

HENRY

Hydraulic Engineering Repository

Ein Service der Bundesanstalt für Wasserbau

Doctoral Thesis, Periodical Part, Published Version

Tyralla, Christoph

Identifikation und Reduktion struktureller Unsicherheiten in hydrologischen Modellen

Schriftenreihe Hydrologie/Wasserwirtschaft

Zur Verfügung gestellt in Kooperation mit/Provided in Cooperation with:
Ruhr-Universität Bochum

Verfügbar unter/Available at: <https://hdl.handle.net/20.500.11970/105170>

Vorgeschlagene Zitierweise/Suggested citation:

Tyralla, Christoph (2016): Identifikation und Reduktion struktureller Unsicherheiten in hydrologischen Modellen. Bochum: Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Hydrologie, Wasserwirtschaft und Umwelttechnik (Schriftenreihe Hydrologie/Wasserwirtschaft, 29).

Standardnutzungsbedingungen/Terms of Use:

Die Dokumente in HENRY stehen unter der Creative Commons Lizenz CC BY 4.0, sofern keine abweichenden Nutzungsbedingungen getroffen wurden. Damit ist sowohl die kommerzielle Nutzung als auch das Teilen, die Weiterbearbeitung und Speicherung erlaubt. Das Verwenden und das Bearbeiten stehen unter der Bedingung der Namensnennung. Im Einzelfall kann eine restriktivere Lizenz gelten; dann gelten abweichend von den obigen Nutzungsbedingungen die in der dort genannten Lizenz gewährten Nutzungsrechte.

Documents in HENRY are made available under the Creative Commons License CC BY 4.0, if no other license is applicable. Under CC BY 4.0 commercial use and sharing, remixing, transforming, and building upon the material of the work is permitted. In some cases a different, more restrictive license may apply; if applicable the terms of the restrictive license will be binding.

Verwertungsrechte: Alle Rechte vorbehalten

RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

RUB

SCHRIFTENREIHE
HYDROLOGIE/WASSERWIRTSCHAFT

Identifikation und Reduktion struktureller Unsicherheiten in hydrologischen Modellen

von Christoph Tyralla



LEHRSTUHL FÜR HYDROLOGIE,
WASSERWIRTSCHAFT UND UMWELTTECHNIK

29

Die vorliegende Arbeit wurde von der Fakultät
für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften als Dissertation angenommen.

Doktorarbeit eingereicht am: 27.06.2016
Tag der mündlichen Prüfung: 11.11.2016

Berichter:

Prof. Dr. rer. nat. habil. Andreas Schumann, Ruhr-Universität Bochum

Prof. Ph. D. Thorsten Wagener, University of Bristol

Copyright: Lehrstuhl für Hydrologie, Wasserwirtschaft und Umwelttechnik
Ruhr-Universität Bochum, 2016
Universitätsstraße 150, 44801 Bochum
Tel. +49 (0) 234 32-24693, Fax. -14153
ISSN 0949-5975

Herausgeber: Prof. Dr. rer. nat. habil. Andreas Schumann

Kurzfassung

Je schlechter die Datenlage, desto relevanter (aus Sicht der Wasserwirtschaft) und unsicherer (aus Sicht der Hydrologie) sind Simulationsrechnungen.

Eine zentrale Aufgabe der Hydrologie ist die Plausibilisierung der Struktur von Niederschlags-Abfluss- und Wasserhaushalts-Modellen. Je verschiedenartiger die beim Modellaufbau verwendeten und beim Modelleinsatz zu berechnenden Daten unter Einhaltung der geforderten Genauigkeit ausfallen dürfen, desto größer ist der Nutzen für die Praxis. Der reduktionistische Ansatz über die Entwicklung möglichst detaillierter „physikalischer“ Prozessmodelle hat sich bislang wenig bewährt. Die einfacheren Konzeptmodelle bleiben in vielen Anwendungsbereichen dominant. Die Frage, wie sich die modellstrukturelle Unsicherheit hochgradig abstrakter Konzeptmodelle erkennen, quantifizieren und reduzieren lässt, ist Gegenstand umfassender wissenschaftlicher Debatten. Die vorliegende Dissertation versucht hierzu auf zwei Feldern methodische Beiträge zu leisten.

Technische Unsicherheit

Bislang wird der Einhaltung bestimmter Genauigkeiten beim approximativen Lösen konzeptioneller Prozessgleichungen wenig Beachtung geschenkt. Mit der Expliziten Lobatto-Sequenz (ELS) wird ein hierauf spezialisiertes Runge-Kutta-Verfahren variabler Ordnung vorgeschlagen, auf die Konzeptmodelle HBV₉₆ und LARSIM_{ME} angewandt und hinsichtlich seiner Effizienz und Robustheit mit Referenzverfahren verglichen.

Diskontinuitäten in Form von Wenn-Dann-Beziehungen sind für Konzeptmodelle typisch, erschweren aber die Anwendung numerischer Integrationsalgorithmen. Zwei Lösungsansätze – die gezielte zeitliche Diskretisierung der Integrationsschrittweite sowie die Regularisierung diskontinuierlicher Prozessgleichungen – werden auf ELS bzw. die genannten Modelle angewandt und getestet.

Gängige Annahmen zum zeitlichen Verlauf der Eingangsdaten innerhalb einzelner Simulationsschritte bewirken, dass die Wahl der Schrittweite die Ergebnisse der Simulation systematisch beeinflusst. Über die stochastische Disaggregation z. B. von Niederschlagsdaten lässt sich dieses Problem lindern. Als einfachere Alternative wird eine statistisch-deterministische Disaggregationstechnik entwickelt und am Beispiel von HBV₉₆ sowie einer speicherbasierten Variante der Horton-Infiltration auf ihre Adäquatheit untersucht.

Zusammenfassend sei empfohlen, zukünftige Konzeptmodell-Entwicklungen unmittelbar auf die Anwendung fehlerüberwachter numerischer Integrationsmethoden auszurichten. Die gewonnenen Ergebnisse zeigen, dass sich damit verbundene Nachteile wie die Verlängerung der Rechendauer und die Gefahr von Rechenabbrüchen akzeptabel klein halten bzw. weitgehend ausschließen lassen. Dagegen eröffnen sich Möglichkeiten zur Schaffung höherer Transparenz- und Genauigkeitsstandards sowie zur flexibleren Modellentwicklung und -anwendung, insbesondere bezüglich der Wahl und Gestaltung von Prozessgleichungen und Randbedingungen. Die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden, implementiert in das hydrologische Modellframework HydPy, können hierfür als Ausgangspunkt dienen.

Prozessunsicherheit

Kein hydrologisches Modell kann alle Aspekte der Prozessheterogenität eines Einzugsgebiets repräsentieren. Die Ensemble-Modellierung begegnet dem durch den simultanen Einsatz mehrerer Modelle und hat sich in der Verbesserung von Vorhersagen bewährt. Der entwickelte Ensemble Range Approach (ERA) verallgemeinert grundlegende Ensemble-Techniken und versucht verschiedene Formen von Prozessunsicherheit erkennbar zu machen. Dies wird durch die Bildung kleiner Ensembles angestrebt, deren Member die Extreme der raumzeitlichen Prozessheterogenität eines Einzugsgebiets annehmen sollen. Eine Strukturunsicherheitsfunktion approximiert aus den Ausgaben aller Member die aus der Prozessunsicherheit resultierende Simulationsunsicherheit.

Die in synthetischen Fallstudien gewonnenen Einblicke in die Wirkungsweise von ERA lassen die Methode, auch im Vergleich zu verschiedenen Referenzmethoden (Pareto-Optimalität, GLUE, DYNIA, Partikel-Filterung), als aussichtsreiches Verfahren zur Identifikation und Reduktion modellstruktureller Defizite erscheinen. Reale Fallstudien unter Einsatz von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} offenbaren jedoch Mängel in der aktuellen Umsetzung von ERA. Von allen skizzierten Weiterentwicklungen erscheint die explizite Einbeziehung externer Schätzungen der Eingangsdatenunsicherheit als die dringendste.

Abstract

The worse the data situation, the more relevant (from the perspective of water management) and uncertain (from the perspective of hydrology) are the simulations.

A central task of hydrology is to evaluate and improve the structure of rainfall-runoff and water balance models. Hydrological models require some available data in order to predict some unavailable data with sufficient accuracy. The more different the available and the unavailable data are allowed to be, the greater the benefit for water management practices. The reductionist approach to develop ‘physical’ process models, representing water fluxes as detailed as possible, has not yet proven successful in achieving this goal. Hence, simple conceptual models remain dominant in many areas of application. The resulting question, a subject of much scientific debate, is how to recognize, quantify, and reduce the model uncertainty of such highly abstract models. The following methodological contributions to two subtopics of this issue are proposed.

Technical uncertainty

To date, solving process equations of conceptual models has gained little attention. In the present thesis, a variable order Runge-Kutta method, called Explicit Lobatto Sequence (ELS) is proposed. ELS is specifically designed to solve differential equation systems of conceptual models. It is applied on the hydrological models HBV₉₆ and LARSIM_{ME}, and compared with two reference methods with respect to its efficiency and robustness.

Discontinuities in the form of if-then relationships are typical features of conceptual models but hamper numerical integration algorithms. Two ways to circumvent this problem are the discretization of integration time steps and the regularization of discontinuous process equations. Both approaches are compared based on their application on ELS and the mentioned models.

Hydrological modelling requires assumptions on the time course of input forcing during individual simulation time steps. Common assumptions introduce systematic dependencies between time step length and simulation results. One way of reducing such dependencies is to disaggregate input data, e.g. precipitation, stochastically. As a simpler alternative, a statistic-deterministic disaggregation method is developed. It is assessed in simulation experiments relying on HBV₉₆ and a bucket model version of Horton’s infiltration equation.

In summary, it seems recommendable to tailor future concept model developments from the outset to the application of adaptive numerical integration methods. Related disadvantages such as extended computing times can be kept sufficiently low and the risk of program abortion can be largely avoided. By contrast, opportunities open up to create higher transparency and accuracy standards, as well as to achieve greater flexibility at all stages of model development and application, in particular with respect to the selection and design of process equations and boundary conditions. The methods presented in this work, implemented in the hydrological modelling framework HydPy, can serve as a starting point for such endeavours.

Process uncertainty

No single hydrological model is able to represent all aspects of process heterogeneity of a given watershed. The idea of ensemble modelling is to deal with the inadequacies of individual models by using large sets of different models simultaneously, which has proven efficient in forecasting applications. Here, the Ensemble Range Approach (ERA) is proposed. ERA generalizes basic ensemble techniques but shifts the emphasis to the identification of different forms of process uncertainty that could possibly be encountered in hydrological modelling studies. In order to achieve this, small ensembles are built. All ensemble members are supposed to represent different extremes of the spatio-temporal process heterogeneity of the watershed under investigation. A structural uncertainty function approximates, based on the model output of all members, simulation uncertainty arising from process uncertainty.

Results obtained in synthetic case studies let ERA appear to be a promising method for the identification and reduction of model inadequacies. At least in theory, ERA enables different insights into process uncertainty apart from the chosen reference methods (Pareto-optimality, GLUE, DYNIA, particle filtering). However, real case studies using HBV₉₆ and LARSIM_{ME} reveal shortcomings in the current implementation of ERA. Of all outlined advancements, the explicit inclusion of independent estimates of input data uncertainty appears to be the most urgent.

Vorwort

Konzeptionelle Modelle sind aus der wasserwirtschaftlichen Praxis nicht mehr wegzudenken. Wie der Name besagt, setzen derartige Modelle eine Konzeption zum Ablauf hydrologischer Prozesse in mathematische Gleichungen um. Die Unsicherheit derartiger Modelle ergibt sich, wenn man von den Unsicherheiten der Eingangs- und Kalibrierungsdaten absieht, im Wesentlichen aus der Wahl dieser Konzeption und deren numerischer Umsetzung.

Obwohl es sich bei den Prozessgleichungen hydrologischer Modelle in der Regel um Differentialgleichungen handelt, sind numerische Integrationsalgorithmen zu deren Lösung bisher wenig gebräuchlich. Meist werden die bestehenden Datenunsicherheiten, die sowohl die Eingangsdaten als auch die zur Kalibrierung verwendeten Abflussdaten betreffen, und die konzeptionellen Unsicherheiten der Modellbildung als so gravierend angesehen, dass eine Vernachlässigung der technischen Unsicherheiten als gerechtfertigt erscheint. Vor diesem Hintergrund hatte sich Herr Dr.-Ing. Tyralla das Ziel gesetzt, die Möglichkeiten und Grenzen der Nutzung numerischer Integrationsverfahren in der hydrologischen Modellierung zu untersuchen. Bei der Umsetzung dieses Vorhabens war eine Reihe von Detailproblemen zu lösen. So wurde es erforderlich, geeignete Lösungen für die, aufgrund der gängigen Schwellenwertkonzepte vorherrschenden, diskontinuierlichen Differentialgleichungen zu finden. Auch bestand die Problematik zeitlich diskreter Niederschlagsintensitäten, die an den Grenzen der einzelnen Zeitintervalle numerische Lösungen erschwerten. Obwohl die Untersuchungen anhand zweier sehr gebräuchlicher hydrologischer Modelle erfolgten, war es erforderlich, alle Modellgleichungen neu zu programmieren, um diese mit den numerischen Integrationsalgorithmen zu koppeln. Diese Arbeiten konnten nur insofern effektiv durchgeführt werden, als Herr Dr.-Ing. Tyralla ein entsprechendes Rahmenmodellsystem („Framework“) mit der Bezeichnung „HydPy“ entwickelte, das eine Kombination der verschiedenen Lösungsansätze ebenso ermöglichte, wie Kopplungen mit externen Optimierungs- und Parameternachführungsalgorithmen. Im Ergebnis dieser umfangreichen Vorarbeiten wurden dann neue numerische Lösungsansätze mit den bisherigen Berechnungsverfahren unter unterschiedlichen Randbedingungen (Zeitschrittweiten, unterschiedliche räumliche Auflösungen, unterschiedliche Systemmodelle, unterschiedliche numerische Integrationen) verglichen.

Im zweiten Teil der Arbeit wird die Unsicherheit der Modellparameter berücksichtigt, indem ein Modellensemble betrachtet wird, dessen einzelne Mitglieder mit Hilfe von gewichteten Likelihood-Funktionen den Unsicherheitsbereich der Simulationsergebnisse beschreiben. Es zeigte sich, dass bereits ein einfaches Ensemble mit nur zwei Modellrechnungen durch die geschickte Wahl der Likelihood-Werte einen wesentlichen Informationsgewinn gegenüber einer einzelnen Simulation liefern kann, wobei umfangreichere Ensembles nicht unbedingt zur Verbesserung der Unsicherheitspropagation beitragen.

Wie aus dieser kurzen Inhaltsangabe schon ersichtlich wird, beinhaltet dieser Band der Schriftenreihe die Darstellung sehr breit gefächelter, theoretisch und methodisch sehr anspruchsvoller Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der hydrologischen Modellierung. Sie bauen auf Arbeiten zur Unsicherheitspropagation anderer Wissenschaftler auf, stellen zugleich aber einen originären Beitrag zu dieser Thematik dar. Trotz ihres theoretischen Anspruchs haben die dargestellten Ergebnisse einen praktischen Nutzen, was darin zum Ausdruck kommt, dass die Untersuchungen von Herrn Dr.-Ing. Tyralla durch die Bundesanstalt für Gewässerkunde finanziell gefördert wurden, der für diese Unterstützung an dieser Stelle herzlich gedankt wird.

Herr Dr.- Ing. Tyralla hat eine Reihe neuer Aspekte in die Diskussion zur Unsicherheit konzeptioneller hydrologischer Modelle eingebracht, die in ihrer methodischen Umsetzung originär sind. So sind z. B. die Fallstudien anhand einfacher und gebräuchlicher hydrologischer Modellansätze für das Verständnis der entwickelten Ansätze sehr nützlich. Er weist jedoch gleichzeitig an verschiedenen Stellen darauf hin, dass eine Reihe von Fragen offen bleiben musste und ein großes Potential für weitergehende Untersuchungen, wie z. B. zur Charakterisierung von unterschiedlichen hydrologischen Prozessen in verschiedenen Naturräumen anhand variabler Ensembles, bietet. Dies stellt jedoch keinen Makel dar, sondern zeichnet eine wissenschaftliche Arbeit aus, die sich einem sehr breiten Forschungsgebiet widmet und damit zwangsläufig Ansätze für weitergehende Untersuchungen aufzeigt.

Bochum, den 23.11.2016

Prof. Dr. Andreas Schumann

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Hydrologie, Wasserwirtschaft und Umwelttechnik der Ruhr-Universität Bochum.

Ich bin Herrn Prof. Dr. rer. nat. Andreas Schumann für die Betreuung meiner Forschungstätigkeit zu großem Dank verpflichtet.

Ich danke Herrn Prof. Ph. D. Thorsten Wagener herzlich für die Übernahme des Koreferats.

Ich danke allen Kollegen der Bundesanstalt für Gewässerkunde, deren Unterstützung die umfangreiche Vorbereitung dieser Arbeit ermöglicht hat.

Ich danke allen aktuellen und ehemaligen Kollegen am Lehrstuhl, die durch ihre Diskussions- und Hilfsbereitschaft zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Unsicherheit in der hydrologischen Modellierung	5
2.1	Was ist Unsicherheit?	5
2.2	Quellen der Simulationsunsicherheit.....	6
2.2.1	Datenunsicherheit.....	6
2.2.2	Modellunsicherheit.....	7
2.2.3	Parameterunsicherheit.....	9
3	Grundlagen dieser Arbeit	15
3.1	Framework HydPy.....	15
3.2	Modelle.....	17
3.2.1	Horton-Infiltration.....	17
3.2.2	HBV ₉₆	19
3.2.3	LARSIM _{ME}	21
3.3	Untersuchungsgebiete.....	24
3.4	Optimierverfahren	27
4	Modelltechnische Unsicherheit	29
4.1	Stand des Wissens und der Technik	29
4.2	Numerische Charakterisierung konzeptioneller Speichermodelle	30
4.3	Methodische Vorüberlegungen und Grundlagen.....	34
4.3.1	Einschritt- versus Mehrschrittverfahren.....	34
4.3.2	Grundlagen von Einschrittverfahren	35
4.4	Methodenentwicklung für kontinuierliche Differenzialgleichungen	40
4.4.1	Implizite Lobatto-Sequenz für himmelsmechanische Anwendungen	40
4.4.2	Explizite Lobatto-Sequenz für hydrologische Anwendungen	41
4.4.3	Ergänzende Anmerkungen.....	45
4.4.4	Veranschaulichung.....	46

4.5	Methodenentwicklung für diskontinuierliche Differenzialgleichungen	54
4.5.1	Diskretisierung.....	54
4.5.2	Regularisierung.....	60
4.6	Methodenentwicklung für zeitvariablen externen Antrieb.....	65
4.6.1	Deterministische versus stochastische Disaggregation	66
4.6.2	Disaggregation mittels stetiger Funktionen.....	67
4.6.3	Integration der Disaggregationfunktionen	70
4.6.4	Ermittlung der Funktionsparameter	72
4.6.5	Schätzung subskaliger Niederschlagseigenschaften.....	75
4.7	Modellimplementierung	80
4.7.1	Interzeption.....	81
4.7.2	Schnee.....	84
4.7.3	Boden	88
4.7.4	Abflusskonzentration.....	96
4.7.5	Horton-Infiltration	98
4.8	Untersuchungen zur Simulationsunsicherheit und -effizienz.....	100
4.8.1	LARSIM _{ME}	101
4.8.2	HBV ₉₆	109
4.8.3	Horton-Infiltration	123
4.9	Untersuchungen zur Parameterkalibrierung.....	127
4.9.1	LARSIM _{ME}	129
4.9.2	HBV ₉₆	133
4.10	Anmerkungen zur Robustheit.....	135
4.11	Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick.....	139
5	Prozessunsicherheit	147
5.1	Ensemble Range Approach	147
5.1.1	Statistische Vorüberlegungen	148
5.1.2	Hydrologische Vorüberlegungen.....	150
5.1.3	Methodenentwicklung	152
5.1.4	Methodenumsetzung.....	155
5.1.5	Veranschaulichung	157

5.2	Alternative Methoden	161
5.2.1	Pareto-Optimierung.....	161
5.2.2	Generalized Likelihood Uncertainty Estimation.....	162
5.2.3	Dynamic Identifiability Analysis	162
5.2.4	Partikel-Filterung	163
5.3	Synthetische Fallstudien	164
5.3.1	Studienaufbau.....	164
5.3.2	Anwendung der Ensembletechniken.....	165
5.3.3	Anwendung der Parametertechniken	168
5.3.4	Diskussion.....	175
5.4	Reale Fallstudien	177
5.4.1	Bisherige Erfahrungen	177
5.4.2	Studienaufbau.....	178
5.4.3	Ergebnisse	180
5.4.4	Diskussion.....	205
5.5	Zusammenfassung und Ausblick.....	207
Literaturverzeichnis		213
Abbildungsverzeichnis		227
Tabellenverzeichnis		233
Abkürzungs- und Symbolverzeichnis		235

1 Einführung

Seit jeher besteht ein großer Kontrast zwischen den Fähigkeiten der Menschheit, das Verhalten des Wassers in der Landschaft zu steuern und zu verstehen. Technologien wie Stauanlagen und Hochwasserdämme wurden bereits in vorchristlicher Zeit eingesetzt; das wissenschaftliche Konzept des hydrologischen Wasserkreislaufs – Platon und Aristoteles spekulierten, ob das Wasser der Flüsse dem Tartarus entstammt oder einer unterirdischen Luft-Wasser-Umwandlung entspringt – entwickelte sich erst im 17. Jahrhundert (McCulloch und Robinson 1993).

In der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts entwickelte sich die moderne Prozesshydrologie. Pioniere wie Robert E. Horton versuchten auf der Hangskala die Abflussentstehung systematisch zu messen und in ihrer Komplexität zu erfassen (Beven 2006c). Aus diesen Bestrebungen ging und geht eine Sammlung diverser Perspektiven auf die Mechanismen der Abflussentstehung hervor (z. B. McGlynn et al. 2002). Deren Überführung in eine allgemein anerkannte Theorie oder ein globales System, das darüber Auskunft gibt, wo, wann und wie bestimmte Mechanismen greifen, steht noch aus (Wagener et al. 2007).

In der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts ermöglichte die Verfügbarkeit rechenstarker Computer den intensiven Einsatz deterministischer Rechenmodelle, die dann zahlreich entwickelt wurden (Singh 1995). Hierbei lassen sich drei Ansätze unterscheiden. Erstens, der *systemanalytische* Ansatz: Ziel ist die Ermittlung und Wiedergabe der Beziehung zwischen Systemeingabe und -ausgabe; es wird kaum versucht, systeminterne Dynamiken realistisch abzubilden (Dooge 1968). Zweitens, der *konzeptionelle* Ansatz: hydrologisches Prozesswissen dient als Ausgangspunkt, wird aber so lange abstrahiert, bis die Anwendbarkeit des entwickelten Modells in großen Flussgebieten gewährleistet ist (Crawford und Linsey 1966). Drittens, der *physikalische* Ansatz: auf Grundlage theoretisch und empirisch möglichst gut abgesicherter Gesetzmäßigkeiten sollen die tatsächlichen Wasserflüsse in und auf einzelnen Hängen, und perspektivisch innerhalb ganzer Flussgebiete, raumzeitlich detailliert abgebildet werden (Freeze und Harlan 1969).

Der systemanalytische Ansatz ist für viele Problemstellungen der Praxis ungeeignet; die mit dem physikalischen Ansatz verbundenen Hoffnungen haben sich kaum erfüllt (Beven 1989). Etabliert haben sich, insbesondere in der wasserwirtschaftlichen Praxis, die Konzeptmodelle – wobei diese bis hin zum höchsten Abstraktionsgrad (z. B. Perrin et al. 2003) auch in der aktuellen Forschung Anwendung finden. Die intuitive Anwendbarkeit verfügbarer Softwareimplementierungen, der geringe Rechenaufwand und die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten sind hierfür als ausschlaggebende Gründe anzusehen.

Nun liefern (teils sehr ähnliche) konzeptionelle Modelle jedoch nicht unbedingt die gewünschten Ergebnisse, weil sie das (teils sehr unterschiedliche) hydrologische Wirkungsgefüge verschiedener Einzugsgebiete zutreffend erfassen und angemessen vereinfachen, sondern weil sie kalibriert werden (Kirchner 2006). Gängige Konzeptmodelle fallen inhaltlich zwar nicht vor das 17. Jahrhundert zurück, haben aber auch keine enge Anbindung an die Beobachtungen, Erkenntnisse und Fragen moderner Prozessstudien – z. B. bezüglich der Rolle der Untergrundtopographie (Huff et al. 1982) oder der Verweilzeiten des Wassers im Einzugsgebiet (Kirchner 2003).

Die Erhöhung der Kompatibilität zwischen der kleinräumigen Beobachtung und der großräumigen Modellierung hydrologischer Prozesse ist allenfalls langfristig herbeizuführen; bis auf Weiteres können Ergebnisse der hydrologischen Prozessforschung nur eingeschränkt zur Untermauerung praxisrelevanter hydrologischer Modelle genutzt werden (Seibert und McDonnell 2002). Dies birgt große Unsicherheiten für die wasserwirtschaftliche Praxis, wenn die annähernde Richtigkeit der benötigten Simulationsergebnisse nicht durch eine vorgeschaltete Kalibrierung des verwendeten Modells zu gewährleisten ist. Als typische Problemfälle seien genannt: ein für einen Pegel zu prognostizierendes Hochwasser liegt jenseits des bislang erfassten Abflussbereichs; für eine bauliche Maßnahme an einem Gewässerabschnitt ohne Pegel werden Bemessungsereignisse benötigt; zur Kalibrierung liegen nur Abflussmessungen vor, benötigt werden aber Informationen über den Bodenwasserhaushalt; die mögliche Beeinflussung des Grundwasserhaushalts durch einen Landschaftseingriff soll bewertet werden.

Seit der Jahrtausendwende wird vermehrt versucht, auch unabhängig von Erkenntnisfortschritten der hydrologischen Feldforschung Wege zu finden, Konzeptmodelle kritisch zu prüfen und zu verbessern (Gupta et al. 2012). In diese Bestrebungen zur Identifikation und Reduktion modellstruktureller Unsicherheiten ordnet sich die hiermit vorgelegte Dissertation ein. Zunächst rein wissenschaftlich an die Arbeiten von Gattke (2006) zur Untersuchung struktureller Unsicherheiten mittels Modellvergleichen anknüpfend, fokussierten sich die Forschungstätigkeiten des Autors im Rahmen einer Projekt-Kooperation mit der Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG) auf die operationelle, großskalige Abflussmodellierung.

Die BfG setzt das hydrologische Modell HBV₉₆ (Lindström et al. 1997) in der operationellen Wasserstandsvorhersage für den Rhein ein. Um ausreichende Klarheit über die Funktionsweise sowie den größtmöglichen Spielraum in der Modifikation des Modells zu gewinnen, wurde HBV₉₆ zunächst – in möglichst enger Anlehnung an die von der BfG eingesetzte Original-Implementierung (SMHI 2011) – in das Modellframework HydPy integriert (Tyralla und Schumann 2013). Als Vergleichsmodell implementiert wurde LARSIM (Bremicker 2000); allerdings eng begrenzt auf die von der BfG im Bereich der Klimafolgenforschung (BMVI 2015) eingesetzten Modellkomponenten (die Veröffentlichung der Dokumentation steht noch aus). Eine auf dieser Basis erfolgte Evaluierung der Modellstruktur von HBV₉₆ findet sich in Tyralla und Schumann (2016b).

Die vorliegende Arbeit entwickelt allgemeine Methoden zur Identifikation und Reduktion struktureller Unsicherheiten und erprobt diese an den beiden genannten hydrologischen Modellen. Die Darstellung ist in die folgenden vier (mit Ausnahme von Kapitel 3 in sich geschlossenen) Kapitel gegliedert.

Kapitel 2 versucht den vagen Begriff *Unsicherheit* im Kontext der hydrologischen Modellierung mit Leben zu füllen (Abschnitt 2.1) und zu veranschaulichen, wie verschiedene Unsicherheitsquellen zur Gesamtunsicherheit der Simulationsergebnisse beitragen (Abschnitt 2.2).

Kapitel 3 beschreibt das Framework HydPy (Abschnitt 3.1), die hydrologischen Modellen HBV₉₆, LARSIM_{ME} sowie eine speziellen Variante der Horton-Infiltration (Abschnitt 3.2), die Untersuchungsgebiete des Neckars, der Lahn und der Nahe (Abschnitt 3.3) sowie den Kalibrieralgorithmus BOBYQA (Abschnitt 3.4).

Kapitel 4 widmet sich der Reduktion der technischen Unsicherheit hydrologischer Modelle. Den möglichen negativen Auswirkungen mangelhafter technischer Umsetzungen konzeptioneller Prozessgleichungen wird oftmals wenig – nach Auffassung von Kavetski und Clark (2011) zu wenig – Beachtung geschenkt. Kapitel 4 zielt primär auf den Aspekt der numerischen Integration der Prozessgleichungen ab. Abschnitt 4.1 schildert die hierbei aktuell gegebene Diskrepanz zwischen dem Stand des (allgemein verfügbaren) Wissens und der (in Konzeptmodellen eingesetzten) Technik. Auf Basis einer numerischen Charakterisierung in Abschnitt 4.2 argumentiert Abschnitt 4.3 für die Kopplung gängiger Konzeptmodelle mit Runge-Kutta-Verfahren und fasst die wichtigsten Aspekte dieser numerischen Integrationsverfahren zusammen. Abschnitt 4.4 schlägt mit der Expliziten Lobatto-Sequenz (ELS) ein auf Konzeptmodelle spezialisiertes Runge-Kutta-Verfahren vor. ELS ist auf die Integration kontinuierlicher Prozessgleichungen beschränkt; Abschnitt 4.5 führt zwei methodische Ergänzungen für diskontinuierliche Prozessgleichungen ein. Abschnitt 4.6 entwickelt eine mit ELS effizient kombinierbare Methodik zur Niederschlagseinspeisung mittels stetiger Disaggregierungsfunktionen zur Erhöhung der Plausibilität des Systemverhaltens. Die mit den vorgestellten Methoden kompatible Formulierung der Prozessgleichungen hydrologischer Modelle wird in Abschnitt 4.7 demonstriert und diskutiert. Abschnitt 4.8 untersucht die numerische Effizienz und Unsicherheit der vorgeschlagenen Integrationsstrategien sowie von Referenzverfahren. Abschnitt 4.9 testet, ob numerische Fehler und/oder diskontinuierliche Prozessbeschreibungen die Parameterkalibrierung beeinträchtigen. Abschnitt 4.10 zeigt anhand von HBV₉₆ die Grenzen des Diskretisierungsansatzes aus Abschnitt 4.5.1 auf. Abschnitt 4.11 schließt mit der Diskussion weiterer möglicher Reduktionen der technischen Unsicherheit und empfiehlt, zukünftige (Weiter-)Entwicklungen konzeptioneller Modelle unmittelbar auf die Anwendung numerischer Integrationsalgorithmen auszurichten.

Kapitel 5 zielt ab auf die Identifikation modellstruktureller Defizite, die aus dem extremen Abstraktionsgrad konzeptioneller Prozessbeschreibungen resultieren. Abschnitt 5.1 entwickelt den Ensemble Range Approach (ERA) als Verallgemeinerung konventioneller Ensemble-Ansätze mit dem Ziel, verschiedene Ideal- und Mischtypen hydrologischer Prozessunsicherheit abbilden zu können. Abschnitt 5.2 beschreibt mit der Pareto-Optimierung, der Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode, der Dynamic Identifiability Analysis und der Partikel-Filterung die gewählten Referenzverfahren. Abschnitt 5.3 wendet ERA, die konventionellen Ensemble-Ansätze sowie die Referenzverfahren auf simple synthetische Fallstudien an, um die Funktionalität der Implementierung von ERA zu belegen und prinzipielle Unterschiede in der Wirkungsweise aller Methoden herauszustellen. Abschnitt 5.4 demonstriert und diskutiert die Wirkungsweise von ERA in realen Fallstudien; hauptsächlich unter Verwendung von HBV₉₆ und vergleichsweise unter Verwendung von LARSIM_{ME}. Abschnitt 5.5 fasst den aktuellen Entwicklungsstand von ERA zusammen und skizziert Möglichkeit zur Behebung noch bestehender Defizite bezüglich der Eingangsdatenunsicherheit, der Optimierstrategie und der Flexibilität bei Verwendung großer Ensembles.

2 Unsicherheit in der hydrologischen Modellierung

2.1 Was ist Unsicherheit?

Unsicherheit ist ein hochgradig allgemeiner Begriff der Alltagssprache. Wohl jeder Aspekt menschlicher Tätigkeit ist von darunter zusammengefassten Phänomenen betroffen. Hiervon ist, wie jeder andere Wissenschaftszweig, auch die hydrologische Modellierung nicht ausgenommen. Die ersten Veröffentlichungen zur Unsicherheitsanalyse computerbasierter hydrologischer Modelle sind kaum älter als die Modelle selbst (z. B. Wood 1976).

Eine disziplinübergreifende Definition des Begriffes Unsicherheit erscheint aufgrund der inhaltlichen Vielschichtigkeit und der alltagssprachlichen Vorbelegung kaum erreichbar. Matott et al. (2009) geben eine Übersicht vorgeschlagener Unsicherheitstaxonomien im Bereich der umweltbezogenen Modellierung und Entscheidungsunterstützung, die aufgrund unterschiedlicher Perspektiven und Begrifflichkeiten zum Teil deutlich voneinander abweichen. Norton et al. (2006) folgern, dass derartige Klassifikationen ohne Diskussion der verschiedenen Bedeutungen von Unsicherheit und der Situationen, in denen diese auftreten, nicht zur Vereinheitlichung des Verständnisses von Unsicherheit beitragen. Krayer von Krauss et al. (2006) halten dagegen Definitionen mit größerem Interpretationsspielraum für notwendig, um den inhaltlichen und methodischen Unterschieden verschiedener Disziplinen gerecht werden zu können.

Auch in der hydrologischen Modellierung hat sich bislang keine einheitliche Terminologie durchgesetzt, was die Klassifikation von unsicherheitsbezogenen Problemen sowie die Auswahl der Methoden zur Bearbeitung dieser Probleme erschwert (Montanari 2007). Weitgehend etabliert hat sich dagegen die Auffassung, dass Unsicherheiten in der hydrologischen Modellierung nicht beliebig durch detailliertere Prozessbeschreibungen reduzierbar sind, da komplexe hydrologische Systeme generell nicht exakt deterministisch beschrieben und vorhergesagt werden können (Montanari und Koutsoyiannis 2012).

Primär interessiert in der hydrologischen Modellierung die Unsicherheit der Simulationsergebnisse, hier Simulationsunsicherheit genannt (siehe Montanari 2007, der hierfür die Bezeichnung *model output uncertainty* verwendet). Diese wird von der Simulationsgüte unterschieden, die eine Maßzahl für die Übereinstimmung einer Menge von Simulationsergebnissen mit zugeordneten Messungen ist. Simulationsunsicherheit wird i. d. R. nicht sprachlich definiert, sondern über ihre Ursachen erläutert (Abschnitt 2.2). Die eigentliche Definition erfolgt vielmehr implizit durch die jeweils angewandte Methode zur Schätzung der Unsicherheit.

Was Simulationsunsicherheit meint, lässt sich – verglichen mit anderen Unsicherheitsformen in der Modellierung – in erster Näherung relativ leicht eingrenzen: Bei der Simulation kontinuierlicher Größen wie dem Abfluss eines Flussgebietes weichen Simulationsergebnisse mehr oder weniger vom als richtig angenommenen Bezugswert ab. Simulationsunsicherheit ist die Unkenntnis über diese Fehler im jeweiligen Anwendungsfall. Ob die Fehlercharakteristika hinreichend probabilistisch beschreibbar sind und insbesondere welche Extrapolierbarkeiten sich daraus ergeben, wird kontrovers diskutiert (siehe z. B. Thiemann et al. 2001, Beven und Young 2003 und Gupta et al. 2003). Eine mathematisch-formale Definition von Simulationsunsicherheit z. B. über Konfidenzintervalle entspricht zumindest nicht dem gegenwärtigen hydrologischen Konsens.

2.2 Quellen der Simulationsunsicherheit

Die Quellen der Simulationsunsicherheit sind in der hydrologischen Literatur weitgehend konsistent beschrieben, aber teils unterschiedlich bezeichnet. Ausgeklammert werden gewöhnlich nicht „objektiv-naturwissenschaftliche“ Aspekte wie menschliche Fehler. Grundsätzlich aufgeführt und weiter differenziert werden dagegen Daten-, Modell- und Parameterunsicherheiten.

2.2.1 Datenunsicherheit

Zunächst ist Datenunsicherheit gemäß DIN 1319-3 Messunsicherheit. Da hydrologische Größen im Wesentlichen nicht unter streng kontrollierten Laborbedingungen erfasst werden, sind deren Messwerte nicht nur von zufälligen, sondern auch von zahlreichen systematischen Messfehlern betroffen (siehe z. B. Richter 1995).

Hinzu kommt der Beitrag der Skalenproblematik zur Datenunsicherheit. Räumlich variable hydrologisch relevante Größen werden i. d. R. über Punktmessungen erfasst, hydrologische Modelle erwarten dagegen flächenbezogene Werte. Daher sind Interpolationsmethoden zwischenzuschalten, die weitere Fehler mit sich bringen (siehe z. B. Grayson und Blöschl 2001). Moderne flächenbezogene Messmethoden liefern hierfür keine grundsätzliche Lösung, da diese – wie beispielsweise die radargestützte Niederschlagserfassung – auf der indirekten Erfassung korrelierter Größen basieren und Punktmessungen sowie Übertragungsfunktionen zur Nutzung dieser Informationen benötigen (Barthels 2004). Ebenfalls relevant ist die fehlende zeitliche Repräsentativität von Messwerten, die zum Teil in Diskrepanz zur Systemdynamik steht. So werden Informationen nur zu ausgewählten Zeitpunkten erfasst und für zwischenliegende Zeiträume beispielsweise als konstant angenommen.

Die Datenunsicherheit nimmt auf unterschiedlichen Wegen Einfluss auf die Simulationsergebnisse, je nachdem ob diese die Eingangsdaten oder die Vergleichsdaten betrifft.

Als Eingangsdaten seien gegebene Informationen zu den zeitlich variablen Antriebsgrößen des Modells bezeichnet. Das hydrologische Modell überführt die Unsicherheit der Eingangsdaten in Simulationsunsicherheit, wobei es in Zusammenspiel mit anderen Unsicherheitsquellen zu verstärkenden aber auch kompensatorischen Effekten kommen kann. Zu bedenken ist, dass in der Praxis oftmals nicht gemessene, sondern mit Hilfe von Extremwertstatistik, Wettergeneratoren oder meteorologischen Modellen geschätzte bzw. simulierte Eingangsdaten Verwendung finden. Deren Eigenarten treten mit denen des hydrologischen Modells in Wechselwirkung und führen ggf. zu Simulationsunsicherheiten unerwarteter Charakteristik. Dies gilt insbesondere für Bemessungen weit im Extrapolationsbereich, bei denen die Einschätzung der Simulationsunsicherheit im Wesentlichen subjektiver Natur ist.

Als Vergleichsdaten seien gegebene Informationen zu den realen Entsprechungen der durch das Modell simulierten Größen bezeichnet. Die Unsicherheit der Vergleichsdaten an sich kann mit der Unsicherheit der Eingangsdaten vergleichbar sein, die Wirkungsmechanismen auf die Simulationsunsicherheit unterscheiden sich jedoch grundsätzlich. Der wichtigste, indirekte Mechanismus geht über die Parameterkalibrierung und ggf. die Modellselektion (siehe Abschnitt 2.2.3). Darüber hinaus können Vergleichsdaten über Nachführungsmethoden auch einen direkteren Einfluss auf die Simulation nehmen.

2.2.2 Modellunsicherheit

Schwerer als der Begriff der Datenunsicherheit ist der Begriff Modellunsicherheit zu fassen. Gewöhnlich werden die Bezeichnungen Struktur- oder Modellstrukturunsicherheit bevorzugt. Walker et al. (2003) schlagen Modellunsicherheit dagegen als Oberbegriff für inhaltliche und mathematisch-informatische Unsicherheitsaspekte vor. Erstere werden im Folgenden als Prozessunsicherheit bezeichnet; für letztere wird der Begriff technische Unsicherheit von Walker et al. (2003) übernommen. Prozessunsicherheit sei, wie in Götzinger und Bárdossy (2008), weiter in Abstraktions- und Umsetzungsunsicherheit differenziert (s. u.).

Nach Beven (2001) sind die ersten Schritte im Prozess der hydrologischen Modellierung (1) die Formulierung eines *perceptual model* („Wahrnehmungsmodell“), welches die eigenen oder angelesenen Beobachtungen und Annahmen des Modellierers über die Reaktionsweise eines hydrologischen Systems zusammenfasst, (2) das Aufstellen eines auf den *perceptual model* basierenden *conceptual model* („abstraktes Modell“) mit Hilfe mathematischer Gleichungen, wobei vereinfachende Annahmen explizit formuliert werden sollten, und (3) die Überführung der mathematischen Gleichungen des *conceptual model* in das *procedural model* („Modell-Implementierung“), welches die konkrete programmtechnische Umsetzung samt aller erforderlichen numerischen Näherungen darstellt.

Bereits die Formulierung des *perceptual model* ist äußerst subjektiv. Den Ergebnissen der hydrologischen Feldforschung ist nicht zu entnehmen, wann und wo welche Beschreibungen für die Quantifizierung insbesondere der bodeninneren Prozesse adäquat sind und wie das jeweilig zutreffende Relevanzverhältnis zwischen den verschiedenen beteiligten Prozessen ausfällt. Ein anschauliches Beispiel hierfür ist das Review von McGlynn et al. (2002), in

dem die langjährige Entwicklung des heutigen, noch immer unvollständigen Kenntnisstandes zur Abflussentstehung im vergleichsweise wenig komplexen, sehr kleinen und extrem detailliert untersuchten Maimai-Einzugsgebietes beschrieben wird.

Zu dieser Ungewissheit über das jeweils geeignete *perceptual model* kommen Auslassungen von Aspekten der natürlichen Variabilität im *conceptual model* hinzu, da diese Variabilitäten nicht oder nur mit unverhältnismäßig hohem Folgeaufwand mathematisch auszudrücken sind (Göttinger und Bárdossy 2008). Wie Morton (1993) allgemein für die mathematische Modellierung herausstellt, weichen Modellannahmen grundsätzlich und bekanntermaßen von einzelnen Aspekten des vollständigen wissenschaftlichen Kenntnisstandes ab. Es hänge vom Geschick des Modellierers ab, ob diese dennoch eine gewisse physikalische Plausibilität beinhalten und zu verlässlichen Ergebnissen führen. Einige Widersprüche zwischen wesentlichen Modellannahmen und dem Stand des Wissens in der Hydrologie werden von McDonnell (2003) zusammengefasst: die Darcy-Gleichung trifft, entgegen ihrer Anwendung in zahlreichen Modellen, nicht für die Hangskala und bei präferentiellen Fließwegen zu; die Topographie des Untergrundgesteins sowie die ggf. nur zeitweilige Konnektivität zwischen Hang- und Uferbereich bestimmen, obwohl in aller Regel vernachlässigt, die Abflussbildungsdynamik maßgeblich; die Aufenthaltszeiten von Wasser und gelösten Stoffen im Einzugsgebiet gehen mit den meisten Modellkonzepten nicht konform.

Die Prozessabstraktionsunsicherheit entspricht den weitgehend subjektiven Möglichkeiten des Modellentwicklers, seiner eigenen Prozessvorstellung folgend ein hydrologisches Modell aufzustellen, ohne damit mehr gegen den Stand des Wissens zu verstoßen als der Stand der Technik erlaubt. Gleiches gilt für die Prozessumsetzungsunsicherheit. Nicht die Theorie oder die Ergebnisse zahlreicher Sensitivitätsstudien bedingen primär wie ein Modell aufgesetzt wird, sondern pragmatische Aspekte wie Datenverfügbarkeit, Einsatzzweck und Rechenkapazität (Gupta et al. 2012). Ab welcher Einzugsgebietsgröße für einen Vorfluter eine explizite Wellenablaufberechnung erforderlich wird oder welcher Zusammenfassungsgrad für vermeintlich hydrologisch homogen reagierende Flächen akzeptabel ist, sind subjektive Entscheidungen des Modellanwenders, die dieser (bislang) weitgehend unabhängig von wissenschaftlichen Erkenntnissen trifft.

Technische Unsicherheit entsteht beim finalen Schritt der Codierung des *conceptual model* in das *procedural model*. Kavetski und Clark (2011) kritisieren die Verwendung unzureichender Lösungsstrategien für Differenzialgleichungen in den meisten gängigen hydrologischen Modellsystemen. Als Ursache für diese Nachlässigkeit vermuten sie das – im Vergleich zu vielen anderen Disziplinen – große Ausmaß der bislang beschriebenen Daten- und Modellunsicherheiten und die Annahme, dass technische Unsicherheiten dagegen vernachlässigbar seien.

Im Gegensatz zur Datenunsicherheit lassen sich Modellunsicherheiten (ausgenommen Aspekte der technischen Unsicherheit) nicht direkt quantifizieren. Der Fehler in der Niederschlagsinterpolation ist beispielsweise unter Rückgriff auf Sondermessnetze abschätzbar. Eine analoge Strategie ist für Modellfehler nicht sinnvoll: das aufwendigere ist nicht

zwangsläufig das realistischere Modell. Gupta et al. (2012) schlagen daher vor, der gängigen Bezeichnung Modellfehler grundsätzlich den Begriff Modelleignung vorzuziehen. Die Modellunsicherheit wird in aktuellen hydrologischen Arbeiten nicht als Abweichung von der Realität oder der als zutreffend postulierten Theorie definiert, sondern – mangels Alternativen – als Anteil der Simulationsunsicherheit.

2.2.3 Parameterunsicherheit

Daten- und Modellunsicherheit lassen sich zumindest ein Stück weit isoliert diskutieren, Parameterunsicherheit nicht. Laut Duden sind Parameter konstant gehaltene Größen in Gleichungen. Im einfachsten Fall handelt es sich dabei um Eigenschaften wie die Einzugsgebietsfläche, die mit vergleichsweise geringem Fehler messbar sind. Deren Unsicherheit entspricht der beschriebenen Eingangsdatenunsicherheit.

Die direkte Messung aller Parameterwerte eines hydrologischen Modells ist grundsätzlich nicht möglich. Aufgrund großer, nicht direkt quantifizierbarer Unterschiede zwischen den realen hydrologischen Prozessen und deren modelltechnischer Umsetzung repräsentieren zahlreiche Modellparameter keine realen, physikalisch messbaren Größen des hydrologischen Systems. Diese sogenannten „effektiven“ Parameter sollen stattdessen das Zusammenspiel vieler heterogener, teils unbekannter Gebietseigenschaften so zusammenfassen, dass die Simulationsgüte, welche die Übereinstimmung der gemessenen und simulierten Werte der Zielgröße quantifiziert, möglichst hoch ist. Ein Beispiel stellen die Bodenkennwerte der Richardsgleichung dar, die für große Teilflächen nicht mess- sondern nur kalibrierbar sind. In Abhängigkeit von der gewählten Kalibrierstrategie entsteht dabei Parameterunsicherheit als Resultat von Daten- und Modellunsicherheit.

