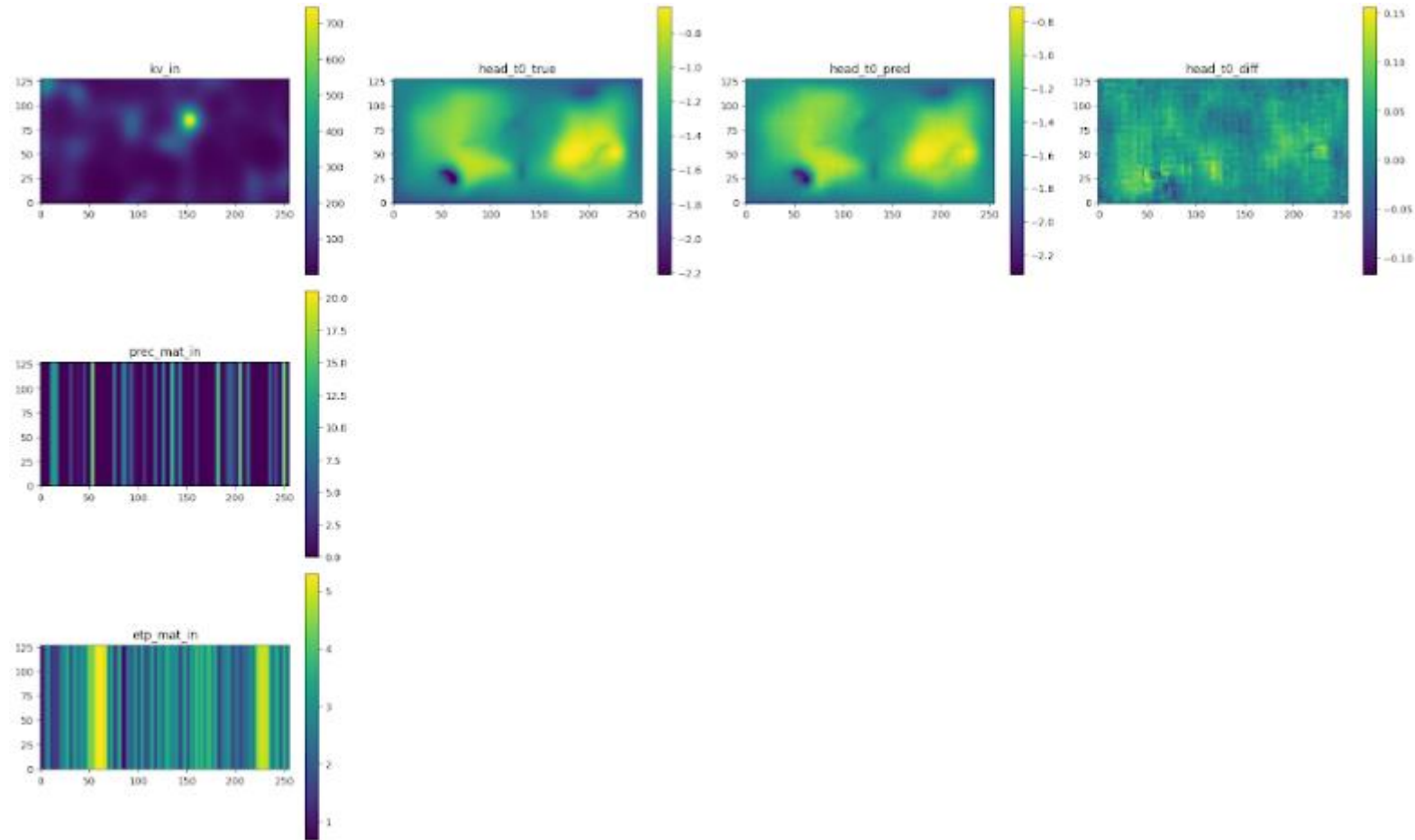
14-04-2010



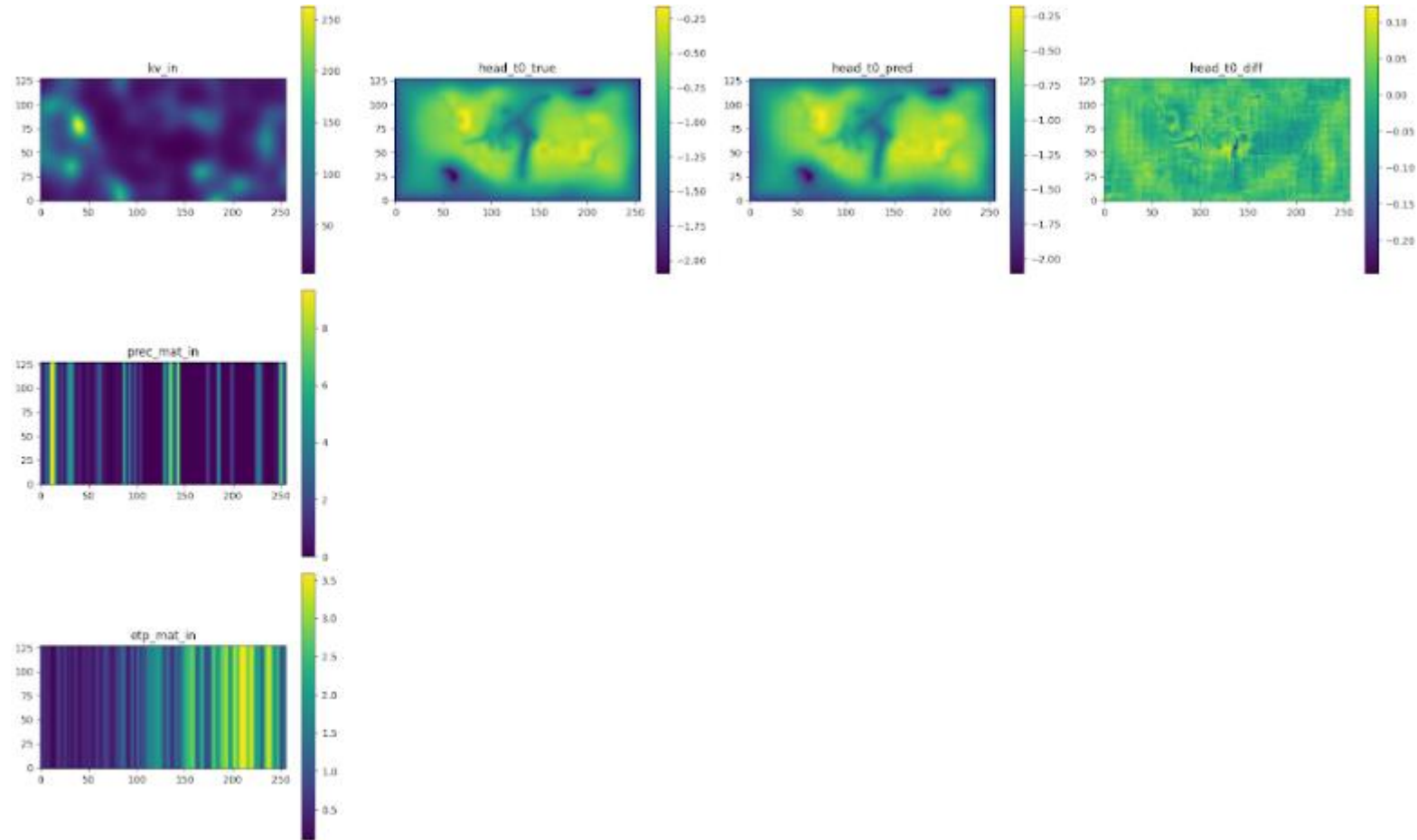
# Example No.1



# Example No.2



# Example No.3





# Prediction for Date No.4

Precipitation

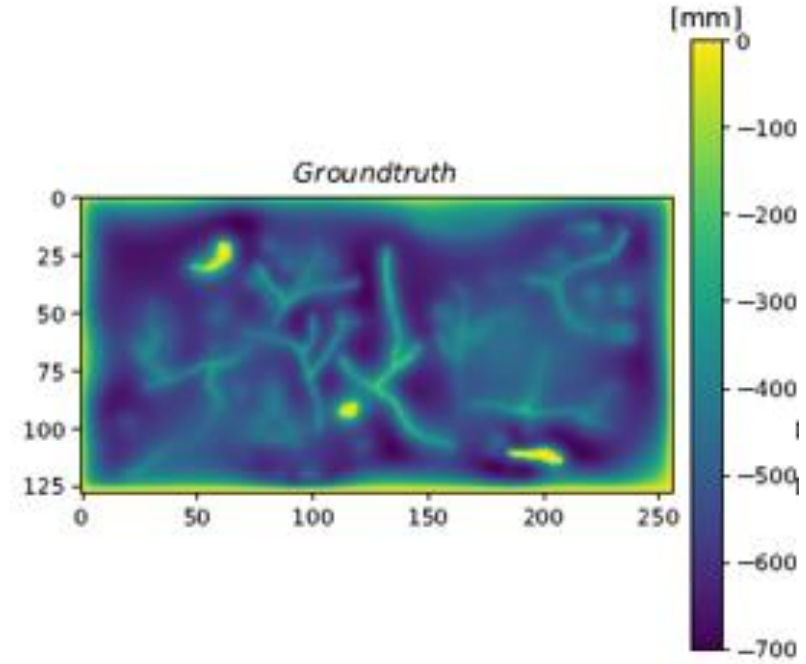


ETp

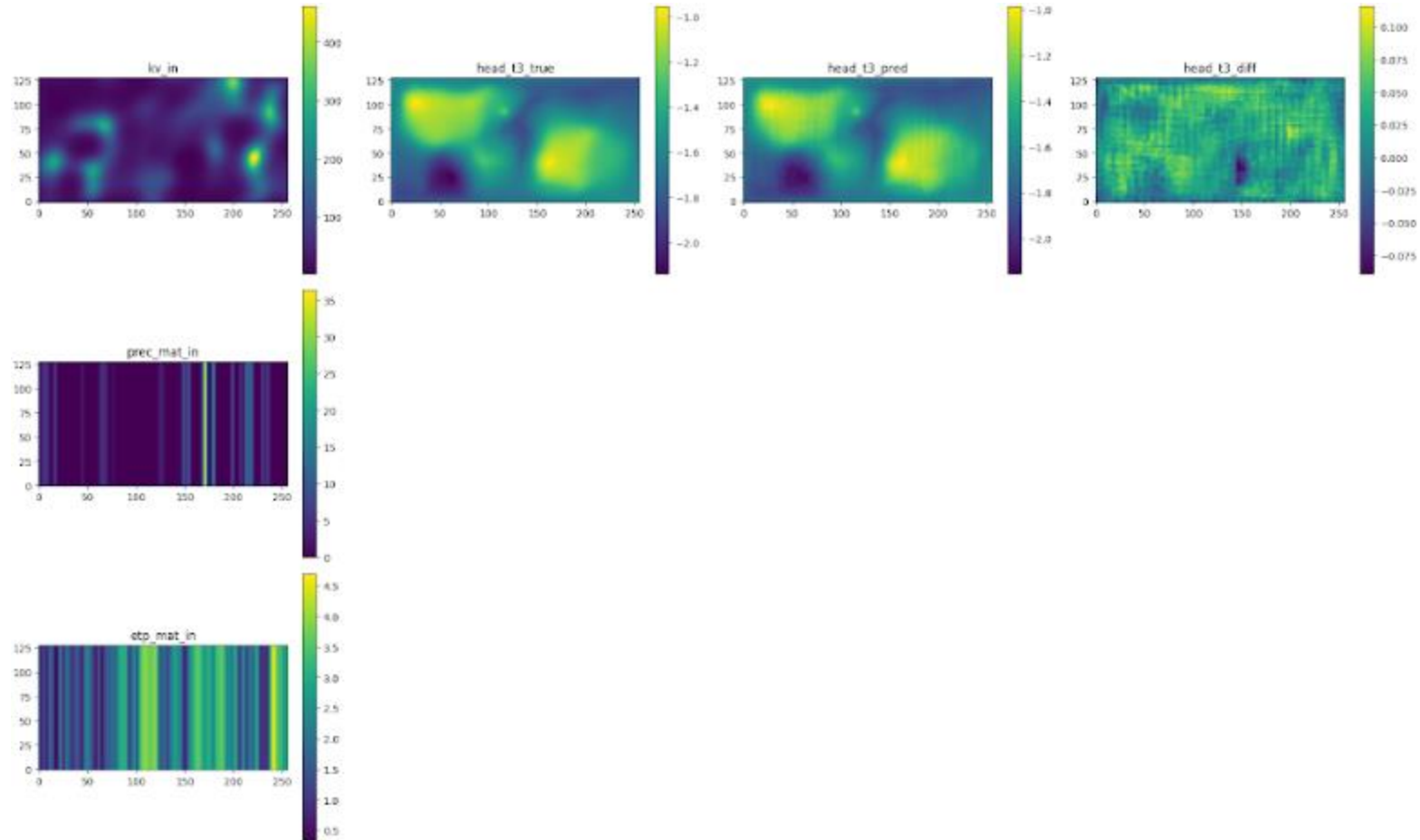


92 days

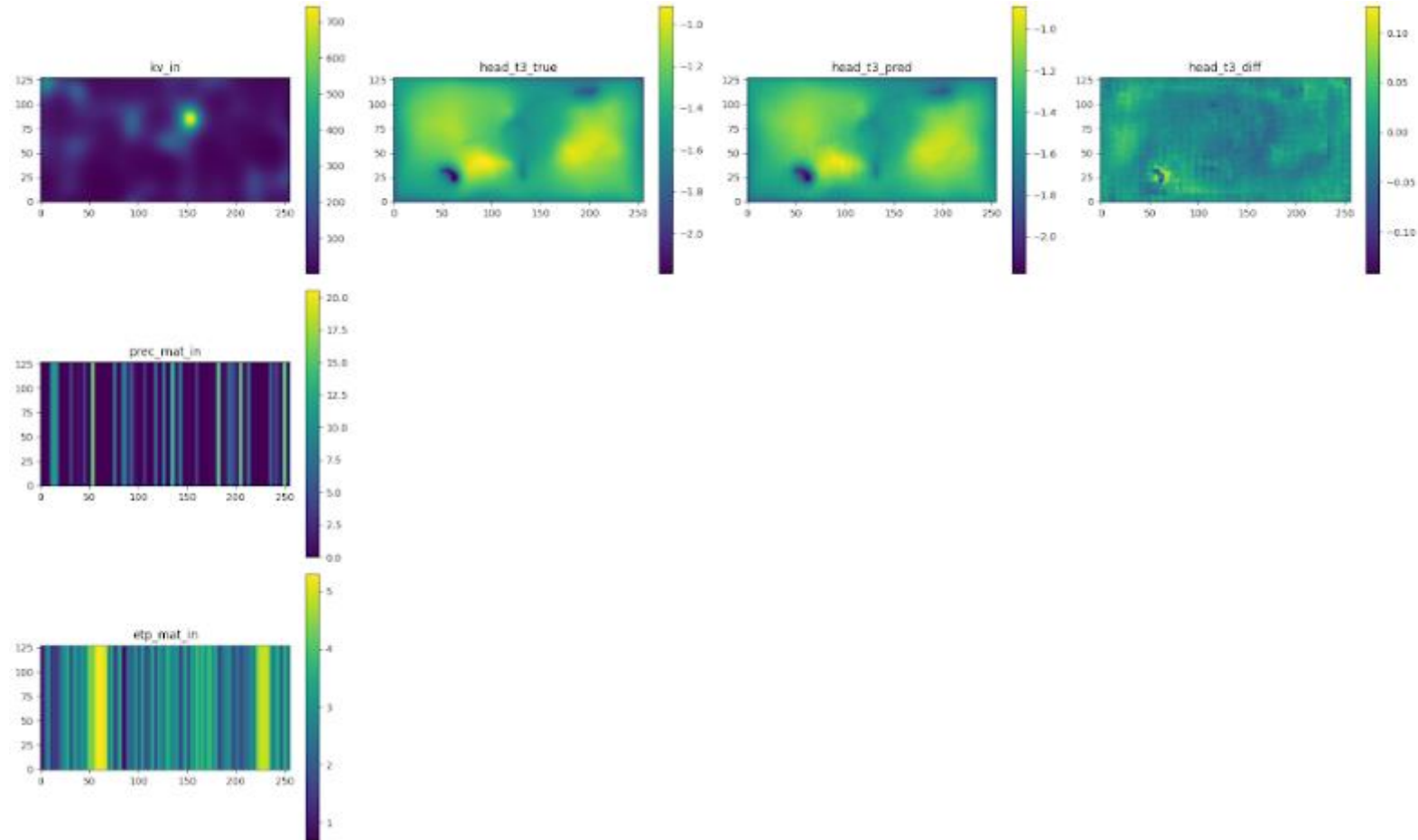
01-07-2010



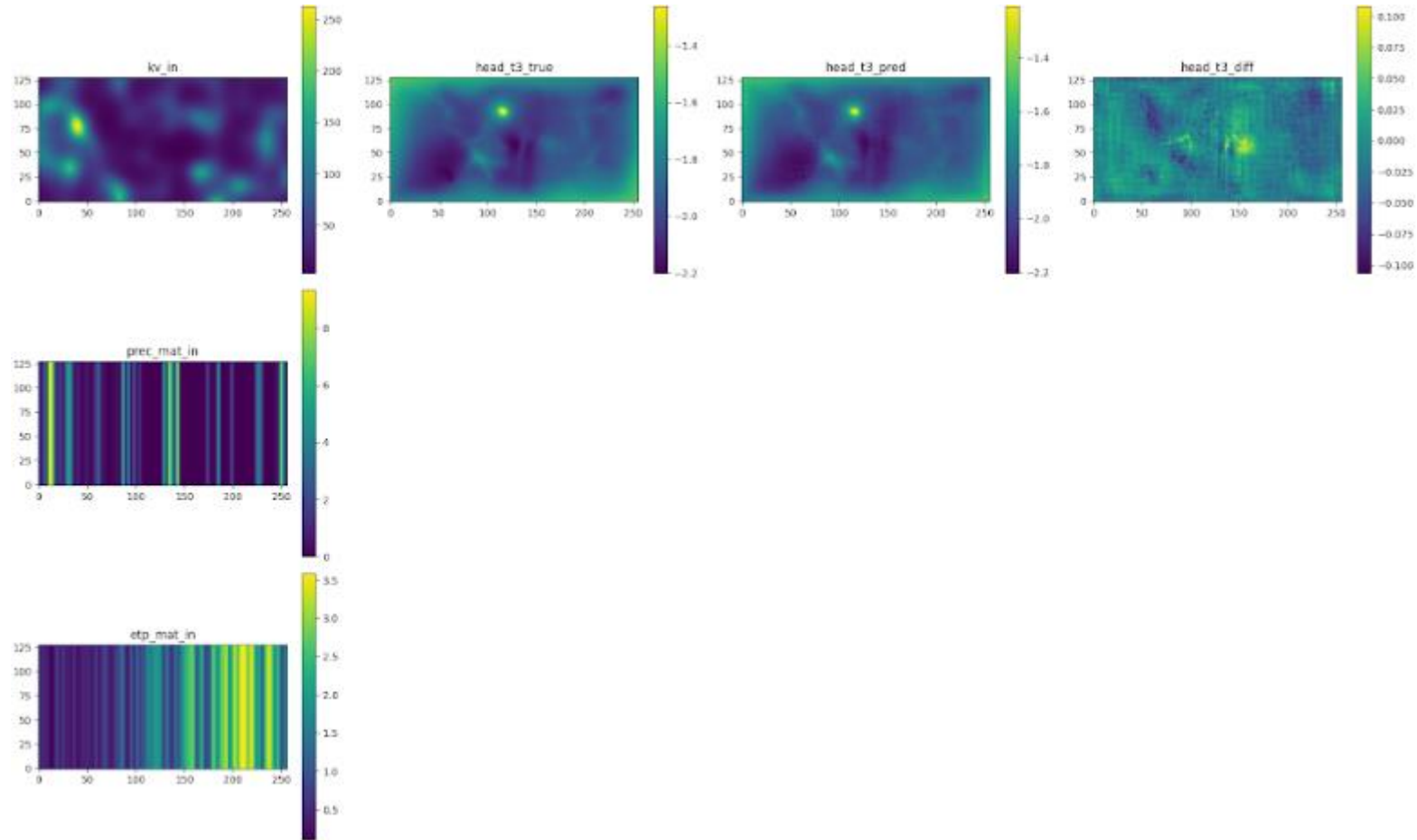
# Example No.1



# Example No.2



# Example No.3



# Prediction for Date No.7

Precipitation

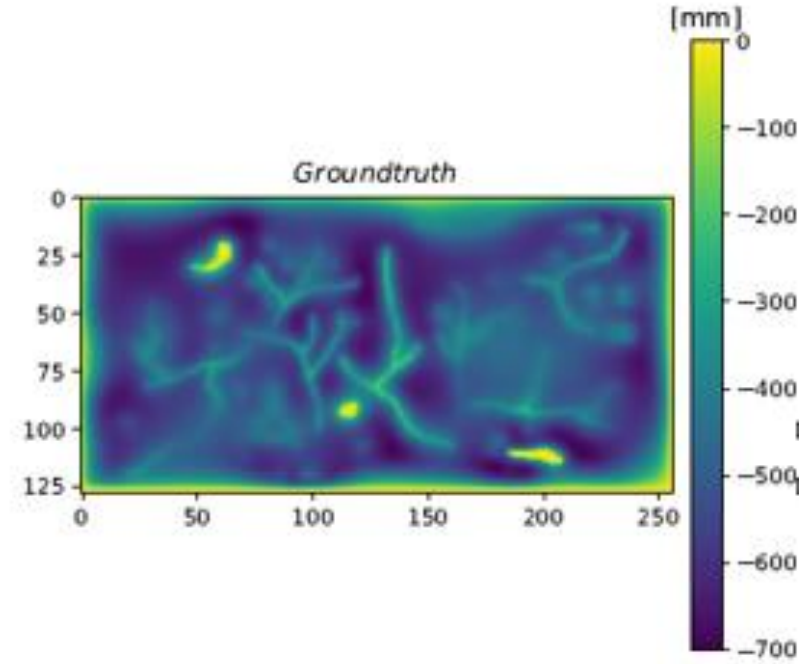


ETp

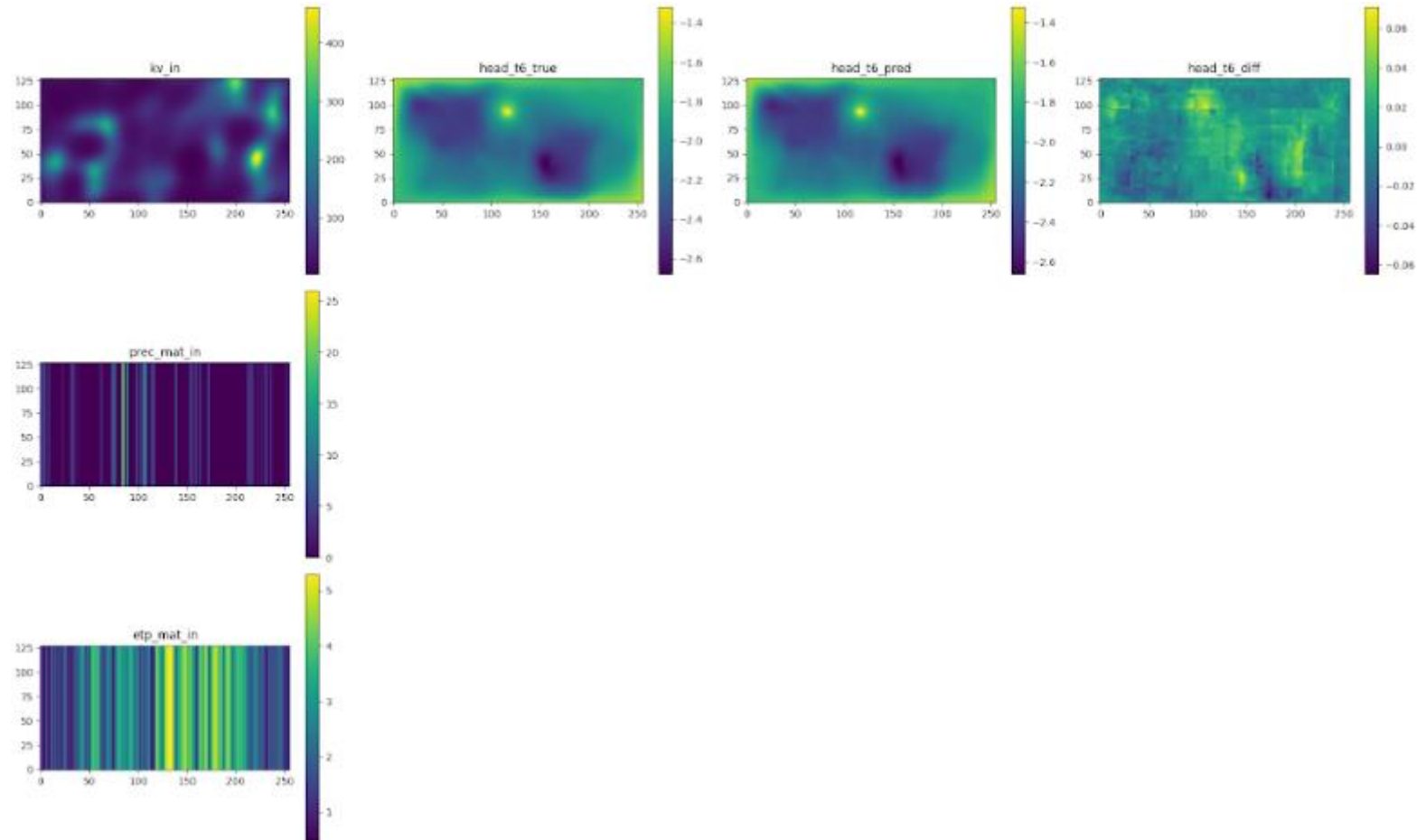


184 days

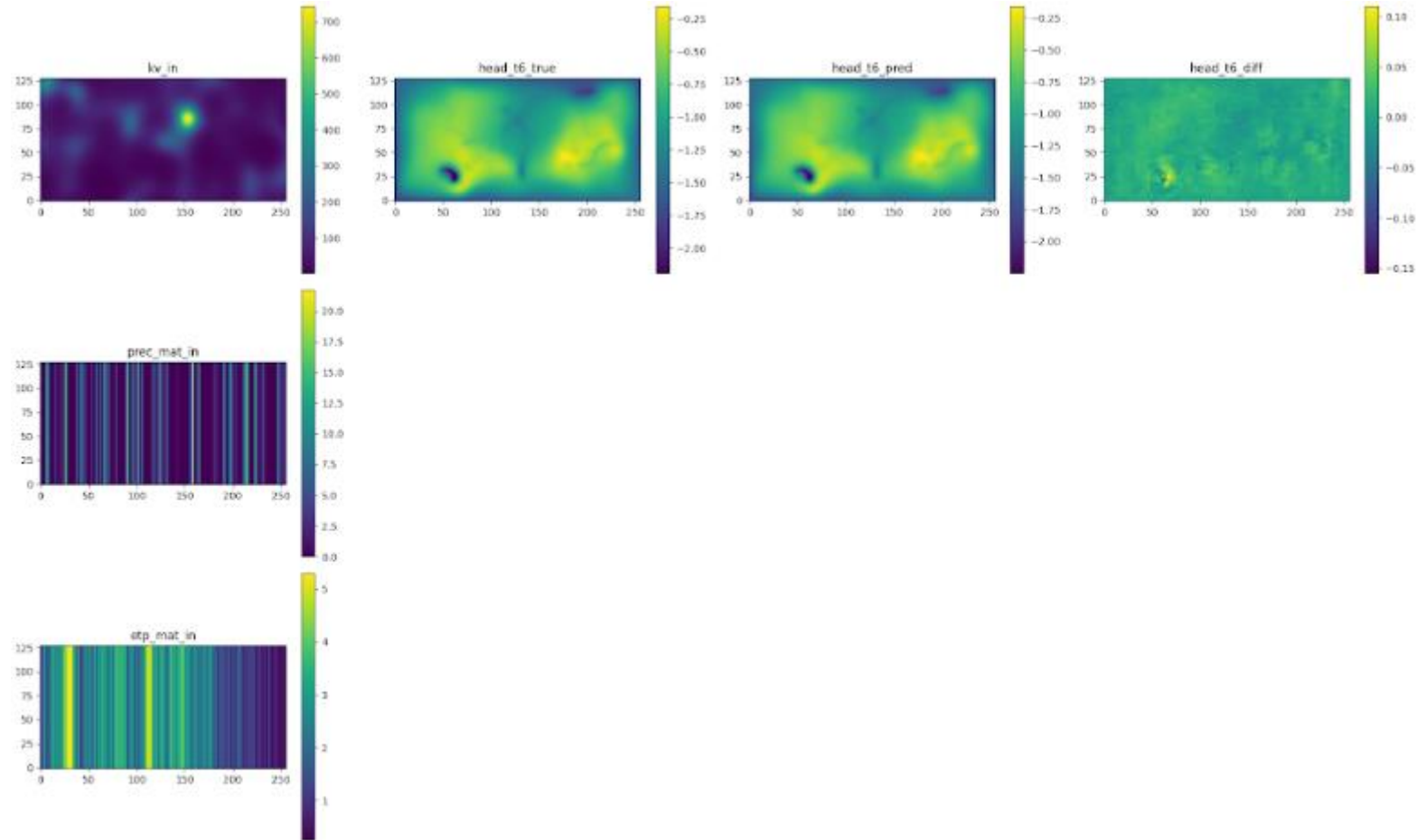
01-10-2010



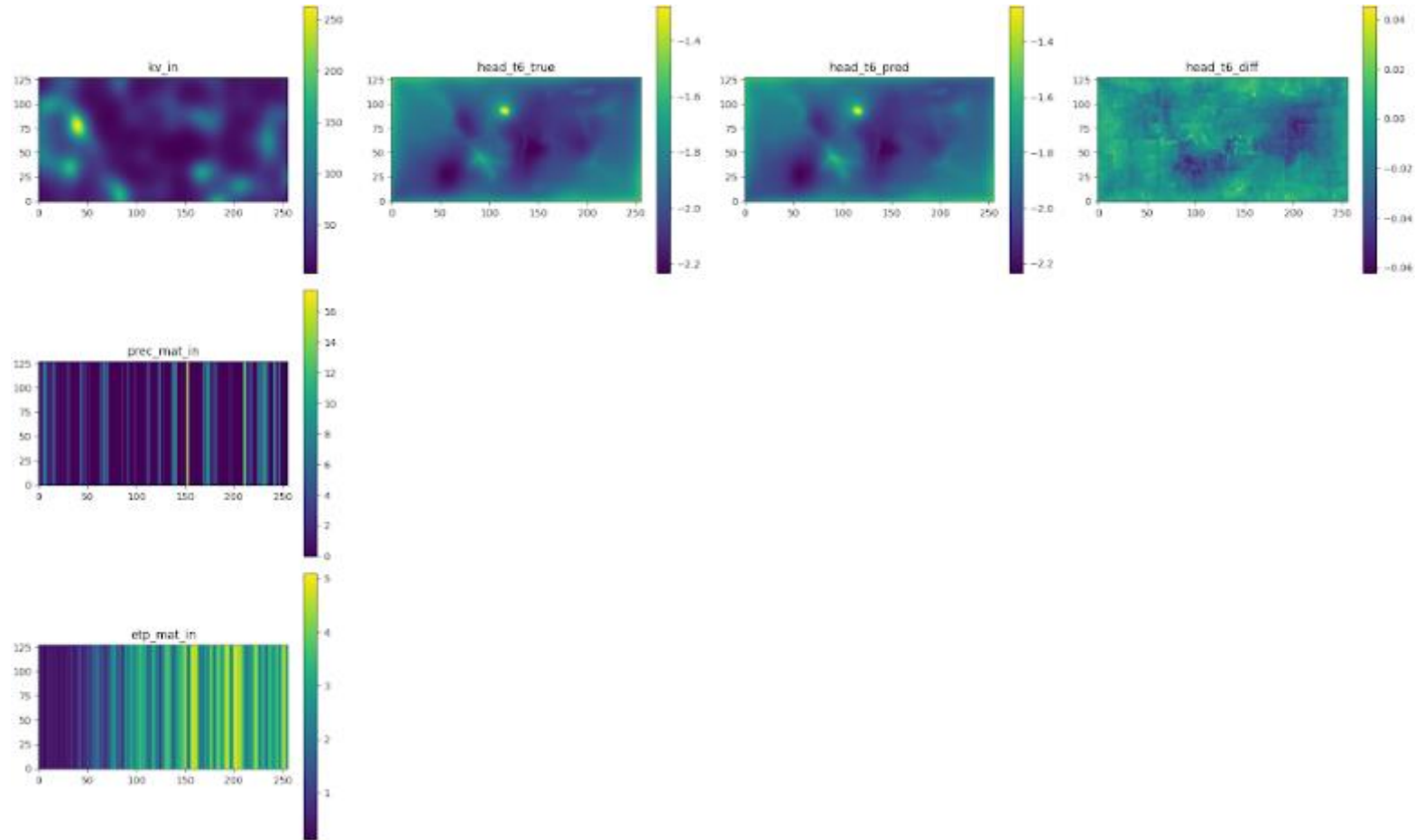