Abbildung 2.1 soll die obige Aussage aus einer statistischen Perspektive veranschaulichen und konkretisieren. Dargestellt sind vier Versuche, die Zielgröße y mit Hilfe bekannter Werte von x_1 zu schätzen.

In den beiden oben dargestellten Teilabbildungen entspricht der angenommene funktionale Zusammenhang $f(x_1) = a \cdot x_1$ (durchgezogene Linie) exakt dem realen Zusammenhang $y = a \cdot x_1$. Im oben links dargestellten Idealfall sind zudem die Werte beider Variablen absolut sicher. Demzufolge reicht ein Datenpunkt, um den Wert des einzigen Modellparameters a eindeutig zu bestimmen. Da weder Modellstruktur- noch Datenunsicherheit vorliegt, entsteht weder Parameter- noch Vorhersageunsicherheit.

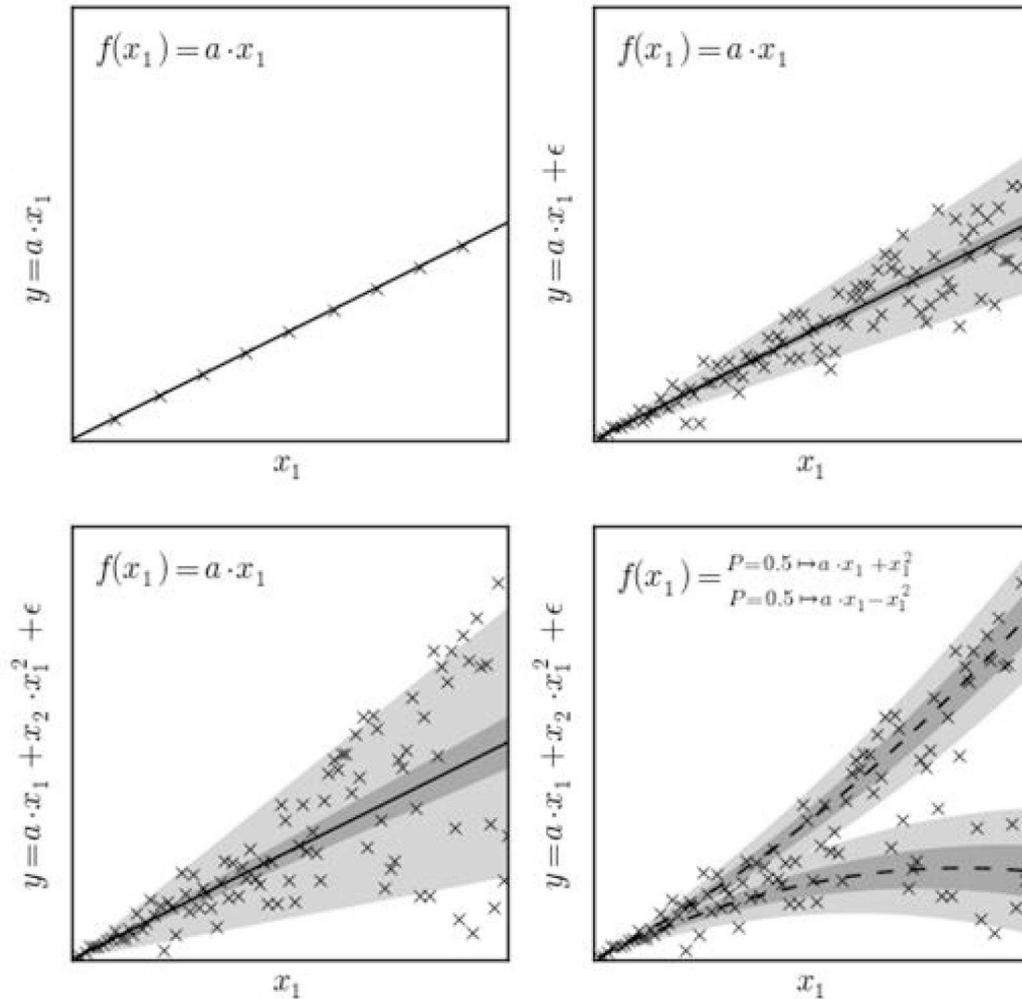


Abbildung 2.1: Wechselwirkung der Quellen der Simulationsunsicherheit. Jeweils links neben den Teilabbildungen findet sich der tatsächliche Zusammenhang zwischen der abhängigen Variable y , der beobachteten unabhängigen Variable x_1 sowie ggf. der unbeobachteten unabhängigen Variable x_2 und dem Fehlerterm ϵ ; innerhalb der Teilabbildungen die jeweils vermuteten funktionalen Zusammenhänge unter Vernachlässigung des Fehlerterms. Die schwarzen Linien entsprechen der jeweils optimalen Anpassung des Funktionsparameters a , der dunkel schattierte Bereich der Parameterunsicherheit und der hell schattierte Bereich der Vorhersageunsicherheit, allesamt ermittelt über die als Kreuze dargestellten gegebenen Beobachtungspaare.

Die Teilabbildung oben rechts veranschaulicht den Effekt von Datenunsicherheit durch Einführung der zufälligen Störgröße ϵ . Die Werte von y ergeben sich zu $y = a \cdot x_1 + \epsilon$; die Werte von ϵ sind heteroskedastisch normalverteilt entsprechend $\epsilon = NV(0, c \cdot x_1)$. Die stochastische Komponente ϵ bedingt, dass der Steigungskoeffizient a nicht eindeutig bestimmbar, sondern in Abhängigkeit von der Stichprobengröße nur mehr oder weniger genau abschätzbar ist. Diese Parameterunsicherheit drückt sich im dunkelgrau hinterlegten Unsicherheitsband aus. Davon ausgehend, dass die y -Werte nur wegen ihrer Datenfehler um den geschätzten Zusammenhang streuen, liegen die fehlerbereinigten y -Werte mit definierter

Wahrscheinlichkeit innerhalb dieses Bandes. Das hellgrau hinterlegte Vorhersageunsicherheitsband umfasst hingegen die „vollständigen“ y -Werte mit definierter Wahrscheinlichkeit. Es ist heranzuziehen, wenn Datenfehler von y keine Rolle spielen und die Streuung z. B. aus der Vernachlässigung anderer Einflussfaktoren resultiert. Mit zunehmender Stichprobengröße sinkt das Ausmaß der Parameterunsicherheit und steigt die Genauigkeit der geschätzten Vorhersageunsicherheit.

In der Teilabbildung unten links kommt zur oben beschriebenen Datenunsicherheit Modellunsicherheit hinzu. Der angenommene Zusammenhang ist weiterhin $f(x_1) = a \cdot x_1$, die y -Werte ergeben sich hingegen über $y = a \cdot x_1 + x_2 \cdot x_1^2 + \varepsilon$. Die Variable x_2 nimmt mit gleicher Wahrscheinlichkeit den Wert -1 oder 1 an und fungiert als Schalter: ein Teil der y -Werte wird erhöht, der andere verringert. Die zusätzliche Streuung durch Vernachlässigung des Terms $x_2 \cdot x_1^2$ führt zu einem Anstieg der Parameter- sowie der Vorhersageunsicherheit. Zudem zeigen die resultierenden Unsicherheitsbänder systematische Fehler. Die Verwendung des unzutreffenden Zusammenhangs $f(x_1) = a \cdot x_1$ macht a zu einem effektiven Parameter ohne reale Entsprechung. Dessen Unsicherheitsband lässt sich durch Erhöhung der Stichprobengröße zwar beliebig verringern, gibt die Lage der von der Datenunsicherheit bereinigten y -Werte jedoch grundsätzlich falsch an und verliert so an Aussagekraft. Weiterhin führt die Vernachlässigung des Terms $x_2 \cdot x_1^2$ zu einer gegenüber x_1 überproportionalen Zunahme der Streuung um die postulierte Gerade. Das entsprechend $\varepsilon = NV(0, c \cdot x_1)$ ermittelte Band der Vorhersageunsicherheit fällt im unteren Wertebereich daher zu weit und im oberen Wertebereich zu schmal aus.

Die Teilabbildung unten rechts zeigt, welcher Nutzen sich aus der Kenntnis des Modellfehlers ziehen lässt. Angenommen, der wahre Zusammenhang $y = a \cdot x_1 + x_2 \cdot x_1^2$ sei bekannt aber nicht deterministisch umsetzbar, da keine Daten für x_2 vorliegen, so findet sich eine stochastische Lösung des Problems durch die Formulierung der beiden Zusammenhänge $f(x_1) = a \cdot x_1 - x_1^2$ und $f(x_1) = a \cdot x_1 + x_1^2$ (gestrichelte Linien), denen jeweils die Wahrscheinlichkeit $P = 1/2$ zugeordnet wird. Für die Breite der Bänder der Parameterunsicherheit ergibt sich hieraus kein Vorteil, sie fällt insgesamt sogar deutlich größer als bei Verwendung des unzutreffenden Zusammenhangs aus (vgl. mit der Teilabbildung unten links). Allerdings entspricht die Lage der Bänder wieder der Lage der von der Datenunsicherheit bereinigten y -Werte. Zudem fallen die Bänder der Vorhersageunsicherheit etwas schmal aus und treffen in allen Bereichen von x_1 zu.

Im zuletzt diskutierten Beispiel (Abbildung 2.1, unten) nimmt die Parameterunsicherheit aufgrund eines symmetrischen Modellfehlers zu. Es besteht keine Abhängigkeit zwischen dem optimalen Wert von Parameter a und dem Wert der erklärenden Variablen x_1 . Dies ist bei hydrologischen Modellen und Modellkomponenten wie beispielsweise dem Muskingum-Verfahren zur Wellenablaufberechnung (McCarthy 1938) oftmals nicht der Fall. Einer der beiden Muskingum-Parameter ist die (konstante) Schwerpunktlaufzeit k . Da die mittlere Fließgeschwindigkeit des Wassers innerhalb eines typischen Gerinnes mit dem Durchfluss Q steigt, ist die tatsächliche Schwerpunktlaufzeit einer Hochwasserwelle bei

kleinen Q -Werten relativ groß und bei großen Q -Werten relativ klein. k sollte somit in Abhängigkeit vom (erwarteten) Wertebereich einer zu simulierenden Hochwasserwelle bestimmt werden. Bei derartigen unsymmetrischen Modellfehlern kann die Parameterunsicherheit somit um die subjektive Komponente erweitert sein, in Abhängigkeit der jeweiligen Rahmenbedingungen zwischen verschiedenen Parameterwerten wählen zu müssen. Entsprechend groß ist die Simulationsunsicherheit im Extrapolationsbereich.

Ein wichtiger Aspekt der Parameterunsicherheit ist, dass diese nicht nur von der Auslassung oder fehlerhaften Umsetzung von Prozessen, sondern auch von der Komplexität des Modells an sich abhängt, wie in Abbildung 2.2 veranschaulicht. Angenommen, zwischen den Größen x und y bestehe die Beziehung $f(x) = 100 \cdot x^1 - 2 \cdot x^2 + 0,01 \cdot x^3$, wobei Messwerte von y durch den additiven Messfehler $\varepsilon = NV(0, 5.000)$ zufällig verfälscht seien. Zwei Modelle stehen zur Auswahl: das zutreffende Modell $f(x) = a_1 \cdot x^{a_2} - b_1 \cdot x^{b_2} + c_1 \cdot x^{c_2}$ sowie das vereinfachte Modell $f(x) = a_1 \cdot x^{a_2}$. Die blaue durchgezogene Linie zeigt die Fehlerquadratanpassung des zutreffenden Modells bei einer sehr großen Anzahl von Messungen; die rote diejenige des vereinfachten Modells. Die gestrichelten Linien markieren die 5%- und 95%-Quantile der Parameterunsicherheit bei einer Stichprobengröße von 100 Wertepaaren.

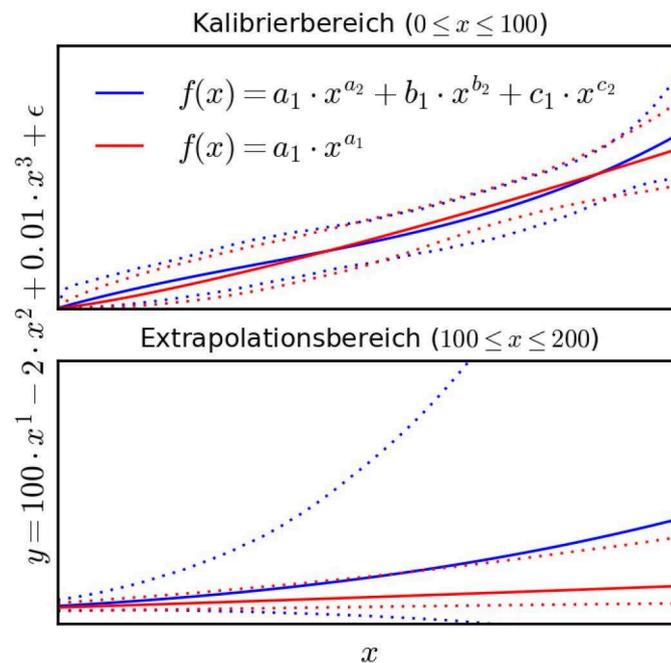


Abbildung 2.2: Parameterunsicherheit unterschiedlich komplexer Modelle. Links neben den Teilabbildungen findet sich der tatsächliche Zusammenhang zwischen der abhängigen Variable y , und den unabhängigen Variablen x_1 , x_2 und x_3 sowie dem Fehlerterm ε ; innerhalb der oberen Teilabbildungen die beiden angenommenen funktionalen Zusammenhänge. Die durchgezogenen Linien entsprechen der optimalen Anpassung der Funktionsparameter bei unbegrenzter Stichprobengröße im Kalibrierbereich, die gestrichelten Linien dem zu erwartenden 5%- bzw. 95%-Quantil der Parameterunsicherheit bei einer begrenzten Stichprobengröße von 100 Wertepaaren.

Im Kalibrierbereich zeigen sich gewisse Abweichungen zwischen der Idealanpassung des vereinfachten Modells und der des zutreffenden Modells. Kommt die Parameterunsicherheit zum Tragen, gehen diese weitgehend verloren. Ohne Vergrößerung des Stichprobenumfangs oder Verringerung der Messfehler zeigt das zutreffende Modell keinen größeren Nutzen als das vereinfachte Modell.

Der große Unterschied beider Modelle wird im Extrapolationsbereich deutlich. Das vereinfachte Modell – nur für den Kalibrierbereich bestmöglich angepasst – weicht gravierend vom wahren Zusammenhang ab. Noch gravierender ist allerdings die Zunahme der Parameterunsicherheit des zutreffenden Modells. Es ist zu erwarten, dass das zutreffende Modell infolge seiner unsicheren Parameterschätzung größere Vorhersagefehler im Extrapolationsbereich liefert als das vereinfachte Modell. Zentrale Ursache hierfür ist der Teilterm $0,01 \cdot x^3$, der erst im größeren Wertebereich gegenüber den anderen Teiltermen an Dominanz gewinnt. Dies ist mit hydrologischen Systemen vergleichbar, in denen je nach Randbedingung verschiedene Prozesse dominieren. Ein zentraler Unterschied gegenüber mehrdimensionalen hydrologischen Systemen ist, dass der Extrapolationsbereich für diese weniger leicht ersichtlich ist. Die Zielgröße kann innerhalb des Kalibrierbereichs liegen, obwohl dieses für die Wertekombination der erklärenden Variablen nicht der Fall ist. Wann mit erhöhter Extrapolationsunsicherheit zu rechnen ist, ist somit oftmals unklar.

Seit den 1970er und 1980er Jahren wurde versucht, die der Kalibrierung geschuldete Parameterunsicherheit durch physikalisch-basierte Modellkonzepte und hoher räumlicher sowie zeitlicher Auflösung der Simulationsmodelle beizukommen. Abbott et al. (1986) formulierten die Hoffnung, dass die Parameter solcher Modelle physikalisch interpretierbar seien. Daraus ergäbe sich zum einen eine direkte Messbarkeit der Parameterwerte, was die Parameterunsicherheit auf Datenunsicherheit reduzierte. Zum anderen wären – im Gegensatz zu überwiegend kalibrierten Parameterwerten – z. B. im Kontext der Landnutzungsänderung verlässliche Extrapolationen möglich. Seit Ende der 1980er Jahre kamen vermehrt Zweifel an dieser Strategie auf. So argumentierte Beven (1989), dass physikalisch-basierte hydrologische Modelle auf physikalische Gesetzmäßigkeiten der Punktskala zurückgreifen und diese – ohne theoretisch fundierte Transformation – in der Skala der Modellrasterfläche anwenden. Das physikalisch-basierte hydrologische Modell greife auf richtige, aber für das zu lösende Problem ungeeignete physikalische Gleichungen zurück und das mache es zu einem Spezialfall eines konzeptionellen Niederschlag-Abfluss-Modells.

In der aktuellen hydrologischen Forschung wird u. a. aufgrund dieser theoretischen Bedenken häufig auf Modellgleichungen mit geringer Parameteranzahl gesetzt (siehe z. B. Perrin et al. 2003). Mindestens ebenso wichtig ist aber ein weiterer Aspekt der Unsicherheit der Parameter: die Identifizierbarkeit der optimalen Werte auf Grundlage der Simulationsgüte.

Zum einen besteht hierbei das praktische Problem, dass insbesondere komplexe, nichtlineare Modelle komplizierte Fehleroberflächen mit zahlreichen lokalen Optima mit sich bringen. Gradientenbasierte Suchalgorithmen liefern häufig nur eines dieser lokalen Optima. Diese

Erkenntnis veranlasste Duan et al. (1992) einen auf evolutionäre Zufallsprozesse angelegten Suchalgorithmus zu entwickeln. Derartige globale Suchalgorithmen verringern zwar die Wahrscheinlichkeit der suboptimalen Parameteridentifikation, können diese für komplexe hydrologische Modelle jedoch nicht gänzlich ausschließen.

Zum anderen stellt sich die Frage, ob es überhaupt sinnvoll ist, von einem globalen Optimum der Parameterwerte auszugehen. Nach Beven (2006a) besteht in der hydrologischen Modellierung prinzipiell das Problem der Äquifinalität: unterschiedliche Parametersätze und sogar unterschiedliche Modelle können im Kalibrierzeitraum ähnliche Simulationsergebnisse zur Folge haben; es ist nicht ersichtlich, welcher dieser Parametersätze oder welches dieser Modelle unter leicht geänderten Bedingungen der bzw. das Beste ist. Dieser Sichtweise folgend ist eine starke Eingrenzung der Parameterunsicherheit nur aufgrund fragwürdiger statistischer Annahmen möglich und letztlich unrealistisch. Als angemessenere Lösungsstrategie propagiert Beven (2006a) daher das Mitführen einer großen Menge akzeptabler Parameter-Modell-Kombinationen im Modellierungsprozess. Nach dieser Sichtweise nimmt Parameterunsicherheit nicht beliebig mit Zunahme des Stichprobenumfangs ab und lässt sich nicht rein mathematisch-objektiv beschreiben.

3 Grundlagen dieser Arbeit

3.1 Framework HydPy

Die Bearbeitung vieler modellstruktureller Problem- und Fragestellungen setzt softwaretechnische Flexibilität voraus. Die Anbieter etablierter hydrologischer Modelle zielen dagegen stärker auf die Anwendungssicherheit der bereitgestellten Software ab. Sowohl das Swedish Meteorological and Hydrological Institute (SMHI) als auch die LARSIM-Entwicklergemeinschaft stellen HBV bzw. LARSIM nur als bereits kompilierte, ausführbare Dateien zur Verfügung. Damit lassen sich Methodenkopplungen – beispielsweise mit anderen Modellen, aber auch mit Algorithmen zur Parameteroptimierung oder Zustandsnachführung – nur umständlich und rechenzeitintensiv umsetzen. Hypothesentests zur Modellunsicherheit durch Modifikation der Prozessgleichungen sind unmöglich.

Vor diesem Hintergrund wurde das Modellframework HydPy entwickelt (Tyralla und Schumann 2013). Anfangs als rein wissenschaftliches Werkzeug für die vorliegende Dissertation gedacht, erfuhr das Framework im Rahmen des Seamless Prediction Projektes der Bundesanstalt für Gewässerkunde (Tyralla und Schumann 2016b) zahlreiche auf die operationelle Tauglichkeit ausgerichtete Erweiterungen, insbesondere hinsichtlich Rechengeschwindigkeit und Benutzerfreundlichkeit. Aktuell wird das Softwaredesign und die Dokumentation auf die für Anfang 2017 geplante Online-Bereitstellung unter dem Python Package Index abgestimmt.

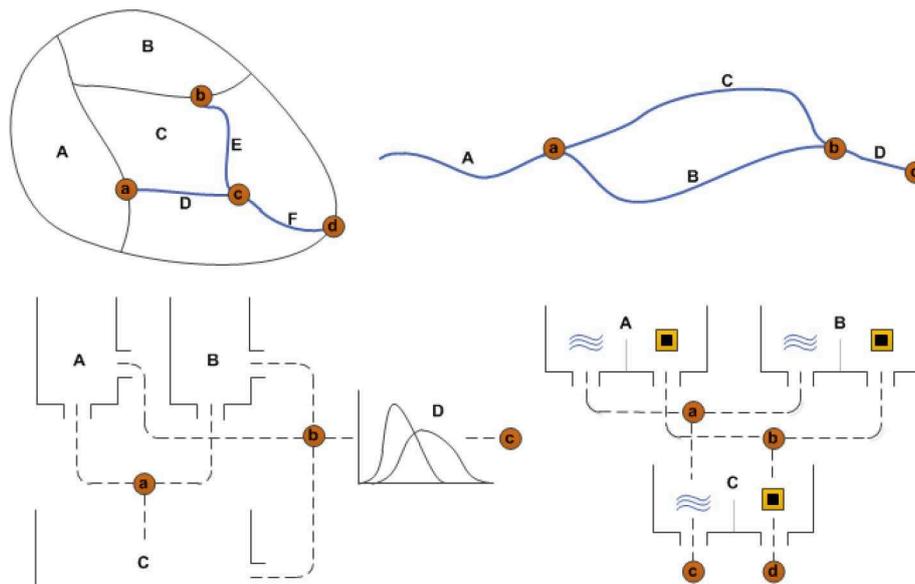


Abbildung 3.1: Mögliche Modellnetzwerke in HydPy.

Aus technisch-wissenschaftlicher Perspektive erscheinen folgende Eigenschaften des Frameworks relevant:

- Wie bei anderen modernen hydrologischen Modellen und Modell-Frameworks (z. B. Gattke 2006) erfolgt die Programmierung von HydPy objektorientiert. Dies vereinfacht die Strukturierung und Pflege des Quelltextes im Vergleich zur rein funktionalen Programmierung.
- In Abgrenzung zum Framework nach Gattke (2006) erfolgte die Umsetzung von HydPy nicht in einer maschinennahen Programmiersprache (C++), sondern in der Skriptsprache Python (Ernesti und Kaiser 2008). Freie Verfügbarkeit, einfache Syntax, geringer Programmieraufwand und zahlreiche wissenschaftliche Zusatzmodule sind zentrale Gründe dafür, dass Python in Praxis und Forschung zunehmend Verbreitung findet (z. B. im Geoinformationssystem ArcGIS, esri Deutschland 2015).
- Mit der dynamischen Programmiersprache Python als Grundlage unterstützt HydPy die interaktive Ausführung. Nach erfolgter Initialisierung hat der Anwender vollen Zugriff auf sämtliche Methoden und Attribute sowohl des Frameworks als auch der ausgewählten Modelle. Dies ermöglicht feingesteuerte Methodenkopplungen (z. B. mit Optimierungsalgorithmen) ohne Modifikation des HydPy-Quelltextes und unter Vermeidung von zeitaufwendigen Festplattenzugriffen und Neuinitialisierungen zum Datenaustausch.
- Gegenüber maschinennahen Programmiersprachen weist Python eine schlechte Laufzeiteffizienz auf. Daher bietet HydPy die Möglichkeit, in Python programmierte und erfolgreich getestete Modelle bzw. Modellkomponenten weitgehend automatisiert in die laufzeiteffizientere Programmiersprache Fortran zu übersetzen, zu kompilieren und einzubinden.
- Hydrologische Modellframeworks treffen teilweise restriktive Annahmen hinsichtlich der implementierbaren Modellstruktur (Fenicia et al. 2011). So ist bspw. FUSE (Clark et al. 2008) für die Strukturanalyse einfacher zweischichtiger konzeptioneller Speichermodelle konzipiert und CMF (Kraft et al. 2011) zielt auf die räumlich differenzierte Simulation mit dem Finite-Volumen-Ansatz von Qu und Duffy (2007) ab. Bei der Planung von HydPy stand der Wunsch im Vordergrund, in mesoskaligen Einzugsgebieten verschiedene Modelle oder Modellkomponenten unterschiedlicher Konzeption einfach und rechenzeiteffizient kombinieren zu können. Die zentrale hierfür getroffene Einschränkung ist, dass ausschließlich unidirektionale Flüsse zwischen einzelnen Modellinstanzen erlaubt sind und das Gleichungssystem jeder Modellinstanz – vom Zufluss der jeweiligen Oberlieger abgesehen – separat gelöst werden kann. Abbildung 3.1 veranschaulicht mögliche Verknüpfungen von Modellen und Modellkomponenten in HydPy, für Details siehe Tyralla und Schumann (2013).

3.2 Modelle

HydPy umfasst mehrere Modelle und Modellkomponenten. In der vorliegenden Dissertation kommen drei davon zum Einsatz: Die Modifikation der Horton-Infiltrationsgleichung nach Bauer (1974) dient als kleine Modellkomponente unter anderem zur Veranschaulichung und Plausibilitätsprüfung der in Abschnitt 4.6 eingeführten Disaggregierungs-Methodik. Als vollständiges Wasserhaushaltsmodell für Methodenanwendungen unter Realbedingungen dient primär HBV₉₆ (Lindström et al. 1997). Zum Vergleich wird teilweise das Wasserhaushaltsmodell LARSIM_{ME} herangezogen (Bremicker 2000).

3.2.1 Horton-Infiltration

Als eine der frühesten Gleichungen der modernen Hydrologie gilt der Infiltrations-Ansatz nach Horton (Horton 1939). Sie beschreibt die Abnahme der Infiltrationskapazität INF_K beginnend von der initialen Infiltrationskapazität INF_A zu Ereignisbeginn bis zur Endinfiltrationskapazität INF_E als exponentiellen Rückgang:

$$INF_K(t) = INF_E + (INF_A - INF_E) \cdot e^{-k \cdot t} \quad 3.1$$

Effektivniederschlag N_{EFF} tritt auf, wenn die Niederschlagsintensität N die Infiltrationskapazität überschreitet:

$$N_{EFF}(t) = \max(N(t) - INF_K(t), 0) \quad 3.2$$

In Abgrenzung zu anderen postulierten Mechanismen der (oberflächlichen) Direktabflussentstehung, wie dem variablen Sättigungsflächenansatz (Dunne und Black 1970), ist die Horton-Gleichung ein rein intensitätsabhängiger Ansatz. Zur Gültigkeit bzw. Relevanz des Ansatzes siehe die Diskussionen in Beven (2006c).

Gleichung 3.1 beschreibt lediglich den Rückgang der Infiltrationskapazität während eines Niederschlagsereignisses. Der zeitliche Ablauf der Wiedereinstellung der Anfangsinfiltrationskapazität zwischen Ereignissen bzw. innerhalb intermittierender Niederschläge bleibt unberücksichtigt, was die Anwendbarkeit des Horton-Ansatzes einschränkt.

Bauer (1974) löst dieses Problem durch Umformulierung des Horton-Ansatzes in ein Speichermodell:

$$\frac{dS}{dt} = INF(t) - LOSS(t) \quad 3.3$$

Er zeigt, dass Gleichung 3.3 bei geeigneter Definition der tatsächlichen Infiltration INF und des „Verlustes“ $LOSS$ bei durchgehender Beregnung hoher Intensität ein zu Gleichung 3.1 analoges Systemverhalten aufweist. Darüber hinaus regeneriert sich die Infiltrationskapazität während Niederschlagspausen infolge der Speicherentleerung durch Erhaltung des Verlustterms bei gleichzeitigem Ausbleiben der tatsächlichen Infiltration.

Bauer (1974) gibt zwar einen Lösungsansatz für Gleichung 3.3 an. In der vorliegenden Arbeit wird die Differenzialgleichung jedoch mit Hilfe allgemeiner numerischer Integrationsalgorithmen gelöst und daher wie folgt ausformuliert:

Die Infiltrationskapazität berechnet sich aus der maximalen Infiltrationskapazität INF_M sowie der Relation von Speicherinhalt S und Maximalspeicherung S_M :

$$INF_K(t) = INF_M \cdot \left(1 - \frac{S(t)}{S_M}\right) \quad 3.4$$

Der Effektivniederschlag ergibt sich analog zu Gleichung 3.2 und die tatsächliche Infiltration zu:

$$INF(t) = \max(INF_K(t), N(t)) \quad 3.5$$

Der „Verlust“ des Speicherinhaltes ergibt sich ebenfalls entsprechend einer Maximalrate ($LOSS_M$) und der relativen Speicherfüllung:

$$LOSS(t) = LOSS_M \cdot \frac{S(t)}{S_M} \quad 3.6$$

Das Horton- und das Bauer-Modell zeigen identisches Systemverhalten bei großer Niederschlagsintensität, wenn folgende Relationen der Modellparameter eingehalten werden.

Die Infiltrationskapazität des Horton-Modells zu Ereignisbeginn entspricht der Infiltrationskapazität des Bauer-Modells bei leerem Speicher:

$$INF_M = INF_A \quad 3.7$$

Nach langer Beregnung hoher Intensität nähern sich sowohl die Infiltration als auch der Verlust einem konstanten Wert an. Durch Gleichsetzen der Gleichungen 3.4 und 3.6 sowie der Endinfiltrationskapazität des Horton-Modells resultiert aus algebraischer Umformung:

$$LOSS_M = \frac{INF_A \cdot INF_E}{INF_A - INF_E} \quad 3.8$$

Durch zeitliches Ableiten von Gleichung 3.1 sowie von Gleichung 3.4 für eine große Niederschlagsintensität, Einsetzen von $t = 0$ bzw. $S = 0$, Gleichsetzen der resultierenden Terme $-k \cdot (INF_A - INF_A)$ sowie $-INF_A^2/S_M$ und Umformen resultiert:

$$S_M = \frac{INF_A^2}{k \cdot (INF_A - INF_E)} \quad 3.9$$

3.2.2 HBV₉₆

HBV ist eines der weitverbreitetsten hydrologischen Modelle im europäischen Raum. Entwickelt wurde es Anfang der 1970 Jahre vom Swedish Meteorological and Hydrological Institute (SMHI). Anlass war die Optimierung der Wasserkraftnutzung mit einem einfachen, problem- und datenadäquaten Tageswertmodell (Bergström und Forsman 1973). Details zur ursprünglichen Modellkonzeption sowie zur mit der Zeit zunehmenden Diversität der Anwendungszwecke finden sich in Bergström (1995). Verschiedene Arbeitsgruppen haben alternative HBV-Varianten entwickelt (z. B. Hundecha und Bárdossy 2004; Seibert und Vis 2012).

Ausgangspunkt für die vorliegende Arbeit ist die umfassende Überarbeitung des HBV-Konzeptes durch Lindström et al. (1997), genannt HBV₉₆. Bei dieser wurde beispielsweise eine Interzeptionsroutine in die Modellgleichungen aufgenommen und die Anzahl der Abflusskomponenten von drei auf zwei reduziert. Zudem wurde eine optionale, alternative Umsetzung des HBV-Sättigungsflächenansatzes implementiert (Bergström et al. 1997).

Das SMHI vertreibt HBV₉₆ nur als ausführbare Datei. Zur wissenschaftlichen Analyse und Weiterentwicklung bestand daher die Notwendigkeit zur Nachprogrammierung entsprechend der Dokumentationen SMHI (2009) und SMHI (2011). Dies erfolgte in Abstimmung und unter Hilfestellung des SMHI. Die resultierende HBV₉₆-Implementierung in HydPy kann für die Zwecke der vorliegenden Arbeit als ausreichend originalgetreu betrachtet werden (Tyralla und Schumann 2013).

Abbildung 3.2 stellt die Anordnung der berücksichtigten Zustandsgrößen (Speicher) und deren Verknüpfung durch Flussgrößen (Pfeile) dar. Anhand dessen wird hier ein grober Einblick in die Modellkonzeption gegeben. Detaillierte Beschreibungen der Prozessumsetzungen finden sich in SMHI (2011) und Tyralla und Schumann (2013) sowie in Abschnitt 4.7.

Nach der HBV-Konzeption wird das zu modellierende Einzugsgebiet in Teilgebiete aufgeteilt. Jedes Teilgebiet wird in Zonen differenziert, deren räumliche Anordnung unberücksichtigt bleibt (*semi-distributed*). Üblicherweise erfolgt die Ausweisung der verschiedenen Zonen über die Landnutzung und die Höhenstufe.

Zonen können vom Typ *forest*, *field*, *glacier* und *internal lake* sein. *forest*- und *field*-Zonen sind strukturell identisch, weisen i. d. R. aber unterschiedliche Parameterwerte für die maximale Interzeptionskapazität (*ICMAX*) und den Grad-Tag-Faktor (*CFMAX*) auf. Üblicherweise wird *ICMAX* für *forest*-Zonen aufgrund größerer Blattflächenindizes höher und *CFMAX* aufgrund der damit einhergehenden Beschattungszunahme kleiner angesetzt.

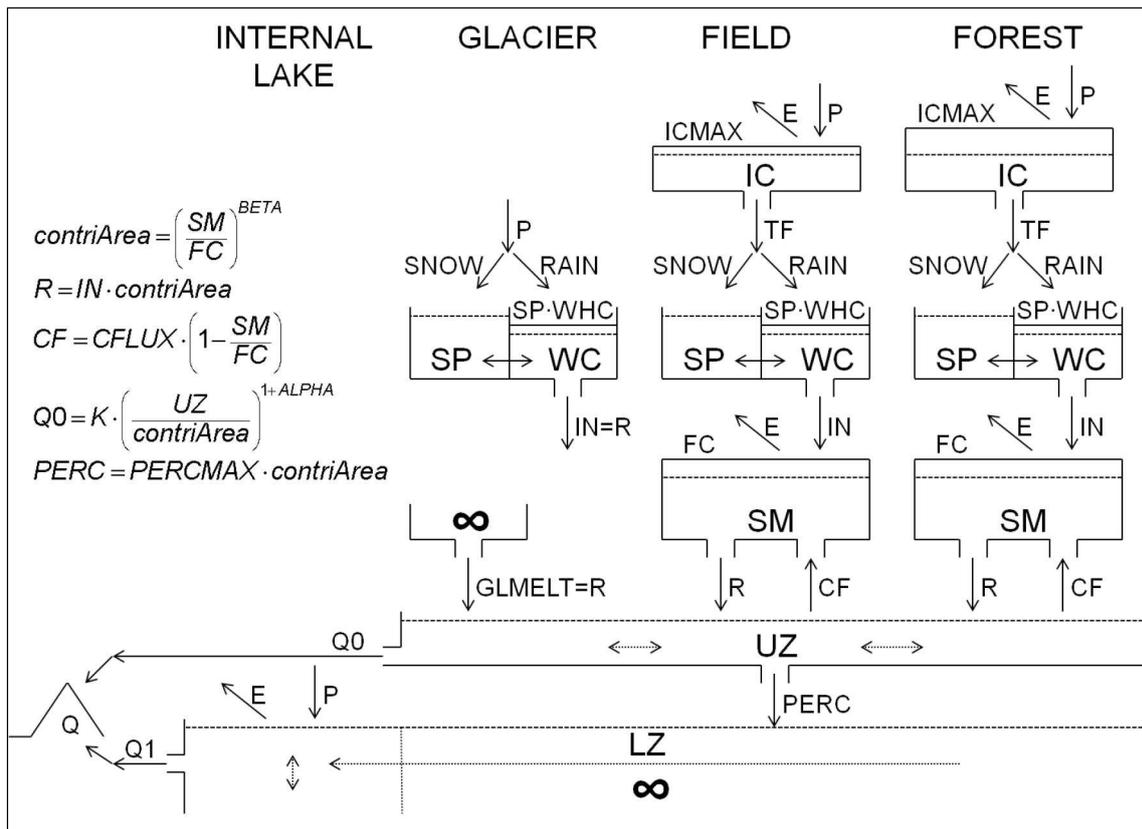


Abbildung 3.2: Skizze der Prozessabstraktion nach HBV₉₆.

glacier -Zonen fehlt sowohl das Interzeptions- als auch das Bodenmodul. Stattdessen wird die Schneeschmelze des Schneemoduls durch Gletscherschmelze ergänzt. Diese berechnet sich ebenfalls nach dem Grad-Tag-Verfahren, schöpft im Gegensatz zum Schneemodul jedoch aus einem unbegrenzten Reservoir.

Die genannten *Landzonen* entwässern in den teilgebietsweiten oberen Grundwasserspeicher (*UZ*). Durch diesen perkoliert (*PERC*) ein Anteil in den tiefen Grundwasserspeicher (*LZ*). *internal lake*-Zonen sind dagegen als Grundwasserseen aufzufassen. Über diese findet ein direkter Niederschlagseintrag (*P*) in *LZ* sowie ein Verdunstungsverlust (*E*) aus *LZ* statt. Damit auch in ausgeprägten Dürrephasen Seeverdunstung auftritt, kann *LZ* negative Werte annehmen.

Zur Abgrenzung von vergleichbaren Modellen sei auf die folgenden Besonderheiten von HBV₉₆ hingewiesen:

- Temperatur und Niederschlag liegen als teilgebietsweite Eingangsdaten vor. Sie werden gemäß einstellbarer Höhengradienten für die einzelnen Zonen modifiziert.
- Die potenzielle Verdunstung wird für jeden Zeitschritt indirekt bestimmt. Direkt anzugeben sind Normwerte der potenziellen Verdunstung (gemittelter Jahresgang). HBV₉₆ korrigiert diese auf Basis der jeweils aktuellen Abweichung der tatsächlichen Temperatur von einer ebenfalls extern zu bestimmenden Normtemperatur.
- Niederschlag kann sowohl in ausschließlich flüssiger oder fester Form als auch als Mischniederschlag berücksichtigt werden.
- Der obere Grundwasserspeicher *UZ* hat zusätzlich die Funktion des Direktabflussspeichers inne. Zudem ist sein Systemverhalten aufgrund des Ansatzes von Bergström et al. (1997) vom Füllungsstand der vorgeschalteten Bodenspeicher (*SM*) abhängig (die entsprechenden Gleichungen sind in Abbildung 3.2 aufgeführt). Damit einhergehende Probleme sowie ein Alternativansatz werden in Tyralla und Schumann (2016b) diskutiert.
- Sowohl die schnelle (*Q0*) als auch die langsame Abflusskomponente (*Q1*) werden durch einen symmetrischen Dreiecks-Unit-Hydrograph zeitlich verzögert.
- Der Wellenablauf im Gerinne wird als reine Translation berechnet, die um eine einfache Abflachungsfunktion ergänzt werden kann.

Die genannten Besonderheiten lassen eine besondere Eignung von HBV₉₆ für die in dieser Arbeit angestellten Stundenwert-Simulationen fraglich erscheinen. Die folgenden Methodenevaluierungen bleiben hiervon jedoch unberührt. Für eine kritische Diskussion des HBV-Konzeptes siehe Tyralla und Schumann (2016b).

3.2.3 LARSIM_{ME}

Das hydrologische Modell LARSIM (Bremicker 2000) findet häufig in Deutschland Anwendung. Es ist ein HBV vergleichbares Speichermodell.

Wie für HBV war für LARSIM aufgrund der Nichtverfügbarkeit des Quelltextes eine Neuprogrammierung erforderlich, die durch Herrn Bremicker (Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg) und Frau Luce (Hydron GmbH) Unterstützung fand. Die hieraus hervorgegangene Implementierung in HydPy umfasst nur diejenigen Modellkomponenten, welche in der für das KLIWAS-Projekt (BMVI 2015) aufgestellten LARSIM-Applikation „Mitteleuropa“ zum Einsatz kommen. Dies sei im Folgenden durch die Abkürzung LARSIM_{ME} vermerkt.

Die Veröffentlichung einer detaillierten Dokumentation der Implementierung von LARSIM_{ME} in HydPy steht noch aus; es sei auf Bremicker (2000) sowie die LARSIM-Hilfe verwiesen. Die Übereinstimmung zu den Simulationsergebnissen der Original-Implementierung von LARSIM reicht aus, um von einer fehlerfreien Programmierung ausgehen zu können.

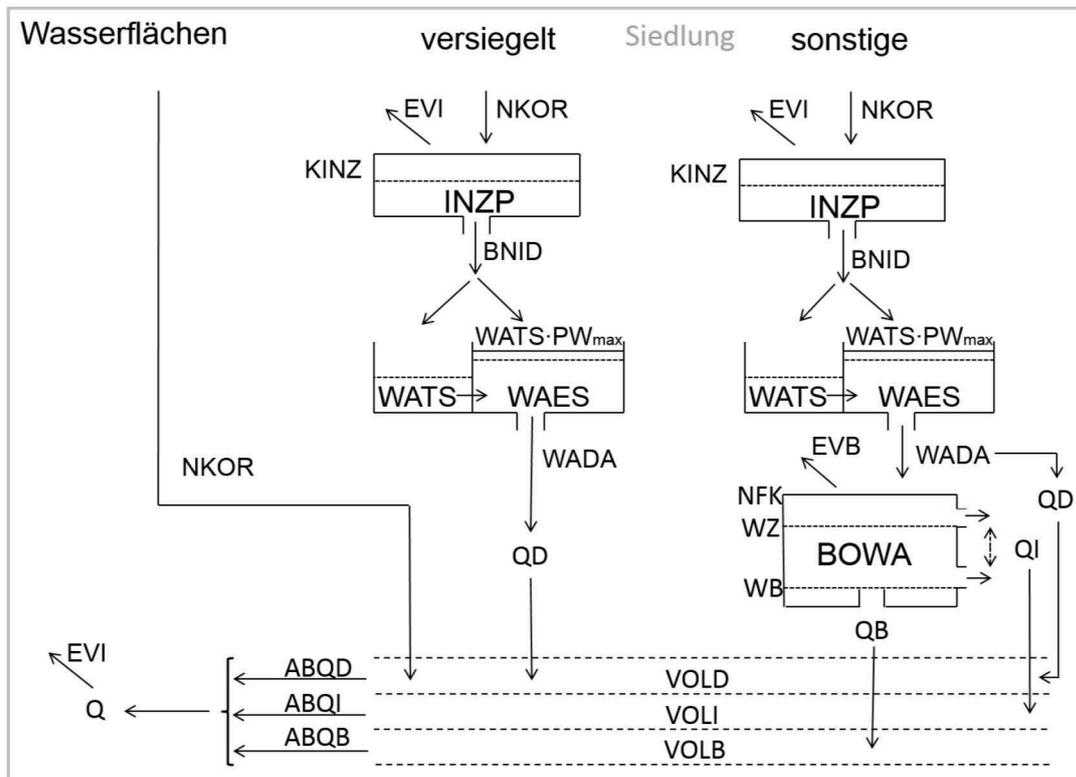


Abbildung 3.3: Skizze der Prozessabstraktion nach LARSIM_{ME}.

Die grundsätzliche Differenzierung in Teilgebiete und Zonen ist HBV₉₆ vergleichbar (siehe Abbildung 3.3), wobei LARSIM-Teilgebiete häufig in Rasterform aufgesetzt werden. Zonen werden zumeist nicht nach der Höhenstufe ausgewiesen, sondern nach einer größeren Anzahl von Landnutzungsklassen.

Bis auf *Wasserfläche*, *versiegelt*, und *Siedlung* sind alle Landnutzungsklassen strukturell identisch. Unterschiede bestehen in den tabellierten landnutzungsspezifischen Parameterwerten, beispielsweise für die auf den Blattflächenindex bezogene Interzeptionskapazität (*HINZ*). Zonen des Typs *versiegelt* fehlt das Bodenmodul. *Siedlung* setzt sich aus *versiegelt* und anderen Landnutzungsklassen zusammen. In Zonen des Typs *Wasserfläche* erreicht fallender Niederschlag direkt den Gebietspeicher für Direktabfluss (*QD*), Seeverdunstung (*EVI*) wird flächenanteilig vom Gesamtgebietsabfluss (*Q*) abgezogen.

Gemeinsam ist LARSIM und HBV, dass die Abflussbildung tendenziell zonal differenziert, die Abflusskonzentration dagegen über teilgebietsweite Speicher repräsentiert wird. In folgenden Punkten unterscheidet sich LARSIM_{ME} deutlich von HBV₉₆:

- Die potenzielle Verdunstung berechnet sich nach dem in ATV-DVWK (2002) beschriebenen Ansatz von Wendling. Ansonsten fallen die Anpassungsmöglichkeiten der meteorologischen Eingangsgrößen deutlich einfacher aus.
- Niederschlag kann nur in fester oder flüssiger Form, nicht aber als Mischniederschlag fallen.
- Die Interzeptionsmodul entspricht dem von HBV₉₆. Dessen Parameter variieren aber monatsweise, um jahreszeitliche Unterschiede der Vegetation abzubilden.
- Das Schneemodul entspricht ebenfalls weitgehend dem von HBV₉₆ (Grad-Tag-Verfahren kombiniert mit Rückhalt von flüssigem Wasser im Eisanteil der Schneedecke). Allerdings ist ein (Wieder-)Gefrieren des flüssigen Schneeanteils ausgeschlossen.
- Das Bodenmodul fällt deutlich komplizierter aus. Die Bodenverdunstung folgt der von Disse (1995) modifizierten Abminderungsfunktion nach Minhas et al. (1974). Während HBV₉₆ die Abflussbildung über einen nichtlinear an die Bodenfeuchte gekoppelten Abflussbeiwert modelliert, greift LARSIM_{ME} auf eine Modifikation des Xinanjiang-Modells (Ren-Jun 1992) zurück. Hierbei werden die Komponenten Basisabfluss (QB) und langsamer Interterflow (QI) über Linearspeicher-Ansätze und der schnelle Interflow über einen nichtlinearen Speicher-Ansatz berechnet. Die Direktabflusskomponente (QD) ergibt sich nach einem nichtlinearen Sättigungsflächen-Ansatz. Ob einzelne Abflusskomponenten aktiv sind, ist von verschiedenen Grenzwerten abhängig.
- Während HBV₉₆ die Abflusskonzentration mittels einer nichtlinearen (für UZ) und einer i. d. R. linearen Abhängigkeit (für LZ) sowie einem Unit-Hydrograph umsetzt, stellt LARSIM_{ME} hierfür einen Linearspeicher je Abflusskomponente bereit ($VOLB$, $VOLI$, $VOLD$).
- Abfluss von Wasserflächen trägt nach HBV₉₆ zur langsamen ($Q1$), nach LARSIM_{ME} zur schnellen Abflusskomponente (QD) bei.
- Beim Wellenablaufverfahren nach Williams (1969) handelt es sich um einen Einzellinearspeicher-Ansatz mit zeitvariabler Schwerpunktlaufzeit, die aus der aktuellen Gerinnespeicherung unter Annahme eines Trippel-Trapez-Profils abgeleitet wird.

3.3 Untersuchungsgebiete

Alle Untersuchungsgebiete und deren Konfigurationen sind dem operationellen HBV-Vorhersagemodell der Bundesanstalt für Gewässerkunde für den Rhein entnommen (Eberle 2007). Zur Festlegung des Gebietsauslasses dient der Pegel Lobith an der niederländisch-deutschen Staatsgrenze. Das so definierte Rheingebiet ist in 134 Teilgebiete aufgeteilt. Diese sind jeweils durch Verschneidung der vier Landnutzungen *forest*, *field*, *glacier* und *internal lake* (siehe Abschnitt 3.2.2) mit Höhenstufen von je 100 m zonal differenziert.

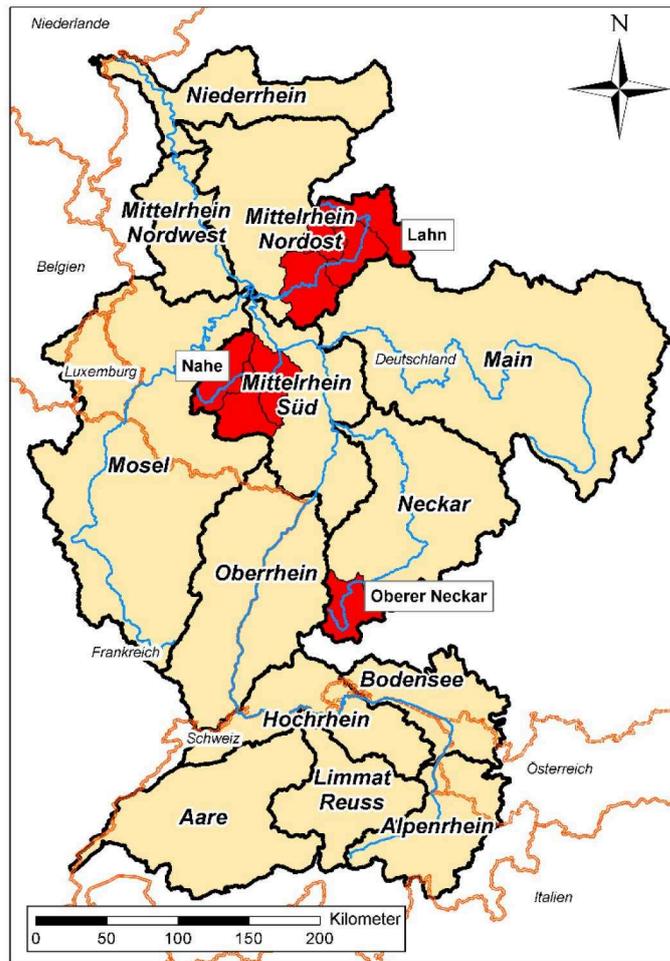


Abbildung 3.4: Lage der Untersuchungsgebiete im Einzugsgebiet des Rheins.

Ausgewählt wurden der obere Neckar bis unterhalb Pegel Horb, die Lahn bis Pegel Kalkofen und die Nahe bis unterhalb Pegel Grolsheim (Abbildung 3.4). Diese bieten sich aufgrund ihrer überschaubaren Größe (1.499 km², 5.298 km² sowie 4.013 km²) und einem geringen Ausmaß anthropogener Steuerung (z. B. durch Talsperren oder Einleitungen) als Modellgebiete an. Zudem ist von einer relativ geringen Beeinträchtigung der Abflussmessung (z. B. durch Staustufen oder Rhein-Rückstau) auszugehen (mündliche Mitteilung von Herrn Meißner, Bundesanstalt für Gewässerkunde).

Modelltechnisch wird der obere Neckar bis unterhalb Pegel Horb als nicht in weitere Teilgebiete differenziertes Kopfgebiet repräsentiert (Abbildung 3.5). Dadurch greifen bis zum Gebietsauslass keine Wellenablauf-Verfahren in die Simulation ein, was die Analyse vereinfacht. Die Lahn bis Pegel Kalkofen (Abbildung 3.6) und die Nahe bis Pegel Grolsheim (Abbildung 3.7) sind dagegen in vier bzw. drei Teilgebiete differenziert, welche durch drei bzw. zwei Routing-Strecken miteinander verknüpft sind. Je Teilgebiet liegen 10 bis 14 Zonen vor, die ausschließlich vom Typ *forest* oder *field* sind.

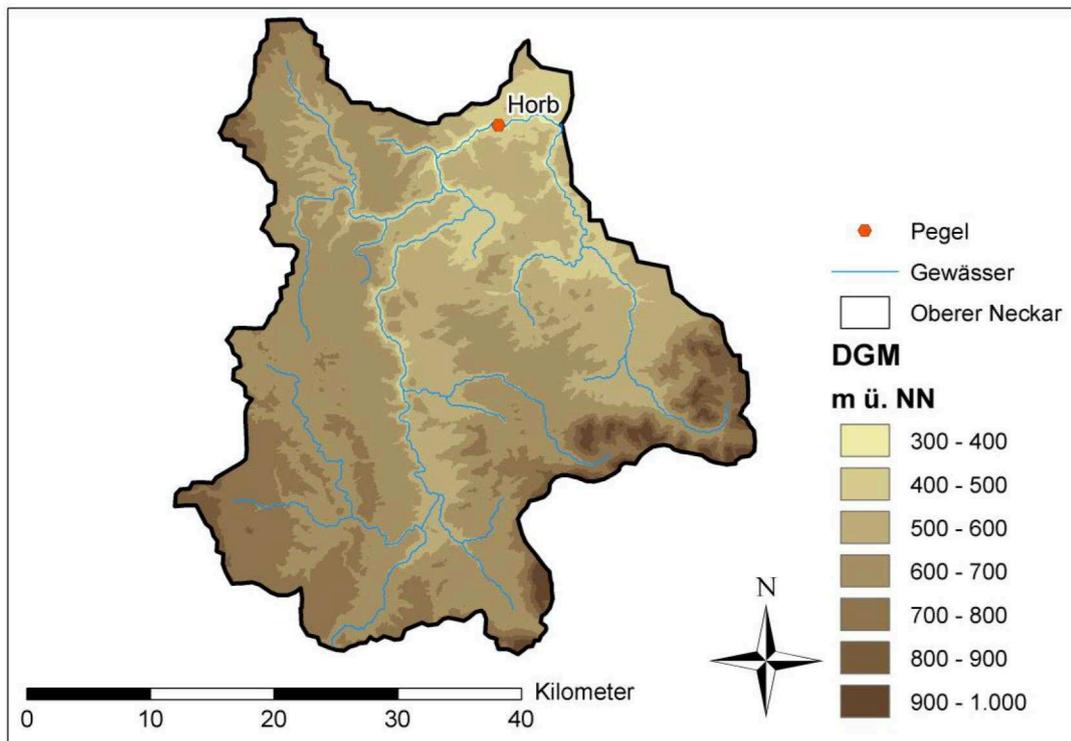


Abbildung 3.5: Einzugsgebiet des oberen Neckars bis zum Zufluss der Eyach.

In Relation zum gesamten Rheingebiet sind die naturräumlichen Unterschiede zwischen den drei Untersuchungsgebieten gering ausgeprägt. Es dominieren Braunerden die zumeist aus Festgesteinen, in größeren Teilen des Lahngbiets aber auch aus Löss hervorgegangen sind. Geologisch überwiegen am oberen Neckar Feinsandsteine, Tonsteine und Mergelgesteine. Zwar wasserführend, aber nur mit wenig ergiebigen Grundwasservorkommen einhergehend, sind die weniger häufigen Karstwasserleiter Kalkstein, Dolomit und Gips. Die Grundwasservorkommen der im Zentrum und Süden des Nahegebiets anstehenden Sande und Kiese sind zum Teil sehr ergiebig; die der übrigen Sedimentite und seltener Vulkanite allenfalls lokal bedeutsam. Das Lahngbiet ist ebenfalls zum großen Teil durch Sand- und Schluffsteine mit geringen Grundwasservorkommen geprägt, hat aber im Norden und Osten sehr ergiebige vulkanische Kluftgrundwasserleiter (Bundesanstalt für Gewässerkunde und Institut für Hydrologie, Universität Freiburg i. Br. 2003).

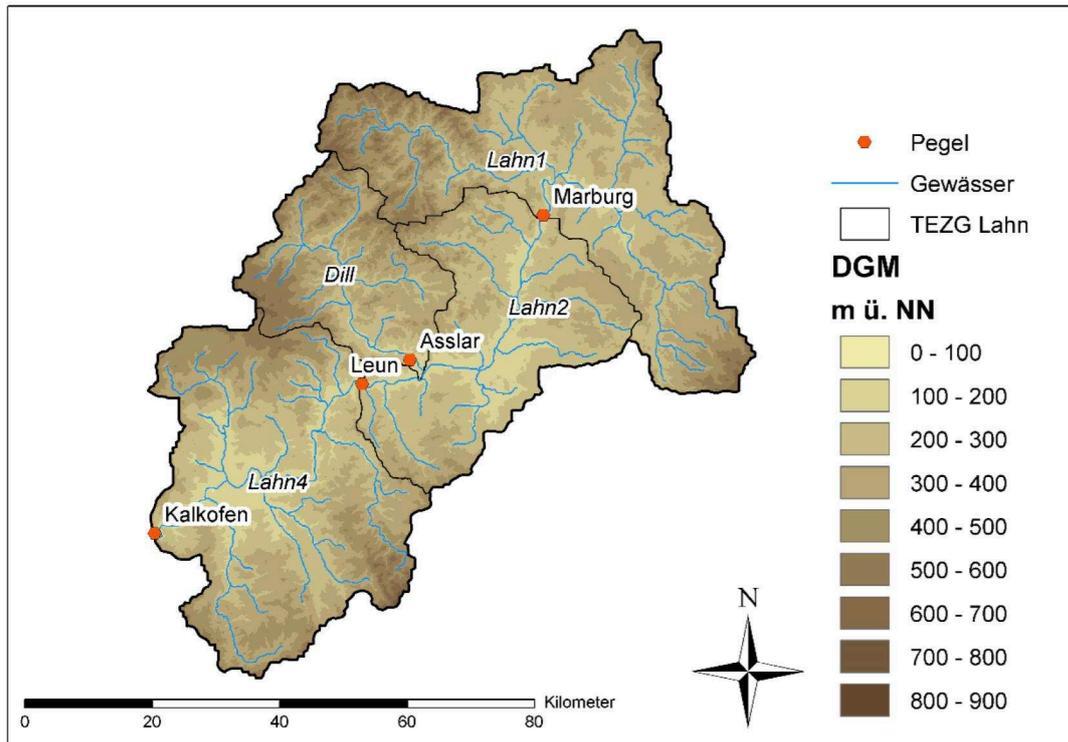


Abbildung 3.6: Einzugsgebiet der Lahn bis Pegel Kalkofen.

Topographisch weichen die Gebiete ebenfalls, aus dem Blickwinkel der mesoskaligen hydrologischen Modellierung betrachtet, wenig voneinander ab. So liegt die maximale Höhendifferenz der Zonen der jeweiligen Teilgebiete in den meisten Fällen bei 600 m. Das mittlere Höhengniveau des oberen Neckar übersteigt mit ca. 700 m ü. NN allerdings das der Lahn- und Nahe-Teilgebiete um ca. 200 m. Dies zeigt sich klimatisch im höchsten mittleren Jahresniederschlag im Untersuchungszeitraum von 925 mm. Die Teilgebietsniederschläge der Lahn variieren dagegen zwischen 689 mm (Lahn zwischen Pegel Marburg und Leun) und 918 mm (Dill), die der Nahe zwischen 594 mm (Nahe zwischen Pegel Boos und Grolsheim) und 781 mm (Glan). Die mittleren Lufttemperaturen (Minimum: oberer Neckar mit 8,3 °C, Maximum: Nahe zwischen Pegel Boos und Grolsheim mit 9,8 °C) und damit verbundene Größen wie beispielsweise das Andauerverhalten der Schneedecke unterscheiden sich nicht markant.

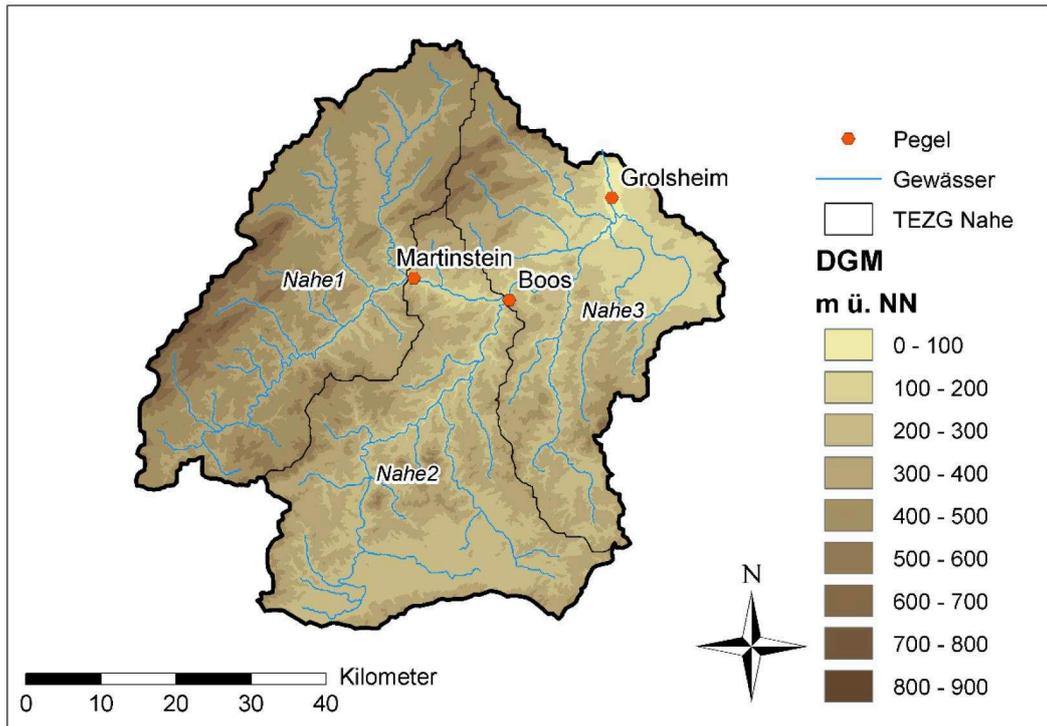


Abbildung 3.7: Einzugsgebiet der Nahe bis unterhalb Pegel Grolsheim.

3.4 Optimierverfahren

Zur Parameterkalibrierung eingesetzt wird in dieser Arbeit zumeist die Implementierung des Algorithmus Bound Optimization By Quadratic Approximation (BOBYQA) von Powell (2009) im Softwarepaket NLOpt des Massachusetts Institute of Technology. Deren Standard-einstellungen werden beibehalten. BOBYQA versucht, basierend auf einer kontinuierlich angepassten quadratischen Annäherung der wahren Zielfunktionsoberfläche, den aktuellen Wert der Zielfunktion durch lokale Parameteränderungen innerhalb gegebener Grenzen zu verbessern. Im Gegensatz zu vielen anderen lokalen Optimierungsalgorithmen arbeitet BOBYQA ableitungsfrei.

Ergänzend herangezogen wird die in SciPy (gängiges Softwarepaket zum wissenschaftlichen Rechnen in Python) implementierte Variante des Truncated Newton Conjugate-Gradient-Algorithmus (TNC) von Nash (1984). Parameteränderungen folgen dem steilsten Gradienten. Die TNC-Implementierung ermöglicht u. A. die in dieser Arbeit gewählte Gradientenschätzung über finite Differenzen. Diese und alle anderen Berechnungen erfolgen mit den Standardeinstellungen. Als gradientenbasiertes Verfahren reagiert TNC sensibel auf Unregelmäßigkeiten in der Zielfunktion und erscheint so als weniger geeignet für die Parameterkalibrierung hydrologischer Modelle als BOBYQA oder globale Verfahren wie z. B. der Shuffled Complex Evolution-Algorithmus (SCE-UA) von Duan et al. (1992). TNC kommt in Abschnitt 4.9 als Hilfsmittel zur Analyse der Beschaffenheit von Zielfunktionen zum Einsatz.

4 Modelltechnische Unsicherheit

Hydrologische Modelle berechnen die zeitliche Änderung der Menge und Verteilung des in Flussgebieten gespeicherten Wassers. Steuernde Größen hierfür sind neben externen Einflüssen wie dem Niederschlag interne Systemzustände wie die Bodenfeuchte. Beispielsweise hängt ein Prozess wie die Infiltration von Niederschlag und Bodenfeuchte ab und erhöht seinerseits die Bodenfeuchte. Derartige Beziehungen zwischen der Änderung eines Systemzustands und dem Systemzustand selbst werden mathematisch mittels Differenzialgleichungen ausgedrückt.

Hydrologische Modelle repräsentieren mehrere Teilprozesse zugleich; neben der Infiltration beispielsweise die Perkolation oder den hypodermischen Abfluss. Folglich liegen ihnen nicht einzelne Differenzialgleichungen, sondern größere Differenzialgleichungssysteme zugrunde. Diese sind in aller Regel nicht integrierbar, d. h. nur approximativ lösbar. Hierfür stehen zwei programmtechnische Umsetzungsmöglichkeiten zur Auswahl: entweder wird das originale (ggf. auch leicht modifizierte) Differenzialgleichungssystem in einen separaten numerischen Integrationsalgorithmus eingespeist oder es wird eine eigenständige approximative Lösung des Differenzialgleichungssystems ausgearbeitet.

Dieses Kapitel verfolgt den erstgenannten Ansatz, welcher in der konzeptionellen hydrologischen Modellierung selten zum Einsatz kommt (Abschnitt 4.1). Hierfür werden, basierend auf einer in Abschnitt 4.2 vorgenommenen Analyse der numerischen Charakteristika konzeptioneller Speichermodelle, Methoden erarbeitet, um die numerische Integration möglichst sicher und effizient (Abschnitt 4.4) auch bei Vorhandensein ausgeprägter Diskontinuitäten (Abschnitt 4.5) durchzuführen und den artifiziellen Einfluss der Rechenschrittweite auf die Simulationsergebnisse zu reduzieren (Abschnitt 4.6). Die Methodenanwendung wird in den Abschnitten 4.7 bis 4.11 anhand der Modelle HBV₉₆, LARSIM_{ME} sowie der Horton-Infiltration (siehe Abschnitt 3.2) veranschaulicht, getestet und diskutiert.

4.1 Stand des Wissens und der Technik

Der Stand der Technik in der Umsetzung hydrologischer konzeptioneller Speichermodelle fällt weit hinter den Stand des Wissens in der numerischen Mathematik zurück. Allgemeine Strategien zur approximativen Lösung von Differenzialgleichungssystemen werden seit Anfang des 19. Jahrhunderts formuliert (Kutta 1901). Viele Modell-Implementierungen – unter anderem die von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} – machen hiervon aber keinen Gebrauch. Gängiger

sind individuelle Lösungsstrategien, in denen einzelne Prozesse im Rahmen eines operator-splittings zunächst isoliert und dann über eine fixe Zeitschrittweite getrennt gelöst werden, was die Gefahr gravierender Genauigkeitseinbußen mit sich bringt (Kavetski et al. 2003). Kavetski und Clark (2010), Michel et al. (2003) und Schoups et al. (2010) zeigen beispielhaft, wie ungenaue Lösungsstrategien die Parameteridentifikation beeinträchtigen können.

Der erste Versuch einer systematischen Darstellung und Anwendung allgemeiner Integrationsmethoden im Kontext hydrologischer Speichermodelle liegt erst wenige Jahre zurück (Clark und Kavetski 2010). Die bisherige – für Wissenschaftler anderer ingenieur- und naturwissenschaftlicher Bereiche schwer nachvollziehbare – Vernachlässigung dieses Themas führen Kavetski und Clark (2011) primär auf die Auffassung zurück, technische Unsicherheit sei im Vergleich zur gesamten strukturellen Unsicherheit hydrologischer Modelle vernachlässigbar. Zudem werden allgemeine Integrationsmethoden als störanfällig sowie zeitaufwendig angesehen und deren Kopplung an bereits existierende Modell-Implementierungen als schwer oder gar nicht umsetzbar.

4.2 Numerische Charakterisierung konzeptioneller Speichermodelle

Die numerische Lösung von Differenzialgleichungen ist in vielen Bereichen ein weitgehend abgeschlossenes und z. B. durch Hairer et al. (1993) sowie Hairer und Wanner (2010) gut dokumentiertes Forschungsfeld. Dem Anwender numerischer Integrationsalgorithmen stellt sich primär die Frage, welche der bekannten (Teil-)Methoden für sein Problem zeiteffizient und robust sind. Dies setzt eine möglichst konkrete Problembeschreibung voraus, welche dieser Abschnitt für die hydrologische Modellierung mittels konzeptioneller Speichermodelle abstrebt. Die verwendeten mathematischen Begriffe und Konzepte finden sich in den genannten Lehrbüchern.

Die Bewegung des Wassers im Flussgebiet findet in vier Dimensionen statt: den drei Raumkoordinaten sowie der Zeit. Eine explizite Abbildung derartiger Systeme erfolgt mit Hilfe partieller Differentialgleichungen, wie im Modell SHE umgesetzt (Abbott et al. 1986). Dagegen berücksichtigen konzeptionelle Speichermodelle den Raum tendenziell implizit. Beispielsweise kommt die räumliche Anordnung von oberem und unterem Grundwasser in HBV₉₆ nur durch die Reihenfolge der korrespondierenden Speicher zum Ausdruck. Dies hat mehrere Implikationen. Die erste ist, dass Speichermodelle mittels gewöhnlicher Differenzialgleichungen erster Ordnung formulierbar sind:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = f(x, \mathbf{y}) \quad 4.1$$

f bezeichnet das Differenzialgleichungssystem, x die unabhängige Variable und \mathbf{y} den Vektor der Systemzustände. Diese allgemein verwendete Formulierung wird im Folgenden für Speichermodelle präzisiert. Bei diesen ist die (alleinige) unabhängige Variable grundsätzlich

die Zeit ($x \leftrightarrow t$), der Systemzustand ist durch die Inhalte aller n Speicher definiert ($y \leftrightarrow S_{1:n}$):

$$S'(t)_{1:n} = f(t, S(t)_{1:n}) \quad 4.2$$

Primäres Interesse besteht zumeist nicht am Systemzustand in Form der Speicherinhalte S (z. B. Grundwasserstand), sondern an einzelnen Flussgrößen F (z. B. Grundwasserabfluss), welche Komponenten der Speicherinhaltsänderungen S' sind (z. B. Grundwasserabsenkung). f ist somit erstens zu zerlegen in m Funktionen Ω zur Berechnung der Flussgrößen:

$$F(t)_{1:m} = \Omega_{1:m}(t, S(t)_{1:n}) \quad 4.3$$

Und zweitens in n Funktionen Z zur Abbildung der Flusskomponenten auf die Zustandsänderungen:

$$S'(t)_{1:n} = Z_{1:n}(F(t)_{1:m}). \quad 4.4$$

Die eindeutige Lösung gewöhnlicher Differentialgleichung erfordert Randbedingungen. Im konkreten Fall liegt ein Anfangswertproblem vor, d. h. lediglich die Speicherstände zu Rechenbeginn t^0 müssen bekannt sein:

$$S(t^0)_{1:n} = S_{1:n}^0 \quad 4.5$$

Gleichung 4.2 ist nicht autonom, weil explizit von t abhängig. Dies resultiert zumeist aus dem Rückgriff auf meteorologische Eingangsinformationen (I) und in einigen Fällen (beispielsweise für LARSIM_{ME}) auch aus der Verwendung zeitvariabler Parameter (θ):

$$S'(t)_{1:n} = Z_{1:n}(\Omega_{1:m}(I(t)_{1:k}, \theta(t)_{1:l}, S(t)_{1:n})) \quad 4.6$$

Informationen zu Niederschlag, Temperatur oder anthropogener Wasserentnahme liegen i. d. R. als äquidistante Zeitreihen vor. Deren Einspeisung in das hydrologische Modell erfolgt häufig über die Annahme konstanter Intensität innerhalb der Intervalle. Diese oder andere gängigen Annahmen über den zeitlichen Verlauf der Eingangsgrößen führen zur Unstetigkeit von Gleichung 4.6. Deren Integration erfolgt daher getrennt für alle Intervalle der Eingangsdaten (im Folgenden als „externe Zeitschritte“ bezeichnet), wobei sich die Anfangsbedingung eines Intervalls aus der Lösung des vorangegangenen Intervalls ergibt:

$$S(t^{i+1})_{1:n} = S(t^i)_{1:n} + \int_{t^i}^{t^{i+1}} Z_{1:n}(\Omega_{1:m}(I^i(\tau)_{1:k}, \theta^i(\tau)_{1:l}, S(\tau)_{1:n})) d\tau \quad 4.7$$

t^i bezeichnet den Start- und t^{i+1} den Endzeitpunkt von Intervall i der Länge $\Delta = t^{i+1} - t^i$. τ ist die Integrationsvariable. Die Verwendung des Intervall-Index in I^i verweist auf den Zeitreihen-Charakter der Eingangsdaten.

Ferner definiert sich die Zeitreihe der Zustände über

$$S_{1:n}^i = S(t^i)_{1:n} \quad 4.8$$

und die der Flussgrößen über

$$F_{1:m}^i = \frac{1}{\Delta} \cdot \int_{t^i}^{t^{i+1}} \Omega_{1:m} \left(I^i(\tau)_{1:k}, \theta^i(\tau)_{1:l}, S(\tau)_{1:n} \right) d\tau \cdot \quad 4.9$$

Demnach lässt sich Gleichung 4.7 wie folgt formulieren:

$$S_{1:n}^{i+1} = S_{1:n}^i + \Delta \cdot Z_{1:n} \left(F_{1:m}^i \right) \quad 4.10$$

Die getrennte Abarbeitung aufeinanderfolgender externer Zeitschritte nach Gleichung 4.7 vermeidet die problematische Integration über datenbasierte Diskontinuitäten. Für viele hydrologische Modelle ist Ω aber selbst nicht in allen relevanten Wertebereichen von S stetig (Kavetski und Kuczera 2007). Die Integrationsstrategie der Wahl sollte somit eine weitere Verfeinerung der Schrittweite der Integration beinhalten oder mittels Hilfsfunktionen Stetigkeit herstellen (Alsoudani und Bogle 2014).

Die zweite Implikation der oben beschriebenen impliziten Betrachtung von Räumlichkeit ergibt sich in Kombination mit der erläuterten Notwendigkeit zur schrittweisen Integration: die Lösung konzeptionelle Speichermodelle stellt im Allgemeinen ein nichtsteifes Anfangswertproblem dar. Dies wird anhand der folgenden Differenzialgleichung erläutert:

$$S'(t) = -k \cdot S(t) \quad 4.11$$

Hierbei handelt es sich zum einen um eine Grundgleichung der hydrologischen Modellierung, welche das Leerlaufen eines Einzellinearspeichers beschreibt. So interpretiert ist Gleichung 4.11 nur für die Wertebereiche $k > 0$ und $S \geq 0$ inhaltlich sinnvoll.

Zum anderen entspricht Gleichung 4.11 leicht umformuliert der von Dahlquist (1963) eingeführten Testgleichung zur Definition der A-Stabilität. Hierbei gilt weiterhin die Beschränkung $Re k > 0$ (die Verallgemeinerung von k zur komplexen Zahl ist im gegebenen Kontext nicht relevant). S darf allerdings auch negative Werte annehmen (obwohl negative Speicherfüllungen in der hydrologischen Modellierung in aller Regel unerwünscht sind, können sie zumindest in Zwischenschritten der numerischen Lösung auftreten).

Als A-stabil gilt nach Dahlquist (1963) jede numerische Integrationsmethode, deren Lösung von Gleichung 4.11 sich bei ausreichender Schrittzahl $S = 0$ annähert. Dahlquist formuliert dies im speziellen für explizite Mehrschrittverfahren (siehe Abschnitt 4.3.1) und beweist, dass diese grundsätzlich nicht A-Stabil sind.

Ein steifes Anfangswertproblem liegt nach pragmatischer Definition vor, wenn sich dieses effizienter durch implizite als durch explizite numerische Integrationsmethoden lösen lässt (Curtiss und Hirschfelder 1952). Dies ist bei Gleichung 4.11 umso mehr der Fall, je größer

k gewählt wird, was anhand des expliziten Euler-Verfahrens verdeutlicht werden kann. Auf Gleichung 4.11 angewandt folgt:

$$S(t+h) = S(t) + h \cdot (-k \cdot S(t)) \quad 4.12$$

Wie über die sukzessive Anwendung von Gleichung 4.12 leicht zu prüfen ist, konvergiert S für alle $S^0 \neq 0$ nur gegen Null falls $h \cdot k < 2$. Für große Werte von k muss die Integrations-Schrittweite h reduziert werden. Der Rechenaufwand steigt umgekehrt proportional.

Gegenstück zum expliziten Euler-Verfahren ist das implizite Euler-Verfahren:

$$S(t+h) = S(t) + h \cdot (-k \cdot S(t+h)) \quad 4.13$$

Das implizite Euler-Verfahren erfordert keine Verringerung von h zum Erhalt der numerischen Stabilität, ist also A-stabil (Hairer und Wanner 2010). Allerdings muss $S(t+h)$ iterativ bestimmt werden (einfache Testprobleme wie das hier diskutierte ausgenommen). Insbesondere bei größeren Gleichungssystemen bringt dies einen großen zusätzlichen Rechenaufwand mit sich.

Der Stabilitätsbereich expliziter Verfahren hängt von deren Konstruktion ab und kann, wie van Der Houwen und Sommeijer (1980) für Einschrittverfahren diskutieren, gegenüber dem expliziten Euler-Verfahren nennenswert erhöht werden. Für konzeptionelle Speichermodelle erscheint jedoch bereits dessen Stabilitätsbereich ausreichend. Mit $k = 2$ reduziert sich der Inhalt des nach Gleichung 4.11 leerlaufenden Linearspeichers über eine externe Zeitschrittweite von $h = 1$ auf ca. 14% des Ausgangswertes. Entsprechend schnell wird Speicherzufluss weitergeleitet. Da in konzeptionellen Speichermodellen jede Modellkomponente einen Effekt auf die Reaktion des Gesamtsystems zeigen sollte (z. B. in Hinblick auf die Parameter-Kalibrierung), sind Parameterbelegungen $k \gg 2$ nicht zu erwarten. Dies steht im Gegensatz zum „physikalischen“ Modellansatz, bei dem eine feine räumliche Diskretisierung zur schnellen Durchströmung der Volumen-Elemente führt (hohe Courant-Zahl).

Das Ergebnis der obigen Diskussion gilt ebenfalls für den nichtlinearen Fall

$$S'(t) = -k \cdot S(t)^p, \quad 4.14$$

da i. d. R. eine Zunahme der Fließgeschwindigkeit mit Feuchtezunahme angenommen, d. h. $p \geq 1$ angesetzt wird. Die Verschärfung von S' in weiter Entfernung vom Stabilitätspunkt $S = 0$ bringt keine Stabilitätsprobleme expliziter Verfahren mit sich, weil h dort genauigkeitslimitiert ist; die Dämpfung von S' in großer Nähe zum Stabilitätspunkt $S = 0$ verringert die Vorteile impliziter Verfahren im ggf. stabilitätslimitierten Bereich (Shampine und Gear 1979).

Die nichtlinearen und diskontinuierlichen Eigenschaften konzeptioneller Speichermodelle bedingen große, teils plötzliche Änderungen der Systemdynamik. Dies wirkt sich auf die numerische Integration aus. Diese ist einfacher während langer Trockenperioden als bei Starkniederschlag. Gleiches gilt für die träge Phase der Schneeakkumulation und die sich (ggf. plötzlich) anschließende dynamische Phase der Schneeschmelze. Folglich erscheint eine variable Wahl der Ordnung der Integrationsmethode sinnvoll (siehe z. B. Hairer und Wanner 1999). Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die – im Vergleich zu einigen anderen Disziplinen – geringe Genauigkeitsforderung in der hydrologischen Modellierung zur raschen Lösung einzelner externer Zeitschritte führt und die numerische Information eines Zeitschritts nicht zwangsläufig auf den folgenden Zeitschritt übertragbar ist.

4.3 Methodische Vorüberlegungen und Grundlagen

Zahlreiche Software-Implementierungen numerischer Integrationsstrategien (Solver) für Systeme gewöhnlicher Differenzialgleichungen sind verfügbar. Allerdings sind viele davon nur für kontinuierliche Probleme geeignet. Andere häufige Einschränkungen, beispielsweise dass keine Zerlegung des Differenzialgleichungssystems gemäß Gleichung 4.6 vorgesehen ist, lassen sich nur unter Inkaufnahme von Nachteilen bzgl. der Rechendauer, dem Speicherbedarf oder der Programmstruktur umgehen. Ebenfalls zu berücksichtigen ist, dass – im Gegensatz zu den regelmäßigen Gittern „physikalischer“ Modelle – die Struktur konzeptioneller Speichermodelle oftmals sehr flexibel und durch vielfältige lokal wirksame Optionen variierbar ist. Dem entspricht eine vektorlastige Programmierung vieler Speichermodelle, die bei älteren Implementierungen eher funktional (z. B. SWAT, Jayakrishnan et al. 2005) und bei neueren wie HydPy eher objektorientiert ausfällt. Deren Kopplung an (häufig in Fortran programmierte) Standard-Solver kann ebenfalls nennenswerten Overhead mit sich bringen.

Infolge der obigen Überlegungen erscheint die Programmierung einer Integrationsroutine innerhalb des Frameworks HydPy aussichtsreicher als die Einbindung eines bestehenden Solvers. Zum einen lässt die engere Interaktion von Modell und Integrationsroutine sowie ein Mehr an Möglichkeiten zur Spezialisierung der Integrationsroutine eine größere Zeiteffizienz erwarten. Zum anderen ergeben sich mehr Freiheitsgrade bei der wissenschaftlichen und technischen Analyse und Weiterentwicklung von Modell und Integrationsroutine.

Im Folgenden werden Überlegungen zur geeigneten Verfahrensgruppe numerischer Integrationsalgorithmen angestellt, aus der sich eine für konzeptionelle Speichermodelle effiziente Methodik ableiten lässt. Anschließend wird, soweit für die in den Abschnitten 4.4 und 4.5 vorgestellte Methodenentwicklung erforderlich, in deren Grundlagen eingeführt.

4.3.1 Einschritt- versus Mehrschrittverfahren

Verfahren zur numerischen Integration werden in Einschritt- und Mehrschrittverfahren unterteilt. Einschrittverfahren greifen, wie Gleichung 4.7 nahegelegt, zur Berechnung von $S_{1:n}^{i+1}$

nur auf den zuvor berechneten Zustandsvektor $S_{1:n}^i$ zurück. Ein Mehrschrittverfahren mit s Stufen greift dagegen zur Berechnung von $S_{1:n}^{i+1}$ auf die zuvor berechneten Zustandsvektoren $S_{1:n}^{i-s+1:i}$ zurück. Bei allen berechneten Zustandsvektoren handelt es sich infolge des approximativen Charakters numerischer Integrationsverfahren um Näherungslösungen. Es ist altbekannt (z. B. Mises 1930), dass sich durch Berücksichtigung mehrerer vorangegangener Lösungen Genauigkeitsvorteile bzw. Effizienzvorteile bei der Berechnung der jeweils nächsten Näherungslösung ergeben können.

Die folgende Integrationsstrategie baut dennoch auf Einschrittverfahren auf. Hierfür spricht neben der einfacheren Umsetzbarkeit von Einschrittverfahren deren – nach Erfahrung des Autors – größere Robustheit. Hairer et al. (1993) kommen durch Vergleichsrechnungen zum Ergebnis, dass Mehrschrittverfahren auch in Fällen, in denen sie weniger Funktionsaufrufe benötigen, größere Rechenzeiten als Einschrittverfahren mit sich bringen können. Dies erklärt sich aus einem deutlich erhöhten Overhead der untersuchten Mehrschritt-Solver. Dieser fällt umso mehr ins Gewicht, je geringer die Rechendauer pro Funktionsaufruf ausfällt.

Der Hauptgrund für die Bevorzugung von Einschrittverfahren in dieser Arbeit ist jedoch die in Abschnitt 4.2 erläuterte Diskontinuität konzeptioneller Speichermodelle. Jeder neue externe Zeitschritt (d. h. jedes neue Zeitintervall der Eingangsdaten) bedeutet einen „Neustart“ für Mehrschrittverfahren, bei dem bis auf den aktuellsten Zustandsvektor alle zuvor berechneten Zwischenergebnisse verfallen. Entsprechend häufig kämen weniger effiziente Mehrschrittverfahren geringer Ordnung zum Einsatz, beginnend mit nur einer Stufe, um Startwerte für die Verfahren höherer Ordnung bereitzustellen. Die Integration über Unstetigkeiten hinweg ist keine Alternative, da Mehrschrittverfahren in noch größerem Ausmaß als Einschrittverfahren durch diese gestört werden (nach Erfahrung des Autors, siehe auch die Beispielrechnungen in Hairer et al. 1993 und Gear und Osterby 1984).

4.3.2 Grundlagen von Einschrittverfahren

In diesem Abschnitt wird selektiv in die für das Verständnis der erarbeiteten Methodik notwendigen Grundlagen eingeführt. Die große Breite numerischer Methoden zur Lösung gewöhnlicher Differenzialgleichungen wird in Lehrbüchern wie Hairer et al. (1993) sowie Hairer und Wanner (2010) dargestellt.

Die wichtigste Klasse der Einschrittverfahren sind die Verfahren nach Runge-Kutta (RK-Verfahren). Kutta (1901) verallgemeinerte die bis dahin bekannten expliziten Einschrittverfahren von Euler, Heun und Runge. Auf der kurzen Notation von Gleichung 4.1 aufbauend werden für ein s -stufiges RK-Verfahren sequentiell s Zustandsänderungen $\Delta \mathbf{y}$ für die Integrations-Schrittweite h bestimmt:

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{y})_1 &= f(x^0, \mathbf{y}^0) \\ (\Delta \mathbf{y})_i &= f\left(x^0 + c_i \cdot h, \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} \cdot (\Delta \mathbf{y})_j\right) \quad \text{für } i = 2, \dots, s \end{aligned} \tag{4.15}$$

In jede neue Berechnung eines Vektors $\Delta \mathbf{y}$ gehen die bislang berechneten $\Delta \mathbf{y}$ -Vektoren ein; im Gegensatz zu Mehrschrittverfahren allerdings nur die im aktuellen Integrationsschritt berechneten.

Die Schätzung der neuen Zustände $\hat{\mathbf{y}}^1$ ausgehend von den initialen Zuständen \mathbf{y}^0 (oftmals selber Schätzungen) erfolgt mit Hilfe einer Linearkombination der s Zustandsänderungen:

$$\hat{\mathbf{y}}^1 = \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^s b_j \cdot (\Delta \mathbf{y})_j \quad 4.16$$

Die Verständlichkeit des Ansatzes erhöht sich durch Vergegenwärtigung der üblichen (teils notwendigen) Restriktionen der Verfahrenskoeffizienten.

Bei Integration über die Zeit entspricht jedes c einem relativen Zeitpunkt im Integrations-schritt:

$$0 \leq c_i \leq 1 \quad 4.17$$

Die Änderungsvektoren $\Delta \mathbf{y}_{1:s}$ können als unterschiedliche Schätzungen der mittleren Zustandsänderung $\mathbf{y}^1 - \mathbf{y}^0$ über h aufgefasst werden. Da die Koeffizienten $a_{i,1:i-1}$ der Schätzung des Zustandes zum relativen Zeitpunkt c_i dienen, erscheint die folgende Summenrestriktion plausibel:

$$c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} \quad 4.18$$

Gleiches gilt für die b -Koeffizienten, die den Zustand zum Zeitschrittende abschätzen, also zum relativen Zeitpunkt 1:

$$1 = \sum_{j=1}^s b_j \quad 4.19$$

Auf Butcher (1964b) geht die verbreitete tabellarische Notation der Koeffizienten von RK-Verfahren zurück. Beispielhaft für ein explizites Verfahren mit vier Stufen:

Tabelle 4.1: Veranschaulichung Butcher-Tableau.

0				
c_2	$a_{2,1}$			
c_3	$a_{3,1}$	$a_{3,2}$		
c_4	$a_{4,1}$	$a_{4,2}$	$a_{4,3}$	
	b_1	b_2	b_3	b_4

Man spricht von einem RK-Verfahren der Ordnung p , kurz $\text{RK}(p)$, wenn für hinreichend glatte, stabile Probleme die folgende Beziehung zwischen lokalem Fehler und Schrittweite der Integration gilt:

$$\|\hat{\mathbf{y}}^1 - \mathbf{y}^1\| \leq K \cdot h^{p+1} \quad 4.20$$

Eine Verringerung der Schrittweite führt zu einer umso größeren Verringerung des maximal zu erwartenden Fehlers, je höher die Ordnung des Verfahrens ausfällt. Wird keine extreme Genauigkeit gefordert, ist dennoch von der Verwendung von RK-Verfahren hoher Ordnung abzusehen. Die Konstante K ist sowohl verfahrens- als auch problemabhängig. Je größer h , desto unterschiedlicher kann das Verhalten von f im relevanten Zeitraum ausfallen, was zur Erhöhung von K führt. Zudem steigt ab $s = p = 4$ die erzielbare Ordnung weniger stark an als die notwendige Stufenanzahl.

Abschätzungen zur erzielten Genauigkeit können über Vergleichsrechnungen mit demselben RK-Verfahren über eine halbierte Schrittweite erfolgen (siehe z. B. den Algorithmus zur Schrittweitensteuerung in Dahmen und Reusken 2008). Effizienter sind RK-Verfahren, in die ein zweites Verfahren eingebettet ist. Die Grundidee wird am weitverbreiteten siebenstufigen Verfahren von Dormand und Prince (1980) erläutert, das in den Abschnitten 4.8 und 4.9 als Referenzverfahren dient.

Dormand und Prince (1980) ermitteln „normale“ Koeffizienten $b_{1:6}$ zur Berechnung einer Lösung der Ordnung 5 ($\hat{\mathbf{y}}^1$) und Vergleichskoeffizienten $\tilde{b}_{1:7}$ zur Berechnung einer Lösung der Ordnung 4 ($\tilde{\mathbf{y}}^1$). Die Abweichung beider Ergebnisse ist ein Maß für die Genauigkeit der Lösung der Ordnung 4.

Die Effizienz des Verfahrens begründet sich weiter darauf, dass $a_{7,1:6} = b_{1:6}$. Das Endergebnis $\hat{\mathbf{y}}^1$ steht somit bereits bei Anwendung von Gleichung 4.15 fest. Der korrespondierende Funktionsaufruf $f(x^0 + h, \hat{\mathbf{y}}^1)$ dient lediglich zur Vergleichsrechnung und ersetzt, falls $\hat{\mathbf{y}}^1$ akzeptiert wird und bei $x^0 + h$ keine Diskontinuität vorliegt, den ersten Funktionsaufruf des nächsten Zeitschrittes. Durch dieses „first same as last“-Prinzip erfordert das siebenstufige DP-Verfahren oftmals nur sechs Funktionsauswertungen pro Integrationsschritt.

Wie die Fehlerabschätzung ε aus $\hat{\mathbf{y}}^1$ und $\tilde{\mathbf{y}}^1$ erfolgt, ist problemabhängig zu entscheiden. Häufig gewählt wird die euklidische Distanz oder der Betrag der stärksten Abweichung. Relative Fehlermaße bieten sich bei Ergebnissen in unterschiedlichen Größenordnungen an. Werden einige Komponenten wichtiger als andere erachtet, lässt sich dies durch unterschiedliche Wichtungen berücksichtigen.

Ein Ergebnis $\hat{\mathbf{y}}^1$ wird akzeptiert, wenn ε die Fehlertoleranz ε_{tol} nicht überschreitet. Angenommen, die in einem Integrationsschritt i gewonnene Information ist auf den nächsten Integrationsschritt $i + 1$ übertragbar, so ergibt sich die ideale Schrittweitensteuerung zu:

$$h^{i+1} = h^i \cdot \left(\frac{\varepsilon_{tol}}{\varepsilon^i} \right)^{\frac{1}{p+1}} \quad 4.21$$

So würde die vom Benutzer vorzugebene Fehlertoleranz ε_{tol} theoretisch bestmöglich ausgereizt ($\varepsilon^{i+1} = \varepsilon_{tol}$). Praktisch hätte man in etwa 50 % der Fälle eine Überschreitung der Toleranzgrenze zu erwarten. Um nicht zu viele Integrationsversuche verwerfen zu müssen, erfolgt die Schrittweitensteuerung unter Einbeziehung verschiedener Sicherheitsfaktoren in Gleichung 4.21. Diese werden oftmals restriktiver angesetzt, wenn der vorangegangene Integrationsversuch aufgrund einer Verletzung der Fehlertoleranz verworfen wurde.

Gegenüber den bislang diskutierten expliziten RK-Verfahren weisen implizite RK-Verfahren einige Vorteile auf. Die Ordnungsgrenze $p \leq s$ expliziter Verfahren lässt sich, je nach Verfahrenswahl, bis $p = 2 \cdot s$ ausdehnen. Die Ordnung (Genauigkeit) der Zwischenschritte expliziter Verfahren ist oftmals sehr gering, für implizite Verfahren kann sie dagegen der Ordnung des Zustandes am Zeitschrittende entsprechen. Häufigster Grund für die Bevorzugung impliziter RK-Verfahren ist deren größere Stabilität.

Der Nachteil impliziter RK-Verfahren folgt aus der Erweiterung von Gleichungssystem 4.15 zu:

$$(\Delta \mathbf{y})_i = f \left(x^0 + c_i \cdot h, \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{i,j} \cdot (\Delta \mathbf{y})_j \right) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad 4.22$$

Die Verwendung von s statt $i - 1$ als Endwert für den Laufindex j bedeutet, dass das Gleichungssystem 4.22 nicht sequentiell für $i = 1, \dots, s$ abgearbeitet werden kann, sondern iterativ zu lösen ist. Die Effizienz und Robustheit der zur Lösung des (ggf. nichtlinearen) Gleichungssystems herangezogenen Iterationsvorschrift bestimmt somit auch die Effizienz und Robustheit des impliziten RK-Verfahrens.

Implizite RK-Verfahren lassen sich aus Quadraturverfahren konstruieren. Reine Quadraturverfahren sind für Fälle konzipiert, in denen sich Gleichung 4.1 vereinfacht zu:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = f(x) \quad 4.23$$

Das Fehlen der abzuschätzenden Zustandsgrößen \mathbf{y} in $f(x)$ ermöglicht das direkte Einsetzen r geeigneter Werte $x_{1:r}$ im betrachteten Intervall von x^0 bis x^1 . Durch die resultierenden

Wertepaare werden Interpolationspolynome $\hat{f}(x)$ gelegt. Deren Integrale approximieren \mathbf{y}^1 :

$$\hat{\mathbf{y}}^1 = \mathbf{y}^0 + \int_{x^0}^{x^1} \hat{f}(\tau) d\tau \quad 4.24$$

Die geeigneten Werte von x werden problemunabhängig definiert. Dadurch eröffnet sich die Möglichkeit der Vereinfachung von Gleichung 4.24 zu einer Linearkombination mit den fallunabhängigen Koeffizienten $\omega_{1:r}$:

$$\hat{\mathbf{y}}^1 = \mathbf{y}^0 + (x_1 - x_0) \cdot \sum_{i=1}^r \omega_i \cdot f(x_i) \quad 4.25$$

Da jedes $\hat{f}(x)$ analytisch integrierbar ist, hängt die Genauigkeit eines Quadraturverfahrens nur von dessen Übereinstimmung mit $f(x)$ im betrachteten Intervall ab. Diese Übereinstimmung ist wiederum von der Wahl der Auswertungsstellen $x_{1:r}$ abhängig.