# Example No.1



# Example No.2



# Example No.3





# Key takeaways - Discussion

# Key takeaways

- Proof of Concept – we are able to model different types of input (linear and gridded) using FNOs
- Barcode representation indeed offers explanatory power to the model
- Can be expanded to larger domains and potentially include other input types, i.e. well locations

# Potential issues

- Adjustment of the scale of the barcode, i.e. when time series length greater than grid dimension
- Accounting for spatial heterogeneity when multiple precipitation or ETp data is available in a region

**Let's Discuss**

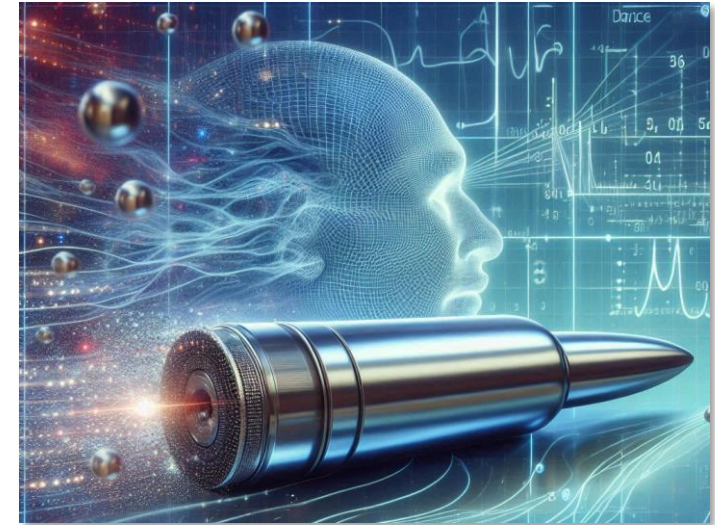
# Agenda

- |  |                      |                 |