Wird ein implizites RK-Verfahren aus einem Quadraturverfahren konstruiert, entsprechen die r Auswertungspunkte $x_{1:r}$ im Intervall $[x^0, x^1]$ den s Koeffizienten $c_{1:s}$ im normierten Intervall $[0,1]$. Die Wichtungskoeffizienten $\omega_{1:r}$ sind identisch mit den Koeffizienten $b_{1:s}$. Offen bleibt die Festlegung der Koeffizienten $a_{1:s,1:s}$. Diese dienen der iterativen Ermittlung der Systemzustände $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}$, welche – im Gegensatz zur reinen Quadraturgleichung 4.25 – in der Schätzung des Endergebnisses Berücksichtigung finden:

$$\hat{\mathbf{y}}^1 = \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i \cdot f(x^0 + c_i \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_i) \quad 4.26$$

Offensichtlich ist die Übereinstimmung zwischen $f(x)$ und einem (implizit berücksichtigten) Interpolationspolynom $\hat{f}(x)$ für gewöhnliche Differenzialgleichungen nicht nur von der Wahl von $c_{1:s}$ abhängig, sondern auch von der Iterationsgenauigkeit der Vektoren $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}$.

Chipman (1971) fasst die Berechnung der a -Koeffizienten gängiger impliziter RK-Verfahren basierend auf der Gauss-, der Lobatto und der Radau-Quadratur prägnant zusammen. Die Gauss-Quadratur ist hinsichtlich des Verhältnisses aus Ordnung und notwendiger Stufenanzahl optimal ($p = 2 \cdot s$). Für die Lobatto-Quadratur gilt dagegen nur die Relation $p = 2 \cdot s - 2$. Diesem Nachteil steht die Lage der äußeren Auswertungsstellen auf den Intervallrändern gegenüber ($c_1 = 0, c_s = 1$). Dies ermöglicht z. B. die iterative Anpassung von $\hat{\mathbf{y}}_1$ (und evtl. auch $\hat{\mathbf{y}}_s$, Butcher 1964a) zu umgehen. Die Mittelstellung zwischen Gauss- und Lobatto-Quadratur nimmt die Radau-Quadratur mit $p = 2 \cdot s - 1$ ein. Nur eine der Auswertungsstellen liegt auf einer Intervallgrenze. Aufgrund ihrer Glättungseigenschaften zeigen Radau-Verfahren mit $c_1 < 0$ sowie $c_s = 1$ Vorteile bei der Lösung extrem steifer Probleme (Hairer und Wanner 1999).

4.4 Methodenentwicklung für kontinuierliche Differenzialgleichungen

Die Grundidee der in diesem Abschnitt vorgestellten Methodik basiert auf einem Vorschlag von Herrn Professor Terry Feagin (Department of Computer Science, University of Houston). Herr Feagin stellte dankenswerterweise eine Implementierung der Ausgangsmethode in C++ zur Verfügung. Da eine Veröffentlichung noch aussteht, wird der Beitrag von Herrn Feagin zu den folgenden Überlegungen deutlich hervorgehoben.

4.4.1 Implizite Lobatto-Sequenz für himmelsmechanische Anwendungen

Feagin (persönliche Kommunikation) schlägt vor, die auf einem definierten Quadraturverfahren basierenden impliziten Runge-Kutta-Verfahren (IRK) aufsteigender Ordnung sequentiell anzuwenden. Diese Strategie wird im Folgenden als „implizite Lobatto-Sequenz“ (ILS) bezeichnet. Ein von Feagin erstellter Quelltext wurde dem Autor dieser Arbeit zur Verfügung gestellt.

ILS greift auf das von Butcher (1964a) entwickelte Lobatto-IRK zurück, bei dem weder $\hat{\mathbf{y}}_1$ noch $\hat{\mathbf{y}}_s$ iterativ ermittelt werden. Tabelle 4.2 veranschaulicht dies für IRK(4). Der ersten Zeile mit allen Koeffizienten $a_{1,1:3} = 0$ ist zu entnehmen, dass der Zustand am linken Intervallrand ($c_1 = 0$) nicht modifiziert wird, d. h. $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{y}^0$. Der Zustandsvektor $\hat{\mathbf{y}}_3$ am rechten Intervallrand ($c_3 = 1$) fließt, da alle Koeffizienten $a_{1,3,3} = 0$, nicht in den Iterationsprozess ein. Es genügt somit, den Funktionsaufruf $f(x^0, \hat{\mathbf{y}}_1)$ einmalig zu Beginn durchzuführen, dann ausschließlich $\hat{\mathbf{y}}_2$ zu iterieren bis $\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{y}^0 + h \cdot \left(\frac{1}{4} \cdot f(x^0, \hat{\mathbf{y}}_1) + \frac{1}{4} \cdot f\left(x^0 + \frac{1}{2} \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_2\right) \right)$ erfüllt ist und erst dann einmalig $\hat{\mathbf{y}}_3$ zu bestimmen sowie $f(x^0 + h, \hat{\mathbf{y}}_3)$ aufzurufen. Hinsichtlich der Relation aus Ordnung und Anzahl der impliziten Stufen ($p = 2 \cdot s + 2$) ist diese Strategie optimal.

Tabelle 4.2: Koeffizienten Lobatto-IRK(4) nach Butcher.

0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0
1	0	1	0
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Feagins Idee ist, beginnend bei IRK(4) mit nur einem impliziten Zustandsvektor ($\hat{\mathbf{y}}_2$), die impliziten Zustandsvektoren des jeweiligen IRK höherer Ordnung zu initialisieren. Mittels IRK(4) erfolgt beispielsweise die erste Schätzung der impliziten Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_2$ und $\hat{\mathbf{y}}_3$ von IRK(6). Diese werden iterativ angepasst und anschließend zur ersten Schätzung der

impliziten Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_2$, $\hat{\mathbf{y}}_3$ und $\hat{\mathbf{y}}_4$ von IRK(8) verwendet. Dieser Prozess wird bis IRK(12) fortgesetzt. Der Unterschied von $\hat{\mathbf{y}}^1$ basierend auf IRK(12) und $\tilde{\mathbf{y}}^1$ basierend auf IRK(10) dient zur Schätzung der Genauigkeit von IRK(10).

Hintergrund dieser Entwicklung ist zum einen die sehr hohe Genauigkeitsforderung im angedachten Anwendungsbereich Himmelsmechanik. Hierbei sind Methoden sehr hoher Ordnung von Vorteil. Zum anderen soll die Übergabe geeigneter Startwerte durch die Verfahren kleinerer Ordnung den Gesamtaufwand reduzieren, welcher durch die Iteration der Verfahren höherer Ordnung dominiert wird.

Die Anpassung von $\hat{\mathbf{y}}_{2:s-1}$ zur tatsächlichen Erzielung der theoretischen Ordnung der verschiedenen IRK erfolgt mittels Fixpunkt-Iteration (s. u.). Wird beispielsweise auf jedem IRK ein einzelner Iterationsschritt ausgeführt, sind insgesamt 37 Funktionsaufrufe erforderlich. Die annähernde Einhaltung der Ordnung 12 ist jedoch nur durch Überwachung des Konvergenzfortschritts der Fixpunkt-Iteration sicherzustellen. Dieser hängt zum einen von der Güte des Übertrags der Zustandsvektoren zwischen den IRK ab, zum anderen von der Konvergenzgeschwindigkeit der Fixpunkt-Iterationen auf den jeweiligen IRK. Insbesondere letztere ist stark problemabhängig, sodass keine allgemeine Aussage zur notwendigen Anzahl von Funktionsaufrufen zum Erzielen der Ordnung 12 möglich ist.

Es ist zu berücksichtigen, dass unabhängig von der Anzahl der Iterationsschritte nur das Endergebnis $\hat{\mathbf{y}}^1$ Ordnungen größer 7 annehmen kann (durch Einhaltung der Lobatto-Quadraturregel). Die Ordnung der internen Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{2:s}$ beträgt grundsätzlich – korrespondierend mit dem Grad der zugrundeliegenden Interpolationspolynome – maximal 7.

4.4.2 Explizite Lobatto-Sequenz für hydrologische Anwendungen

Der in Abschnitt 4.4.1 beschriebene Ansatz von Prof. Feagin wurde vom Autor dieser Arbeit wie folgt an die in Abschnitt 4.2 diskutierten Besonderheiten der konzeptionellen hydrologischen Modellierung angepasst. Hierfür findet die Bezeichnung „explizite Lobatto-Sequenz“ (ELS) Verwendung.

Im Vergleich zur Genauigkeitsforderung himmelsmechanischer Berechnungen fällt die Genauigkeitsforderung an Simulationsrechnungen konzeptioneller Speichermodelle gering aus. Zudem ist jeder Simulationszeitraum gemäß der zeitlichen Auflösung der Antriebsdaten in externe Zeitschritte fragmentiert. Eine akzeptable Lösung der zugrundeliegenden Differenzialgleichungen über einen externen Zeitschritt sollte sich, solange keine Diskontinuitäten in den Prozessgleichungen zum Tragen kommen, i. d. R. in einem einzigen Integrations-schritt erzielen lassen – und das häufig mit relativ geringer Verfahrensordnung. Eine wichtige Erweiterung der Methodik von Feagin ist daher, an möglichst vielen Zwischenschritten die bislang erzielte Genauigkeit abzuschätzen und die Lobatto-Sequenz ggf. abubrechen.

Von einer impliziten Gebrauchsmöglichkeit der Methodik, d. h. von der iterativen Anpassung von $\hat{\mathbf{y}}_{2:s-1}$ bis zum Erreichen eines Konvergenzkriteriums, wird abgesehen. Stattdes-

sen wird auf jedem IRK eine vordefinierte, kleine Anzahl an Fixpunkt-Iterationen durchgeführt. Damit lässt sich die Methodik als explizites RK-Verfahren variabler Ordnung auffassen und – für jede definierte Anzahl an Fixpunkt-Iterationen – entsprechend ausformulieren.

Für ELS wird das Verfahren Lobatto-IIIa nach Ehle (1969) dem in ILS verwendeten Butcher-Ansatz vorgezogen. Der Vergleich von Tabelle 4.2 mit Tabelle 4.3 veranschaulicht Gemeinsamkeiten und Unterschiede beider Ansätze. Da beide Verfahren auf der Lobatto-Quadratur aufbauen, sind die Ausführungspunkte $c_{1:3}$ sowie die Wichtungsfaktoren $b_{1:3}$ identisch. Für den ersten Zustandsvektor gilt in beiden Fällen $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{y}^0$. Bei Lobatto-IIIa wird der Zustandsvektor $\hat{\mathbf{y}}_s$ allerdings in die Iteration einbezogen, d. h. für wenigstens einen der korrespondierenden Koeffizienten gilt $a_{2:s,1} \neq 0$.

Tabelle 4.3: Koeffizienten Lobatto-IIIa(4) nach Ehle.

0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{24}$
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Der Nachteil des Ehle-Ansatzes besteht in der Iterationsnotwendigkeit für $\hat{\mathbf{y}}_s$. Dieser entfällt jedoch, falls die Anzahl an Fixpunkt-Iterationen auf jedem IRK auf null oder eins fixiert wird. Der Verzicht auf jegliche Iteration auf den jeweiligen IRK ist insbesondere für die in Abschnitt 4.5.1 beschriebene methodische Ergänzung zweckmäßig. Ansonsten ist die Festlegung auf jeweils einen Iterationsschritt nach Empfehlung von Feagin in vielen Fällen ein guter Kompromiss zwischen der Anzahl der notwendigen Funktionsaufrufe und der tatsächlich erzielten Genauigkeit.

Lobatto-IIIa und andere Verfahren von Ehle (1969) werden üblicherweise aufgrund ihrer überlegenen Stabilitätseigenschaften dem Ansatz von Butcher (1964a) vorgezogen. Dieser Aspekt ist bei Anwendung konzeptioneller Speichermodelle von untergeordneter Bedeutung (Abschnitt 4.2). Für eine mögliche Erweiterung des Anwendungsspektrums der Lobatto-Sequenz um „physikalisch-basierte“ Modelle wäre die größere Stabilität von Lobatto-IIIa dagegen entscheidend. Zudem fügt sich der Ehle-Ansatz äußerst konsistent in die Idee der sequentiellen IRK-Anwendung ein, was im Folgenden diskutiert wird.

Obwohl ursprünglich anders hergeleitet, lassen sich einige IRK-Verfahren wie Lobatto-IIIa als Kollokationsverfahren verstehen und veranschaulichen (Deuffhard und Bornemann 2013). Um dem Kollokationsprinzip zu genügen sind die Verfahrens-Koeffizienten so zu

bestimmen, dass nach erfolgreicher Iteration die in Gleichung 4.24 eingeführten Interpolationspolynome $\hat{f}(x)$ für alle Zustände $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}$ die folgende Bedingung erfüllen:

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \mathbf{y}^0 + h \cdot \int_0^{c_i} \hat{f}(x^0 + \tau \cdot h) d\tau \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad 4.27$$

Hieraus folgen unmittelbar die Relationen $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{y}^0$ und $\hat{\mathbf{y}}^1 = \hat{\mathbf{y}}_s$, die sich bezüglich der Lobatto-IIA-Koeffizienten in $a_{1,1:s} = 0$ und $b_{1:s} = a_{s,1:s}$ äußern.

Alle a -Koeffizienten lassen sich wie folgt berechnen. Ein exaktes Interpolationspolynom ergibt sich nach Lagrange aus:

$$\hat{f}(x) = \sum_{i=1}^s \left(f(x^0 + c_i \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_i) \cdot \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{x - c_j}{c_i - c_j} \right) \quad 4.28$$

Durch Einsetzen der c -Koeffizienten des jeweils betrachteten IRK und anschließende Integration lässt sich für jeden beliebigen Koeffizienten c_i (übergeben als Funktionsargument x) die folgende Form herstellen:

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{i,j} \cdot f(x^0 + c_j \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_j) \quad 4.29$$

Die benötigten Werte der a -Koeffizienten sind der jeweiligen Einzelfalllösung direkt zu entnehmen.

Die beschriebene Vorgehensweise zur Berechnung der Verfahrenskoeffizienten ist theoretisch simpel, in der praktischen Durchführung jedoch sehr aufwendig. Daher erfolgte die Bestimmung aller Verfahrenskoeffizienten programmtechnisch unter Zuhilfenahme des Moduls SymPy. Dieses dient dem „symbolischen“ Umgang mit Formeln in Python und automatisiert Vorgänge wie z. B. das Umstellen und Integrieren von Gleichungen.

Wie bereits erwähnt, lassen sich die a -Koeffizienten mit linearer Algebra deutlich einfacher bestimmen (Chipman 1971). ELS benötigt allerdings auch den Übertrag auf die versetzten $c_{2:s-1}$ des jeweils folgenden IRK. Dies ist in konsistenter Weise unter Verwendung von Gleichung 4.28 durch Weiterverwendung der „alten“ c -Koeffizienten als Stützstellen unter sukzessiver Substitution der „neuen“ c -Koeffizienten als Auswertungsstellen möglich. Nach Integration kann eine Gleichung 4.29 äquivalente Form hergestellt werden:

$$\hat{\mathbf{y}}_i^* = \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^s g_{i,j} \cdot f(x^0 + c_j \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_j) \quad 4.30$$

$\hat{\mathbf{y}}_i^*$ verweist darauf, dass der Zustandsvektor einem Auswertungspunkt des nachfolgenden IRK zugeordnet ist. Die g -Koeffizienten sind der jeweiligen Einzelfalllösung zu entnehmen und exemplarisch in Tabelle 4.4 für den Übertrag zwischen den Verfahren der Ordnungen 4 und 6 angegeben. Die erste Zeile enthält die c -Koeffizienten von Lobatto-IIIA(4), die erste

Spalte die von Lobatto-III(6). Die Koeffizienten zur Berechnung von $\hat{\mathbf{y}}_1^*$ und $\hat{\mathbf{y}}_4^*$ entsprechen denen für $\hat{\mathbf{y}}_1$ und $\hat{\mathbf{y}}_3$ in Tabelle 4.3, da die Lage der äußeren Auswertungspunkte an beiden Intervall-Rändern bestehen bleibt. Die Koeffizienten zur Berechnung von $\hat{\mathbf{y}}_2^*$ und $\hat{\mathbf{y}}_3^*$ an den verschobenen, internen Auswertungspunkten können nur approximativ angegeben werden.

Tabelle 4.4: Übertragskoeffizienten Lobatto-III(4 → 6).

	0	$\frac{1}{2}$	1
0	0	0	0
$\frac{5 - \sqrt{5}}{10}$	0.1759	0.1246	-0.0241
$\frac{5 + \sqrt{5}}{10}$	0.1908	0.5420	-0.0092
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Die Fixpunkt-Iteration erfolgt unter implizitem Rückgriff auf die Interpolationspolynome nach dem Prinzip der Picard-Iteration:

$$\hat{\mathbf{y}}_i^{[q+1]} = \mathbf{y}^0 + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{i,j} \cdot f\left(x^0 + c_j \cdot h, \hat{\mathbf{y}}_j^{[q]}\right) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad 4.31$$

Durch Einsetzen der aus dem Übertrag oder einem vorangegangenen Iterationsschritt erhaltenen Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}^{[q]}$ ergeben sich die verfeinerten Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}^{[q+1]}$.

Butcher (1964a) beweist die Konvergenz einer solchen Fixpunkt-Iteration. Diese liegt allerdings nur vor, wenn der Spektralradius der Jakobi-Matrix kleiner eins ist. Möglichkeiten zur Schätzung des Spektralradius für gewöhnliche Differentialgleichungen werden von Sommeijer et al. (1998) diskutiert.

In der in Abschnitt 4.2 diskutierten Testgleichung 4.11 entspricht der Spektralradius dem Produkt der Konstante k und der Schrittweite h . Die Fixpunktvorschrift zur iterativen Ermittlung des Endzustandes $S(t + h)$ für das implizite Euler-Verfahren lautet:

$$S^{[0]}(t + h) = S(t) \quad 4.32$$

$$S^{[q+1]}(t + h) = S(t) + h \cdot \left(-k \cdot S^{[q]}(t + h)\right) \quad 4.33$$

Nur falls $h \cdot k < 1$ führt die sukzessive Anwendung von Gleichung 4.33 zur Konvergenz für alle $S(t) \neq 0$. Für steife Probleme besteht für die Fixpunkt-Iteration folglich ein analoges

Problem wie für explizite Integrationsverfahren. Aus diesem Grund sprechen Autoren wie Hairer und Wanner (2010) nur dann von „echten“ impliziten Integrationsverfahren, wenn robustere Verfahren wie die Newton-Iteration Verwendung finden.

Wie bereits in Abschnitt 4.2 diskutiert, stellt die Lösung konzeptioneller Speichermodelle i. d. R. kein steifes Anfangswertproblem dar. Folglich wird die beschriebene „explizite“ Iterationsvorschrift den deutlich aufwendigeren Varianten der Newton-Iteration vorgezogen.

Die Konvergenzordnung der Fixpunktiteration ist $p = 1$. Von vergleichbaren Verfahren (z. B. Frank und Ueberhuber 1977) ist bekannt, dass die Anwendung einer Iterationstechnik der Ordnung 1 die Ordnung des gesamten Kollokationsverfahrens um 1 anheben kann. Dies gilt nur, solange die grundsätzliche Verfahrensordnung nicht ausgeschöpft ist, das Problem ausreichend glatt ist, keine Stabilitätsprobleme auftreten und mit ausreichender Präzision gerechnet wird (Dutt et al. 2000).

Aus den angestellten Betrachtungen folgt, dass der Übertrag der Zustandsvektoren von einem IRK auf das folgende mit Hilfe von Gleichung 4.30 als Abwandlung der Fixpunkt-Iteration basierend auf Ehles Lobatto-IIIa-Ansatz interpretiert werden kann. Für $\hat{\mathbf{y}}_1^*$ und $\hat{\mathbf{y}}_s^*$ bestehen, wie durch Tabelle 4.3 und Tabelle 4.4 veranschaulicht, keine Unterschiede zur „normalen“ Fixpunkt-Iteration. Dass sich auch für $\hat{\mathbf{y}}_{2:s}^*$ die Erhöhung der Ordnung um 1 ergibt (mit den oben genannten Einschränkungen), wurde anhand mehrerer nichtsteifer Testprobleme geprüft.

4.4.3 Ergänzende Anmerkungen

ELS zeigt Ähnlichkeiten zu anderen Kollokationsverfahren, insbesondere zur von Dutt et al. (2000) vorgeschlagenen Spectral Deferred Correction-Methode (SDC). Hierbei durchläuft zunächst ein Verfahren geringer Ordnung, für nichtsteife Probleme beispielsweise das explizite Euler-Verfahren, die Auswertungsstellen des Gauß-Quadraturverfahrens. Basierend auf einer Picard-Integral-Formulierung wird das Verfahren geringer Ordnung anschließend wiederholt so angewandt, dass es den Fehler der jeweils vorangegangenen Lösung approximiert. Durch jede Korrektur einer vorläufigen Lösung mit dem approximierten Fehler erhöht sich die Ordnung der Lösung um die Ordnung des Antriebsverfahrens – maximal solange bis die Ordnung des zugrundeliegenden Quadraturverfahrens erreicht ist.

Trotz einiger Unterschiede scheinen die folgenden Transferschlüsse auf ELS angemessen.

SDC zeigt bei Verwendung einfacher impliziter Antriebsverfahren – i. d. R. dem impliziten Euler-Verfahren – bis hin zu hohen Ordnungen gute Stabilitätseigenschaften (Dutt et al. 2000). SDC hätte somit das Potential die vorgestellte Methodik für die numerische Integration „physikalisch-basierter“ hydrologischer Modelle zu erweitern. Dies erforderte zwar die Anwendung eines stabilen Iterations-Verfahrens. Da aber jeweils nur der Zustandsvektor einer Stufe anzupassen ist, d. h. Verfahrens-Ordnung und Dimensionalität des Iterationsproblems entkoppelt sind, wird der Zeit- und Speicherbedarf „matrixfreier“ Iterationstechniken wie dem Generalized Minimal Residual-Algorithmus (GMRES, Saad und Schultz

1986) stark verringert. Für eine beispielhafte Anwendung in der wasserchemischen Modellierung siehe Miller et al. (2013).

Layton und Minion (2005) zeigen, dass SDC auch für andere Auswertungsstellen als die der Gauß-Quadratur (unter anderem die der Lobatto-Quadratur), gute Ergebnisse erzielt. Dies gilt sogar für Auswertungspunkte, die keinem Quadraturverfahren entsprechen. Sie vermuten daher, dass – sofern entsprechende Informationen vorliegen – problembezogene Festlegungen der Auswertungspunkte deutliche Effizienzgewinne mit sich bringen.

Minion (2003) untersucht semi-implizite SDC-Verfahren. Er prüft exemplarisch anhand eines 4-stufigen SDC, ob eine der Lobatto-Sequenz vergleichbare SCD-Sequenz (genannt „ladder method“) Vorteile mit sich bringt. Im Ergebnis führen die sequentielle und die unmittelbare Anpassung der 4-stufigen SDC nach Normierung mit der Anzahl an notwendigen Funktionsaufrufen zu einer ähnlichen Genauigkeit. Die geringere Anzahl an Funktionsaufrufen bei geringen Ordnungen wird folglich durch Genauigkeitsverluste ausgeglichen. Zumindest tendenziell ist dies auch bei ELS zu erwarten. Etwaige Vorteile durch die variable Verfahrensordnung bleiben hiervon unberührt. Dennoch wäre, falls für ELS Genauigkeitsverluste den Zeitgewinn durch die Einsparung von Funktionsaufrufen überwiegen, die Möglichkeit eines „Direkteinstiegs“ in ein IRK höherer Ordnung mit einer erwarteten Genauigkeit möglichst knapp oberhalb der vorgegebenen Toleranz zu erwägen.

4.4.4 Veranschaulichung

Wie in Abschnitt 4.4.2 erläutert, ist ELS mit vordefinierter Anzahl an Fixpunkt-Iterationen – trotz Rückgriff auf implizite Runge-Kutta-Verfahren – als explizites Runge-Kutta-Verfahren zu betrachten. Tabelle 4.5 veranschaulicht in einer erweiterten Form des Butcher-Tableaus (siehe Abschnitt 4.3.2) den Rechengang ohne Fixpunkt-Iteration auf den einzelnen IRK. Tabelle 4.6 veranschaulicht den Rechengang bei jeweils einmaliger Fixpunkt-Iteration auf jedem IRK.

Die Angaben in den geschweiften Klammern verweisen auf die Stufenanzahl des jeweiligen IRK. Für die a - und die c -Koeffizienten ist die Zuordnung eindeutig. Für die g -Koeffizienten wird durch die Pfeil-Notation deren Transfercharakter verdeutlicht.

Um herauszustellen, dass die Auswertungspunkte $c_1^{\{s\}}$ und $c_s^{\{s\}}$ grundsätzlich auf den Intervallrändern liegen, sind deren feste Zahlenwerte 0 und 1 tabelliert. Gleiches gilt für den Koeffizienten $g_{1,1}^{\{1 \rightarrow 2\}}$, der den Wert 1 annehmen muss (vgl. Diskussion bzgl. der a -Koeffizienten, Restriktion 4.18).

Tabelle 4.5: Koeffizienten der expliziten Lobatto-Sequenz ohne Fixpunkt-Iteration.

0									
1	1								
$c_2^{\{3\}}$	$g_{2,1}^{\{2 \rightarrow 3\}}$	$g_{2,2}^{\{2 \rightarrow 3\}}$							
1	$g_{3,1}^{\{2 \rightarrow 3\}}$	$g_{3,2}^{\{2 \rightarrow 3\}}$							
$c_2^{\{4\}}$	$g_{2,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{2,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{2,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$						
$c_3^{\{4\}}$	$g_{3,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{3,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{3,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$						
1	$g_{4,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{4,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{4,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$						
$c_2^{\{5\}}$	$g_{2,1}^{\{4 \rightarrow 5\}}$		$g_{2,2}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{2,3}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{2,4}^{\{4 \rightarrow 5\}}$				
$c_3^{\{5\}}$	$g_{3,1}^{\{4 \rightarrow 5\}}$		$g_{3,2}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{3,3}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{3,4}^{\{4 \rightarrow 5\}}$				
$c_4^{\{5\}}$	$g_{4,1}^{\{4 \rightarrow 5\}}$		$g_{4,2}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{4,3}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{4,4}^{\{4 \rightarrow 5\}}$				
1	$g_{5,1}^{\{4 \rightarrow 5\}}$		$g_{5,2}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{5,3}^{\{4 \rightarrow 5\}}$	$g_{5,4}^{\{4 \rightarrow 5\}}$				
$c_2^{\{6\}}$	$g_{2,1}^{\{5 \rightarrow 6\}}$			$g_{2,2}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{2,3}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{2,4}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{2,5}^{\{5 \rightarrow 6\}}$		
$c_3^{\{6\}}$	$g_{3,1}^{\{5 \rightarrow 6\}}$			$g_{3,2}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{3,3}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{3,4}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{3,5}^{\{5 \rightarrow 6\}}$		
$c_4^{\{6\}}$	$g_{4,1}^{\{5 \rightarrow 6\}}$			$g_{4,2}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{4,3}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{4,4}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{4,5}^{\{5 \rightarrow 6\}}$		
$c_5^{\{6\}}$	$g_{5,1}^{\{5 \rightarrow 6\}}$			$g_{5,2}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{5,3}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{5,4}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{5,5}^{\{5 \rightarrow 6\}}$		
1	$g_{6,1}^{\{5 \rightarrow 6\}}$			$g_{6,2}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{6,3}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{6,4}^{\{5 \rightarrow 6\}}$	$g_{6,5}^{\{5 \rightarrow 6\}}$		

Tabelle 4.6: Koeffizienten der expliziten Lobatto-Sequenz mit einmaliger Fixpunkt-Iteration.

0									
1	1								
$c_2^{\{3\}}$	$g_{2,1}^{\{2 \rightarrow 3\}}$	$g_{2,2}^{\{2 \rightarrow 3\}}$							
1	$g_{3,1}^{\{2 \rightarrow 3\}}$	$g_{3,2}^{\{2 \rightarrow 3\}}$							
$c_2^{\{3\}}$	$a_{2,1}^{\{3\}}$	$a_{2,2}^{\{3\}}$	$a_{2,3}^{\{3\}}$						
1	$a_{3,1}^{\{3\}}$	$a_{3,2}^{\{3\}}$	$a_{3,3}^{\{3\}}$						
$c_2^{\{4\}}$	$g_{2,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$		$g_{2,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{2,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$					
$c_3^{\{4\}}$	$g_{3,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$		$g_{3,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{3,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$					
1	$g_{4,1}^{\{3 \rightarrow 4\}}$		$g_{4,2}^{\{3 \rightarrow 4\}}$	$g_{4,3}^{\{3 \rightarrow 4\}}$					
$c_2^{\{4\}}$	$a_{2,1}^{\{4\}}$			$a_{2,2}^{\{4\}}$	$a_{2,3}^{\{4\}}$	$a_{2,4}^{\{4\}}$			
$c_3^{\{4\}}$	$a_{3,1}^{\{4\}}$			$a_{3,2}^{\{4\}}$	$a_{3,3}^{\{4\}}$	$a_{3,4}^{\{4\}}$			
1	$a_{4,1}^{\{4\}}$			$a_{4,2}^{\{4\}}$	$a_{4,3}^{\{4\}}$	$a_{4,4}^{\{4\}}$			

Die erste Stufe wird in jedem Fall explizit gehandhabt ($\hat{\mathbf{y}}_2^{\{1:s\}} = \mathbf{y}^0$), wie der ersten Zeile beider Tabellen zu entnehmen ist. Alle späteren Rechenschritte können auf den Funktionsaufruf bei $f(x^0, \mathbf{y}^0)$ zurückgreifen, wodurch sich eine durchgehende Besetzung der zweiten Spalte ergibt.

Der erste Ergebnisvektor ($\hat{\mathbf{y}}^{1\{2\}} = \hat{\mathbf{y}}_2^{\{2\}}$) steht gemäß der zweiten Zeile bereits nach einem Funktionsaufruf fest. Faktisch liegt eine einfache Anwendung des expliziten Euler-Verfahrens vor. Die Ordnung beträgt 1.

Der nun folgende Funktionsaufruf wird genutzt, um die Ordnung zu erhöhen und gleichzeitig die erste interne Stufe bei $c_2^{\{3\}}$ einzufügen. Sowohl $\hat{\mathbf{y}}_2^{\{3\}}$ als auch $\hat{\mathbf{y}}_3^{\{3\}}$ entsprechen der Konsistenzordnung 2. Über den Vergleich von $\hat{\mathbf{y}}^{1\{3\}} = \hat{\mathbf{y}}_3^{\{3\}}$ mit $\hat{\mathbf{y}}^{1\{2\}}$ kann geprüft werden, ob die gewünschte Genauigkeit bereits durch $\hat{\mathbf{y}}^{1\{2\}}$ erzielt wird (wovon in aller Regel nicht auszugehen ist).

Unter Verzicht auf jegliche Fixpunkt-Iteration (Tabelle 4.5) wiederholt sich dieses Schema. Mit insgesamt elf Funktionsaufrufen wird die Ordnung 5 erreicht (zwölf Spalten abzüglich der für die c -Koeffizienten reservierten ersten Spalte). Im Gegensatz zu üblichen expliziten Runge-Kutta-Verfahren werden stets nur die Zustandsvektoren der jeweils höchsten Ordnung weiterverwendet, wodurch sich die Lücken im Tableau ergeben. Gegenüber dem in Abschnitt 4.3.2 diskutierten Verfahren von Dormand und Prince (1980), welches bis zum Erreichen der Ordnung 5 sieben Funktionsaufrufe benötigt, folgt daraus ein erhöhter Rechenaufwand. Dem steht zum einen ein zu erwartender Genauigkeitsvorteil gegenüber, da das Endergebnis nach dem Ansatz von Dormand und Prince aus Zwischenergebnissen mit teils geringer Ordnung und an ungleichmäßiger verteilten Ausführungspunkten gewonnen wird. Zum anderen kann der ELS-Prozess, falls möglich, vorzeitig abgebrochen und, falls nötig, bis zum Erreichen der erforderlichen Genauigkeit fortgesetzt werden.

Komplizierter wird die Betrachtung, wenn Fixpunkt-Iterationen durchgeführt werden. Tabelle 4.6 umfasst neun Funktionsausführungen. So lässt sich theoretisch ebenfalls die Konsistenzordnung 5 erzielen, und dies mit lediglich neun Funktionsaufrufen. In der Praxis ist aber von einer Ordnungsreduktion auszugehen. Die Anwendung der $g^{\{3 \rightarrow 4\}}$ -Koeffizienten führt, aufgrund der vorgeschalteten Fixpunkt-Iteration mit den $a^{\{3\}}$ -Koeffizienten, zwar bereits für $\hat{\mathbf{y}}^{1\{4\}} = \hat{\mathbf{y}}_4^{\{4\}}$ zur Ordnung 4. Die internen Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{2:3}^{\{4\}}$ nehmen jedoch nur die Ordnung 3 an. Durch die abschließende Fixpunkt-Iteration mit den $a^{\{4\}}$ -Koeffizienten wird somit lediglich das Erreichen von Ordnung 4 von $\hat{\mathbf{y}}^{1\{5\}}$ gewährleistet. Trotz Ordnungsreduktion ist aufgrund der genauer bestimmten Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{2:3}^{\{4\}}$ eine Präzisionszunahme der Lösung $\hat{\mathbf{y}}^{1\{5\}}$ gegenüber der Auslassung der Fixpunkt-Iteration entsprechend Tabelle 4.5 zu erwarten.

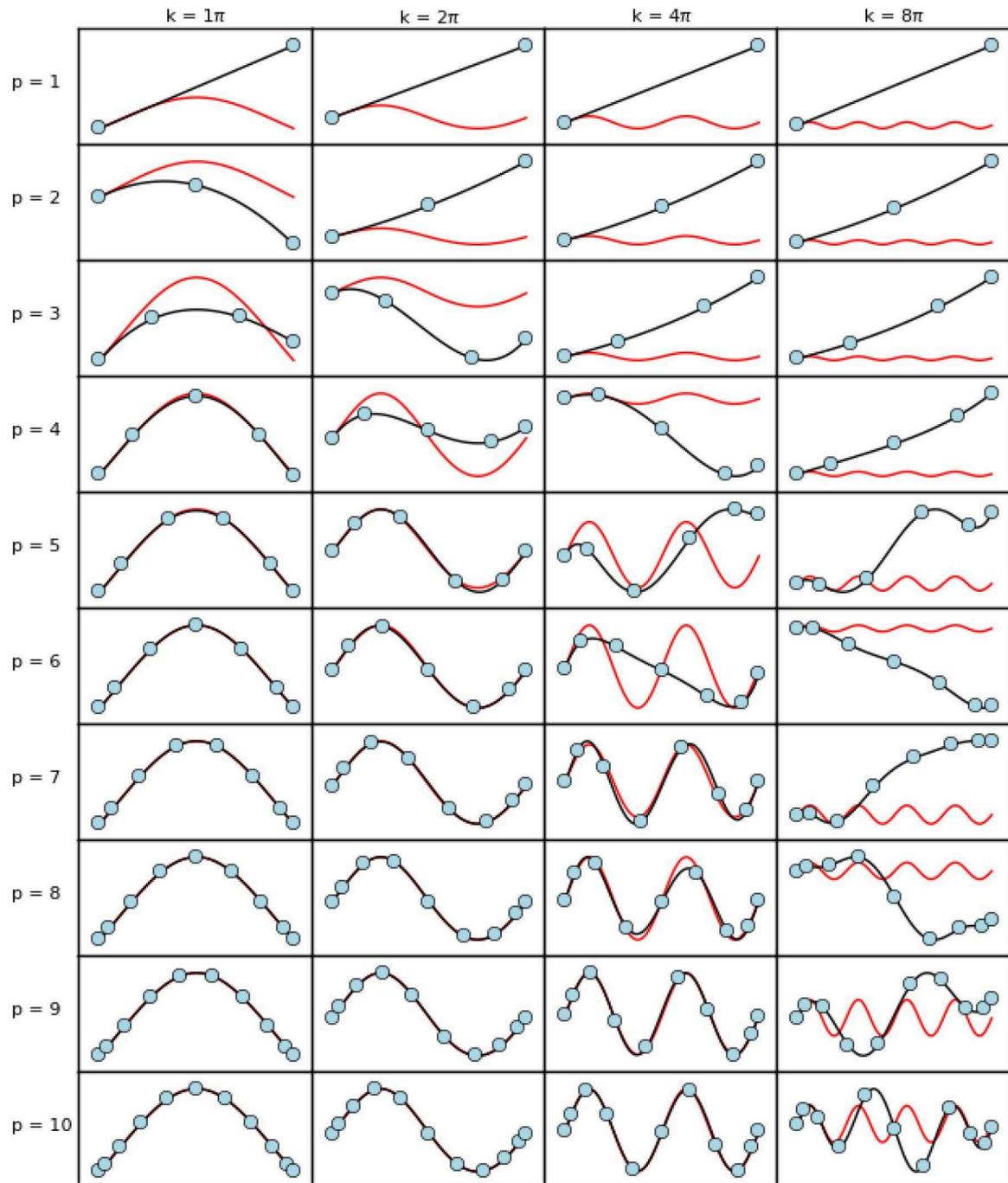


Abbildung 4.1: Anwendung von ELS ohne stufenbezogene Fixpunkt-Iteration auf ein nichtsteifes Testproblem. Mit von links nach rechts zunehmendem Wert des Parameters k wird das Testproblem schwerer lösbar. Die analytische Lösung ist jeweils rot, die numerische Approximation bei unterschiedlicher Verfahrensordnung (p) schwarz eingezeichnet. Die blauen Kreise stellen die erzielten Näherungswerte an den Lobatto-Auswertungsstellen dar.

Abbildung 4.1 veranschaulicht den sukzessiven Fortschritt von ELS bei der Lösung des Testproblems $y'(t) = y \cdot \cos(k \cdot x)$ im Intervall $0 \leq x \leq 1$ für die Anfangsbedingung $y(0) = 1$ und für verschiedene Werte von k (oben aufgeführt). Aufgrund des Verzichts auf jegliche

Fixpunkt-Iterationen kann unmittelbar die jeweilige Verfahrensordnung angegeben werden (links aufgeführt). Die analytischen Lösungen $y(t) = \exp(k^{-1} \cdot \sin(k \cdot x))$ sind als rote Linien, die approximierten Systemzustände sind als blaue Kreise und die zugehörigen Interpolationspolynome als schwarze Linien eingezeichnet. Zur effizienten Berechnung der Interpolationspolynome siehe Abschnitt 4.5.1.

Bei $k = 1\pi$ (erste Spalte) findet – beginnend mit der „linearen Extrapolation“ entsprechend dem expliziten Euler-Verfahren mit $p = 1$ – eine schrittweise Annäherung an die analytische Lösung statt. Ab $p = 4$ liegen die korrekte und die approximierte Trajektorie weitgehend übereinander. Dies ist bei $k = 2\pi$ erst ab $p = 6$ und bei $k = 4\pi$ ab $p = 9$ der Fall. Für $k = 8\pi$ lässt sich selbst bei $p = 10$ allenfalls eine tendenzielle Annäherung feststellen.

An dem Scheitern von ELS bei $k = 8\pi$ sowie der spät einsetzenden Konvergenz bei $k = 4\pi$ zeigt sich, dass der Übertrag der Zustandsvektoren von Verfahren geringer Ordnung auf Verfahren hoher Ordnung nur effizient ist, wenn bereits die wenigen Auswertungsstellen der Verfahren geringer Ordnung das gegebene Problem grob aufzulösen imstande sind. Solange dies nicht der Fall ist, wird die theoretische Verfahrensordnung nicht eingehalten. Ausbleibende Konvergenz trotz Zunahme der theoretischen Verfahrensordnung ist somit ein Indikator dafür, dass eine Verringerung der Integrations-schrittweite trotz Zunahme der Integrationsintervalle zur Verringerung der Rechendauer führt.

Mit den groß angesetzten Werten für k geht eine starke zeitliche Variation der Systemdynamik einher. Diese fällt größer aus als bei Simulationen mittels konzeptioneller Speichermodelle über einzelne externe Zeitschritte zu erwarten. In Kombination mit einer gewöhnlich geringen Genauigkeitsforderung ist davon auszugehen, dass ein Verfahren der Ordnung 10 selten oder gar nicht zum Einsatz kommt. Dennoch werden die korrespondierenden Verfahrenskoeffizienten vorgehalten, um einen Abbruch der Lobatto-Sequenz kurz vor Erreichen der gewünschten Genauigkeit möglichst auszuschließen. Je höher der Grad der zugrundeliegenden Polynome, desto größer ist allerdings die erforderliche Rechengenauigkeit, weshalb von der Verwendung von mehr als zehn bzw. elf Stufen abgesehen wird.

Zuletzt sei die flexible Wahl der Auswertungsstellen veranschaulicht. Solange die Bedingungen $c_1^{\{1:s\}} = 0$ und $c_s^{\{1:s\}} = 1$ eingehalten werden, kann ohne jede algorithmische Änderung beliebig von der Lobatto-Quadraturregel abgewichen werden. Unter Verzicht auf die Fixpunkt-Iteration ist die Wahl äquidistanter Auswertungsstellen naheliegend. Layton und Minion (2005) erzielen mit diesen bei der Anwendung der Spectral Deferred Correction-Methode gute Ergebnisse.

Abbildung 4.2 entspricht Abbildung 4.1, wurde aber unter Verwendung äquidistanter Auswertungsstellen und den korrespondierenden Verfahrenskoeffizienten erstellt. Für $k = 1\pi$ zeigen sich keine markanten Unterschiede. Dies deutet an, dass gewisse Freiheitsgrade zur problembezogenen Definition der Auswertungsstellen gegeben sind. Für größere k -Werte

erweist sich die Äquidistanz jedoch als nachteilig. Für $k = 8\pi$ deutet sich das Runge-Phänomen an, nach dem (bei einer reinen Quadratur) die Interpolationsgüte bei zunehmendem Polynomgrad unter Verwendung äquidistanter Auswertungsstelle insbesondere im Randbereich stark abnehmen kann. Es ist anzunehmen, dass dies durch den streng zyklischen Charakter der Zieltrajektorie gefördert wird, welcher für hydrologische Simulationen in diesem Maß nicht zu erwarten ist.

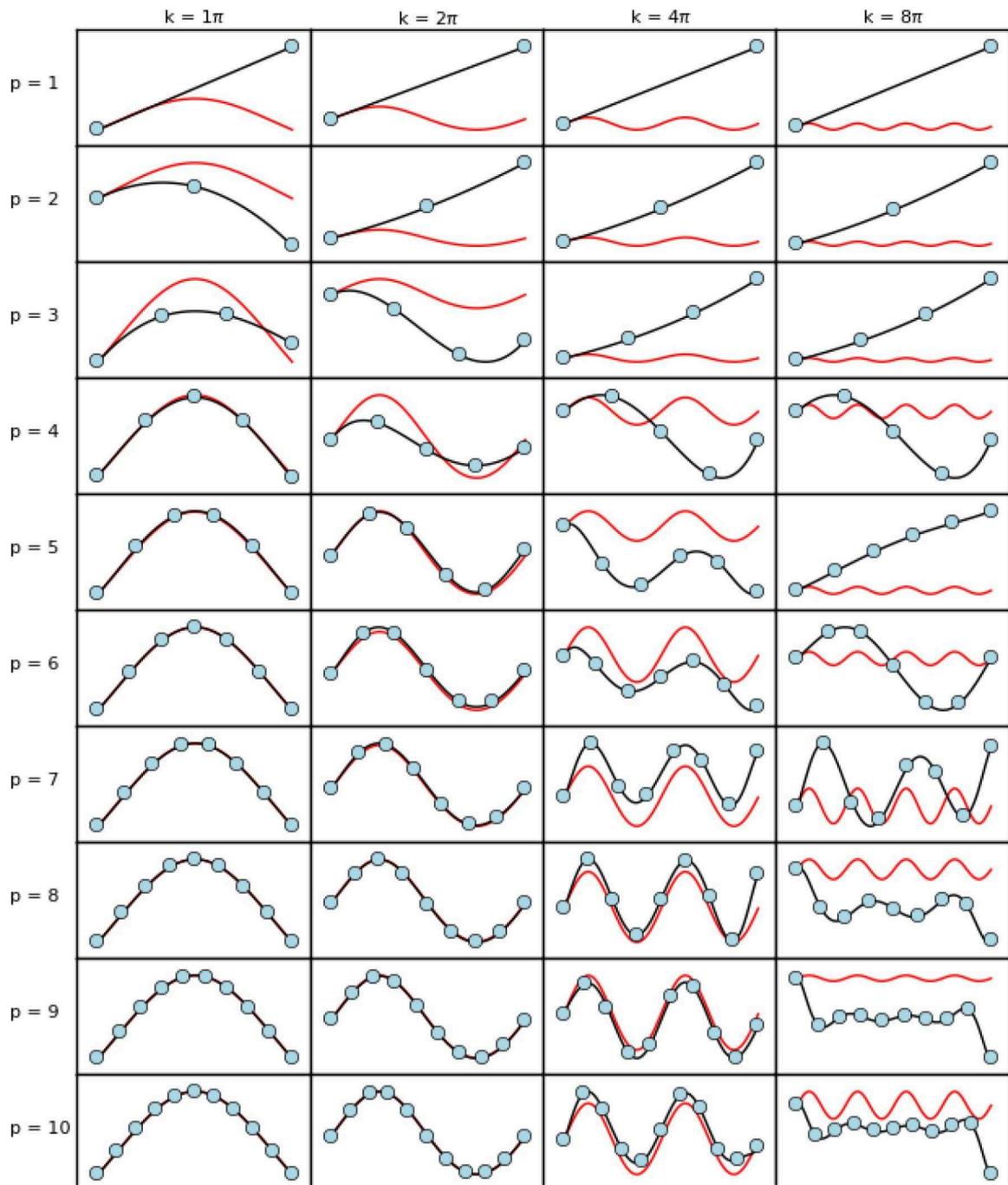


Abbildung 4.2: Vergleichsanwendung analog zu Abbildung 4.1 unter Verwendung äquidistanter Auswertungsstellen.

Abbildung 4.1 lotet die Grenzen von ELS hinsichtlich der erfassbaren Variabilität innerhalb eines Integrationssschrittes aus. Abbildung 4.3 zeigt die Grenzen von ELS für potenziell steife sowie diskontinuierliche Anfangswertprobleme auf und veranschaulicht die Beeinflussung der Konvergenzgeschwindigkeit durch zusätzliche Fixpunkt-Iterationen auf jedem IRK. Aufgrund der fehlenden Eindeutigkeit der theoretischen Konsistenzordnung ist links die Stufenanzahl des jeweils die Lösung erzeugenden RK-Verfahrens angegeben.

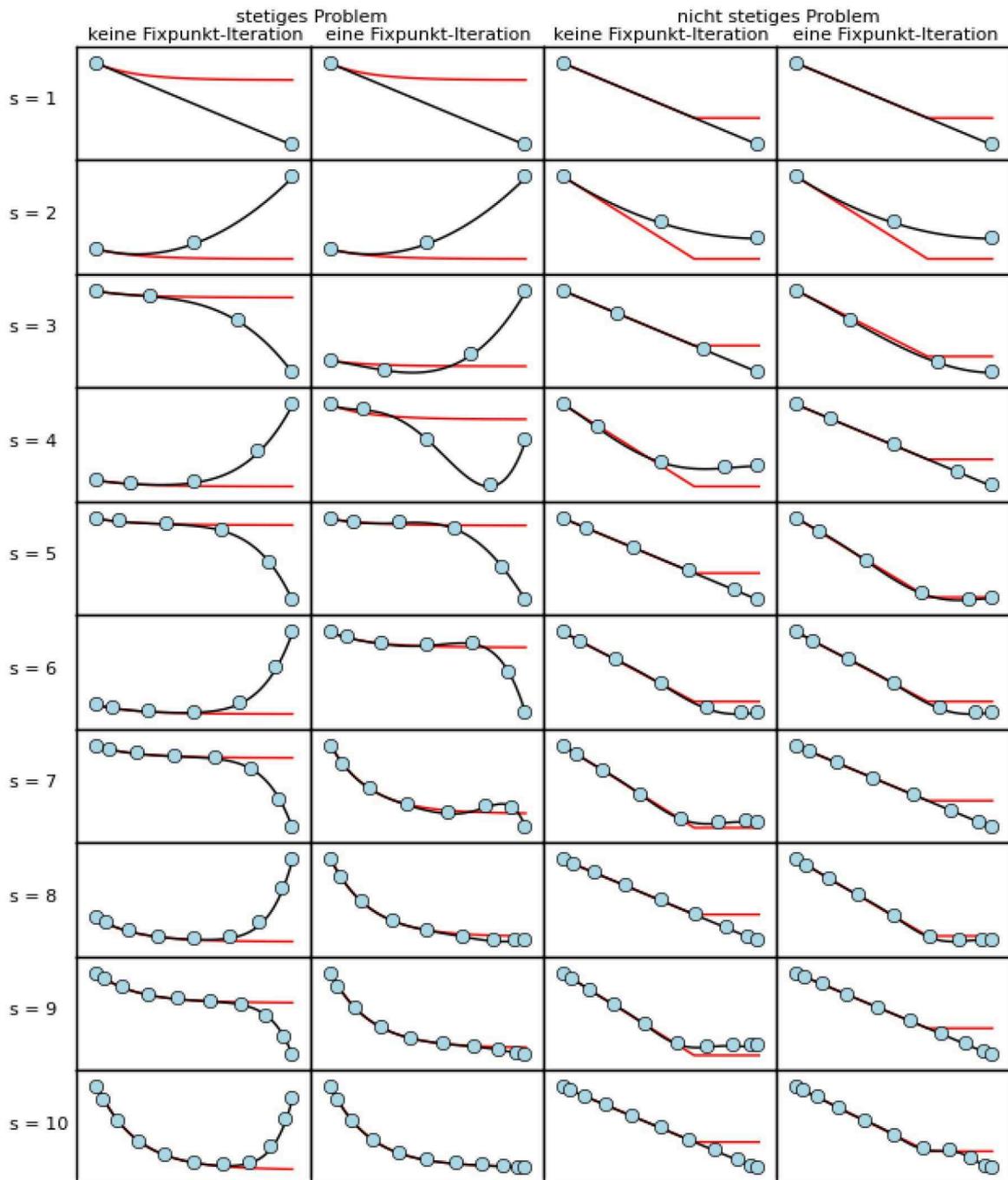


Abbildung 4.3: Anwendung von ELS ohne und mit einmaliger stufenbezogener Fixpunkt-Iteration auf ein (potenziell) steifes sowie ein unstetiges Testproblem. s entspricht der jeweils zur Erzeugung der nächsten numerischen Approximation benötigten Stufenanzahl.

Als potenziell steifes Problem wird die bereits diskutierte Dahlquist-Testgleichung herangezogen. Konkret gelöst wird $S'(t) = -5 \cdot S(t)$ im Intervall $0 \leq t \leq 1$ mit der Anfangsbedingung $S(0) = 1$ und der analytischen Lösung $S(t) = \exp(-5 \cdot t)$.

Zur Veranschaulichung des Effektes von Unstetigkeiten wird das folgende Anfangswertproblem über das Intervall $0 \leq t \leq 1$ gelöst:

$$S'(t) = \begin{cases} -3/2 & | S(t) > 0 \\ 0 & | S(t) \leq 0 \end{cases} \quad 4.34$$

$$S(0) = 1 \quad 4.35$$

Ein Beispiel für eine solche einfache Prozessgleichung in der hydrologischen Modellierung ist die Entleerung eines Interzeptionsspeichers entsprechend einer als konstant angenommen potenziellen Verdunstung.

Über die Bestimmung des Zeitpunktes der frühesten Speicherentleerung, d. h. dem Wirksamwerden der Diskontinuität, lautet die analytische Lösung des Problems:

$$S(t) = \begin{cases} 1 - 3/2 \cdot t & | t \leq 2/3 \\ 0 & | t > 2/3 \end{cases} \quad 4.36$$

Die analytischen Lösungen beider Probleme (Abbildung 4.3, rote Linien) sehen, grob betrachtet, ähnlich aus. Im Konvergenzfortschritt von ELS zeigen sich dagegen signifikante Unterschiede.

Für das stetige Problem und unter Auslassung der Fixpunkt-Iteration auf den jeweiligen IRKs (erste Spalte) wird bis zur maximalen Stufenanzahl keine akzeptable Approximation der tatsächlichen Trajektorie erreicht. Bei Hinzunahme einer jeweils einmaligen Fixpunkt-Iteration (zweite Spalte) überlagern sich die approximierte und die korrekte Trajektorie zumindest im letzten Schritt der Sequenz. Die Hinzunahme der Fixpunkt-Iteration zeigt hier zwar einen deutlichen Vorteil, dennoch wäre das Problem durch Aufteilung des gesamten Zeitintervalls in mehrere Integrationsschritte mit deutlich weniger Funktionsaufrufen zu lösen.

Gravierender und, wie in Abschnitt 4.2 diskutiert, für die Anwendung konzeptioneller Speichermodelle deutlich relevanter ist die Untauglichkeit der bislang vorgestellten Funktionalitäten von ELS für das unstetige Anfangswertproblem. Unabhängig davon, ob zusätzliche Fixpunkt-Iterationen ausgelassen (dritte Spalte) oder durchgeführt werden (vierte Spalte), schwanken die geschätzten Trajektorien auch bei hoher Stufenanzahl um die korrekte Lösung. Häufig gehen zeitweilige Konvergenzfortschritte beim Wechsel zum folgenden IRK verloren. Hierfür sind die variierende Lage der Auswertungsstellen und insbesondere die zufällige Über- bzw. Unterschreitung des Grenzwertes $S(t) = 0$ ausschlaggebend.

Das Scheitern numerischer Integrationsalgorithmen beim Lösen diskontinuierlicher Probleme ist ein allgemein bekanntes Problem. Dieses ist durch simple Verringerungen der Rechenschrittweite nicht zu umgehen, da bei nicht gegebener Lipschitz-Stetigkeit Gleichung 4.20 ihre Anwendbarkeit verliert. Im folgenden Abschnitt werden zwei Lösungsstrategien für derartige Fälle vorgestellt.

4.5 Methodenentwicklung für diskontinuierliche Differenzialgleichungen

In Abschnitt 4.4.4 wurde das Scheitern von ELS bei der approximativen Lösung einer simplen nicht-stetigen Differenzialgleichung demonstriert. Diskontinuitäten ohne vorab feststehenden Eintrittszeitpunkt finden sich in vielen Anwendungsbereichen. Ein typisches Beispiel ist die Simulation des Betriebs technischer Anlage, bei der das Erreichen einer bestimmten Bedingung eine plötzliche Änderung in der Prozesssteuerung veranlasst. Aber auch natürliche bzw. unkontrollierte Prozesse zeigen starke Grenzwertabhängigkeiten (oder lassen zumindest eine effiziente Beschreibung ihres komplexen Wirkungsgefüges durch einfache Grenzwertbetrachtungen zu). Ein physikalisches Beispiel hierfür ist die plötzliche Abnahme des Reibungswiderstandes, sobald ein Objekt auf einer Oberfläche zu gleiten beginnt (Carver 1978). Ein hydrologisches Beispiel ist die „fill and spill“-Hypothese, nach der die Abflussbildung das vorherige Auffüllen von Senken im anstehenden Festgestein bis hin zur Verbindung der entstehenden Sättigungsflächen erfordert (Tromp-van Meerveld und McDonnell 2006). Eine umfassende Diskussion des grenzwertdominierten Verhaltens verschiedener ökohydrologischer Systeme findet sich in Zehe und Sivapalan (2009).

Zur numerischen Lösung der aus grenzwertdominierten Systemen abgeleiteten diskontinuierlichen Prozessgleichungen bieten sich zwei Strategien an: die Diskretisierung des Problems in kontinuierliche Teilprobleme und die Regularisierung, d. h. Verstetigung, des Differenzialgleichungssystems (Alsoudani und Bogle 2014). Beide Strategien werden in diesem Abschnitt eingeführt und bezüglich ihrer Kopplung an ELS erläutert. Die in beiden Fällen erforderlichen Anpassungen in der Formulierung des Differenzialgleichungssystems werden in Abschnitt 4.7 für die speicherbasierte Horton-Infiltration, HBV₉₆ und LARSIM_{ME} beschrieben.

4.5.1 Diskretisierung

Diskretisierung meint im gegebenen Zusammenhang die zeitliche Aufteilung eines Anfangswertproblems in Teilabschnitte (die Terminologie orientiert sich im Folgenden primär an Mao und Petzold 2002). Für jeden dieser Teilabschnitte ist das zugrundeliegende Differenzialgleichungssystem effektiv als kontinuierlich anzusehen. Dies kann prinzipiell mittels „Versuch und Irrtum“ über einer Schrittweitensteuerung erfolgen, die auf die unstetigkeitspezifischen Charakteristika der Abschätzung des Integrationsfehlers eingeht (Enright et al. 1988). Häufiger verwendet (Bahl und Linninger 2001) und besser kompatibel mit ELS ist der „Discontinuity Locking“-Ansatz (DL, Cellier 1979).

Als Ereignis sei das Auftreten einer Bedingung bezeichnet, die zwei jeweils als stetig anzusehende Teilabschnitte diskontinuierlich voneinander trennt. t^* sei der Zeitpunkt eines solchen Ereignisses. Das Ziel ist, jeweils den nächsten Ereigniszeitpunkt t^* zu ermitteln und diesen als Endpunkt t^1 für den aktuellen und als Startpunkt t^0 für den folgenden Integrations-schritt anzusetzen. Diese Strategie ist trivial für alle a-priori bekannten Ereigniszeitpunkte. In der hydrologischen Modellierung entspricht dies der Aufteilung des gesamten Simulationszeitraums in durch die Antriebsdaten vorgegebene externe Zeitschritte. Problematischer ist, wenn der nächste Ereigniszeitpunkt nicht a-priori bekannt, sondern nur implizit durch das Anfangswertproblem definiert ist.

Das Paradox der Lokalisation solcher zustandsabhängigen Ereignisse lässt sich wie folgt formulieren: Ein numerischer Integrationsalgorithmus ist maximal bis $t^1 = t^*$ sinnvoll anzuwenden. Die Bestimmung von t^* erfordert das Vorliegen einer Lösung über t^* hinaus. Diese ist vorab ausreichend genau durch den numerischen Integrationsalgorithmus zu approximieren.

DL umgeht dieses Paradox durch ein künstliches Festhalten am „Modus“ (Mao und Petzold 2002) des Differenzialgleichungssystems im Teilintervall $t^0 \leq t \leq t^*$ über t^* hinaus. Dies wird umgesetzt, indem nicht der jeweils aktuelle Systemzustand $y(t)$ sondern der Systemzustand zu Beginn des Integrationsintervalls $y(t^0)$ den Modus bestimmt: $y'(t) = f_{t^0, y(t^0)}(t, y(t))$.

Nach dem DL-Ansatz ist Gleichung 4.34 umzuformulieren in:

$$S'(t) = \begin{cases} -3/2 & | S(t^0) > 0 \\ 0 & | S(t^0) \leq 0 \end{cases} \quad 4.37$$

In diesem Beispiel ist der erste Modus die zeitlich konstante Abnahme des Speichervolumens (eigentlich nur für positive Speichervolumina vorgesehen) und der zweite das Ausbleiben jeder Änderung (eigentlich nur exakt für den Speicherinhalt null vorgesehen). Der erste Modus ist zu Beginn aktiv ($S(t^0) = 1$). Dieser wird (ohne Berücksichtigung des eingeschränkten Wertebereiches) über $t^0 \leq t \leq t^1$ gelöst. Die Lösung wird zur Ermittlung des Ereignisses $S(t) = 0$ bei $t^* = 2/3$ genutzt. Anschließend wird die Integration bei $t^0 = t^*$ fortgesetzt. Augenscheinlich entspricht die algorithmische Umsetzung von DL bei integrierbaren Modi weitgehend der manuellen Vorgehensweise.

DL ist nur anwendbar, wenn jeder Modus auch außerhalb seines eigentlichen Wertebereiches definiert ist und – den Grenzbereich eingeschlossen – ausreichend glatt verläuft. Gegebenenfalls ist dies durch Umformulierung sicherzustellen. Erfolgte dies soweit erforderlich, kann das Anfangswertproblem für den jeweiligen Modus akkurat über $t^0 \leq t \leq t^1$ gelöst und der früheste Zeitpunkt gesucht werden, zu dem dessen Wertebereich verlassen wird.

t^* wird gewöhnlich mit Hilfe von „Diskontinuitäts-Funktionen“ (E) bestimmt (Carver 1978). Jede dieser Funktionen definiert in Abhängigkeit vom gegebenen Zeitpunkt sowie

Systemzustand den „Abstand“ zu einem der möglichen Ereignisse. Der früheste Zeitpunkt, zu dem eine der Diskontinuitäts-Funktionen die Nulllinie schneidet, korrespondiert mit dem relevanten Ereignis und markiert somit t^* .

Eine Diskontinuitätsfunktion sei definiert über:

$$E_i(t^0, t) = \begin{cases} (\xi_{i,t} - \Xi_{i,t}) \cdot \text{sgn}(\Xi_{i,t^0} - \xi_{i,t^0}) & | \quad \Xi_{i,t^0} \neq \xi_{i,t^0} \\ |\xi_{i,t} - \Xi_{i,t}| & | \quad \Xi_{i,t^0} = \xi_{i,t^0} \end{cases} \quad 4.38$$

Angelehnt an die in Abschnitt 4.2 eingeführten Differenzialgleichungsnotation für konzeptionelle Speichermodelle, gehört zu jeder Diskontinuitätsfunktion eine Funktion Ξ zur Ermittlung des Grenzwertes

$$\Xi_{i,t} = \Xi_i(t, \hat{S}(t)_{1:n}, \hat{F}(t)_{1:m}), \quad 4.39$$

sowie eine Funktion ξ zur Ermittlung des Vergleichswertes

$$\xi_{i,t} = \xi_i(t, \hat{S}(t)_{1:n}, \hat{F}(t)_{1:m}), \quad 4.40$$

die jeweils zu Beginn des Integrationsintervalls (t^0) und am betrachteten Zeitpunkt (t) ausgewertet werden.

Im Idealfall nimmt jede der so definierten Diskontinuitätsfunktionen bis zum Erreichen von $\Xi_{i,t} = \xi_{i,t}$ ausschließlich Werte kleiner Null und danach ausschließlich Werte größer Null an. Problematisch ist der (selten auftretende) Fall zunächst identischer Vergleichs- und Grenzwerte, berücksichtigt durch die untere Zeile von Gleichung 4.38. Sicherheitshalber wird jede daraufhin eintretende Abweichung positiv, d. h. als Indikator für das Vorliegen eines Ereignisses gewertet.

So wie den einzelnen Komponenten (Flussgrößen F) der zeitlichen Änderung der Systemzustände (Speichergrößen S) ein größeres Interesse in der hydrologischen Modellierung als in vielen anderen Anwendungsbereichen von Differenzialgleichungen entgegengebracht wird, spielen sie – wie Gleichung 4.39 und 4.40 hervorheben – auch in Bezug auf das grenzwertdominierte Verhaltens konzeptioneller Speichermodell eine wichtige Rolle.

Die Anzahl an Grenzwerten (l) kann die Anzahl der Zustandsgrößen in der hydrologischen Modellierung deutlich übersteigen. Als übersichtlich und im gegebenen Zusammenhang ausreichend effizient wird erachtet, nicht jede einzelne Diskontinuitätsfunktion auf ihre individuelle Ereigniszeit hin zu untersuchen, sondern über eine Maximumsfunktion

$$E(t^0, t) = \max_{i \in [1, l] \mid T_i(t^0)} (E_i(t^0, t)) \quad 4.41$$

t^* direkt zu bestimmen:

$$t^* = \min(t \in [t^0, t^1] \mid [E(t^0, t) > 0]) \quad 4.42$$

E wird nur über diejenigen Diskontinuitätsfunktionen ermittelt, welche am Anfang des Integrationsintervalls eine zugeordnete Bedingung T erfüllen. Die Definition von Bedingungen für die Berücksichtigung von Diskontinuitätsfunktionen erleichtert es, Diskretisierungen des Integrationsintervalls zu vermeiden, die vom jeweils aktuellen Modus ausgehend unnötig sind (siehe Abschnitt 4.7).

Die Ereigniszeit ist derjenige „früheste Zeitpunkt“, zu dem E den Wert Null überschreitet. Diese Definition ist dahingehend unpräzise, dass für das halboffene Intervall $t^* < t \leq t^1$ zwar das Infimum, nicht aber das benötigte Minimum definiert ist. Die Definition des „frühesten Zeitpunktes“ erfordert eine pragmatische Ergänzung, wie nachstehend erläutert.

Vor einer etwaigen Ereignislokalisierung ist zu prüfen, ob überhaupt von der Existenz eines Ereignisses innerhalb des Integrationsintervalls auszugehen ist. Je höher die Ordnung eines Verfahrens und je größer die Zeitschrittweite, desto eher können eine oder mehrere der Trajektorien den zulässigen Wertebereich ihres initialen Modus nur kurzfristig verlassen. Eine einmalige Anwendung von E auf den Intervallendpunkt t^1 reicht häufig nicht aus, um die Existenz von Ereignissen im gesamten Integrationsintervall mit ausreichender Sicherheit auszuschließen.

ELS bietet die Möglichkeit, die Gitterweite dieser Überprüfung ohne zusätzlichen Rechenaufwand zu verfeinern. Angenommen, die Lösung eines IRK mit s Stufen wurde anhand der Vergleichslösung des IRK mit $s + 1$ Stufen für ausreichend genau befunden, dann liegen an allen Lobatto-Auswertungsstellen des s -stufigen IRK Approximationen sowohl der Speicher- (\hat{S}) als auch der Flussgrößen (\hat{F}) vor. Wurde von einer Fixpunkt-Iteration auf den jeweiligen IRK abgesehen, ist die Einhaltung der Konsistenzordnung über alle Auswertungsstellen gewährleistet, d. h. das Endergebnis des s -stufigen IRK sowie die Abschätzungen an den internen Auswertungsstellen sind von vergleichbarer Genauigkeit. Die Konsistenzordnung von Speicher- und Flussgrößen ist ebenfalls identisch, da letztere unmittelbar aus ersteren berechnet wurden.

Die Lobatto-Auswertungsstellen $c_{2:s}$ des s -stufigen IRK werden durchlaufen, bis $E(t_0, c_i) > 0$. Wird diese Bedingung erfüllt, ist t^* im Intervall $c_{i-1} \leq t \leq c_i$ genauer zu bestimmen. Bei ausreichend kleiner Gitterweite der initialen Überprüfung liegt eine einzelne Nullstelle von $E(t_0, t)$ im Intervall vor. Da $E(t_0, c_{i-1}) \leq 0 \leq E(t_0, c_i)$, bieten sich modifizierte Regula-falsi-Ansätze zur sukzessiven Intervallverkleinerung an. Während Mao und Petzold (2002) auf das Illinois-Verfahren (Dowell und Jarratt 1971) zurückgreifen, kommt hier das etwas effizientere und nur geringfügig kompliziertere Pegasus-Verfahren (Dowell und Jarratt 1972) zum Einsatz. Dieses verbindet die Robustheit der einfachen Bisektion mit der Effizienz (Superlinearität) des Sekantenverfahrens und garantiert Konvergenz.

Die Iterationsvorschrift des Pegasus-Verfahrens wird solange wiederholt, bis die Breite des sukzessiv eingeschränkten Intervalls einen definierten Grenzwert unterschreitet. Um das tat-

sächliche Verlassen des fixierten Modus sicherzustellen, wird das Intervallende als Ereigniszeit herangezogen und zusätzlich der Grenzwert aufgeschlagen. Die Wahl des Grenzwertes erfolgt so, dass in Relation zur geforderten numerischen Genauigkeit kein relevanter Zuwachs an Rechenungenauigkeit zustande kommt. Zusätzlich wird – zur Gewährleistung der numerischen Stabilität und zum Abbruch der Iteration nach nur einem Schritt im linearen Fall – geprüft, ob sich der Wert von E für die aktuellste Näherung von t^* rechentechnisch signifikant von Null unterscheidet. Falls nicht, wird diese Näherung (wiederum unter Addition des genannten Grenzwertes) unmittelbar als Ereigniszeit verwendet.

Die Definition von E als Maximum mehrerer Diskontinuitätsfunktionen (Gleichung 4.41) kann die Konvergenz des Pegasus-Verfahrens beeinträchtigen; besonders gravierend im folgenden Beispiel: Zwei Diskontinuitätsfunktionen liegen vor. Die erste schneidet die Nulllinie in der Intervallmitte, die zweite nimmt im gesamten Intervall den Wert Null an. Um derartige Fälle zu vermeiden und die Effizienz des Pegasus-Verfahrens allgemein zu steigern werden während der Iteration nur diejenigen Diskontinuitätsfunktionen einbezogen, die am Intervallende einen Wert größer Null annehmen.

Der Einsatz des Pegasus-Verfahrens erfordert Abschätzungen der Speicher- (\hat{S}) und Flussgrößen (\hat{F}) zwischen den Lobatto-Auswertungsstellen. Diese lassen sich in konsistenter Form durch die in Abschnitt 4.4.2 eingeführten Interpolationspolynome ermitteln. Die Anforderung, diese Polynome an beliebigen Stellen im Intervall $0 \leq t \leq 1$ auswerten zu können, schließt jedoch die Vorabberechnung von Linearkombinationsparametern wie den a - und g -Koeffizienten aus. Stattdessen wird die folgende Ermittlung von Polynomkoeffizienten (w) umgesetzt.

Analog zu Gleichung 4.28 lässt sich die Interpolationsfunktion nach Lagrange unmittelbar für die s Zustandsvektoren $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}$ aufstellen und mit der konventionellen Polynomformulierung gleichsetzen:

$$\sum_{i=1}^s \left(\hat{\mathbf{y}}_i \cdot \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{x - c_j}{c_i - c_j} \right) = \sum_{i=1}^s \mathbf{w}_i \cdot x^{i-1} \quad 4.43$$

Durch s -malige Substitution von x durch verschiedene Zahlenwerte (z. B. den Lobatto-Auswertungsstellen $c_{1:s}$) resultiert ein System von s Gleichungen, welches in die folgende Form zu bringen ist:

$$\mathbf{w}_i = \sum_{j=1}^s v_{i,j} \cdot \hat{\mathbf{y}}_j \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad 4.44$$

Die v -Koeffizienten sind allgemeingültig, d. h. vorab für alle IRK-Verfahren bestimmbar. Die w -Koeffizienten sind dagegen problemspezifisch, d. h. für jeden Interpolationsfall und für jede Größe des Zustandsvektors separat zu bestimmen.

Die Polynomkoeffizientenvektoren $\mathbf{w}_{1:s}$ sind einmalig vor jeder Durchführung des Pegasus-Verfahrens zu ermitteln. Mit deren Hilfe erfolgt in jedem Iterationsschritt die Interpolation des notwendigen Zustandsvektors mittels der konventionellen Polynomformel. Der Rechenaufwand entspricht auch für den zweiten Schritt annähernd dem einer Linearkombination, da der Multiplikationsaufwand der i. d. R. zahlreichen Komponenten von \mathbf{w} mit den Potenzen von x den der einmaligen Bestimmung von x^0 bis x^{s-1} überwiegt.

Tabelle 4.7 gibt die v -Koeffizienten exemplarisch für das dreistufige IRK Lobatto-III(4) an. Die erste Zeile enthält die fixen Lobatto-Auswertungsstellen ($c_{1:3}$). Die erste Spalte enthält die Potenzen der variablen Auswertungsstelle (x^0 bis x^2), mit denen die resultierenden w -Vektoren jeweils zu multiplizieren sind. Für die erste Zeile der v -Koeffizienten (entspricht der zweiten Zeile der Tabelle) gilt grundsätzlich $v_{1,1} = 1$ sowie $v_{1,2:s} = 0$, da $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{y}^0$ erfüllt sein muss.

Tabelle 4.7: Interpolationskoeffizienten für Speichergrößen, Lobatto-III(4).

	0	$\frac{1}{2}$	1
x^0	1	0	0
x^1	-3	4	-1
x^2	2	-4	2

Den obigen Erklärungen folgend lassen sich für jeden beliebigen Zeitpunkt t die Systemzustände \mathbf{y} bzw. $\hat{S}_{1:n}$ interpolieren. Ein analoges Vorgehen ist für die Interpolation der Flussgrößen $\hat{F}_{1:m}$ möglich. Bevorzugt wird jedoch, gemäß Gleichung 4.3 eine Abschätzung auf Basis der Modellgleichungen vorzunehmen:

$$\hat{F}(t)_{1:m} = \Omega_{1:m}(t, \hat{S}(t)_{1:n}) \quad 4.45$$

Gegenüber der direkten Interpolation von $\hat{F}_{1:m}$ besteht für konzeptionelle Speichermodelle i. d. R. kein großer Rechenaufwand. Zudem wird eine mögliche Ursache des „discontinuity sticking“-Problems (Park und Barton 1996) umgangen.

Im Rahmen der geforderten Rechengenauigkeit ergeben sich jenseits der Lobatto-Auswertungsstellen grundsätzlich Abweichungen zwischen der Abschätzung der Flussgrößen mittels direkter Interpolation und mittels Gleichung 4.45. Gleichung 4.45 wird nach erfolgter Lokalisation eines Ereignisses zur Berechnung der initialen Flüsse und somit zur neuen Fixierung des Modus des Differenzialgleichungssystems herangezogen. Wird die Ereigniszeit durch direkt interpolierte Flussgrößen bestimmt, besteht die Gefahr einer mehrfachen Reinitialisierung im selben Modus.

Die direkte Interpolation der Flussgrößen kommt daher nur nach erfolgtem Abschluss der Iteration des Pegasus-Verfahrens zum Einsatz, um deren Integrale bis t^* zu bestimmen. Das oben diskutierte Vorgehen ist hierauf übertragbar, wobei Gleichung 4.43 vorab beidseitig zu integrieren ist. Zur Gewährleistung der Konsistenz mit den interpolierten Zustandsgrößen eines s -stufigen IRK-Verfahrens sind die an den $s - 1$ Lobatto-Auswertungsstellen des vorangegangenen IRK-Verfahrens berechneten Flussgrößen zu verwenden.

Tabelle 4.8 zeigt durch Vergleich mit Tabelle 4.7, dass die Interpolationskoeffizienten der Flussintegrale und Speichergrößen für ein gegebenes IRK über die Potenz-Ableitungsregel verknüpft sind.

Tabelle 4.8: Interpolationskoeffizienten für Flussintegrale, Lobatto-III(4).

	0	$\frac{1}{2}$	1
x^1	1	0	0
x^2	$-\frac{3}{2}$	$\frac{4}{2}$	$-\frac{1}{2}$
x^3	$\frac{2}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{2}{3}$

4.5.2 Regularisierung

Regularisierung bedeutet – im Gegensatz zur oben diskutierten Diskretisierung – nicht die Modifikation des numerischen Integrationsalgorithmus, sondern die Modifikation des zu lösenden Differenzialgleichungssystems. Im Idealfall erfolgt die Regularisierung, d. h. die Entfernung von Diskontinuitäten aus Prozessgleichungen, in inhaltlicher Übereinstimmung mit dem zu modellierenden System. Ist dies nicht möglich oder zu aufwendig, empfiehlt sich, sämtliche Diskontinuitäten auf Grundlage einer möglichst einheitlichen Strategie zu eliminieren.

Kavetski und Kuczera (2007) schlagen die Verwendung von „logistischen“ oder „trigonometrischen“ Glättungsfunktionen in der hydrologischen Modellierung vor. Die in das Modellframework HydPy implementierte Regularisierungsmethodik baut auf ersteren auf (Tyrralla und Schumann 2013).

Abbildung 4.4 veranschaulicht typische Diskontinuitäten hydrologischer Prozessgleichungen. Wie in Abschnitt 4.7 aufgezeigt, lassen sich sämtliche Diskontinuitäten der Differenzialgleichungssysteme von HBV und LARSIM auf diese Grundtypen zurückführen. Zusätzlich eingezeichnet sind Regularisierungsfunktionen mit verschiedenen Glättungsgraden.

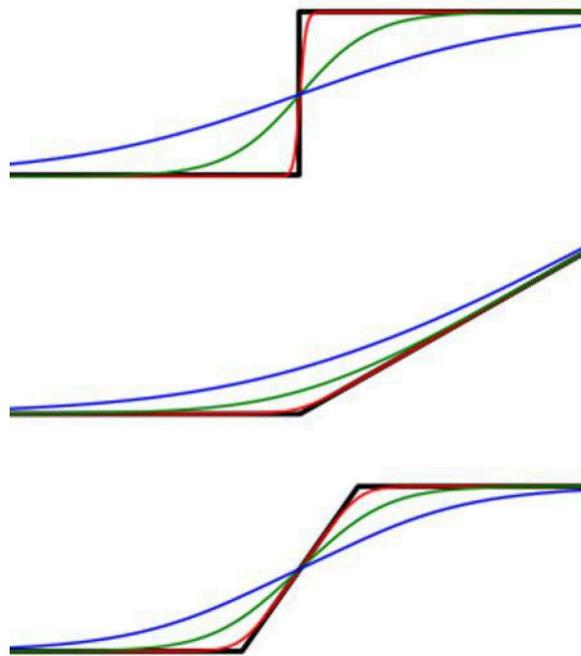


Abbildung 4.4: Drei Unstetigkeitstypen (schwarz) und deren Regularisierung mit unterschiedlichem Glättungsgrad (rot: schwach, grün: mittel, blau: stark).

Im oberen Teil von Abbildung 4.4 zeigt die Originalfunktion eine Sprungstelle. Derartige „Schalterfunktionen“ legen beispielsweise fest, ob Niederschlag aufgrund der Unter- oder Überschreitung einer Grenztemperatur in fester oder flüssiger Form fällt. In standardisierter Notation (s. u.) sind derartige Gleichungen darzustellen über:

$$f_1(x) = \begin{cases} 0 & | \ x \leq 0 \\ 1 & | \ x > 0 \end{cases} \quad 4.46$$

Gleichung 4.46 wird durch Rückgriff auf die logistische Funktion und Einführung des Glättungsparameters s_1 regularisiert:

$$\hat{f}_1(x, s_1) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{1 + \exp(x/s_1)} & | \ x < \gamma \cdot s_1 \\ 1 & | \ x \geq \gamma \cdot s_1 \end{cases} \quad 4.47$$

Die Funktion $1 - 1/(1 + \exp(x/s_1))$ ist theoretisch über den gesamten Wertebereich von x definiert und stetig differenzierbar. Gleiches gilt für dessen Ableitungen beliebiger Ordnung. In der praktischen Umsetzung ist jedoch die jeweilige Maschinen-Rechengenauigkeit zu berücksichtigen. Die Möglichkeit eines Variablenüberlaufs aufgrund der Verwendung der Exponentialfunktion wird durch die zusätzliche Bedingung in Gleichung 4.47 ausgeschlossen. Der Parameter γ entspricht dem natürlichen Logarithmus des größten Wertes, den der verwendete Datentyp annehmen kann. Dieser liegt für den Python-Datentyp „float“ (entspricht dem C-Datentyp „double“) bei ca. $1,8 \cdot 10^{308}$. Bei Wahl geringer Glättungsgrade,

d.h. kleiner Werte für s_1 , kann dieser sehr groß erscheinende Wert überschritten werden. Die zusätzliche Abfrage in Gleichung 4.47 verursacht keine für die numerische Integration relevante Diskontinuität.

Während im oberen Teil von Abbildung 4.4 die Originalfunktion selbst unstetig ist, ist dies im mittleren Teil für die erste Ableitung der Funktion der Fall. Ein Beispiel für derartige „Knickpunkte“ liefert das Grad-Tag-Verfahren, nach dem die potenzielle Schneeschmelzrate ab Überschreitung der Grenztemperatur der Differenz aus Temperatur und Grenztemperatur proportional ist. Notiert in standardisierter Form:

$$f_2(x) = \begin{cases} 0 & | \quad x \leq 0 \\ x & | \quad x > 0 \end{cases} \quad 4.48$$

Eine hierfür geeignete Glättungsfunktion lässt sich durch Integration von Gleichung 4.47 erzielen (Kavetski und Kuczera 2007):

$$\widehat{f}_2(x, s_1) = \begin{cases} s_2 \cdot \ln(1 + \exp(x/s_2)) & | \quad x < \gamma \cdot s_2 \\ x & | \quad x \geq \gamma \cdot s_2 \end{cases} \quad 4.49$$

Schwieriger ist die Regularisierung von Funktionen mit zwei Diskontinuitäten, wie unten in Abbildung 4.4 dargestellt. Ein solcher Fall liegt z. B. im HBV-Modell vor. Die Aufteilung des Niederschlags in Schnee und Regen erfolgt anhand zweier Temperaturgrenzwerte. Unterhalb des unteren Wertes tritt ausschließlich Schnee auf, oberhalb des oberen Wertes ausschließlich Regen. Zwischen beiden Grenzwerten wird ein Mischungsverhältnis aus flüssigem und festem Niederschlagsanteil linear interpoliert. In standardisierter Form:

$$f_3(x) = \begin{cases} 0 & | \quad x \leq 0 \\ x & | \quad 0 < x < 1 \\ 1 & | \quad x \geq 1 \end{cases} \quad 4.50$$

Kavetski und Kuczera (2007) empfehlen für derartige Fälle eine Zerlegung in Teilprobleme. So wäre Gleichung 4.50 unterhalb und oberhalb von $x = 1/2$ jeweils durch Varianten von Gleichung 4.49 zu ersetzen.

Diese auf eine beliebige Anzahl von Diskontinuitäten erweiterbare Vorgehensweise hat den Nachteil, dass die effektive Stetigkeit der zusammengesetzten Funktion bei $x = 1/2$ nur bei geringem Glättungsgrad gegeben ist. Das schränkt den Spielraum des Modellanwenders ein und schließt die weiter unten beschriebene Strategie zur einheitlichen Parametrisierung sämtlicher Glättungsfunktionen aus. Daher wird folgende Alternative zur Regularisierung von Gleichung 4.50 umgesetzt:

$$\widehat{f}_3(x, s_3) = (1 - w(x, s_1)) \cdot \widehat{f}_2(x, s_2) + w(x, s_1) \cdot (1 - \widehat{f}_2(1 - x, s_2)) \quad 4.51$$

Dem Vorschlag von Kavetski und Kuczera (2007) folgend kommt die Glättungsfunktion 4.49 zweimalig zum Einsatz. Allerdings werden beide Komponenten durch einen Wichtungsfaktor (w) kombiniert, der sich über Glättungsfunktion 4.47 ergibt zu:

$$w(x, s_1) = \hat{f}_1(x - 1/2, s_1) \quad 4.52$$

Das Konstruktionsprinzip findet in Abbildung 4.5 Veranschaulichung. Der diskontinuierliche Originalverlauf ist in allen drei Teilabbildungen identisch. Der Verlauf von w , der \hat{f}_2 -basierten Komponenten sowie von \hat{f}_3 variiert je nach gewähltem Glättungsgrad. Bei geringem Glättungsgrad entspricht das Resultat von Gleichung 4.51 optisch dem Vorschlag von Kavetski und Kuczera (2007). Auch bei mittlerem und großem Glättungsgrad liegen im gesamten Intervall keine relevanten Diskontinuitäten vor.

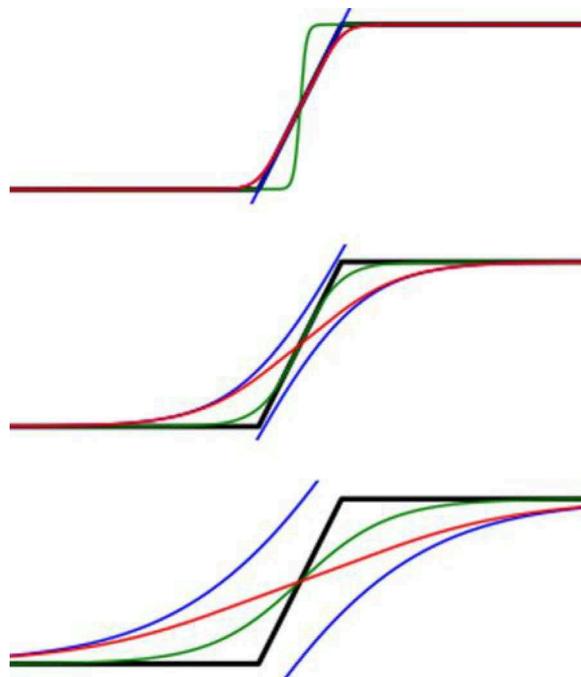


Abbildung 4.5: Veranschaulichung des Konstruktionsprinzips der Regularisierungsfunktion \hat{f}_3 (rot) aus w (grün) und zwei \hat{f}_2 -basierten Komponenten (blau) bei schwacher (oben), mittlerer (mittig) und starker (unten) Glättung.

Bislang ungeklärt ist die Frage, wie die Glättungsparameter s_1 und s_2 bei Anwendung von Glättungsfunktion 4.51 bei gegebenem Glättungsparameter s_3 zu bestimmen sind. Um bei geringem Glättungsgrad im Randbereich ein Verhalten analog zur Glättungsfunktion 4.49 sicherzustellen, bietet sich zunächst die folgende Gleichsetzung an:

$$s_2 = s_3 \quad 4.53$$

Die Bestimmung von s_1 fällt komplizierter aus:

$$s_1 = \begin{cases} 0,54 \cdot s_3^{1,17} & | \quad s_3 > 0,0724 \\ 0,025 & | \quad s_3 \leq 0,0724 \end{cases} \quad 4.54$$

Dieser Zusammenhang bewirkt, dass bei Anwendung von Gleichung 4.51 mittig zwischen beiden Grenzwerten keine relevante Krümmung auftritt, d. h. $\hat{f}_3''(1/2, s_3) \approx 0$ für alle $s_3 > 0$. Damit tritt erstens im zentralen Bereich keine Verflachung auf, erfolgt zweitens im Randbereich eine rasche Annäherung an die Funktionsverläufe der \hat{f}_2 -basierten Komponenten und ist drittens \hat{f}_3 effektiv im gesamten Wertebereich streng monoton steigend.

Die drei Glättungsfunktionen sind auf die Lage der Diskontinuität bei $x = 0$ normiert, \hat{f}_3 zudem auf die Lage der zweiten Diskontinuität bei $x = 1$. Die maximale Spannweite (bei \hat{f}_1) bzw. Steigung (bei \hat{f}_2 sowie \hat{f}_3) beträgt jeweils eins. Alle Glättungsfunktionen sind streng monoton steigend. Diese Konventionen erlauben die einfache und einheitliche Anwendung der Funktionen auf unterschiedliche Probleme (siehe Abschnitt 4.7).

Jeder Einsatz einer Glättungsfunktion bringt einen weiteren Freiheitsgrad mit sich. Abbildung 4.4 zeigt für geringe Glättungsgrade den weitgehenden Erhalt und für große Glättungsgrade die annähernde Linearisierungen der diskontinuierlichen Originalverläufe. Zunehmende Glättung erhöht die Effizienz numerischer Integrationsalgorithmen und wirkt sich nach Kavetski und Kuczera (2007) regularisierend auf Fehleroberflächen aus, erleichtert also z. B. die gradientenbasierte Parameteroptimierung. Zu starke Glättung kann jedoch zum Verlust der Originalzusammenhänge und so zur Verringerung der erzielbaren Simulationsgüte führen.

Welcher Glättungsgrad einen geeigneten Kompromiss darstellt, ist vorab schwer einzuschätzen und durch Tests zu prüfen. Zur Reduktion der Freiheitsgrade bietet es sich an, sämtliche Diskontinuitäten möglichst einheitlich zu glätten. Dies wird durch die Einführung der Metaparameter Y_T und Y_W bewerkstelligt.

Y_T mit der Einheit $^{\circ}C$ wird auf „temperaturbasierte“ Grenzwerte angewandt. Dessen jeweiliger Wert soll dem Abstand der aktuellen Temperatur zur Grenztemperatur entsprechen, an dem die Glättungsfunktion um 1% vom diskontinuierlichen Originalzusammenhang abweicht.

Der Metaparameter Y_W wird auf „wasserbasierte“ Grenzwerte angewandt. Dessen Einheit ist entweder mm oder mm/d , je nachdem ob der jeweilige Grenzwert mit Speicher- oder Flussgrößen verglichen wird. Die Funktionalität von Y_W soll ansonsten der von Y_T entsprechen.

Für die normierten diskontinuierlichen Originalzusammenhänge f und Glättungsfunktionen \hat{f} lässt sich die genannte Bedingung allgemein wie folgt formulieren:

$$\hat{f}(x-Y, s(Y)) - f(x-Y) \stackrel{!}{=} f(x+Y) - \hat{f}(x+Y, s(Y)) \stackrel{!}{=} \frac{1}{100} \quad 4.55$$

Bezogen auf Glättungsfunktion \hat{f}_1 ergibt sich:

$$1 - \frac{1}{1 + \exp(Y/s_1)} \stackrel{!}{=} \frac{1}{100}, \quad 4.56$$

Der gesuchte Wert von s_1 berechnet sich über:

$$s_1 = \frac{Y}{\ln(100-1)} \quad 4.57$$

Bezogen auf die Glättungsfunktion \hat{f}_2 ergibt sich:

$$s_2 \cdot \ln(1 + \exp(Y/s_2)) \stackrel{!}{=} \frac{1}{100} \quad 4.58$$

Da hierfür kein algebraischer Ausdruck für den relevanten Wertebereich existiert, wird im Modellframework HydPy zunächst eine Näherungslösung ermittelt:

$$s_2 \approx 0.3 \cdot Y^{0.84} \quad 4.59$$

Der erste Näherungswert wird iterativ mit dem Newton-Raphson-Verfahren präzisiert, bis Gleichung 4.58 ausreichend genau erfüllt ist. Die hierfür benötigte Ableitung lautet:

$$\frac{d}{ds_2} (s_2 \cdot \ln(1 + \exp(Y/s_2))) = \frac{Y}{s_2 \cdot \exp(Y/s_2) + s_2} \cdot \ln(\exp(-Y/s_2) + 1) \quad 4.60$$

Der zusätzliche Rechenaufwand dieser iterativen Vorgehensweise fällt gegenüber der gesamten Simulationsdauer nicht ins Gewicht, da sämtliche Glättungsparameter nur einmalig zur Modellinitialisierung zu bestimmen sind.

\hat{f}_3 nähert sich im Randbereich dem Verlauf der jeweiligen \hat{f}_2 -basierten Komponente (siehe Abbildung 4.5). Die Bestimmung von s_3 erfolgt daher wie für s_2 beschrieben. Bei Glättungsgraden, die in Relation zum Abstand der beiden Diskontinuitätsstellen groß ausfallen, treten geringfügige Abweichungen von der 1%-Vorgabe auf.

4.6 Methodenentwicklung für zeitvariablen externen Antrieb

Wie in Abschnitt 4.2 erläutert, erfolgt die hydrologische Simulation i. d. R. schrittweise entsprechend der zeitlichen Auflösung der (meteorologischen) Eingangsdaten. Das zeitliche Muster der Eingangsgrößen innerhalb eines jeden *externen Zeitschritts* wird in vielen ad hoc-Lösungen hydrologischer Prozessgleichungen nicht explizit definiert. Bei der Formulierung hydrologischer Modelle in Differenzialgleichungsform ist dies unabdingbar. Hierbei wird so häufig von der zeitlichen Konstanz der Eingangsgrößen innerhalb externer Zeitschritte ausgegangen, dass Clark und Kavetski (2010) in ihrem Grundlagenartikel zur

numerischen Integration konzeptioneller Speichermodelle lediglich die Lösung (schrittweise) autonomer Differenzialgleichungssysteme erwägen.

Insbesondere beim Niederschlag führt das Ansetzen konstanter Intensitäten zu einer starken, zeitschrittabhängigen Unterschätzung der realen Variabilität mit systematischer Verfälschung der Simulationsergebnisse. Weniger problematische Intensitätsverläufe lassen sich deterministisch oder stochastisch ermitteln. Abschnitt 4.6.1 erläutert die zentralen Unterschiede beider Strategien. Anschließend wird als „statistisch-deterministischer“-Ansatz die Verwendung fester Musterverläufe der Niederschlagsintensität vorgeschlagen (Abschnitt 4.6.2), deren konkrete Ausgestaltung anhand statistischer Kenngrößen erfolgt (Abschnitte 4.6.5 und 4.6.5). Anwendungsbeispiele folgen in Abschnitt 4.8.

4.6.1 Deterministische versus stochastische Disaggregation

Die gängigsten Eingangsdaten hydrologischer Modelle sind der Niederschlag und die Temperatur. Häufig hinzu kommen Reihen der potenziellen Verdunstung oder meteorologische Größen wie die Globalstrahlung zur Berechnung derselben.

Charakteristisch für die Lufttemperatur ist deren ausgeprägte Persistenz und Periodizität. Starke Persistenz rechtfertigt die Annahme konstanter Temperaturwerte innerhalb kurzer externer Zeitschritte, z. B. bei Stundenwertsimulationen. Ausgeprägte Periodizität erleichtert die Berücksichtigung charakteristischer Abweichungen vom Temperaturmittelwert innerhalb längerer externer Zeitschritte, z. B. bei Tageswertsimulationen.

Schwieriger ist die Handhabung des Niederschlags, welcher intermittierend, oftmals hochvariabel und in den gemäßigten Breiten nur schwach periodisch auftritt. Des Weiteren steht die Variabilität des Niederschlags in starker Wechselwirkung mit der Nichtlinearität hydrologischer Systeme. Gleiches gilt für die korrespondierende Nichtlinearität hydrologischer Modelle. In der Regel führt jede Verlängerung der Simulationsschrittweite bei Annahme schrittweise konstanter Niederschlagsintensitäten zur Verringerung der simulierten Abflussdynamik (siehe hierzu insbesondere die Vergleichsrechnungen Abschnitt 4.8.3).

Dieses bekannte Phänomen kann durch die Disaggregation einzelner Niederschlagswerte verringert werden. Gewöhnlich wird die Niederschlagssumme eines externen Zeitschrittes ungleichmäßig auf gleich lange Teilintervalle aufgeteilt. Die Aufteilungsregel kann deterministisch oder stochastisch sein.

In der Bemessungspraxis kommen häufig deterministische Ansätze wie die DVWK-Verteilung zum Einsatz (DVWK 1984), welche jedem relativen Zeitintervall einen definierten Niederschlagsanteil zuordnen. Diese einfach umsetzbaren Konventionen führen zu eindeutigen Ergebnissen.