|--|----------------------|-----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05        | (5 min)         |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                        | 09:05 - 09:10        | (5 min)         |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25        | (15 min)        |
| <b>4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling</b>                 | <b>09:25 - 09:35</b> | <b>(10 min)</b> |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                        | 09:35 - 09:45        | (10 min)        |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55        | (10 min)        |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                    | 09:55 - 10:00        | (5 min)         |
| 8. Rondvraag en afsluiting                                     | 10:00 - 10:05        | (5 min)         |

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Neurale netwerken / operators inzetten als snelle benadering van traditionele numerieke modellen



- Inmiddels de scepsis voorbij
- diverse domeinen naarstig op zoek naar de 'silver bullet'

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Het onderzoek is volop in beweging; onderzoeksgroepen/onderzoekers experimenteren met diverse methoden:
  - Random Forest
  - Long Short Term Memory (LSTMs)
  - UNET (met of zonder 'attention')
  - Generative Adversarial Networks (GANs)
  - Convolutional Neural Networks (CNNs)
  - Graph Neural Networks (GNN)
  - DeepONets neural *operator* (DON)
  - Fourier Neural *Operator* (FNO)





## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Lauren Foster (Neptune and company) presenteerde op 3<sup>e</sup> congresdag haar observaties, hieronder enkele sheets daarvan:

**Many different structures to incorporating physics into machine learning algorithms**

<b>Physics-guided (PgNN)</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• learn correlations from structured datasets</li><li>• (e.g. from controlled experiments or output of physics model)</li></ul>	<b>Neural Operators (NO)</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• learn nonlinear mappings between function spaces</li><li>• Also requires structured datasets as input</li></ul>
<b>Physics-informed (PiNN)</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• Physics incorporated OUTSIDE the neural network</li><li>• (e.g. in the loss function)</li></ul>	<b>Physics-encoded (PeNN)</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• Hard encode underlying physics INSIDE the core architecture of the neural network</li></ul>

17

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Lauren Foster (Neptune and company) presenteerde op 3<sup>e</sup> congresdag haar observaties, hieronder enkele sheets daarvan :

**Many different structures to incorporating physics into machine learning algorithms**

- Physics-guided (PgNN)**
  - learn correlations from structured datasets
  - (e.g. from controlled experiments or output of physics model)
- Physics-informed (PiNN)**
  - Physics incorporated OUTSIDE the neural network
  - (e.g. in the loss function)

**Summary:**

- Most of the applications I have seen at this conference fall into these two categories
- More accessible and straightforward architectures
- Often struggle to generalize beyond training datasets
- The algorithm is NOT getting better at physics, it's just constrained by physics