Stochastische Ansätze (siehe z. B. die Einführung von Koutsoyiannis 2003) versprechen theoretisch ein größeres Maß an Objektivität, da sie das Verhalten des Niederschlages auf den Subskalen statistisch berücksichtigen. Ihre Anwendung ist jedoch deutlich komplexer.

Zudem ergibt jede stochastische Generierung eine höher aufgelöste Datenreihe die zwar statistisch plausibel sein kann, aber nur eine zufällige Realisierung eines Kontinuums von Realisierungsmöglichkeiten des angenommenen stochastischen Prozesses darstellt.

4.6.2 Disaggregation mittels stetiger Funktionen

Im gegebenen Zusammenhang wird – als Kompromiss zwischen den in Abschnitt 4.6.1 genannten Strategien – ein „statistisch-deterministischer“ Disaggregierungsansatz vorgeschlagen. Ziel ist es, die Einfachheit und Eindeutigkeit deterministischer Ansätze beizubehalten und dennoch die modelltechnisch relevantesten subskaligen Niederschlagscharakteristika in ihrer typischen Ausprägung zu reproduzieren. Des Weiteren gilt es, die Rechendauer durch eine Verfeinerung der externen Zeitschrittweite nicht zu stark erhöhen.

Der vorgeschlagene Ansatz beruht auf der Verwendung von statistisch parametrisierbaren deterministischen Funktionen ρ , die als Intensitätsverläufe aufzufassen sind:

$$P^i(t) = \rho(t, I^i(t)_{1:k}, \theta^i(t)_{1:l}) \cdot \bar{P}^i \quad 4.61$$

Die zeitvariable Niederschlagsintensität $P^i(t)$ im Intervall $t^i \leq t \leq t^{i+1}$ berechnet sich durch Multiplikation der Disaggregierungsfunktion $\rho(t, \cdot)$ mit dem korrespondierenden Reihenwert des Niederschlages \bar{P}^i , welcher als mittlere Intensität vorliegt. ρ soll eine möglichst kontinuierliche Funktion sein, für die analog zu einer beidseitig beschränkten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gilt:

$$\int_{t^i}^{t^{i+1}} \rho(\tau, I^i(\tau)_{1:k}, \theta^i(\tau)_{1:l}) d\tau = 1 \quad 4.62$$

Es wird je ein Modell für die gängigen Datenaufösungen von einer Stunde und einem Tag vorgeschlagen. Zur Vereinfachung der Notation sei im Folgenden $t^i = 0$ sowie $t^{i+1} = 1$ gesetzt. Zur Stundenwert-Disaggregation reduziert sich Gleichung 4.61 zu:

$$P^i(t) = \rho_h(t, \alpha_h^i) \cdot \bar{P}^i \quad 4.63$$

Zur besseren Nachvollziehbarkeit sei die Funktion ρ_h bereits vor ihrer genauen Definition veranschaulicht. Abbildung 4.6 zeigt den postulierten Verlauf der relativen Niederschlagsintensität für verschiedene Werte des Parameters α_h , welcher die Ereignisdauer bestimmt. Eine Strategie zur Ermittlung geeigneter Werte für α_h unter Rückgriff auf die jeweils aktuellen meteorologischen Eingangsinformationen (I) und Parameter (θ) wird in Abschnitt 4.6.4 eingeführt.

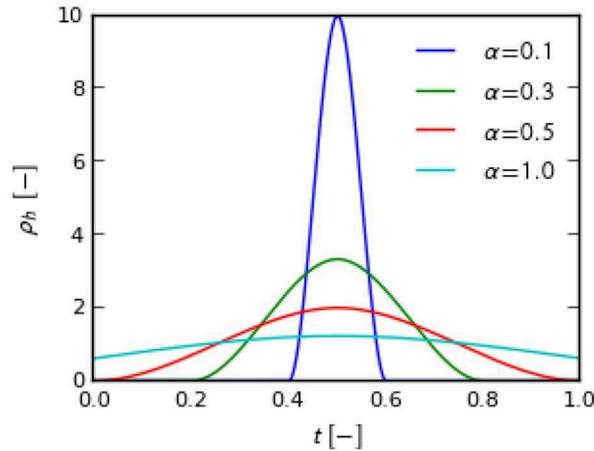


Abbildung 4.6: Disaggregation von Stundenwerten des Niederschlages. Darstellung der normierten Intensitätsverläufe (ρ) über die relative Zeit im Stundenintervall (t) bei unterschiedlicher Belegung des Parameters α .

Bei der Disaggregation von Stundenwerten wird (falls $\bar{P}^i > 0$) ein einzelnes, stetiges, symmetrisches sowie unimodales Niederschlagsereignis mit einem Maximum in der Intervallmitte angesetzt. Intensitäten größer Null treten nur im Intervall $t_0 \leq t \leq t_1$ auf, mit $t_0 = 1/2 - \alpha_h$ und $t_1 = 1/2 + \alpha_h$. Die maximale Intensität steht aufgrund von Restriktion 4.62 in inverser Relation zu α_h .

Die noch nicht normierte Disaggregierungsfunktion ρ_h^* definiert sich segmentweise nach:

$$\rho_h^*(t, \alpha_h) = \begin{cases} 0 & | \quad t \leq t_0 \\ \lambda((t-t_0)/(t_1-t_0)) & | \quad t_0 < t \leq 1/2 \\ \lambda((t_1-t)/(t_1-t_0)) & | \quad 1/2 < t \leq t_1 \\ 0 & | \quad t_1 < t \end{cases} \quad 4.64$$

Die beiden Ereignissegmente links und rechts des Intensitätsscheitels definieren sich über ein Polynom, mit u als relativem Zeitpunkt innerhalb des jeweiligen Segments:

$$\lambda(u) = 3 \cdot u^2 - 2 \cdot u^3 \quad 4.65$$

Gilt $t_0 \geq 0$ (aufgrund der Symmetrie gleichbedeutend mit $t_1 \leq 1$), erfolgt die Normierung von ρ_h^* alleinig durch Division mit $t_1 - t_0$. Falls $t_0 < 0$ (bzw. $t_1 > 1$), ist eine zusätzliche Korrektur wegen des Flächenanteils der Polynome außerhalb des Intervalls $0 \leq t \leq 1$ erforderlich. Die linke Integrationsgrenze u_0 für das linke Ereignissegment ist dann:

$$u_0 = 1 - \frac{t_1}{t_1 - t_0} = 1 - \frac{1}{2 \cdot \alpha_h} \quad 4.66$$

Aufgrund der Symmetrie des Problems besteht keine Notwendigkeit die rechte Intervallgrenze u_1 des rechten Ereignissegments explizit zu berücksichtigen. Der Korrekturfaktor λ_k

folgt aus der Division der Fläche eines Ereignisses $2 \cdot \int_0^1 \lambda(u) du$ mit der innerhalb $0 \leq t \leq 1$ liegenden Teilfläche $2 \cdot \int_{u_0}^1 \lambda(u) du$:

$$\lambda_k = \begin{cases} 1 & | \alpha_h \leq 1/2 \\ \frac{1}{1 - 2 \cdot (u_0^3 - 1/2 \cdot u_0^4)} & | \alpha_h > 1/2 \end{cases} \quad 4.67$$

Wie Abbildung 4.6 darstellt, liegt das gesamte Ereignis für $\alpha_h \leq 1/2$ innerhalb $0 \leq t \leq 1$, sodass $\lambda_k = 1$ anzusetzen ist.

Die normierte Disaggregierungsfunktion für Stundenwerte des Niederschlages lautet:

$$\rho_h(t, \alpha_h) = \lambda_k \cdot \rho_h^*(t, \alpha_h) / (t_1 - t_0) \quad 4.68$$

Die Annahme eines einzelnen Ereignisses erscheint bei Stundenintervallen akzeptabel. In Tagesintervallen ist die Aufteilung des Niederschlages auf mehrere Zeitfenster beispielsweise wegen der Verdunstung interzeptierten Wassers in Niederschlagspausen von größerer Bedeutung. Dies kann durch Modellierung mehrerer Einzelereignisse im Tagesintervall Berücksichtigung finden.

Die Funktion ρ_d zur Disaggregierung von Tageswerten wird durch Überlagerung mehrerer Anwendungen von ρ_h konstruiert:

$$\rho_d(t, \alpha_d, \beta_d, \gamma_d) = \frac{\rho_{h,1}(t, \alpha_d, \beta_d) + \gamma_d \cdot \rho_{h,2}(t, \alpha_d) + \rho_{h,3}(t, \alpha_d, \beta_d)}{2 + \gamma_d} \quad 4.69$$

Dies entspricht (maximal) drei Niederschlagsereignissen innerhalb eines Tages. Abbildung 4.7 veranschaulicht den postulierten Verlauf der Niederschlagsintensität für $\beta_d = 1/4$ und $\gamma_d = 2$ sowie für verschiedene Werte von α_d . α_d hat dieselbe Wirkung auf die (relative) Ereignisdauer wie für α_h beschrieben. β_d legt den zeitlichen Versatz zwischen den Scheiteln der symmetrisch angeordneten Einzelereignisse fest. Falls $\beta_d \geq 2 \cdot \alpha_d$, entspricht γ_d sowohl dem Scheitel- als auch dem Volumenverhältnis des zentralen und der randseitigen Ereignisse.

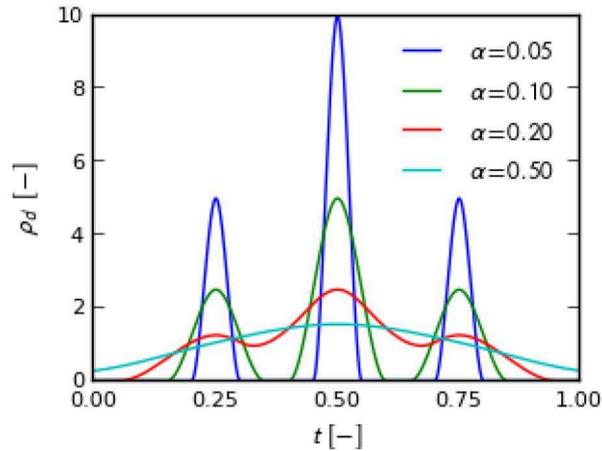


Abbildung 4.7: Disaggregation von Tageswerten des Niederschlages. Darstellung der normierten Intensitätsverläufe (ρ) über die relative Zeit im Tagesintervall (t) bei unterschiedlicher Belegung des Parameters α und fixierter Belegung der übrigen Parameter ($\beta = 1/4$ und $\gamma = 2$).

Für $\rho_{h,2}$ besteht kein methodischer Unterschied gegenüber ρ_h , da beide gleichermaßen an der jeweiligen Intervallmitte ausgerichtet sind. Für $\rho_{h,1}$ (und spiegelverkehrt für $\rho_{h,3}$) ist erstens die von ρ_h abweichende Intervalldefinition $t_0 \leq t \leq t_1$ mit $t_0 = 1/2 - \beta_d - \alpha_h$ und $t_1 = 1/2 - \beta_d + \alpha_h$ zu beachten. Zweitens führt die Verschiebung um β_d zu unterschiedlichen Abständen zu den beiden Intervallgrenzen $t^0 = 0$ und $t^1 = 1$. Die linke Integrationsgrenze u_0 für das linke Ereignissegment von $\rho_{h,1}$ ergibt sich zu:

$$u_0 = \max\left(1 - \frac{t_1}{t_1 - t_0}, 0\right) = \max\left(1 - \frac{1 - 2 \cdot \beta_d}{2 \cdot \alpha_d}, 0\right) \quad 4.70$$

Die linke Integrationsgrenze u_1 für das linke Ereignissegment von $\rho_{h,3}$ ergibt sich – vergleichbar der rechten Integrationsgrenze des rechten Ereignissegments von $\rho_{h,1}$ – zu:

$$u_1 = \max\left(1 - \frac{t_1}{t_1 - t_0}, 0\right) = \max\left(1 - \frac{1 + 2 \cdot \beta_d}{2 \cdot \alpha_d}, 0\right) \quad 4.71$$

Aufgrund der Symmetrie von $\rho_{h,1}$ und $\rho_{h,3}$ resultiert der Korrekturfaktor λ_k in beiden Fällen aus der Division der Fläche des Ereignisses $2 \cdot \int_0^1 \lambda(u) du$ mit der innerhalb $0 \leq t \leq 1$ liegende Teilfläche $\int_{u_0}^1 \lambda(u) du + \int_{u_1}^1 \lambda(u) du$:

$$\lambda_{k,1} = \lambda_{k,3} = \frac{1}{1 - 2 \cdot (u_0^3 - 1/2 \cdot u_0^4) - 2 \cdot (u_1^3 - 1/2 \cdot u_1^4)} \quad 4.72$$

4.6.3 Integration der Disaggregierungsfunktionen

Die Funktionen ρ_h und ρ_d ordnen – im Gegensatz zu stochastischen Disaggregierungsmethoden – jedem Zeitpunkt eine definierte Niederschlagsintensität zu. Darin entsprechen sie

beispielsweise der genannten DVWK-Verteilung. Im Gegensatz zu konventionellen deterministischen Ansätzen wie der DVWK-Verteilung sind ρ_h und ρ_d sowie deren erste Ableitungen jedoch stetig.

Angenommen, die reale zeitliche Niederschlagsvariabilität wird durch eine zeitliche Auflösung von 5 Minuten für die hydrologische Modellierung ausreichend erfasst. Dann sind bei konventioneller Vorgehensweise 12 Zeitschritte je Stunde bzw. 288 Zeitschritte je Tag zu lösen. Durch Rückgriff auf ρ_h oder ρ_d wird der Zuwachs an Rechenaufwand vergleichsweise gering gehalten.

Von einer numerischen Integration über eine Stunde oder einen Tag ist bei Verwendung von ρ_h oder ρ_d jedoch abzusehen. Hiervon wären numerische Integrationsalgorithmen wie ELS ähnlich überfordert wie in Abbildung 4.1 unten rechts gezeigt. Daher wird der Endzeitpunkt des externen Zeitschrittes t^1 durch eine Menge aufsteigend angeordneter Zeitpunkte $t^{[1:w]}$ ersetzt, die sukzessive als (temporäre) Endzeitpunkte dienen, wobei $t^{[w]} = t^1$.

Zur Vereinfachung sei weiterhin $t^0 = 0$ und $t^1 = 1$ angenommen. Gilt $\bar{P}^i = 0$, ist die Einführung von Zwischenzeitpunkten grundsätzlich nicht erforderlich, d. h. $w = 1$. Ansonsten ist bei Verwendung von ρ_h , falls $\alpha_h \geq 1/2$, ein zusätzlicher Zeitpunkt in der Intervallmitte anzusetzen, d. h. $w = 2$ und $t^{[1]} = 1/2$. Falls $\alpha_h < 1/2$ kommt je ein Zeitpunkt zu Ereignisbeginn und -ende hinzu, d. h. $w = 4$, $t^{[1]} = 1/2 - \alpha_h$, $t^{[2]} = 1/2$ und $t^{[3]} = 1/2 + \alpha_h$.

Bei Verwendung von ρ_d empfiehlt sich die getrennte Berechnung von Zwischenzeitpunkten für $\rho_{h,1}$, $\rho_{h,2}$ und $\rho_{h,3}$ wie für ρ_h beschrieben. Aufgrund der möglichen Überlappungen bei großen Werten von α_d oder kleinen Werten von β_d ist die aufsteigende Anordnung aller Zeitpunkte durch algorithmische Sortierung zu gewährleisten. Maximal werden neun zusätzliche Zeitpunkte hinzugefügt, d. h. $w \leq 10$.

Alle resultierenden Integrationsintervalle enthalten Überlagerungen von λ -Segmenten gemäß Gleichung 4.65. Somit stellen diese Überlagerungen stetig differenzierbare Polynome (maximal) dritten Grades dar, welche ab Verwendung von Lobatto-III(4) fehlerfrei gelöst werden. Dies entspricht ohne zusätzliche Fixpunktiteration vier Funktionsaufrufen. Im reinen Quadraturfall (z. B. beim vollständigen Sammeln des Niederschlages in einem ausreichend großen Interzeptionsspeicher) läge das korrekte Ergebnis bei der Stundenwert-Disaggregation nach maximal 8 und bei der Tageswert-Disaggregation nach maximal 40 Funktionsaufrufen vor; die erforderliche Bestätigung durch das nachfolgende IRK hinzugenommen bei maximal 16 bzw. 70 Funktionsaufrufen.

Folgendes ist bei der Integration nicht überlagerter λ -Segmente ist zu beachten: Trotz falscher Wiedergabe des zeitlichen Verlaufes durch Polynome ersten und zweiten Grades liefern diese bei Anwendung von ELS korrekte Integralwerte. Derartige Phänomene zeigen sich häufig bei der Anwendung symmetrisch angeordneter Auswertungsstellen auf regelmäßig konstruierte Quadraturprobleme. Die vorliegende Besonderheit ist der effizienten bilanz-

treuen Integration zunächst dienlich. Beispielsweise sind im oben diskutierten reinen Quadraturfall deutlich weniger Funktionsaufrufe notwendig als angegeben. Allerdings ist ein vorzeitiger Abbruch der IRK-Sequenz bei möglicher Aufteilung des Integrationsintervalls problematisch. Solange die Polynome den zeitlichen Verlauf nicht korrekt erfassen, sind die für die Teilabschnitte ermittelten Integralwerte fehlerhaft. Die Kombination des in Abschnitt 4.5.1 beschriebenen Diskretisierungsansatzes mit der Disaggregierungsfunktion ρ_h oder ρ_d kann so zu Bilanzfehlern jenseits der geforderten Rechengenauigkeit führen. Daher ist bei dieser Methodenkombination für alle betroffenen Integrationsintervalle ein Abbruch der Sequenz vor Verwendung von Lobatto-IIIA(4) bzw. Lobatto-IIIA(6) mittels einer zusätzlichen Abfrage auszuschließen.

4.6.4 Ermittlung der Funktionsparameter

Dieser Abschnitt beschreibt die Einbringung subskaliger Niederschlagseigenschaften in die deterministischen Disaggregierungsfunktionen ρ_h und ρ_d . Diese erfolgt über die Wertebelegung von α_h bzw. α_d und β_d (für den dritten Parameter von ρ_d gilt wie in Abbildung 4.7 weiterhin grundsätzlich $\gamma_d = 2$). Zunächst sei das Vorliegen subskaliger Informationen vorausgesetzt, deren statistische Abschätzung findet in Abschnitt 4.6.5 Erläuterung.

Die zentrale Annahme ist, dass hydrologische Modelle unter allen subskaligen Niederschlagscharakteristika am sensitivsten auf die Streuung der Intensität reagieren. Die relative Variabilität der Niederschlagsintensität sei quantifiziert über:

$$\sigma(\cdot) = \sqrt{\int_0^1 (\rho(\tau, \cdot) - 1)^2 d\tau} \quad 4.73$$

Beispielsweise ergibt sich unter Verwendung von ρ_h in Gleichung 4.73 für $\alpha_h = 1/2$ die relative Variabilität zu $\sigma_h = \sqrt{\int_0^1 (\rho_h(\tau, 1/2) - 1)^2 d\tau} \approx 0.697$.

Die Disaggregierung von Stundenwerten erfordert das Vorliegen einer Inversen von Gleichung 4.73, die jedem vorab geschätzten Variabilitätswert $\hat{\sigma}_h$ den korrespondierenden Wert des Parameters α_h zuordnet. Diese ist nur näherungsweise bestimmbar. Gesucht sei eine akzeptable Approximation im Intervall $0.01 \leq \hat{\sigma}_h \leq \sqrt{11}$ (siehe Abschnitt 4.6.5). Mit Hilfe einer logarithmischen Transformation und unter Berücksichtigung der Diskontinuität bei $\alpha_h = 1/2$ über den Hilfstern

$$\tilde{\sigma}_h = \ln(\hat{\sigma}_h) - \ln(0.697) \quad 4.74$$

findet sich:

$$\alpha_h = \exp\left(-0.683 - 0.521 \cdot \tilde{\sigma}_h - 0.623 \cdot \max(\tilde{\sigma}_h, 0)^{1.639}\right) \quad 4.75$$

Gleichung 4.73 stellt diesen Zusammenhang graphisch dar. Damit ermittelte Werte von α_h resultieren in Variabilitätswerten $\check{\sigma}_h$, die im gesamten Intervall vom vorgegebenen Wert $\hat{\sigma}_h$

um weniger als 2% abweichen. Durch eine aufwendigere Näherungsfunktion ließe sich die Maximalabweichung weiter reduzieren, was im Rahmen zu erwartender Unsicherheiten von $\hat{\sigma}_h$ aber nicht gerechtfertigt erscheint.

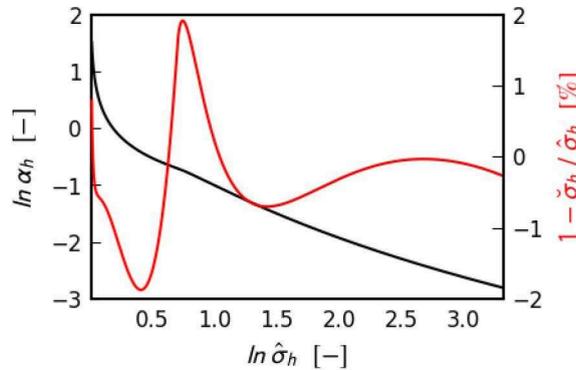


Abbildung 4.8: Veranschaulichung der Parametrisierung der Disaggregierungsfunktion ρ_h . Die schwarze Line zeigt den ermittelten Zusammenhang zwischen der vorab statistisch abzuschätzenden relativen Niederschlagsvariabilität im jeweiligen Stundenintervall ($\hat{\sigma}_h$) und dem Disaggregierungsparameter α_h (linke Ordinate). Die rote Line zeigt die prozentuale Abweichung zwischen $\hat{\sigma}_h$ und der aus der Anwendung der Schätzung von α_h resultierenden relativen Niederschlagsvariabilität ($\tilde{\sigma}_h$) über den relevanten Wertebereich von $\hat{\sigma}_h$ (rechte Ordinate).

Gegenüber der Stundenwertsimulation spielt die zeitliche Verteilung der Niederschlagsintensität in der Tageswertsimulation eine größere Rolle. Hierzu wird die Annahme getroffen, dass ausgeprägte Modellsensitivität weniger hinsichtlich der Zeitpunkte einzelner Niederschlagsimpulse vorliegt als vielmehr hinsichtlich der zeitlichen Abstände zwischen den Niederschlagsimpulsen. Als Maß für die zeitliche Verteilung im Intervall dient die Abweichung von der Schwerpunktzeit:

$$\delta(\cdot) = \sqrt{\int_0^1 \rho(\tau, \cdot) \cdot (\tau - 1/2)^2 d\tau} \quad 4.76$$

Die Einhaltung von δ in der Stundenwertdisaggregation ist, da der einzige freie Parameter α_h von ρ_h bereits zur näherungsweisen Einhaltung von σ_h dient, grundsätzlich nicht zu gewährleisten. In der Tageswertdisaggregation mittels ρ_d besteht in Form von β_d ein zusätzlicher Freiheitsgrad. Dieser wird zwar genutzt, in Bezug auf die Genauigkeit der zu ermittelnden Inversbeziehungen wird jedoch der Einhaltung von σ_d gegenüber der von δ_d Priorität eingeräumt. Zur Vereinfachung des Inversproblems wird zunächst β_d basierend auf der statistisch abzuschätzenden Schwerpunktabweichung $\hat{\delta}_d$ festgelegt und anschließend α_d ermittelt.

Geht α_d gegen null, resultiert nach Einsetzen von ρ_d in Gleichung 4.76 $\delta_d = \beta_d/\sqrt{2}$. Der Wert des Disaggregierungsparameters β_d wird grundsätzlich über die korrespondierende Inversbeziehung ermittelt:

$$\beta_d = \sqrt{2} \cdot \hat{\delta}_d \quad 4.77$$

Gleichung 4.77 erfüllt Gleichung 4.76 mit großer Genauigkeit, wenn $\hat{\delta}_d$ große Werte annimmt, aus denen kleine Werte von α_d resultieren. Zudem erfüllt Gleichung 4.77 „automatisch“ Gleichung 4.76 mit großer Genauigkeit, wenn $\hat{\delta}_d$ kleine Werte annimmt. Dies hat große Werte von α_d zur Folge, sodass der Intensitätsverlauf jedes Ereignisses im betrachteten Intervall annähernd konstant und dessen genaue Position vernachlässigbar ist. Geht α_d gegen unendlich, gilt $\delta_d \approx 0.288$ für alle Werte von β_d im Intervall $[0, 1/2]$.

Die approximative Einhaltung von Gleichung 4.73 unter Verwendung von ρ_d für alle zu erwartenden Wertepaare von $\hat{\delta}_d$ und $\hat{\delta}_d$ bzw. β_d erfolgt mittels bilinearer Interpolation. Durch Logarithmieren sowohl von $\hat{\delta}_d$ und β_d als auch von α_d lässt sich die ausgeprägte Nichtlinearität des Problems abmildern und so die Interpolationsgüte erhöhen.

Konstruiert wird ein (im logarithmischen Raum) gleichmäßiges Gitter mit 60^2 Gitterpunkten in den Grenzen $\ln(0.1)$ und $\ln(17.0)$ für $\hat{\delta}_d$ sowie $\ln(0.01)$ und $\ln(0.30)$ für β_d . Mittels iterativer Näherung wird für jeden Gitterpunkt ein Wert von α_d bestimmt, welcher $\hat{\delta}_d$ mit großer Genauigkeit einhält. Der korrespondierende $\ln\alpha_d$ -Wert wird gespeichert. In späteren Simulationsrechnungen werden die gespeicherten $\ln\alpha_d$ -Werte eingelesen und zur bilinearen Interpolation verwendet, deren Ergebnis in Abbildung 4.9 veranschaulicht ist.

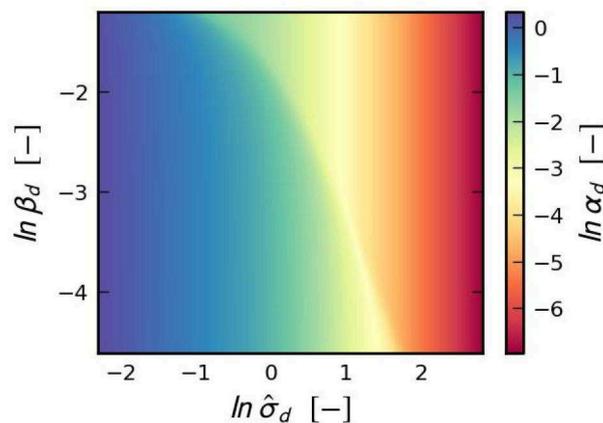


Abbildung 4.9: Veranschaulichung der Parametrisierung der Disaggregierungsfunktion ρ_d . Die jeweilige Farbstufe entspricht dem Wert des Disaggregierungsparameters α_d , welcher bei gegebener statistisch abgeschätzter relativer Niederschlagsvariabilität im jeweiligen Tagesintervall ($\hat{\delta}_d$) und bereits festgelegter Wertebelegung des Disaggregierungsparameters β_d zu einer resultierenden relativen Niederschlagsvariabilität ($\check{\sigma}_d$) führt, die $\hat{\delta}_d$ annähert.

Die bilineare Interpolation ist zeiteffizient, erfordert zur Einhaltung einer akzeptablen Genauigkeit allerdings eine relativ große Anzahl an Gitterpunkten. Deren Anzahl (60^2) wurde so festgelegt, dass Interpolationsfehler – gemessen als Abweichung der resultierenden Variabilität $\check{\sigma}_d$ von der vorgegebenen Variabilität $\hat{\sigma}_d$ – wie in der Stundenwert-Disaggregation im gesamten betrachteten Bereich kleiner 2 % ausfallen. Nach Abbildung 4.10 treten die größten relativen Fehler entlang einer etwa diagonalen Linie auf, welche sich auch in Abbildung 4.9 in Form eines steilen Gradienten zeigt. Die Punktartigkeit des blauen Farbenzugs (Überschätzung) sowie des roten Farbenzugs (Unterschätzung) resultiert aus der Zunahme der Interpolationsfehler hin zur Rasterzellenmitte.

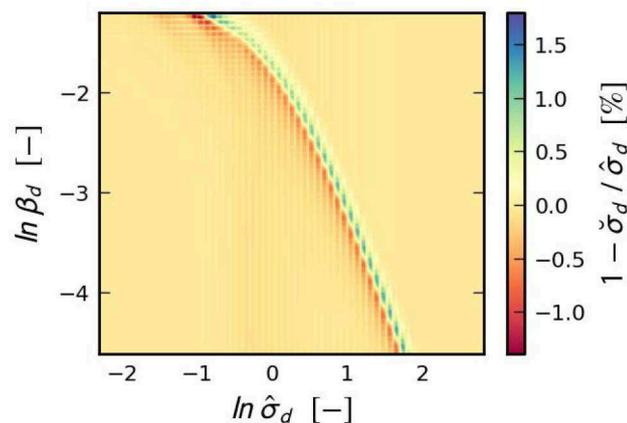


Abbildung 4.10: Abweichung von der geforderten Variabilität. Die jeweilige Farbstufe entspricht der prozentualen Abweichung zwischen der vorab statistisch abgeschätzten ($\hat{\sigma}_d$) und der aus der bivariaten Interpolation entsprechend Abbildung 4.9 resultierenden ($\check{\sigma}_d$) relativen Niederschlagsvariabilität im jeweiligen Tagesintervall.

4.6.5 Schätzung subskaliger Niederschlagseigenschaften

Abschnitt 4.6.4 legt dar, wie die Parameter α_h bzw. α_d und β_d der Disaggregierungsfunktionen ρ_h und ρ_d zur annähernden Einhaltung subskaliger Niederschlagscharakteristika genutzt werden können. Dieser Abschnitt zielt auf die Ermittlung von Regressionsbeziehungen zur Abschätzung der ausgewählten Charakteristika $\hat{\sigma}_h$ sowie $\hat{\sigma}_d$ und $\hat{\delta}_d$ ab.

Die Regressionsanalysen werden exemplarisch für drei Messstationen des Deutschen Wetterdienstes (DWD) durchgeführt. Für die nordrhein-westfälischen DWD-Stationen Essen-Bredeneu, Herford und Siegen liegen lange Niederschlagsreihen in wenigstens 5-minütiger Auflösung vor. Alle Reihen sind im betrachteten Zeitraum 1972-2005 kaum von Fehlwerten betroffen und zeigen in Plausibilitätstests keine Auffälligkeiten.

Als möglicher Prädiktor wird neben der Niederschlagssumme der Temperaturmittelwert herangezogen. Damit vergrößert sich der für die hydrologische Modellierung benötigte Datenumfang i. d. R. nicht. Eine ausreichend lange und vollständige Messreihe der Lufttemperatur liegt lediglich für Essen-Bredeneu vor. Für Herford wird behelfsweise die Reihe der DWD-Station Bad Salzuflen herangezogen, für Siegen die der DWD-Station Gießen.

Für jedes Stundenintervall in dem Niederschlag fällt berechnet sich die relative Variabilität der Intensität ($\sigma_{h,5m}$) über die Standardabweichung der auf die Intensität 1 mm/h normierten 5-Minuten-Werte (vgl. Gleichung 4.73 und das Rechenbeispiel im folgenden Absatz).

An der Station Essen-Bredeneby wurde in ca. 21 % aller Stundenintervalle Niederschlag registriert. Abbildung 4.11 trägt deren $\sigma_{h,5m}$ -Werte gegen die jeweilige Niederschlagssumme P_h auf. Die markante obere Grenze von $\sigma_{h,5m}$ entspricht dem Extremfall, dass die gesamte Stundensumme des Niederschlages in einem einzelnen 5-Minuten-Zeitfenster fällt. Die Intensität in diesem Intervall beträgt nach Normierung 12 mm/h , die der übrigen elf Intervalle 0 mm/h , d. h. $\sigma_{h,5m} = \sqrt{1/12 \cdot (12 - 1)^2 + 11/12 \cdot (0 - 1)^2} = \sqrt{11}$. Die untere Grenze der Variabilität ($\sigma_{h,5m} = 0$) entspricht einer (im Rahmen der messtechnischen Genauigkeit) gleichbleibenden Intensität über alle 5-Minuten-Teilintervalle, was in ca. 2 % aller Stundenintervalle mit $P_h > 0$ zutrifft.

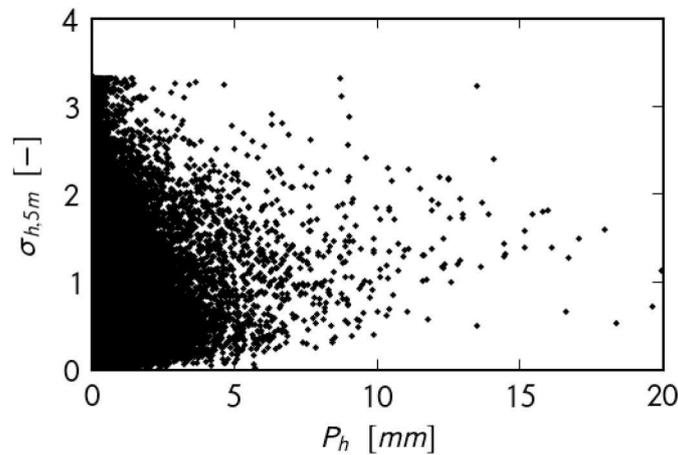


Abbildung 4.11: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlages ($\sigma_{h,5m}$) vs. der Niederschlagssumme (P_h) einzelner Stundenfenster, DWD-Station Essen-Bredeneby.

Abbildung 4.11 deutet an, dass in der Stundenwertbetrachtung für die Station Essen-Bredeneby kein deutlicher Zusammenhang zwischen $\sigma_{h,5m}$ und der Summe des Niederschlages besteht. Gleiches gilt für die Lufttemperatur als potenziellem Prädiktor sowie für die beiden anderen DWD-Stationen. Für die Stundenwert-Disaggregation ist $\hat{\sigma}_h$ daher konstant zu halten. Die arithmetischen Mittel aller $\sigma_{h,5m}$ -Werte der drei Stationen finden sich in Tabelle 4.9.

Tabelle 4.9: Mittlere Niederschlagsvariabilität in Stundenintervallen.

	Essen	Herford	Siegen
$\hat{\sigma}_h$	0,90	1,21	0,95

Für die Station Herford zeigt sich gegenüber Essen-Bredeneu und Siegen eine deutlich erhöhte mittlere relative Variabilität der Niederschlagsintensität. Die naheliegende Frage, ob bzw. wie stark dieser Unterschied auf Messunsicherheit zurückzuführen ist, lässt sich mit Hilfe der vorliegenden Daten nicht beantworten.

In der Tagesintervallbetrachtung zeigt die relative Niederschlagsvariabilität ($\sigma_{d,5m}$) ausgeprägte Abhängigkeiten zu den gewählten Prädiktoren. $\sigma_{d,5m}$ nimmt mit zunehmender Niederschlagsmenge (P_d) deutlich ab (Abbildung 4.12) und steigt mit zunehmender Temperatur (T_d) leicht an (Abbildung 4.13). Ersteres ist aufgrund der i. d. R. gleichmäßigeren relativen Verteilung großer Niederschlagsmengen über den Tag naheliegend. Die leichte Zunahme im Bereich höherer Temperaturen könnte auf die sommerliche Steigerung konvektiver Niederschlagsanteile zurückzuführen sein.

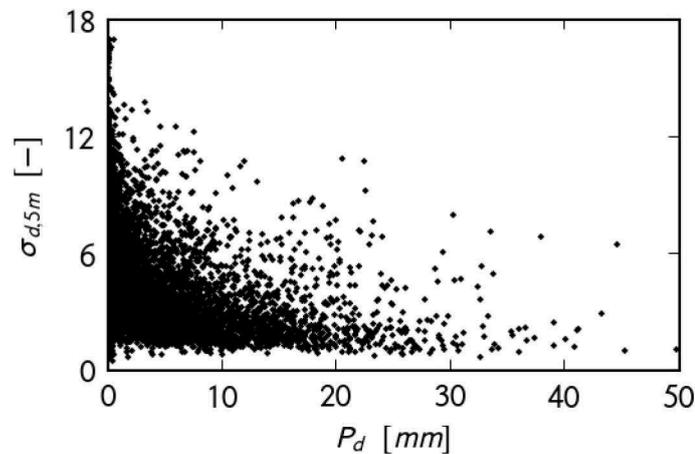


Abbildung 4.12: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\sigma_{d,5m}$) vs. der Niederschlagssumme (P_d) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu.

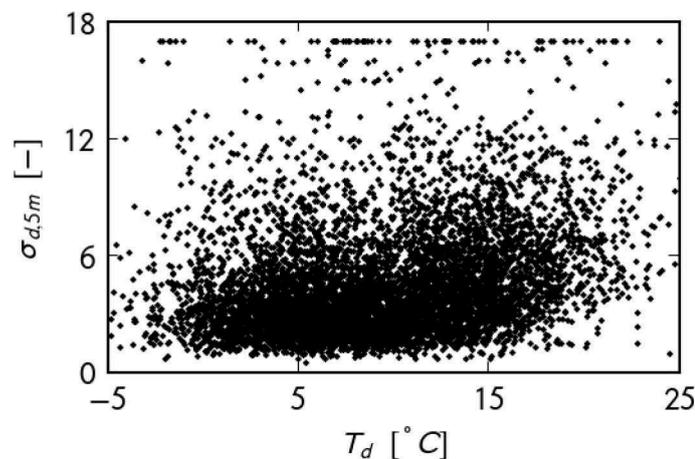


Abbildung 4.13: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\sigma_{d,5m}$) vs. der Mitteltemperatur (T_d) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu.

In ca. 56 % aller Tagesintervalle wurde Niederschlag registriert. Der Maximalwert für $\sigma_{d,5m}$ von $\sqrt{287}$ tritt, wegen der geringen Wahrscheinlichkeit des Abregnens des gesamten Niederschlags in nur einem 5-Minuten-Zeitfenster, nur selten und nur bei kleinen Niederschlags-Tagessummen auf. Eine konstante Niederschlagsintensität über alle 5-Minuten-Intervalle findet sich in keinem Fall, der kleinste bestimmte Wert von $\sigma_{d,5m}$ beträgt ca. 1/2.

Die folgende Regressionsbeziehung wird für alle Stationen zur Abschätzung von $\hat{\sigma}_d$ herangezogen:

$$\hat{\sigma}_d = c_1 - c_2 \cdot \ln(P_d) + c_3 \cdot \exp(c_4 \cdot T_d) \quad 4.78$$

Die im Vergleich zur Stichprobengröße gering gewählte Anzahl an Regressionsparametern soll die Vergleich- und Übertragbarkeit der ermittelten Parameterwerte erhöhen (Tabelle 4.10). Durch aufwendigere Gleichungen ließen sich die Bestimmtheitsmaße (R^2) von 33,8 % für Herford bis 41,1 % für Siegen zwar weiter erhöhen, diese blieben allerdings in jedem Fall deutlich unterhalb 50 %. Ein darüber hinausgehender Anteil an erklärter Varianz ließe sich lediglich unter Hinzunahme weiterer Prädiktoren erzielen.

Tabelle 4.10: Regression zur relativen Niederschlagsvariabilität in Tagesintervallen.

	Essen	Herford	Siegen
c_1	3,46	3,99	3,30
c_2	0,94	0,98	0,97
c_3	0,62	0,52	0,51
c_4	0,09	0,09	0,09
R^2	36,9 %	33,8 %	41,1 %

Zur Ermittlung der Abweichung von der Schwerpunktzeit ($\delta_{d,5m}$) wird angenommen, dass der Niederschlag eines jeden 5-Minuten-Intervalls ausschließlich in der Intervallmitte (2.5 min, 7.5 min, ..., 1437.5 min) fällt. Durch die mit den jeweiligen Niederschlagswerten gewichtete Mittelung dieser Zeitpunkte ergibt sich die Schwerpunktzeit. Aus der gewichteten Mittelung der quadrierten zeitlichen Abstände zur Schwerpunktzeit nach Gleichung 4.76 resultiert $\delta_{d,5m}$ (wobei die relative Schwerpunktzeit 1/2 der Disaggregierungsfunktion ρ_d durch die jeweils aus den Daten bestimmte Schwerpunktzeit zu ersetzen ist).

Der Rechengang sei erneut anhand der Extremfälle veranschaulicht. Fällt der gesamte Tagesniederschlag in einem einzigen 5-Minuten-Intervall, entspricht dessen Intervallmitte der Schwerpunktzeit. Der zeitliche Abstand dieses Intervalls zur Schwerpunktzeit beträgt null, die zeitlichen Abstände der übrigen Intervalle werden mit der Niederschlagsmenge null ge-

wichtet, folglich beträgt auch deren Summe null, d. h. $\delta_{d,5m} = 0$. Fällt der gesamte Tagesniederschlag dagegen ausschließlich und zu gleichen Teilen im ersten und im letzten 5-Minuten-Intervall, liegt die Schwerpunktzeit exakt in der Tagesmitte (720 min). Die Intensität in den beiden randständigen Intervallen beträgt nach Normierung 144 mm/d , in den übrigen 286 Intervallen 0 mm/d . Die relative Abweichung von der Schwerpunktzeit ergibt sich zu

$$\delta_{d,5m} = \sqrt{\left(\frac{144}{288} \cdot \left(\frac{2.5}{1440} - \frac{720}{1440}\right)^2 + \frac{0}{288} \cdot \left(\frac{7.5}{1440} - \frac{720}{1440}\right)^2 + \dots + \frac{144}{288} \cdot \left(\frac{1437.5}{1440} - \frac{720}{1440}\right)^2\right)} \approx \frac{1}{2}.$$

Für $\delta_{d,5m}$ besteht nur in Bezug auf die Niederschlagssumme eine relevante Abhängigkeit. Der ermittelte univariate Zusammenhang ist exemplarisch für die Station Essen-Bredeneay in Abbildung 4.14 dargestellt. Erwartungsgemäß weisen Tage mit wenig Niederschlag tendenziell kleinere Abweichungen von der Schwerpunktzeit auf.

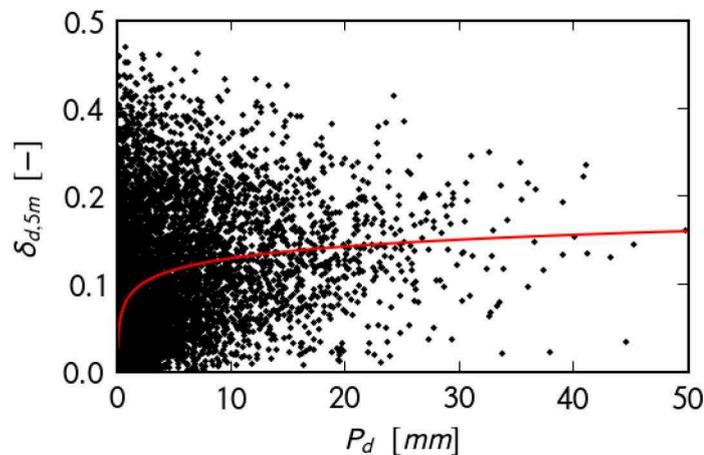


Abbildung 4.14: Relative Schwerpunktabweichung der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\delta_{d,5m}$) vs. der Niederschlagssumme (P_d) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneay. Die ermittelte univariate Regressionsbeziehung ist rot eingezeichnet.

Für alle drei Stationen wird die folgende Regressionsbeziehung zur Abschätzung von $\hat{\delta}_d$ herangezogen:

$$\hat{\delta}_d = c_1 + c_2 \cdot \ln(P_d) \quad 4.79$$

Die in Tabelle 4.11 gegebenen Regressionskoeffizienten zeigen eine ausgeprägte Ähnlichkeit der ermittelten Zusammenhänge. In allen Fällen wird nur etwa 20 % der Varianz der $\delta_{d,5m}$ -Werte erklärt.

Tabelle 4.11: Regression zur relativen Schwerpunktabweichung in Tagesintervallen.

	Essen	Herford	Siegen
c_1	0,107	0,099	0,116
c_2	0,024	0,025	0,028
R^2	16,8%	16,8%	21,7%

Die Flexibilität von ρ_d in der Einhaltung der Schwerpunktabweichung ist infolge der Fixierung von $\gamma = 2$ begrenzt. Zu erwartende Vorgaben gemäß Gleichung 4.79 und Tabelle 4.11 können jedoch erfüllt werden. Wie Abbildung 4.14 für Station Essen-Bredeneay zeigt, bleibt die Ausgleichsline auch für hohe Niederschlagssummen deutlich unterhalb 0,2. Der in Abbildung 4.9 gezeigte Interpolationsbereich erstreckt sich bis $\beta_d = 0,3$. Nach Gleichung 4.77 sind damit Schwerpunktabweichungen bis $\hat{\delta}_d \approx 0,21$ erfassbar. Eine deutliche Erweiterung von ρ_d hin zu größeren Schwerpunktabweichungen ließe sich durch Freigabe des Parameters γ bewerkstelligen. Mit Verringerung von γ werden die beiden randständigen Ereignisse dominanter und der oben diskutierte Extremfall ($\delta_{d,5m} \approx 1/2$) kann angenähert werden.

Die ermittelten Regressionsbeziehungen lassen einen großen relativen Anteil an Streuung unerklärt. Dieser Anteil fällt für die $\sigma_{d,5m}$ -Werte zwar geringer aus als für die $\delta_{d,5m}$ -Werte, ersteres erscheint im Rahmen der in Abschnitt 4.6.4 angestellten Relevanzüberlegungen jedoch als problematischer. Folglich sind – zumindest unter alleiniger Verwendung der Niederschlagssumme und der Temperatur als Prädiktoren – Disaggregierungsverfahren, welche die Restvarianz stochastisch berücksichtigen, gegenüber dem beschriebenen statistisch-deterministischen Ansatz theoretisch im Vorteil. Gegenüber der Annahme konstanter Niederschlagsintensitäten ($\sigma = 0$) ist allerdings selbst die Verwendung des Erwartungswertes der $\sigma_{h,5m}$ -Werte ohne jede Varianzerklärung theoretisch von Vorteil. Untersuchungen zu praktischen Vor- und Nachteilen werden in Abschnitt 4.8 angestellt.

4.7 Modellimplementierung

Im Folgenden wird anhand der modifizierten Horton-Infiltration (Abschnitt 3.2.1), HBV₉₆ (Abschnitt 3.2.2) und LARSIM_{ME} (Abschnitt 3.2.3) die mit den eingeführten Integrations-techniken kompatible Notation der Prozessgleichungen konzeptioneller Speichermodelle erörtert. Die Gliederung folgt der vertikalen Prozessfolge von der Interzeption (Abschnitt 4.7.1) bis zur Abflusskonzentration (Abschnitt 4.7.4). Aufgrund der strukturellen Ähnlichkeit von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} werden die korrespondierenden Modellkomponenten parallel abgehandelt. Die Umsetzung der speicherbasierten Horton-Infiltration wird separat in Abschnitt 4.7.5 diskutiert.

Die Darstellung ist nicht auf Vollständigkeit ausgelegt, sondern fokussiert auf die grundlegenden Prinzipien sowie die kritischen Punkte. Gleichungen die keine Differenzialgleichungen darstellen, beispielsweise zur Modifikation der Eingangsdaten, bleiben unberücksichtigt. Umfangreichere Modellbeschreibungen und Diskussionen zur Modellkonzeption finden sich in Abschnitt 3.2 sowie der darin zitierten Literatur.

In den folgenden Gleichungen wird vereinfachend auf alle Indizes zur Berücksichtigung zeitlicher und räumlicher Differenzierungen verzichtet. Ebenso soll von der Angabe der Einheiten der Parameter sowie der Speicher- und Flussgrößen abgesehen werden, die sich in aller Regel selbsterklärend aus den Basiseinheiten mm , $^{\circ}C$ und – je nach externer Zeitschrittweite – d oder h zusammensetzen. Vollständigere Notationen finden sich in Tyralla und Schumann (2013).