19

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Lauren Foster (Neptune and company) presenteerde op 3<sup>e</sup> congresdag haar observaties, hieronder enkele sheets daarvan :

**Many different structures to incorporating physics into machine learning algorithms**

- More complex algorithms
- More challenges with convergence
- Longer training times

---

- More generalizable outside training datasets
- More capacity to LEARN underlying physical laws (ones we already know and also ones we don't)

**Neural Operators (NO)**

- learn nonlinear mappings between function spaces
- Also requires structured datasets as input

**Physics-encoded (PeNN)**

- Hard encode underlying physics INSIDE the core architecture of the neural network

18

## 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Lauren Foster (Neptune and company) presenteerde op 3<sup>e</sup> congresdag haar observaties, hieronder enkele sheets daarvan :

**Many different structures to incorporating physics into machine learning algorithms**

**Physics-guided (PgNN)**

- learn correlations from structured datasets
- (e.g. from controlled experiments or output of physics model)

**Neural Operators (NO)**

- learn nonlinear mappings between function spaces
- Also requires structured datasets as input

Perhaps especially promising for leveraging NUMERICAL MODELING because these two approaches require structured datasets as inputs (which models naturally provide)

20

# 4. MODFLOW and More 2024; terugkoppeling

- Het onderzoek is volop in beweging; onderzoeksgroepen/onderzoekers experimenteren met diverse methoden:
  - Random Forest
  - Long Short Term Memory (LSTMs)
  - UNET (met of zonder ‘attention’)
  - Generative Adversarial Networks (GANs)
  - Convolutional Neural Networks (CNNs)
  - Graph Neural Networks (GNN)
  - DeepONets neural *operator* (DON)
  - Fourier Neural *Operator* (FNO)
- Iedereen lijkt ‘solo’ bezig, maar er zijn ook samenwerkingsinitiatieven:
  - AINED
  - AI NL Coalitie
  - Digishape
- Onze huidige positie
  - Onze keuze voor FNO is prima.
  - Zoveel mogelijk flexibel blijven (‘agile’) b.v. door training data set methodiek-onafhankelijk op te zetten.



# Agenda

- |  |                      |                 |
|--|----------------------|-----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05        | (5 min)         |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                        | 09:05 - 09:10        | (5 min)         |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25        | (15 min)        |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                        | 09:25 - 09:35        | (10 min)        |
| <b>5. Real-world casussen, stand van zaken</b>                 | <b>09:35 - 09:45</b> | <b>(10 min)</b> |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55        | (10 min)        |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                    | 09:55 - 10:00        | (5 min)         |
| 8. Rondvraag en afsluiting                                     | 10:00 - 10:05        | (5 min)         |

# 5. Real-world casussen, stand van zaken

# Agenda

- |   |                     |                 |
|---|---------------------|-----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                      | 09:00- 09:05        | (5 min)         |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                             | 09:05- 09:10        | (5 min)         |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input      | 09:10- 09:25        | (15 min)        |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                             | 09:25- 09:35        | (10 min)        |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                             | 09:35- 09:45        | (10 min)        |
| <b>6. AI &amp; grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)</b> | <b>09:45- 09:55</b> | <b>(10 min)</b> |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                         | 09:55- 10:00        | (5 min)         |
| 8. Rondvraag en afsluiting  | 10:00- 10:05        | (5 min)         |



## 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)

- Idee is om een AI & grondwaterdag(deel) te organiseren.

Vraag aan projectgroep: waar hebben jullie behoefte aan?

1. Dagdeel als onderdeel van de jaarlijkse Delft Software Days (DSD)
  - Internationaal publiek
  - Qua organisatie kunnen we 'meeliften' met DSD
2. Aparte 'TKI-project'-symposiumdag
  - Nederlandse doelgroep
  - B.v. onder '*STOWA-paraplu*'

# Agenda

- |  |                      |                |
|--|----------------------|----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05        | (5 min)        |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                        | 09:05 - 09:10        | (5 min)        |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25        | (15 min)       |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                        | 09:25 - 09:35        | (10 min)       |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                        | 09:35 - 09:45        | (10 min)       |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55        | (10 min)       |
| <b>7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg</b>             | <b>09:55 - 10:00</b> | <b>(5 min)</b> |
| 8. Rondvraag en afsluiting                                     | 10:00 - 10:05        | (5 min)        |

## 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg

- Volgend overleg: woensdag 25 september 2024, live.

# Agenda

- |  |                      |                |
|--|----------------------|----------------|
| 1. Opening + vaststellen agenda + mededelingen                 | 09:00 - 09:05        | (5 min)        |
| 2. Notulen, acties n.a.v. vorig overleg                        | 09:05 - 09:10        | (5 min)        |
| 3. Techniekontwikkeling: stand van zaken multi-variabele input | 09:10 - 09:25        | (15 min)       |
| 4. MODFLOW and More 2024 terugkoppeling                        | 09:25 - 09:35        | (10 min)       |
| 5. Real-world casussen, stand van zaken                        | 09:35 - 09:45        | (10 min)       |
| 6. AI & grondwater symposium; DSD- en/of STOWA-dag(deel)       | 09:45 - 09:55        | (10 min)       |
| 7. Afspraken en volgend projectgroepoverleg                    | 09:55 - 10:00        | (5 min)        |
| <b>8. Rondvraag en afsluiting</b>                              | <b>10:00 - 10:05</b> | <b>(5 min)</b> |

# 8. Rondvraag en afsluiting