4.7.1 Interzeption

Die „oberste“ Modellkomponente ist das Interzeptionsmodul. Die Umsetzung in HBV₉₆ und LARSIM_{ME} ist, bis auf die nur für LARSIM_{ME} gegebene Möglichkeit zur monatsweisen Variation der Interzeptionskapazität in Anlehnung an die jahreszeitliche Entwicklung des Blattflächenindex, strukturell identisch. Mit den HBV₉₆-Variablenbezeichnungen lautet die Differenzialgleichung der Interzeptionsspeicherung (IC):

$$\frac{dIC}{dt} = Pc(t) - TF(t) - EI(t) \quad 4.80$$

Der unter anderem höhenkorrigierte Niederschlag Pc kann im Modellframework HydPy gemäß den in Abschnitt 4.6 eingeführten Disaggregierungsfunktionen auch innerhalb externer Zeitschritte zeitvariabel angesetzt werden.

Niederschlag durchfällt (TF , throughfall) den Interzeptionsspeicher, wenn dessen Kapazität ($ICMAX$) erreicht ist und der Niederschlag die (korrigierte) potenzielle Evapotranspiration (EPC) überschreitet. Dies kann nach dem discontinuity locking-Ansatz (DL) formuliert werden zu:

$$TF(t) = \begin{cases} Pc(t) - EPC(t) & | \ (IC(t_0) \geq ICMAX) \wedge (Pc(t_0) > EPC(t_0)) \\ 0 & | \ (IC(t_0) < ICMAX) \vee (Pc(t_0) \leq EPC(t_0)) \end{cases} \quad 4.81$$

Wie in Abschnitt 4.5.1 erläutert, findet auf der „Funktionsseite“ der aktuelle Zeitpunkt (t) und auf der „Bedingungsseite“ der Zeitpunkt zu Beginn des aktuellen Integrationsintervalls (t_0) Verwendung. Durch die Verwendung von „ \geq “ statt „ $=$ “ als Vergleichsoperator in der Teilbedingung $IC(t_0) \geq ICMAX$ wird die Möglichkeit der Überschreitung der Interzeptionskapazität im Rahmen der geforderten Rechengenauigkeit berücksichtigt.

Unter Verwendung des Regularisierungsansatzes gemäß Abschnitt 4.5.2 kann der durchfallende Niederschlag alternativ berechnet werden durch:

$$TF(t) = Pc(t) \cdot \hat{f}_1(IC(t) - IC_{MAX}, s_1) \quad 4.82$$

Durch die Übergabe der Differenz $IC(t) - IC_{MAX}$ wird die Glättungsfunktion \hat{f}_1 so an IC_{MAX} ausgerichtet, dass sie für $IC(t) = IC_{MAX}$ den Wert $1/2$ annimmt. IC_{MAX} ist infolge der Regularisierung nicht der größtmögliche Wert der Interzeptionsspeicherung, sondern derjenige Wert, bei dem Niederschlag die Vegetationsschicht zu 50 % passiert und zu 50 % von dieser zurückgehalten wird. Die auf der Vegetationsschicht gespeicherte Wassermenge kann IC_{MAX} um ein Vielfaches der geforderten Rechengenauigkeit überschreiten.

Das Ausmaß dieser Überschreitungsmöglichkeit bestimmt maßgeblich der Glättungsparameter s_1 . Bei kleinen Werten von s_1 nimmt \hat{f}_1 bereits bei geringer Unterschreitung von IC_{MAX} annähernd den Wert null an und bei geringer Überschreitung annähernd den Wert eins, d. h. der grobe Verlauf des Originalzusammenhangs bleibt weitgehend erhalten. Siehe Abschnitt 4.5.2 für eine ausführliche Diskussion zur Wertebelegung der Glättungsparameter.

Die Interzeptionsverdunstung (EI) entspricht der (korrigierten) potenziellen Verdunstung (EPc), solange der Interzeptionsspeicher Wasser enthält oder der Niederschlag die potenzielle Verdunstung überschreitet. Ansonsten entspricht die Interzeptionsverdunstung dem einfallenden Niederschlag bzw. dem Wert null, falls kein Niederschlag fällt. Nach den obigen Überlegungen ist dies DL-kompatibel wie folgt zu notieren:

$$EI(t) = \begin{cases} EPc(t) & | (IC(t_0) > 0) \vee (Pc(t_0) \geq EPc(t_0)) \\ Pc(t) & | (IC(t_0) \leq 0) \wedge (Pc(t_0) < EPc(t_0)) \end{cases} \quad 4.83$$

Gemäß dem verfolgten Regularisierungsansatz wird auch zur Berechnung der Interzeptionsverdunstung die Glättungsfunktion \hat{f}_1 herangezogen, welche allerdings am (ursprünglichen) Minimalwert der Interzeptionsspeicherung von null ausgerichtet wird:

$$EI(t) = EPc(t) \cdot \hat{f}_1(IC(t) - 0, s_1) \quad 4.84$$

Die Regularisierung des Minimums hat zur Folge, dass die tatsächliche Verdunstung bei einem Speicherinhalt von null 50 % der potenziellen Verdunstung beträgt. Damit kann die Interzeptionsspeicherung, jenseits der geforderten Rechengenauigkeit, negative Werte annehmen. Dies muss sich selbst bei großer Glättung (bzw. großen s_1 -Werten) nicht negativ auf das Systemverhalten auswirken. Zum einen erscheint ein kontinuierliches Ausklingen der Interzeptionsverdunstung plausibler als deren plötzlicher Abbruch. Zum anderen steuern langfristig nicht die absoluten Werte der minimalen und der maximalen Interzeptionsspeicherung das Systemverhalten, sondern deren Differenz.

Der Definition der einzelnen Flüsse folgend, können bei der numerischen Lösung von Gleichung 4.80 nach dem DL-Ansatz aufgrund von drei Diskontinuitäten zustandsabhängige Ereignisse auftreten.

Erstens reagiert der durchfallende Niederschlag beim Erreichen der Interzeptionskapazität unstetig. Zur Definition der korrespondierenden Diskontinuitätsfunktion (E , Gleichung 4.38) seien die benötigte Grenzwertfunktion Ξ und die benötigte Vergleichswertfunktion ξ :

$$\begin{aligned}\Xi_{1,t} &= ICMAX \\ \xi_{1,t} &= IC(t) \\ T_{1,t^0} &= [IC(t^0) < ICMAX]\end{aligned}\tag{4.85}$$

Die zusätzliche Bedingungsfunktion (T) gewährleistet, dass die über Ξ und ξ definierte Diskontinuitätsfunktion nur beim Überschreiten der Interzeptionskapazität wirksam wird, d. h. während der Anfeuchtung. Beim Unterschreiten der Interzeptionskapazität während der darauffolgenden Abtrocknung bleibt sie dagegen unwirksam. Dies vermeidet unnötige Problemdiskretisierungen zu Beginn der Trocknungsphase mit zunächst vollem (bzw. im Rahmen der numerischen Genauigkeit übervollem) Interzeptionsspeicher.

Zweitens reagiert die Interzeptionsverdunstung bei der Entleerung des Interzeptionsspeichers unstetig. Grenzwert-, Vergleichswert- und Bedingungsfunktion sind analog zu Gleichung 4.85 formulierbar:

$$\begin{aligned}\Xi_{2,t} &= 0 \\ \xi_{2,t} &= IC(t) \\ T_{2,t^0} &= [IC(t^0) > 0]\end{aligned}\tag{4.86}$$

Drittens können sowohl der durchfallende Niederschlag als auch die Interzeptionsverdunstung auf die Relation von Niederschlag und potenzieller Verdunstung unstetig reagieren. Bei zunächst vollem Speicher kommt es nach Unterschreitung der potenziellen Verdunstung durch den Niederschlag zur Abtrocknung. Infolgedessen nimmt der durchfallende Niederschlag den konstanten Wert null an. Bei zunächst leerem Speicher kommt es nach Überschreitung der potenziellen Verdunstung durch den Niederschlag zur Anfeuchtung. Infolgedessen wird die Interzeptionsverdunstung alleinig von der potenziellen Verdunstung abhängig. Dies sei zusammengefasst zu:

$$\begin{aligned}\Xi_{3,t} &= EPC(t) \\ \xi_{3,t} &= PC(t) \\ T_{3,t^0} &= [(IC(t^0) \leq 0) \vee (IC(t^0) \geq ICMAX)]\end{aligned}\tag{4.87}$$

Bei der Regularisierung der Prozessgleichungen korrespondiert Gleichung 4.82 mit Gleichung 4.85 und Gleichung 4.84 mit Gleichung 4.86. Für Gleichung 4.87 findet sich dagegen

keine Entsprechung. Die Regularisierung bindet die Ausgangsgrößen des Interzeptionsmoduls stärker an die aktuelle Speicherung. Der diskontinuierliche Effekt der Relation der Eingangsgrößen entfällt.

4.7.2 Schnee

Die Schneemodule von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} sind den Interzeptionsmodulen nachgeordnet, d. h. Schneeprozesse werden erst „unterhalb“ der interzeptierenden Vegetationsdecke modelliert. Die folgenden Erläuterungen beziehen sich auf die allgemeinere HBV₉₆-Implementierung.

Infolge der Differenzierung der Schneedecke in einen festen (*SP*) und eine flüssigen (*WC*) Anteil liegen zwei Differenzialgleichungen vor:

$$\frac{dSP}{dt} = SNOW(t) + REFR(t) - MELT(t) \quad 4.88$$

$$\frac{dWC}{dt} = RAIN(t) - MELT(t) - REFR(t) - IN(t) \quad 4.89$$

Bloß das HBV₉₆-Schneemodul berücksichtigt das (erneute) Gefrieren des in der Schneedecke gespeicherten flüssigen Wassers (*REFR*). Der Term entfällt in den Differenzialgleichungen von LARSIM_{ME}.

Der feste (*SNOW*) und der flüssige Anteil (*RAIN*) des durchfallenden Niederschlags sind die primären Einträge in *SP* und *WC*. In LARSIM_{ME} fällt Niederschlag entweder in flüssiger oder in fester Form, HBV₉₆ gestattet zudem Mischniederschläge in variablen Anteilen innerhalb des am Temperaturgrenzwert *TT* zentrierten Temperaturintervalls *TTINT*. Das Verhältnis von flüssigem Niederschlag und Gesamtniederschlag definiert sich über:

$$\frac{RAIN(t)}{Pc(t)} = \begin{cases} 0 & | \quad Tc(t^0) \leq TT - \frac{TTINT}{2} \\ \frac{Tc(t) - (TT - TTINT/2)}{TTINT} & | \quad TT - \frac{TTINT}{2} < Tc(t^0) \leq TT + \frac{TTINT}{2} \\ 1 & | \quad TT + \frac{TTINT}{2} < Tc(t^0) \end{cases} \quad 4.90$$

Zur Regularisierung der zwei Diskontinuitäten in Gleichung 4.90 kommt Glättungsfunktion \hat{f}_3 zur Anwendung:

$$\frac{RAIN(t)}{Pc(t)} = f_3 \left(\frac{Tc(t) - (TT - TTINT/2)}{TTINT}, s_3 \right) \quad 4.91$$

Es tritt der für Anwendungen von \hat{f}_3 typische Fall ein, dass statt der absoluten Werte Verhältnisse übergeben werden: im konkreten Fall hinsichtlich eines Temperaturintervalls normierte Temperaturabweichungen. Dies beeinflusst die Wirkung des Glättungsparameters s_3 .

Zur konsistenten Einhaltung der in Abschnitt 4.5.2 eingeführten Strategie zur Handhabung der Glättungsparameter ist in der (vor dem eigentlichen Simulationsbeginn) zu lösenden Gleichung 4.58 statt dem gewünschten Wert des Metaparameters Y_T das Verhältnis $Y_T/TTINT$ einzusetzen. Im Gegensatz zu s_1 und s_2 ist s_3 somit i. d. R. fallabhängig.

Die potenzielle Schmelze ($pMELT$) des gefrorenen Schneeanteils ergibt sich nach dem Grad-Tag-Verfahren über den Faktor $CFMAX$ und den Temperaturgrenzwert TTM in DL-kompatibler Form zu:

$$pMELT(t) = \begin{cases} CFMAX \cdot (Tc(t) - TTM) & | Tc(t_0) > TTM \\ 0 & | Tc(t_0) \leq TTM \end{cases} \quad 4.92$$

Analog zum (potenziellen) Einsetzen der Schmelze bei Überschreitung der Grenztemperatur erfolgt das (potenzielle) Gefrieren ($pREFR$) des flüssigen Schneeanteils proportional zur Unterschreitung der Grenztemperatur:

$$pREFR(t) = \begin{cases} CFR \cdot CFMAX \cdot (TTM - Tc(t)) & | Tc(t_0) < TTM \\ 0 & | Tc(t_0) \geq TTM \end{cases} \quad 4.93$$

CRF dient i. d. R. durch Belegung mit Werten kleiner eins als Verminderungsfaktor. Durch Setzen von CRF auf null wird ein Gefrieren des flüssigen Schneeanteils ausgeschlossen und die Schneeretention von HBV_{96} entspricht der von $LARSIM_{ME}$.

Unter Rückgriff auf Glättungsfunktion \hat{f}_2 sind die beiden obigen, in der ersten Ableitung un stetigen Prozessgleichungen wie folgt regularisierbar:

$$pMELT(t) = CFMAX \cdot \hat{f}_2(Tc(t) - TTM, s_2) \quad 4.94$$

$$pREFR(t) = CFR \cdot CFMAX \cdot \hat{f}_2(TTM - Tc(t), s_2) \quad 4.95$$

Das tatsächliche Schmelzen ($MELT$) und Gefrieren ($REFR$) entspricht den potenziellen Werten, solange festes bzw. flüssiges Wasser in der Schneedecke enthalten ist, ansonsten nur der jeweiligen Eingabegröße ($SNOW$ bzw. $RAIN$). Somit liegt ein Systemverhalten analog zur Interzeptionsverdunstung vor (s. Abschnitt 4.7.1). In Anlehnung an Gleichung 4.83 ergeben sich:

$$MELT(t) = \begin{cases} pMELT(t) & | (SP(t_0) > 0) \vee (SNOW(t_0) \geq pMELT(t_0)) \\ SNOW(t) & | (SP(t_0) \leq 0) \wedge (SNOW(t_0) < pMELT(t_0)) \end{cases} \quad 4.96$$

$$REFR(t) = \begin{cases} pREFR(t) & | (WC(t_0) > 0) \vee (RAIN(t_0) \geq pREFR(t_0)) \\ RAIN(t) & | (WC(t_0) \leq 0) \wedge (RAIN(t_0) < pREFR(t_0)) \end{cases} \quad 4.97$$

In Gleichung 4.84 zur Regularisierung der Interzeptionsverdunstung entfällt die Notwendigkeit, die Relation der Eingangsgrößen Pc und EPC explizit zu berücksichtigen. Gleiches ist für die Regularisierung von $MELT$ und $REFR$ bezüglich der Relation von $SNOW$ und $pMELT$ bzw. $RAIN$ und $pREFR$ der Fall:

$$MELT(t) = pMELT(t) \cdot \hat{f}_1(SP(t) - 0, s_1) \quad 4.98$$

$$REFR(t) = pREFR(t) \cdot \hat{f}_1(WC(t) - 0, s_1) \quad 4.99$$

Die Freisetzung von überschüssigem Niederschlags- oder Schmelzwasser erfolgt, sobald der flüssige Inhalt der Schneedecke einen durch WHC festgelegten Anteil des festen Inhalts überschreitet:

$$WC_{MAX}(t) = WHC \cdot SP(t) \quad 4.100$$

Mit der Haltekapazität WC_{MAX} liegt ein speicherbezogener Grenzwert mit der folgenden zeitlichen Abhängigkeit vor:

$$\frac{dWC_{MAX}}{dt} = WHC \cdot \frac{dSP}{dt} = WHC \cdot (SNOW(t) + REFR(t) - MELT(t)) \quad 4.101$$

Die Reduktion der ungenutzten Haltekapazität entspricht einer potenziellen Wasserfreisetzung (pIN):

$$pIN(t) = RAIN(t) + MELT(t) - REFR(t) - \frac{dWC_{MAX}}{dt} \quad 4.102$$

Tatsächliche Wasserfreisetzung (IN) erfolgt nur, wenn der flüssige Wassergehalt die Haltekapazität überschreitet und die potenzielle Wasserfreisetzung positive Werte annimmt:

$$IN(t) = \begin{cases} pIN(t) & | \quad (WC(t_0) > WC_{MAX}(t_0)) \wedge (pIN(t_0) > 0) \\ 0 & | \quad (WC(t_0) \leq WC_{MAX}(t_0)) \vee (pIN(t_0) \leq 0) \end{cases} \quad 4.103$$

Bei Verwendung der Regularisierungstechnik ist dagegen lediglich die aus Regen und (modifizierter) Schmelze bestehende Eingabe in den flüssigen Schneeanteil mit Glättungsfunktion \hat{f}_1 zu multiplizieren, welche an der jeweils aktuellen Haltekapazität ausgerichtet ist:

$$IN(t) = (RAIN(t) + (1 + WHC) \cdot MELT(t)) \cdot \hat{f}_1(WC(t) - WC_{MAX}(t), s_1) \quad 4.104$$

Die Modifikation von $MELT$ durch den Faktor $(1 + WHC)$ berücksichtigt den Effekt der Verringerung von WC_{MAX} durch das Schmelzen von SP . Dies verhindert eine ausgeprägte zeitliche Verzögerung der regularisierten Wasserfreisetzung im Vergleich zur nicht regularisierter Wasserfreisetzung in Schmelzphasen. Gegenüber der einfachen Verwendung von $MELT$ wird so auch bei größeren Glättungsgraden eine akzeptable Näherung an den Originalzusammenhang erzielt.

Wie in Abschnitt 4.7.1 für die Interzeptionskapazität $ICMAX$ diskutiert, verliert WC_{MAX} infolge der Regularisierung seine Bedeutung als definitiver Maximalwert. Gleiches gilt für den Minimalwert null der jeweiligen Speicher. Das Originalverhalten von WC und SP bleibt lediglich bei kleiner Wertebelegung des Glättungsparameters s_1 annähernd erhalten.

Die folgenden Grenzwert- (Ξ) und Vergleichswertfunktionen (ξ) berücksichtigen Diskontinuitäten infolge von Temperaturgrenzwerten. Ξ_4 und Ξ_5 stehen in Verbindung mit der Aufteilung des Niederschlages (Pc) in einen flüssigen ($RAIN$) und einen festen Anteil ($SNOW$). Ξ_6 diskretisiert sowohl die potenzielle Schmelze ($pMELT$) als auch das potenzielle Gefrieren ($pREFR$) innerhalb der Schneedecke, die sich hinsichtlich desselben Temperaturgrenzwertes (TTM) diskontinuierlich zeigen:

$$\begin{aligned}\Xi_{4:6,t} &= TT - TTINT/2, TT + TTINT/2, TTM \\ \xi_{4:6,t} &= Tc(t) \\ T_{4:6,t^0} &= [1]\end{aligned}\tag{4.105}$$

Zur korrekten Berechnung von $RAIN/Pc$ bzw. $SNOW/Pc$ sowie $pMELT$ und $pREFR$ ist die Berücksichtigung der definierten Diskontinuitätsfunktionen in jedem Fall (d. h. für alle Modi) erforderlich, weshalb die Bedingungsfunktionen T_4 bis T_6 grundsätzlich den Wahrheitswert eins annehmen.

In Bezug auf die tatsächliche Schmelze ($MELT$) wird, vergleichbar zur Interzeptionsverdunstung (siehe Abschnitt 4.7.1), in zwei Modi differenziert. Bei zunächst gefülltem Speicher für den festen Schneeanteil (SP) bricht die Schmelze im Falle einer Entleerung abrupt ab. Dies sei berücksichtigt durch:

$$\begin{aligned}\Xi_{7,t} &= 0 \\ \xi_{7,t} &= SP(t) \\ T_{7,t^0} &= [SP(t^0) > 0]\end{aligned}\tag{4.106}$$

Bei zunächst leerem Speicher für den festen Schneeanteil folgt dessen Füllung der Differenz aus festem Niederschlagsanteil ($SNOW$) und potenzieller Schmelze, sobald diese positive Werte annimmt. Dies sei berücksichtigt durch:

$$\begin{aligned}\Xi_{8,t} &= pMELT(t) \\ \xi_{8,t} &= SNOW(t) \\ T_{8,t^0} &= [SP(t^0) \leq 0]\end{aligned}\tag{4.107}$$

Die Diskontinuitätsfunktionen für des Gefrieren (*REFR*) des flüssigen Schneeanteils (*WC*) sind auf analoge Weise konstruierbar. Vergleichbar zu Gleichung 4.106 ergibt sich:

$$\begin{aligned}\Xi_{9,t} &= 0 \\ \xi_{9,t} &= WC(t) \\ T_{9,t^0} &= [WC(t^0) > 0]\end{aligned}\tag{4.108}$$

Vergleichbar zu Gleichung 4.107 ergibt sich unter Berücksichtigung des flüssigen Niederschlaganteils (*RAIN*):

$$\begin{aligned}\Xi_{10,t} &= pREFR(t) \\ \xi_{10,t} &= RAIN(t) \\ T_{10,t^0} &= [WC(t^0) \leq 0]\end{aligned}\tag{4.109}$$

Für den flüssigen Schneeanteil sind zusätzliche Diskretisierungen hinsichtlich der diskontinuierlichen Wasserfreisetzung (*IN*) erforderlich. Erstens setzt die Wasserfreisetzung mit Überschreitung der Haltekapazität (*WCMAX*) abrupt ein:

$$\begin{aligned}\Xi_{11,t} &= WCMAX(t) \\ \xi_{11,t} &= WC(t) \\ T_{11,t^0} &= [WC(t^0) < WCMAX(t)]\end{aligned}\tag{4.110}$$

Zweitens entspricht die tatsächliche Freisetzung bei zuvor erreichter Haltekapazität nur solange der potenziellen Freisetzung (*pIN*), wie diese positive Werte annimmt:

$$\begin{aligned}\Xi_{12,t} &= 0 \\ \xi_{12,t} &= pIN(t) \\ T_{12,t^0} &= [WC(t^0) \geq WCMAX(t)]\end{aligned}\tag{4.111}$$

4.7.3 Boden

Die mit der Bodenzone verknüpften hydrologischen Prozesse werden in HBV₉₆ und LARSIM_{ME} verschieden abgebildet und daher getrennt diskutiert.

Primäre Eingabe in das HBV₉₆-Bodenmodul ist *IN* (siehe Abschnitt 4.7.2). Hiervon wird der Anteil *R* prinzipiell abflusswirksam, kann jedoch als kapillarer Wiederaufstieg (*CF*) aus dem oberen Grundwasserspeicher (*UZ*) zurück in den Bodenspeicher (*SM*) gelangen. Eine nicht intermittente Entnahme erfolgt lediglich über die Bodenverdunstung (*EA*). Die Differenzialgleichung lautet:

$$\frac{dSM}{dt} = IN(t) - R(t) + CF(t) - EA(t)\tag{4.112}$$

Die Abflussbildung kann als zeitvariabler Abflussbeiwert-Ansatz aufgefasst werden:

$$R(t) = IN(t) \cdot \Psi(t) \quad 4.113$$

Der Abflussbeiwert (Ψ) steht in i. d. R. nichtlinearer Beziehung zur relativen Bodenfeuchte, wobei die Feldkapazität (FC) als maximale Bodenfeuchte herangezogen wird:

$$\Psi(t) = \max\left(\frac{SM(t)}{FC}, 0\right)^{BETA} \quad 4.114$$

Gleichung 4.114 definiert Ψ im gesamten plausiblen Wertebereich von SM im Intervall $[0, FC]$ in kontinuierlicher Form. Die Maximumsfunktion bewirkt, dass Ψ auch für negative relative Bodenfeuchten für alle reellen Werte des Exponenten $BETA$ mathematisch definiert ist. Dies verhindert Rechenabbrüche infolge ungenauer numerischer Zwischenergebnisse. Die Trägheit der Bodenspeicherung in Betracht ziehend, sind negative Werte von SM allenfalls in Ausnahmefällen zu erwarten. Eine Notwendigkeit zur Diskretisierung oder Regularisierung besteht nicht.

Der potenzielle kapillare Aufstieg (pCF) ist bereits in der Originalformulierung auch jenseits des plausiblen Bereiches definiert:

$$pCF(t) = CFLUX \cdot \left(1 - \frac{SM(t)}{FC}\right) \quad 4.115$$

Den tatsächlichen Aufstieg (CF) betreffend liegt die Besonderheit vor, dass dieser über pCF zwar in alleiniger Abhängigkeit zur Speichergröße SM steht, allerdings nur solange der Speicher für das obere Grundwasser (UZ) nicht leerläuft. Dies ist DL-kompatibel zu formulieren über:

$$CF(t) = \begin{cases} pCF(t) & | \ (UZ(t^0) > 0) \vee (pCF(t^0) < R(t^0)) \\ R(t) & | \ (UZ(t^0) \leq 0) \wedge (pCF(t^0) \geq R(t^0)) \end{cases} \quad 4.116$$

Die durch das Leerlaufen von UZ bedingte Unstetigkeit in CF kann durch Glättungsfunktion \hat{f}_1 eliminiert werden:

$$CF(t) = pCF(t) \cdot \hat{f}_1(UZ(t) - 0, s_1) \quad 4.117$$

Bodenwasser verdunstet in der HydPy-Implementierung von HBV₉₆ nur, sofern der gefrorene Anteil der Schneedecke (SP) den Grenzwert EAT erreicht oder unterschreitet. In der Original-Implementierung wird statt EAT grundsätzlich der Grenzwert null verwandt. Die

maximal mögliche tatsächliche Verdunstung aus dem Bodenkörper (pEA) nimmt bei Überschreitung des Speicheranteils $LP \cdot FC$ durch die Bodenfeuchte (SM) den Wert der potenziellen Verdunstung (EPc) an, anderenfalls wird pEA gemäß der Unterschreitung reduziert. Diese Vorgaben ergeben sich in DL-kompatibler Form zu:

$$pEA(t) = \begin{cases} EPc(t) \cdot \frac{SM(t)}{LP \cdot FC} & | \quad (SP(t^0) \leq EAT) \wedge (SM(t^0) \leq LP \cdot FC) \\ EPc(t) & | \quad (SP(t^0) \leq EAT) \wedge (SM(t^0) > LP \cdot FC) \\ 0 & | \quad SP(t^0) > EAT \end{cases} \quad 4.118$$

Eine Möglichkeit zur Eliminierung des Knickpunktes bei $LP \cdot FC$, die zusätzlich eine nicht zwingend erforderliche Glättung bei $SM \approx 0$ bewirkt, stellt die Anwendung von Glättungsfunktion \hat{f}_3 dar. In Verbindung mit Glättungsfunktion \hat{f}_1 zur Regularisierung der Schalterfunktion der Schneebedeckung folgt:

$$pEA(t) = EPc(t) \cdot \hat{f}_3\left(\frac{SM(t)}{LP \cdot FC}, s_3\right) \cdot \hat{f}_1(EAT - SP(t), s_1) \quad 4.119$$

Nach Gleichung 4.118 bzw. 4.119 in Verbindung mit Gleichung 4.83 bzw. 4.84 kann ein möglicher Verdunstungsüberschuss (pEE) auftreten, d. h. eine Überschreitung der potenziellen Verdunstung (EPc) durch die Summe aus Interzeptionsverdunstung (EI) und möglicher Bodenverdunstung (pEA):

$$pEE(t) = EI(t) + pEA(t) - EPc(t) \quad 4.120$$

Überschreitungen von EPc durch die Summe aus EI und tatsächlicher Bodenverdunstung (EA) lassen sich durch den Faktor $ERED$ einschränken. Wird $ERED$ auf den Wert null gesetzt, entspricht die Gesamtverdunstung im Extremfall dem Doppelten der potenziellen Verdunstung. Ansonsten erfolgt eine Reduktion der Bodenverdunstung proportional zu pEE , sofern $pEE > 0$. Durch Setzen von $ERED$ auf den Wert eins wird die Bodenverdunstung soweit reduziert, dass die potenzielle Verdunstung in jedem Fall die Obergrenze der Gesamtverdunstung darstellt.

Die Diskontinuität bei $pEE = 0$ in Betracht ziehend, ergibt sich die Formulierung zur Anwendung des DL-Ansatzes zu:

$$EA(t) = \begin{cases} pEA(t) - ERED \cdot pEE(t) & | \quad pEE(t^0) \geq 0 \\ pEA(t) & | \quad pEE(t^0) < 0 \end{cases} \quad 4.121$$

Die Regularisierung kann beispielsweise über Glättungsfunktion \hat{f}_1 erfolgen:

$$EA(t) = pEA(t) - ERED \cdot \hat{f}_1(pEE(t), s_1) \cdot pEE(t) \quad 4.122$$

Gleichung 4.122 schließt das Auftreten negativer Verdunstungswerte aus. Daraus folgt jedoch – insbesondere bei groß angesetzten Werten von Glättungsparameter s_2 – eine Tendenz zur systematischen Erhöhung von EA .

Für die Diskretisierung der Integrationsschritte zu berücksichtigen ist zum einen der Füllstand des oberen Grundwasserspeichers (UZ) wegen seiner Wirkung auf den potenziellen kapillaren Aufstieg (pCF). In Abhängigkeit von der initialen Speicherfüllung ergeben sich die beiden Diskontinuitätsfunktionen:

$$\begin{aligned} \Xi_{13,t} &= R(t) \\ \xi_{13,t} &= pCF(t) \\ \mathbf{T}_{13,t^0} &= [UZ(t^0) \leq 0] \end{aligned} \quad 4.123$$

$$\begin{aligned} \Xi_{14,t} &= 0 \\ \xi_{14,t} &= UZ(t) \\ \mathbf{T}_{14,t^0} &= [UZ(t^0) > 0] \end{aligned} \quad 4.124$$

Zum anderen sind drei die Bodenverdunstung betreffende Diskontinuitätsfunktionen aufzustellen. Aufgrund der Schalterfunktion der Schneedecke notwendig ist:

$$\begin{aligned} \Xi_{15,t} &= EAT \\ \xi_{15,t} &= SP(t) \\ \mathbf{T}_{15,t^0} &= [1] \end{aligned} \quad 4.125$$

Eine Diskretisierung hinsichtlich des Grenzwertes $LP \cdot FC$ muss nur in Erwägung gezogen werden, wenn die Bodenverdunstung im vorliegenden Modus nicht unterdrückt wird:

$$\begin{aligned} \Xi_{16,t} &= LP \cdot FC \\ \xi_{16,t} &= SM(t) \\ \mathbf{T}_{16,t^0} &= [SP(t^0) \leq EAT] \end{aligned} \quad 4.126$$

Gleiches gilt für den möglichen Verdunstungsüberschuss pEE . Hierbei kann die Bedingung $ERED > 0$ hinzugefügt werden, da pEE ansonsten wirkungslos bleibt:

$$\begin{aligned} \Xi_{17,t} &= 0 \\ \xi_{17,t} &= pEE(t) \\ \mathbf{T}_{17,t^0} &= [(SP(t^0) \leq EAT) \wedge (ERED > 0)] \end{aligned} \quad 4.127$$

In der Differenzialgleichung des LARSIM_{ME}-Bodenmoduls entfällt der kapillare Wiederaufstieg, dafür findet die Weitergabe abflusswirksamen Wassers in Form von drei Komponenten statt:

$$\frac{dBOWA}{dt} = WADA(t) - QB(t) - QI(t) - QD(t) - EVB(t) \quad 4.128$$

BOWA (entspricht *SM*) ist der Bodenwassergehalt, *WADA* (entspricht *IN*) ist das Wasserdargebot, *QB*, *QI* und *QD* sind die Weitergaben an den Basis-, den Interflow- und den Direktabflusskonzentrationsspeicher und *EVB* (entspricht *EA*) ist die Evapotranspiration aus dem Bodenkörper.

Neben dem fehlenden kapillaren Aufstieg liegt ein markanter Unterschied gegenüber dem HBV₉₆-Bodenmodul darin, dass über *QB* und *QI* auch in niederschlags- und schmelzwasserfreien Zeiträumen eine Freisetzung von Bodenwasser stattfinden kann.

Die Basisabflussfreisetzung tritt proportional zur Überschreitung des unteren Grenzwertes *WB* durch *BOWA* auf:

$$QB(t) = \begin{cases} \beta \cdot (BOWA(t) - WB) & | \ BOWA(t^0) \geq WB \\ 0 & | \ BOWA(t^0) < WB \end{cases} \quad 4.129$$

Die Unstetigkeit in der ersten Ableitung lässt sich unter Verwendung von Glättungsfunktion \hat{f}_2 eliminieren:

$$QB(t) = \beta \cdot \hat{f}_2(BOWA(t) - WB, s_2) \quad 4.130$$

Die Interflowfreisetzung setzt sich aus einer langsamen (*QI_L*) und einer schnellen Teilkomponente (*QI_S*) zusammen. *QI_L* tritt wie *QB* bei einer Überschreitung von *WB* auf:

$$QI_L(t) = \begin{cases} Dmin \cdot \frac{BOWA(t)}{nFK} & | \ BOWA(t^0) \geq WB \\ 0 & | \ BOWA(t^0) < WB \end{cases} \quad 4.131$$

Im Gegensatz zur Speicherkonstante *beta* in Gleichung 4.130 ist *Dmin* eine maximale Flussrate. Diese kommt bei Überschreitung von *WB* proportional zum relativen Wassergehalt des gesamten Bodens zum Tragen, d. h. *QI_L* kann abrupt einsetzen und abbrechen. Zur Eliminierung dieser Unstetigkeit im Originalverlauf ist Glättungsfunktion \hat{f}_1 anzuwenden:

$$QI_L(t) = Dmin \cdot \hat{f}_1(BOWA(t) - WB, s_1) \cdot \frac{BOWA(t)}{nFK} \quad 4.132$$

QI_S setzt bei Überschreitung des Grenzwertes WZ ein, wobei $WZ \geq WB$, gemäß:

$$QI_S(t) = \begin{cases} (Dmax - Dmin) \cdot \max\left(\frac{BOWA(t) - WZ}{nFK - WZ}, 0\right)^{3/2} & | \ BOWA(t^0) \geq WZ \\ 0 & | \ BOWA(t^0) < WZ \end{cases} \quad 4.133$$

In diesem Fall bezieht sich die maximale Flussrate ($Dmax - Dmin$) auf die relative Sättigung der Restvolumens $nFK - WZ$. Somit kann, wie bei der Regularisierung von QB , Glättungsfunktion \hat{f}_2 verwendet und wie folgt in den nichtlinearen Term eingebettet werden:

$$QI_S(t) = (Dmax - Dmin) \cdot \left(\frac{\hat{f}_2(BOWA(t) - WZ, s_2)}{nFK - WZ}\right)^{3/2} \quad 4.134$$

Die Maximumsfunktion in Gleichung 4.133 erweitert den Definitionsbereich der oberen Teilgleichung auf $BOWA(t) < WZ$ und stellt so die Anwendbarkeit des DL-Ansatzes sicher. Es bleibt allerdings eine Diskontinuität bei $BOWA(t) = WZ$ bestehen. Da diese erst in der zweiten Ableitung zum Tragen kommt und die Bodenspeicherung im Allgemeinen ein träges Systemverhalten zeigt, sollte dies die Effizienz numerischer Lösungsverfahren nicht wesentlich beeinträchtigen.

Die Direktabflussfreisetzung definiert sich (wie in HBV₉₆ die Gesamtabflussabgabe R) über einen zeitvariablen Abflussbeiwert:

$$QD(t) = WADA(t) \cdot \Psi(t) \quad 4.135$$

Ψ steht ebenfalls in nichtlinearer Beziehung zur Bodenfeuchte, allerdings nach der Konzeption des Xinanjiang-Modells (Ren-Jun 1992):

$$\Psi(t) = \frac{A_S(t)}{A_G} = 1 - \left(1 - \frac{BOWAx(t)}{nFKx}\right)^{BSF} \quad 4.136$$

Nach dem Xinanjiang-Modell wird das Wasserdargebot, welches auf den gesättigten Flächen (A_S) eines Gebietes niederschlägt, vollständig zu Direktabfluss. Ungesättigte Flächen ($A_G - A_S$) halten das Wasserdargebot vollständig zurück.

Die gesättigte Flächenanteil (A_S/A_G) steht in Abhängigkeit zur Heterogenität der Speicherkapazität des Bodens. Die minimale Speicherkapazität im Gebiet beträgt null, die maximale $nFKx$. Die Häufigkeitsdichte für dazwischen liegende Speicherkapazitäten wird durch den Exponenten BSF moduliert. Für $BSF = 1$ ist diese im Intervall $[0, nFKx]$ gleichverteilt.

$BOWAx$ bezeichnet den aktuell größten im Gebiet vorzufindenden Bodenwassergehalt. Dieser liegt für alle nicht gesättigten Teilflächen ($A_G - A_S$) vor. Für alle gesättigten Teilflächen (A_S) entspricht der Bodenwassergehalt der Speicherkapazität.

Die in der Originalversion von LARSIM_{ME} implementierte Berechnung von QD entspricht der analytischen Lösung von Gleichung 4.128 unter der Voraussetzung, dass die übrigen Terme (QI , QB sowie EVB) null betragen. Hierin gehen nur die gebietsweit gemittelte Speicherkapazität nFK und die gebietsweit gemittelte Bodenspeicherung $BOWA$ ein.

Die numerische Lösung des vollständigen Differenzialgleichungssystems erfordert dagegen die mit nFK und BSF korrespondierenden Wert von $nFKx$ und $BOWAx$. Aus Gleichung 4.136 sowie den genannten Annahmen folgt $nFK = \int_0^{nFKx} (1 - u/nFKx)^{BSF} du$. Aus Integration und Umformung resultiert:

$$nFKx = (BSF + 1) \cdot nFK \quad 4.137$$

Analog zu $nFKx$ ergibt sich unter Verwendung von $BOWAx$ als obere Integrationsgrenze $BOWA = \int_0^{BOWAx} (1 - u/nFKx)^{BSF} du$ und daraus:

$$BOWAx(t) = nFKx - \left((BSF + 1) \cdot (nFK - BOWA(t)) \cdot nFKx^{BSF} \right)^{\frac{1}{BSF+1}} \quad 4.138$$

Für den Parameter BSF werden in der Regel Werte kleiner eins angesetzt (Ren-Jun 1992). Infolgedessen darf $BOWAx$ maximal den Wert von $nFKx$ annehmen (s. Gleichung 4.136) bzw. $BOWA$ maximal den von nFK . Bei kleinen Werten von BSF verweilt der Abflussbeiwert Ψ über weite Bereiche der Bodenfeuchte auf geringem Niveau und steigt bei annähernder Sättigung rapide gegen eins an. Numerische Integrationsalgorithmen laufen Gefahr, verspätet auf solch einen rapiden Anstieg von Ψ zu reagieren und infolgedessen $nFKx$ größer als $BOWAx$ zu schätzen. Zur Vermeidung daraus resultierender Rechenabbrüche werden die folgenden Absicherungen vorgenommen.

Für die Anwendung des DL-Ansatzes erfolgt zunächst eine Erweiterung des Definitionsbereiches unter Rückgriff auf die Maximumfunktion:

$$BOWAx(t) = nFKx - \left((BSF + 1) \cdot \max(nFK - BOWA(t), 0) \cdot nFKx^{BSF} \right)^{\frac{1}{BSF+1}} \quad 4.139$$

Zudem wird ein Sicherheitsfaktor ζ eingeführt. Dieser definiert eine relative Bodenspeicherung knapp unterhalb eins, ab welcher der Bodenwassergehalt nicht weiter zunehmen darf. Dies wird über die modifizierte Direktabflusskomponente QD^* bewerkstelligt:

$$QD^*(t) = WADA(t) - QI(t) - QB(t) - EVB(t) \quad 4.140$$

Der tatsächliche Direktabfluss ergibt sich zu:

$$QD(t) = \begin{cases} WADA(t) \cdot \Psi(t) & | \ (BOWA(t^0) < \zeta \cdot nFK) \vee (QD^*(t) < 0) \\ QD^*(t) & | \ (BOWA(t^0) \geq \zeta \cdot nFK) \vee (QD^*(t) \geq 0) \end{cases} \quad 4.141$$

Damit die beschriebene Anpassung keine relevante Verfälschung des Originalzusammenhangs zur Folge hat, ist ζ möglichst nahe eins anzusetzen. Allerdings führt eine zu starke Annäherung an eins zur Einschränkung der Effizienz numerischer Integrationsalgorithmen im (seltenen) Fall der Annäherung von $BOWA$ an $\zeta \cdot nFK$. Nach Durchführung mehrerer Testsimulationen wird $\zeta = 1 - 10^6$ als praktikabler Kompromiss gewählt.

Unter Rückgriff auf Glättungsfunktion \hat{f}_3 lässt sich das vorliegende Problem (unter Inkaufnahme größerer Abweichungen zum Originalzusammenhang) deutlich einfacher lösen:

$$BOWAx(t) = nFKx - \left((BSF + 1) \cdot \left(nFK - \hat{f}_3 \left(\frac{BOWA(t)}{nFK}, s_3 \right) \right) \cdot nFKx^{BSF} \right)^{\frac{1}{BSF+1}} \quad 4.142$$

Die Bodenverdunstung (EVB) berechnet sich – ohne weitere Diskontinuitäten einzuführen – über die Differenz von potenzieller Verdunstung ($EVPO$) und Interzeptionsverdunstung (EVI) sowie einem aus der Bodenfeuchte ($BOWA$) abgeleiteten Reduktionsfaktor nach der Empfehlung in ATV-DVWK (2002):

$$EVB(t) = (EVPO(t) - EVI(t)) \cdot \frac{1 - e^{-Grasref_r \cdot \frac{BOWA(t)}{nFK}}}{1 + e^{-Grasref_r \cdot \frac{BOWA(t)}{nFK}} - e^{-Grasref_r}} \quad 4.143$$

Die auf die Original-Grenzwerte WB und WZ abzielenden Diskontinuitätsfunktionen sind, da $BOWA$ nicht an diesen Grenzen fixiert wird, trivial konstruierbar:

$$\begin{aligned} \Xi_{18:19,t} &= WB, WZ \\ \xi_{18:19,t} &= BOWA(t) \\ \mathbf{T}_{18:19,t^0} &= [1] \end{aligned} \quad 4.144$$

Der modifizierte Grenzwert $\zeta \cdot nFK$ fixiert $BOWA$ dagegen im Überschreitungsfall, weshalb für diesen – wie bereits mehrfach diskutiert – zwei Diskontinuitätsfunktionen zu definieren sind:

$$\begin{aligned} \Xi_{20,t} &= \zeta \cdot nFK \\ \xi_{20,t} &= BOWA(t) \\ \mathbf{T}_{20,t^0} &= [BOWA(t^0) < \zeta \cdot nFK] \end{aligned} \quad 4.145$$

$$\begin{aligned} \Xi_{21,t} &= 0 \\ \xi_{21,t} &= QD^*(t) \\ \mathbf{T}_{21,t^0} &= [BOWA(t^0) \geq \zeta \cdot nFK] \end{aligned} \quad 4.146$$

4.7.4 Abflusskonzentration

Sowohl in HBV₉₆ als auch in LARSIM_{ME} erfolgt die Berechnung der Abflusskonzentration gebietsweit. Somit sind die Einspeisungen durch die Bodenmodule aller Teilflächen (Zonen bzw. Landnutzungsklassen) zu aggregieren, was zur Verkürzung der Notation im Folgenden unberücksichtigt bleibt.

Die zeitliche Verzögerung der drei Abflusskomponenten von LARSIM_{ME} erfolgt jeweils nach dem Einzellinearspeicheransatz, weist keine Diskontinuitäten auf und erfordert keine weitere Erläuterung.

Die Abflusskonzentration von HBV₉₆ fällt komplizierter aus. Sowohl der Speicher *UZ* als auch der Speicher *LZ* haben neben der Verzögerung des Direkt- (*Q0*) bzw. Basisabflusses (*Q1*) weitere Funktionen inne. So kann aus *UZ* als oberem Grundwasserspeicher Wasser kappilar in die Bodenzone aufsteigen (*CF*) und in den unteren Grundwasserspeicher (*LZ*) aussickern (*PERC*). Die Differenzialgleichungen beider Speicher lauten:

$$\frac{dUZ}{dt} = R(t) - CF(t) - PERC(t) - Q0(t) \quad 4.147$$

$$\frac{dLZ}{dt} = PERC(t) - Q1(t) \quad 4.148$$

Gleichung 4.148 trifft so nur zu, wenn keine der im Gebiet befindlichen Teilflächen bzw. Zonen die Funktion eines teilgebietsinternen Sees annimmt. Von der Diskussion der Besonderheiten solcher See-Zonen (wie auch von denen der Gletscher-Zonen) wird abgesehen; in den folgenden Anwendungen (Abschnitte 4.8 und 4.9) kommen diese nicht zum Einsatz.

Die zeitliche Verzögerung des Basisabflusses folgt – falls keine See-Zonen im betrachteten Gebiet vorliegen – dem Einzellinearspeicheransatz:

$$Q1(t) = K4 \cdot LZ(t) \quad 4.149$$

Dagegen berechnet sich der Direktabfluss nach dem folgenden nichtlinearen Ansatz:

$$Q0(t) = K \cdot \left(\frac{UZ(t)}{\Psi(t)} \right)^{ALPHA+1} \quad 4.150$$

Ψ ist der nach Gleichung 4.114 über die Bodenfeuchte zu berechnende Abflussbeiwert. Bei gleicher Grundwasserspeicherung führt eine Zunahme der Bodenfeuchte somit zur Verringerung des Direktabflusses. Zur inhaltlichen Begründung dieses kontraintuitiven Zusammenhangs siehe Bergström et al. (1997). Eine kritische Diskussion findet sich in Tyralla und Schumann (2016b). Hier sei lediglich auf Probleme der modelltechnischen Umsetzung eingegangen.

In HydPy ist zur Umsetzung des DL-Ansatzes die folgende Beziehung implementiert:

$$Q0(t) = \begin{cases} K \cdot \left(\frac{\max(UZ(t), 0)}{1/100 + 99/100 \cdot \Psi(t)} \right)^{ALPHA+1} & | \ UZ(t^0) > 0 \\ 0 & | \ UZ(t^0) \leq 0 \end{cases} \quad 4.151$$

Die Maximumsfunktion im Zähler dient der Vermeidung von Rechenabbrüchen infolge negativer Werte von UZ . Die Modifikation des Nenners verhindert die Division durch null im Falle einer vollständigen Bodenspeicherentleerung. Eine solche Entleerung muss weder rechnerisch falsch noch physikalisch unplausibel sein. Die Begrenzung des Nenners auf den subjektiv angesetzten Minimalwert $1/100$ stellt somit einen gewissen Eingriff in die Modellkonzeption dar. Durch Verwendung von $\max(\Psi, 1/100)$ käme diese erst für $\Psi < 1/100$ zum Tragen, allerdings unter Einführung einer weiteren zu berücksichtigenden Diskontinuität.

Die Regularisierung von Gleichung 4.151 erfolgt mittels Glättungsfunktion \hat{f}_2 :

$$Q0(t) = K \cdot \left(\frac{\hat{f}_2(UZ(t) - 0, s_2)}{1/100 + 99/100 \cdot \Psi(t)} \right)^{ALPHA+1} \quad 4.152$$

Eine zentrale Annahme dieser Arbeit ist, dass die Anwendung konzeptioneller hydrologischer Speichermodelle mathematisch der numerischen Lösung nichtsteifer Anfangswertprobleme gleichkommt (siehe Abschnitt 4.2). Unter allen Differenzialgleichungen von HBV₉₆ erscheint Gleichung 4.147 aufgrund der ungewöhnlichen Berechnung von $Q0$ diesbezüglich am problematischsten. Beispielsweise resultiert aus der typischen Wertbelegung $ALPHA = 1$ bei weitgehend entleertem Bodenspeicher $Q0(t) = K \cdot 10^4 \cdot UZ^2$. Ob dies bzw. wie häufig dies numerische Instabilität bewirkt, ist schwer abschätzbar. K ist sinnvollerweise sehr klein anzusetzen und der Nettozufluss ($R - CF$) in das obere Grundwasser fällt bei trockenem Bodenspeicher gering aus.

Als Reduktionsfaktor der maximalen Perkulationsrate ($PERC_{MAX}$) kommt der Abflussbeiwert auch in der Berechnung der potenziellen Perkolation ($pPERC$) zum Tragen. Zur Wahrung der Einheitlichkeit wird im Modellframework HydPy die in Gleichung 4.151 eingeführte Modifikation beibehalten:

$$pPERC(t) = PERC_{MAX} \cdot (1/100 + 99/100 \cdot \Psi(t)) \quad 4.153$$

Die Perkolation folgt dem potenziellen Wert, solange UZ gefüllt ist oder der Nettozufluss aus dem Bodenmodul ($R - CF$) diesen überschreitet:

$$PERC(t) = \begin{cases} pPERC(t) & | (UZ(t^0) > 0) \vee (R(t^0) - CF(t^0) > pPERC(t^0)) \\ R(t) - CF(t) & | (UZ(t^0) \leq 0) \wedge (R(t^0) - CF(t^0) \leq pPERC(t^0)) \end{cases} \quad 4.154$$

$PERC$ und CF weisen mit der Schalterfunktion des oberen Grundwassers dieselbe Unstetigkeitsursache auf. Analog zur Regularisierung von CF gemäß Gleichung 4.117 ergibt sich:

$$PERC(t) = pPERC(t) \cdot \widehat{f}_1(UZ(t) - 0, s_1) \quad 4.155$$

Für die Anwendung der DL-Technik sind die an UZ geknüpften Diskontinuitätsfunktionen 4.123 und 4.124 zu ergänzen durch:

$$\begin{aligned} \Xi_{22,t} &= R(t) - CF(t) \\ \xi_{22,t} &= pPERC(t) \\ \mathbf{T}_{22,t^0} &= [UZ(t^0) \leq 0] \end{aligned} \quad 4.156$$

Zur finalen Ermittlung des Gesamtabflusses (Q) werden Direkt- und Basisabfluss aufsummiert und anschließend erneut zeitlich verzögert, in diesem Fall mittels Faltung:

$$Q_i = \sum_j^n UH_j \cdot (Q0_{i-j+1} + Q1_{i-j+1}) \quad 4.157$$

Die Unit-Hydrograph-Ordinaten ($UH_{1:n}$) entsprechen, gemäß der aktuellen Rechenschrittweite, den schrittweisen Integralen über ein gleichschenkliges Dreieck mit der Fläche eins und der wählbaren Basislänge $MAXBAZ$.

Gleichung 4.157 lässt sich nicht auf eine Differenzialgleichung zurückführen und ist nicht mit den diskutierten Integrationstechniken kompatibel. Die Faltung fällt jedoch als letzte Berechnung im Teilgebiet an und weist keine Sensitivität bezüglich der zeitlichen Verteilung von $Q0$ und $Q1$ in einzelnen externen Zeitschritten auf. Damit sind Faltung und numerische Lösung der (vorgeschalteten) Differenzialgleichungen trennbar, d. h. ohne Inkaufnahme zusätzlicher Fehler sequentiell durchführbar.

4.7.5 Horton-Infiltration

Die speicherbasierte Modifikation der Horton-Infiltration nach Bauer (1974) wurde bereits in Abschnitt 3.2.1 inhaltlich eingeführt. Als intensitätsabhängiges Abflussbildungsverfahren ergänzt es die Darstellungen in Abschnitt 4.7.3 zur Umsetzung von Sättigungsflächenansätzen.

Die Bildung von Effektivniederschlag (N_{EFF}) nach Gleichung 3.2 entsprechend der Überschreitung der aktuellen Infiltrationskapazität (INF_K) durch den eingehenden Niederschlag (N) ist DL-kompatibel formulierbar zu:

$$N_{EFF}(t) = \begin{cases} N(t) - INF_K(t) & | \quad N(t^0) > INF_K(t^0) \\ 0 & | \quad N(t^0) \leq INF_K(t^0) \end{cases} \quad 4.158$$

Diese Unstetigkeit in der ersten Ableitung ist durch die simple Anwendung einer an INF_K ausgerichteten Glättungsfunktion \hat{f}_2 eliminierbar:

$$N_{EFF}(t) = \hat{f}_2(N(t) - INF_K(t), s_2) \quad 4.159$$

Die einzige notwendige Diskontinuitätsfunktion mit durchgehendem Geltungsbereich definiert sich über:

$$\begin{aligned} \Xi_{23,t} &= INF_K(t) \\ \xi_{23,t} &= N(t) \\ \mathbf{T}_{23,t^0} &= [1] \end{aligned} \quad 4.160$$

Die Anwendung der Horton-Infiltration kann zwei Probleme mit sich bringen. Das erste tritt bei physikalischer Parametrisierung der Modellkomponente auf. Infolge schnell ablaufender Verschlammungsprozesse nähert sich die potenzielle Infiltrationsrate zahlreicher Böden in Minuten oder wenigen Stunden der Endinfiltrationskapazität an (Kutilek und Nielsen 1994). Insofern ist die modifizierte Horton-Infiltration sowohl inhaltlich (wegen ihrer Validität für die Punktskala) als auch technisch (wegen ihrer potenziellen Steifheit) als Grenzfall für die hydrologische Modellierung mit konzeptionellen Speichermodellen zu betrachten (vgl. Abschnitt 4.2). In Abschnitt 4.8.3 werden die vorgestellten Integrationstechniken zur Lösung der Horton-Infiltration sowohl mit tendenziell „physikalischer“ als auch „modelldienlicher“ Parametrisierung angewandt.

Das zweite Problem ist an die Regularisierung der diskontinuierlichen Infiltration geknüpft. Bei kleiner Infiltrationskapazität sowie großem Glättungsgrad tritt nach Gleichung 4.159 der unplausible Fall $N_{EFF} > N$ ein. Entsprechend $N = N_{EFF} + INF$ folgen daraus negative Infiltrationswerte. Eine akzeptable Einhaltung des originalen Systemverhaltens erfordert die Abstimmung von Glättungsparameter s_2 mit der jeweiligen Endinfiltrationskapazität. Dies kann allerdings den technisch wünschenswerten Glättungsgrad einschränken. Eine mögliche Alternative wäre die Implementierung einer funktionalen Abhängigkeit von s_2 zur jeweils aktuellen Infiltrationskapazität.

4.8 Untersuchungen zur Simulationsunsicherheit und -effizienz

Die eingeführten Integrationstechniken werden auf die HydPy-Implementierungen von LARSIM_{ME} (Abschnitt 4.8.1), HBV₉₆ (Abschnitt 4.8.2) und der modifizierten Horton-Infiltration (Abschnitt 4.8.3) angewandt. Im Fokus stehen allein Fragen zur numerischen Effizienz, Robustheit und Unsicherheit, was eine Beschränkung der Simulationsrechnungen auf ein einzelnes Gebiet angemessen erscheinen lässt. Da die Implementierung der Wellenablaufverfahren von LARSIM und HBV in dieser Arbeit nicht diskutiert wird, fällt die Wahl auf das Kopfgebiet des oberer Neckars (siehe Abschnitt 3.3).

Als erstes Referenzverfahren dient das bereits in Abschnitt 4.3.2 erwähnte Runge-Kutta-Verfahren von Dormand und Prince (1980), im Folgenden abgekürzt mit DP. Dieses weitverbreitete Verfahren erreicht mit sieben Stufen ein Ergebnis der Ordnung 5 sowie ein Vergleichsergebnis zur Fehlerabschätzung der Ordnung 4. Zudem genügt es dem in Abschnitt 4.3.2 beschriebenen „first same as last“-Prinzip, wodurch für stetige Anfangswertprobleme pro Integrationsschritt (bis auf den ersten) lediglich sechs Funktionsaufrufe anfallen.

Während DP mit der Konsistenzordnung 5 bzw. 4 auf mittlere Genauigkeiten abzielt, ist das zweite Referenzverfahren von Bogacki und Shampine (1989), abgekürzt BS, für die effiziente Einhaltung geringer Genauigkeitsforderungen konzipiert. Es erzielt mit vier Stufen die Ordnung 3 sowie ein Vergleichsergebnis der Ordnung 2 und genügt ebenfalls dem „first same as last“-Prinzip. Bei der Lösung stetiger Probleme fallen damit, den ersten Integrationsschritt ausgenommen, je drei Funktionsaufrufe an.

Für BS und DP liegen effiziente Fortran-Quelltexte der Autoren bzw. von Hairer et al. (1993) zur allgemeinen Verwendung vor. Aufgrund der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Besonderheiten konzeptioneller hydrologischer Speichermodelle erschien jedoch eine Neuprogrammierung in HydPy flexibler.

Die für die Vergleichsrechnungen gewählte Konfiguration von DP und BS sowie der expliziten Lobatto-Sequenz (ELS) ist schlicht gehalten. Verzichtet wird insbesondere auf Abfangmechanismen wie der Verwendung einer minimalen Rechenschrittweite, welche trotz Verletzung der Fehlertoleranz nicht unterschritten wird. Dies hat u. A. zur Folge, dass keiner der Integrationsalgorithmen LARSIM_{ME} oder HBV₉₆ mit akzeptabler Genauigkeit zu lösen imstande ist, solange deren Diskontinuitäten beispielsweise nicht durch die in Abschnitt 4.5.2 beschriebene Regularisierungstechnik eliminiert werden. In der Praxis ist ein solcher Mangel an Robustheit nicht wünschenswert. In der Entwicklung und Analyse kann er dagegen helfen, Probleme in der Modellformulierung aufzudecken (siehe Abschnitt 4.10).

Die folgenden weiteren Festlegungen werden getroffen. Zu Beginn jedes neuen externen Zeitschrittes wird dessen Länge als initiale Integrationsschrittweite (h) angesetzt. Die Fehlerschätzung (ε) erfolgt über die Maximumsnorm aller Flussgrößen.

Nach eventueller Überschreitung der Fehlertoleranz (ε_{Tol}) erfolgt die Steuerung der Rechenschrittweite von DP und BS bis zum Erreichen des nächsten externen Endzeitpunktes über

$h^{i+1} = 0,9 \cdot h^i \cdot (\varepsilon^i / \varepsilon_{Tol})^{1/q}$ mit $q = \min(5, 4)$ bzw. $q = \min(3, 2)$ (Hairer et al. 1993, Seite 168). Die Verwendung von q statt $q + 1$ im Exponenten (siehe auch Gleichung 4.21) begründet sich aus der Fehlerabschätzung über die als mittlere Intensitäten angegebenen Flussgrößen.

Die explizite Lobatto-Sequenz wird spätestens nach Anwendung des elfstufigen Lobatto-IRK, d. h. mit Erreichen von zwölf Stufen, abgebrochen. Auf Fixpunkt-Iterationen auf den jeweiligen Stufen wird verzichtet. Nach Anwendung des dreistufigen IRK ($s = 3$) liegt jeweils eine aktuelle ($\varepsilon^{\{s\}}$) sowie eine vorangegangene ($\varepsilon^{\{s-1\}}$) Fehlerschätzung vor. Dies wird genutzt, um die zu erwartende Fehlerschätzung nach Anwendung des elfstufigen IRK zu extrapolieren über $\hat{\varepsilon}^{\{11\}} = \exp\left(\ln \varepsilon^{\{s\}} + (\ln \varepsilon^{\{s\}} - \ln \varepsilon^{\{s-1\}}) \cdot (11 - s)\right)$. Bei zweimaliger aufeinanderfolgender Überschreitung von ε_{Tol} durch $\hat{\varepsilon}^{\{11\}}$ wird die Sequenz zur Vermeidung des unnützen Einsatzes der aufwendigen IRKs hoher Ordnung vorzeitig abgebrochen. Nach jedem Abbruch wird h um den Faktor $1/5$ reduziert. Nach jedem Erfolg wird – solange die Restdauer des externen Zeitschrittes nicht überschritten wird – h um den Faktor 2 erhöht.

Eine Kopplung an den in Abschnitt 4.5.1 beschriebenen discontinuity locking-Ansatz (DL) erfolgte bislang lediglich für ELS, wäre in ähnlicher Form aber ebenso für DP und BS umsetzbar. Der diskutierte Grenzwert, welcher etwa der finalen Intervallbreite der Pegasus-Iteration entspricht, wird mit 10^{-6} d für Tages- und 10^{-6} h für Stundenwertsimulationen angesetzt. Nach jedem Ereignis wird h auf die verbliebene externe Restschrittweite gesetzt.

ELS wird, wie DP und BS, im Folgenden im Extrapolationsmodus betrieben, d. h. nicht das Ergebnis geringerer Ordnung mit vorhandener Fehlerschätzung wird genutzt, sondern das Ergebnis höherer Ordnung mit (theoretisch) geringerem Fehler. Bei der Kopplung mit DL besteht dabei folgende Inkonsistenz. Wie in Abschnitt 4.5.1 dargelegt, basiert die Ereignislokalisation auf Interpolationspolynomen, die aus Effizienzgründen aus dem Ergebnis geringerer Ordnung abgeleitet werden. Die anschließende Neuinitialisierung mit Hilfe von Interpolationspolynomen, die aus dem Ergebnis höherer Ordnung abgeleitet werden, kann zum unerwünschten Verbleib im alten Modus und so zur Erhöhung der Anzahl der notwendigen Rechenschritte führen. In Vorversuchen traten derartige Fälle kaum auf, sodass diese etwas riskantere, bei Erfolg jedoch genauere Strategie vorgezogen wird.

4.8.1 LARSIM_{ME}

Die Original-Konfiguration von LARSIM_{ME} (Ebel et al. 2000) unterteilt das gesamte Rhein-Flussgebiet in Rasterflächen von 25 km². Die (direkt und indirekt) in den Flussabschnitt von Pegel Horb entwässernden Rasterflächen wurden für die folgenden Berechnungen zu einem Teilgebiet zusammengefasst. Dieses umfasst im Gegensatz zur HBV-Konfiguration nicht den Zufluss der Eyach (siehe Tyralla und Schumann 2014).

Es wird in zwei Varianten gerechnet: in der ersten wird das Gebiet lediglich durch die Landnutzungsklasse Mischwald repräsentiert (*lumped*), in der zweiten bleiben die relativen

Flächenanteile der zehn verschiedenen Landnutzungsklassen der Original-Konfiguration erhalten (*semi distributed*). Dies sind 58 % lockerer Baumbestand, Nadel-, Laub- und Mischwald, 38 % Acker oder intensiv bewirtschaftetes Grundland und 4 % versiegelte oder unbewachsene Fläche sowie Obstbau und Feuchtfläche (Tyralla und Schumann 2014).

Soweit nicht anders angegeben, kommt zwecks besserer Vergleichbarkeit die räumlich undifferenzierte Variante zum Einsatz. Der Untersuchungszeitraum umfasst die hydrologischen Jahre 1997 bis 2005.

Abbildung 4.15 stellt den erforderlichen Rechenaufwand und die global erzielte Genauigkeit verschiedener Einstellungen der lokalen Fehlertoleranz (ε_{Tol}) gegenüber. Gewählt werden die Werte 10^0 mm/d, 10^{-1} mm/d, 10^{-2} mm/d, 10^{-3} mm/d und 10^{-4} mm/d. Der Rechenaufwand wird über die Anzahl der Funktionsaufrufe (fn) des Differenzialgleichungssystems erfasst. Als globale Genauigkeitsmaße dienen der mittlere absolute Fehler (MAE) sowie der maximale absolute Fehler ($MaxAE$) des simulierten Abflusses. Diese werden über Vergleichsrechnungen mit einer lokalen Fehlertoleranz von 10^{-10} mm/d bestimmt.

Hier und in den folgenden Abbildungen zur „Solvareffizienz“ sind die Ergebnisse von ELS (Explizite Lobatto-Sequenz) in Kopplung mit DL (discontinuity locking) als breite graue Linie dargestellt. Bei Anwendung auf regularisierte Differenzialgleichungen sind die Ergebnisse von ELS schwarz, die von DP (Dormand-Prince) rot und die von BS (Bogacki-Shampine) blau dargestellt. Durchgezogene Linien korrespondieren mit einem großen Glättungsgrad ($Y = 10$ in der jeweils geeigneten Einheit mm, mm/d oder °C), gestrichelte Linien mit einem mittleren Glättungsgrad ($Y = 5$) und gepunktete Linien mit einem niedrigen Glättungsgrad ($Y = 1$). Links finden sich die Resultate der räumlich undifferenzierten, rechts die der räumlich differenzierten Variante.

Der grundsätzliche Einfluss der Konsistenzordnung zeigt sich im Vergleich der Anzahl der Funktionsaufrufe (fn) der Verfahren DP (rot) und BS (blau).

Bei höchster Fehlertoleranz ($\varepsilon_{Tol} = 10^{-0}$ mm/d) benötigt DP im Mittel exakt 7, BS ca. 4,03 Funktionsaufrufe. Die Genauigkeit des siebenstufigen DP-Verfahrens ist – geeignete Fehlerschätzungen vorausgesetzt – ausreichend, jeden externen Zeitschritt (Tag) des Untersuchungszeitraums in einem Integrationsschritt zu lösen. Beim vierstufigen BS-Verfahrens trifft dies zumindest für die große Mehrzahl der externen Zeitschritte zu. Bei geringer Genauigkeitsforderung erweist sich die geringe Stufenanzahl des BS-Verfahrens als vorteilhaft.

Im geschilderten Fall kommt das „first same as last“-Prinzip für DP nicht und für BS selten zum Tragen. Beinahe jeder Übergang zwischen zwei externen Zeitschritten geht mit einer oder mehreren Diskontinuitäten einher, z. B. in Form sprunghafter Änderungen der Niederschlagsintensität. Dies schließt die Wiederverwendung eines Funktionsaufrufes am alten Zeitschrittende als Funktionsaufruf am neuen Zeitschrittanfang aus.

Bei höherer Genauigkeitsforderung zeigt sich der Vorteil von DP gegenüber BS. Die Beziehungen zwischen fn und ε_{Tol} nehmen bei geringeren Werten von ε_{Tol} in doppellogarithmischer Darstellung weitgehend gerade Verläufe an. Die korrespondierenden Steigungen sind sowohl für DP als auch für BS für alle untersuchten Glättungsgrade annähernd identisch. Die geringere Steigung der Verläufe des DP-Verfahrens deutet dessen höhere „effektive“ Ordnung für das vorliegende Problem an.

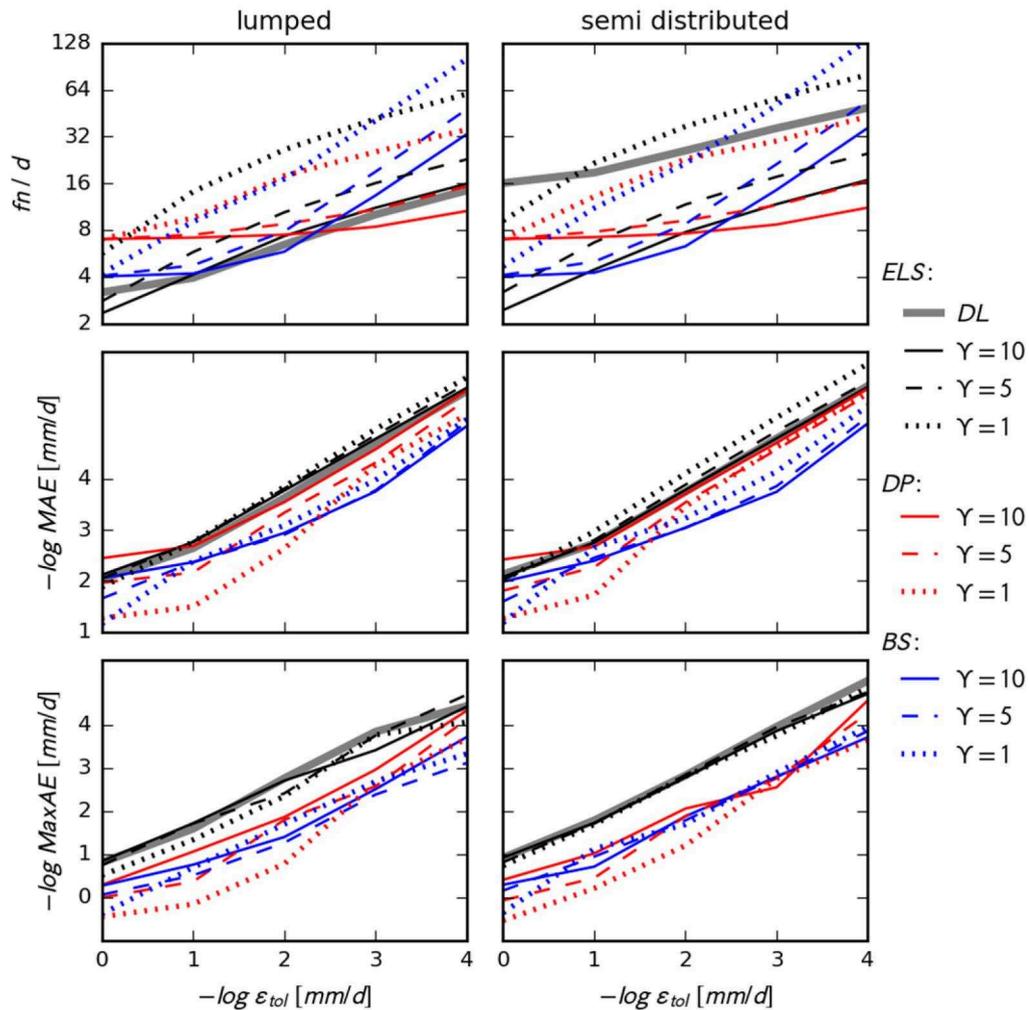


Abbildung 4.15: Veranschaulichung der Solvereffizienz für die Tageswertsimulation mit LARSIM_{ME} ohne Niederschlagsdisaggregation. Einfluss der Wahl der Fehlertoleranz (ε_{tol}) auf die mittlere Anzahl der Funktionsaufrufe pro Tag (fn/d), den mittleren absoluten Fehler (MAE) und den maximalen absoluten Fehler ($MaxAE$). Die Ergebnisse der Anwendung der discontinuity locking-Technik (DL) sind als breite graue Linien eingezeichnet (nur für ELS). Die Ergebnisse der Anwendung der Regularisierungstechnik sind für starke ($\gamma = 10$), mittlere ($\gamma = 5$) und schwache ($\gamma = 1$) Glättungsgrade als schmale durchgezogene, gestrichelte und gepunktete Linien eingezeichnet, für die explizite Lobatto-Sequenz (ELS) in schwarz, für das Dormand-Prince-Verfahren (DP) in rot und für das Bogacki-Shampine-Verfahren (BS) in blau. Links die Ergebnisse für die räumlich nicht-differenzierte (lumped) und rechts für die räumlich differenzierte (semi distributed) LARSIM-Konfiguration.

ELS benötigt bei der höchsten lokalen Fehlertoleranz lediglich 2,4 Funktionsaufrufe pro Tag. Allerdings benötigt BS im Bereich mittlerer und DP im Bereich hoher Genauigkeitsforderungen weniger Funktionsaufrufe. Beim geringsten Glättungsgrad (gepunktete Linie) benötigt ELS beinahe durchgehend mehr Funktionsaufrufe als DP. ELS büßt seine Vorteile gegenüber den gängigen Integrationsalgorithmen umso mehr ein, je weniger externe Zeitschritte in einem Integrationsschritt lösbar sind.

Wird das Problem der Diskontinuitäten in den Prozessgleichungen von $LARSIM_{ME}$ mit Hilfe des DL-Ansatzes gelöst, benötigt ELS auch bei der kleinsten gewählten Fehlertoleranz ($\varepsilon_{Tol} = 10^{-4} \text{ mm/d}$) für die räumlich undifferenzierte LARSIM-Konfiguration lediglich 14,8 Funktionsaufrufe pro Tag. Hierin sind die zusätzlich für die Ereignislokalisierung notwendigen Funktionsaufrufe bereits enthalten.

Die in Abschnitt 4.4.2 getroffene Annahme der Lösbarkeit externer Zeitschritte in einem Integrationsschritt trifft für $LARSIM_{ME}$ in der gegebenen Parametrisierung weitgehend zu, solange Diskontinuitäten mittels Diskretisierung und nicht mittels schwacher Glättung behoben werden. Detailanalysen der räumlich undifferenzierten Variante bestätigen dies: unter Verwendung von DL treten selbst bei geringster Fehlertoleranz lediglich 10 Reduzierungen der Schrittweite auf, bei schwacher Glättung dagegen 2009 Reduzierungen.

Mit dem Wechsel zur räumlich differenzierten Konfiguration steigt die Anzahl der notwendigen Funktionsaufrufe bei Anwendung der Regularisierungstechnik moderat an. Eine gewisse Erhöhung des Rechenaufwandes ist bei einer Vergrößerung des Differenzialgleichungssystems infolge der Verwendung der Maximumnorm zur Bestimmung der Fehlertoleranz zwangsläufig zu erwarten. Diese nimmt ein moderates Ausmaß an, da von einer Reduzierung der Rechenschrittweite oder Erhöhung der Ordnung die Genauigkeiten der Teillösungen aller Landnutzungsklassen in ähnlichem Maße profitieren.

Unter Rückgriff auf den DL-Ansatz erhöht sich der Rechenaufwand hingegen markant. Die Anzahl der zu berücksichtigenden Diskontinuitäten steigt linear mit der Anzahl an Landnutzungsklassen. Die Lokalisation einer Diskontinuität in den Gleichungen einer Landnutzungsklasse bringt keinen Vorteil für die Lösung der Gleichungen einer anderen Landnutzungsklasse mit sich, solange keine exakte Übereinstimmung von Ereigniszeiten auftritt, wovon höchst selten auszugehen ist.

Wird die tatsächlich erreichte Genauigkeit in die Betrachtung einbezogen (Abbildung 4.15), bleiben zwar die bisherigen Aussagen gültig, allerdings verschieben sich die Relationen. ELS erzielt in beinahe allen Fällen die genaueste Abflusssimulation. So entspricht der mittlere absolute Fehler (MAE) im Allgemeinen etwa 1 % und der maximale absolute Fehler ($MaxAE$) etwa 10 % der gewählten lokalen Fehlertoleranz. Höhere Genauigkeiten zeigt nur DP beim höchsten Glättungsgrad und bei geringster Genauigkeitsforderung, allerdings unter Verwendung von deutlich mehr Funktionsaufrufen.

Die stärksten Genauigkeitsschwankungen treten bei Verwendung von DP auf, und zwar bei geringer bis mittlerer Genauigkeitsforderung. Im Rahmen zu erwartender Fehlerkumulatio-
nen über mehrere Zeitschritte sind diese nicht eindeutig als „Verfahrensfehler“ zu werten,
könnten allerdings auf Probleme der Schätzung des lokalen Fehlers bei großen Toleranzen
hindeuten.

Zum direkten Vergleich sind in Abbildung 4.16 der mittlere (MAE) und der maximale ab-
solute Fehler ($MaxAE$) gegen die Anzahl der Funktionsaufrufe (fn) aufgetragen. Für MAE -
Werte größer 10^{-4} oder 10^{-3} mm/d sowie für $MaxAE$ -Werte größer 10^{-3} oder 10^{-2} mm/d zeigt
sich ELS am effizientesten, für größere Genauigkeiten dagegen das DP-Verfahren.

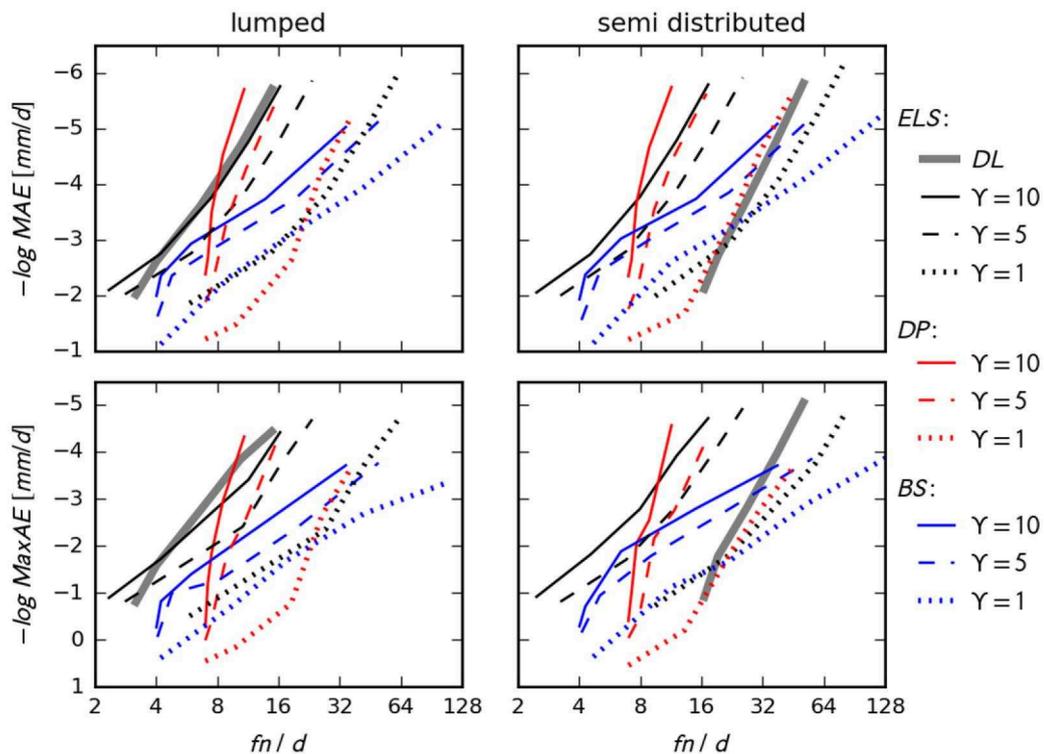


Abbildung 4.16: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15, aber als direkter
Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.

Die numerische Integration der Prozessgleichungen mit ELS in Kombination mit DL offen-
bart in der obigen Analyse keine Probleme und wird im Folgenden als Referenz herangezo-
gen. Abbildung 4.17 illustriert Unterschiede in der Simulation zentraler Flusskomponenten,
die aus der Verwendung der ad hoc-Integrationsstrategie sowie der Regularisierung des Dif-
ferenzialgleichungssystems von LARSIM_{ME} resultieren. Die Darstellung erfolgt über Vio-
linplots. Hierbei entspricht die Breite der grauen Polygone der Häufigkeit bestimmter Ab-
weichungen (ε). Die horizontalen Linien zeigen die mittlere Abweichung (ME), die dik-
ken Punkte das 10 und 90 %-Quantil, die dünnen Punkte das 1 und 99 %-Quantil.

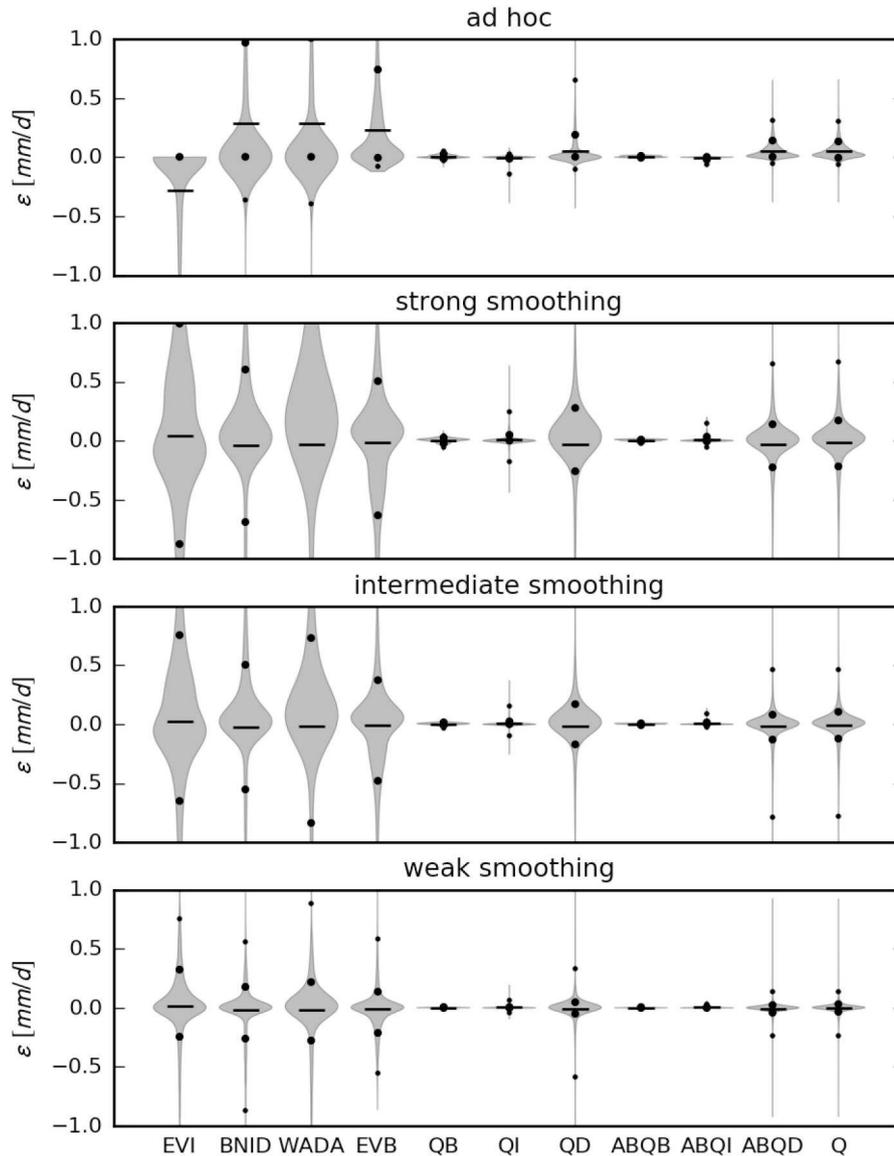


Abbildung 4.17: Flusskomponentenvergleich für die Tageswertsimulation mit LARSIM_{ME} ohne Niederschlagsdisaggregation. Einfluss der Wahl der Integrationsstrategie auf die simulierten Werte der Flussgrößen Interzeptionsverdunstung (EVI), Bestandsniederschlag (BNID), Wasserdargebot (WADA), Bodenverdunstung (EVB), Basisabflusststehung (QB), Interflowentstehung (QI), Direktabflusststehung (QD), Basisabfluss (ABQB), Interflow (ABQI), Direktabfluss (ABQD) und Gesamtabfluss (Q). Die obere Teilabbildung zeigt die jeweiligen Residuen (ε) zwischen den Simulationsergebnissen der originalen ad hoc-Integrationsstrategie von LARSIM_{ME} sowie von den Ergebnissen der als Referenz angesehenen expliziten Lobatto-Sequenz in Verbindung mit dem discontinuity locking-Ansatz. Die übrigen Teilabbildungen zeigen eine analoge Analyse des Regularisierungsansatzes, angewandt mit starkem ($\gamma = 10$, oben), mittlerem ($\gamma = 5$, mittig) und schwachem ($\gamma = 1$, unten) Glättungsgrad. Die Gesamtheit der Residuen ist mittels Violinplots charakterisiert, deren Breite der relativen Häufigkeit in einem Bereich entspricht. Zusätzlich eingezeichnet sind die Bilanzdifferenzen als Linien, die 10 und 90%-Quantile als dicke Punkte sowie die 1 und 99%-Quantile als dünne Punkte.

Die ad hoc-Lösung zeigt insbesondere im Interzeptionsmodul markante Unterschiede zur ELS-DL-Lösung. Die Interzeptionsverdunstung (*EVI*) wird grundsätzlich geringer, der durchfallende Niederschlag (*BNID*) i. d. R. deutlich höher eingeschätzt. Die mittlere Abweichung beträgt, mit umgekehrtem Vorzeichen, für beide Flussgrößen 0,29 mm/d. Zum Vergleich: die gemessenen mittleren Intensitäten des Niederschlages und des Abflusses ergeben sich zu 2,91 mm/d und 1,31 mm/d.

Diese Diskrepanz lässt sich als Auswirkung unterschiedlicher Annahmen zur Niederschlagsverteilung innerhalb externer Zeitschritte auffassen. Bei Anwendung der numerischen Integrationsalgorithmen wird eine konstante Niederschlagsintensität über den gesamten Tag angenommen (siehe Abschnitt 4.6). Die originale ad hoc-Lösung von LARSIM_{ME} lässt sich dagegen so interpretieren, als ginge sie von einer unverzüglichen Beschickung des Interzeptionsspeichers mit dem gesamten Niederschlagsvolumen zu Tagesbeginn aus. Überschüssiges Wasser passiert den Interzeptionsspeicher umgehend und erst im Anschluss wird eine Abstraktion durch die Interzeptionsverdunstung durchgeführt.

Die Bilanzdifferenz des Interzeptionsmoduls wird im Bodenmodul durch eine erhöhte Bodenverdunstung (*EVB*) größtenteils kompensiert. Markante Abweichungen bleiben lediglich in der Direktabflusskomponente bestehen (*QD* bzw. *ABQD*). Die mittlere Abweichung des Gesamtabflusses (*Q*) liegt mit ca. 0,04 mm/d im einstelligen Prozentbereich des gemessenen Abflusses. Das 90 %- und das 99 %-Quantil liegen mit 0,14 mm/d und 0,31 mm/d im zweistelligen Prozentbereich.

Verglichen mit der ad hoc-Lösung führt die Regularisierung des Differenzialgleichungssystems von LARSIM_{ME} keine relevanten Bilanzdifferenzen ein (Abbildung 4.17). Die Streuung der Abweichungen nimmt mit Verringerung des Glättungsgrades ab. Beides ist bei gelungener Umsetzung der Regularisierungstechnik (sowie der Diskretisierungstechnik) zu erwarten. Die absoluten Abweichungen in den „oberen“ Modellkomponenten liegen selbst beim geringsten Glättungsgrad in einer relevanten Größenordnung. Die zunehmende Dämpfung in den „unteren“ Modellkomponenten reduziert diese.

Die diskutierten Ergebnisse basieren auf einem fixen Parametersatz und sind daher von beschränkter Repräsentativität. Zur Verallgemeinerung erfolgt eine einfache „one factor at a time“-Sensitivitätsanalyse.

Abbildung 4.18 zeigt die mittleren absoluten Abweichungen (*MAE*) des Abflusses, ermittelt über die ELS-DL- und die ad hoc-Lösung der Prozessgleichungen, für verschiedene Parameterwerte. Die schwarzen Linien beziehen sich auf den Wertebereich von 0,00 bis 0,15 mm/d. Die grauen Linien heben Details hervor. Die Markierungen zeigen die bislang verwendeten, aggregierten Parameterwerte der Original-Implementierung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar. Die untere sowie die obere Parametergrenze der Sensitivitätsanalyse ist unter der jeweiligen Teilabbildung angegeben. Die Abszissen sind linear skaliert.

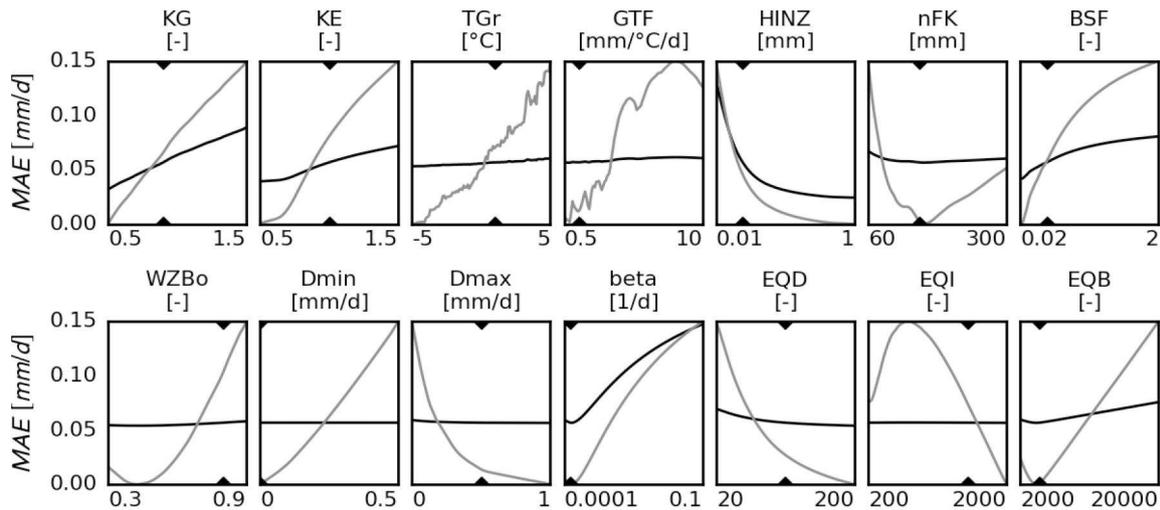


Abbildung 4.18: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit der Tageswertsimulation mit $LARSIM_{ME}$ ohne Niederschlagsdisaggregation. Einfluss der Wertebelegung der einzelner Parameter auf die mittlere absolute Abweichung (MAE) zwischen dem simulierten Abfluss der originalen ad hoc-Integrationsstrategie von $LARSIM_{ME}$ sowie dem simulierten Abfluss der expliziten Lobatto-Sequenz in Verbindung mit dem discontinuity locking-Ansatz, dargestellt für den Niederschlagskorrekturfaktor (KG), den Verdunstungskorrekturfaktor (KE), den Temperaturgrenzwert (TGr), den Grad-Tag-Faktor (GTF), die blattflächenindexbezogene Interzeptionskapazität ($HINZ$), die nutzbare Feldkapazität (nFK), den Bodensättigungsfläche-Parameter (BSF), den relativen Bodenwassergrenzwert ($WZBo$), die Maximalrate des langsamen Interflow ($Dmin$), die Maximalrate des gesamten Interflow ($Dmax$), den Koeffizienten der Basisabflussbildung ($beta$) sowie die Kalibrierfaktoren der Einzellinearspeicher für Direktabfluss (EQD), Interflow (EQI) und Basisabfluss (EQB). Auf den nicht logarithmisch skalierten Abszissen sind nur die jeweils gewählten Parametergrenzen eingetragen. Die oben und unten eingezeichneten Dreiecke markieren den Wert der Ausgangsparametrisierung. Die dunklen Linien beziehen sich auf den angegebenen Ordinatenbereich von 0,00 bis 0,15 mm/d. Die zusätzlich eingezeichneten hellen Linien sind auf die Gesamthöhe der Teilabbildungen skaliert, um Details hervorzuheben.

Größere Korrekturfaktoren für den Niederschlag (KG) und die potenzielle Verdunstung (KE) verstärken die Wirkung des Interzeptionsmoduls und so die diskutierte Bilanzdifferenz. Es resultiert ein ausgeprägter, positiver Zusammenhang mit MAE .

Der Temperaturgrenzwert (TGr) und der Grad-Tag-Faktor (GTF) zeigen sich kaum sensitiv. Zwar zeigen die Sensitivitätsverläufe eine gewisse Diskontinuität, allerdings nur in starker Vergrößerung.

Als maßgeblicher Parameter des Interzeptionsmoduls zeigt die auf den Blattflächenindex bezogene Interzeptionskapazität ($HINZ$) die größte Sensitivität. Je kleiner die Speicherkapazität, desto größer die Bilanzdifferenz, da sich der diskutierte Unterschied in der Annahme der zeitlichen Verteilung des Niederschlages nur bei einer Überschreitung der Speicherkapazität auswirkt.

Eine Zunahme der Speicherkapazität des Bodens (nFK) sowie eine Abnahme des Nichtlinearitätsparameters für die Direktabflussbildung (BSF) verringert MAE . Dies ist zum einen

auf eine Verstärkung der Bilanzkompensation durch das Bodenmodul zurückzuführen. Die korrespondierende Abnahme des Direktabflusses verringert zum anderen die Abflussdynamik und infolgedessen die numerische Unsicherheit.

Die für die Interflowbildung relevanten Parameter $WZBo$, $Dmin$ und $Dmax$ sind hinsichtlich MAE kaum sensitiv. Es ist zu berücksichtigen, dass die Ausgangsparametrisierung im Untersuchungszeitraum ein Interflowvolumen von lediglich 7 % des simulierten Gesamtabflusses mit sich bringt.

Eine Zunahme von β erhöht die Basisabflussabgabe und verringert so die Bilanz-Kompensation des Bodensmoduls. Dementsprechend stark fällt die Steigerung von MAE aus.

Eine Zunahme der Abflussdynamik durch Verringerung des Kalibrierparameters für die Direktabflussverzögerung ($EQD = 20$ entspricht einer Schwerpunktlaufzeit von 0,43 d) führt zur Zunahme der numerischen Unsicherheit, allerdings auf moderatem Niveau. Der Kalibrierparameter für die zeitliche Verzögerung des Interflows (EQI) verhält sich weitgehend insensitiv. Die Sensitivität des Kalibrierparameters für die Basisabflussverzögerung ($EQB = 20.000$ entspricht einer Schwerpunktlaufzeit von 430 d) ist wahrscheinlich auf Verschiebungen des zeitlichen Auftretens der dominanten Bilanzfehler gegenüber dem Untersuchungszeitraum zurückzuführen.

Die durchgeführte Sensitivitätsanalyse erlaubt keine exakten Schlüsse über das gesamte numerische Unsicherheitsspektrum von $LARSIM_{ME}$, da Parameterinteraktionen unberücksichtigt bleiben. Offensichtlich führen verschiedene Parameterwertkombinationen jedoch zu Differenzen in den Abflusssimulationen, deren mittlere Absolutabweichungen deutlich unterhalb 0,03 mm/d oder deutlich oberhalb 0,15 mm/d liegen. Zum Vergleich: der simulierte mittlere Abfluss der Original-Parametrisierung von $LARSIM_{ME}$ beträgt 0,95 mm/d oder 0,90 mm/d, je nachdem ob das Differenzialgleichungssystem mit der ad hoc-Strategie oder mit ELS-DL gelöst wird.

4.8.2 HBV₉₆

Dieser Abschnitt wiederholt für HBV₉₆ die im vorangegangenen Abschnitt für $LARSIM_{ME}$ vorgenommene Analyse. Zusätzlich untersucht wird die Abhängigkeit der Ergebnisse von der externen Zeitschrittweite (Stunden- vs. Tageswerte) sowie der Effekt der in Abschnitt 4.6 eingeführten Disaggregierungsmethodik.

Grundlage ist die Konfiguration des operationellen HBV₉₆-Modells der Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG) für den oberen Neckar (siehe Abschnitt 3.3). Neben der flächendifferenzierten Variante mit insgesamt dreizehn Verschneidungen der Landnutzungen *field* und *forest* sowie der 100-m-Höhenstufen kommt eine aggregierte Blockvariante mit nur einer Zone vom Typ *field* zum Einsatz.

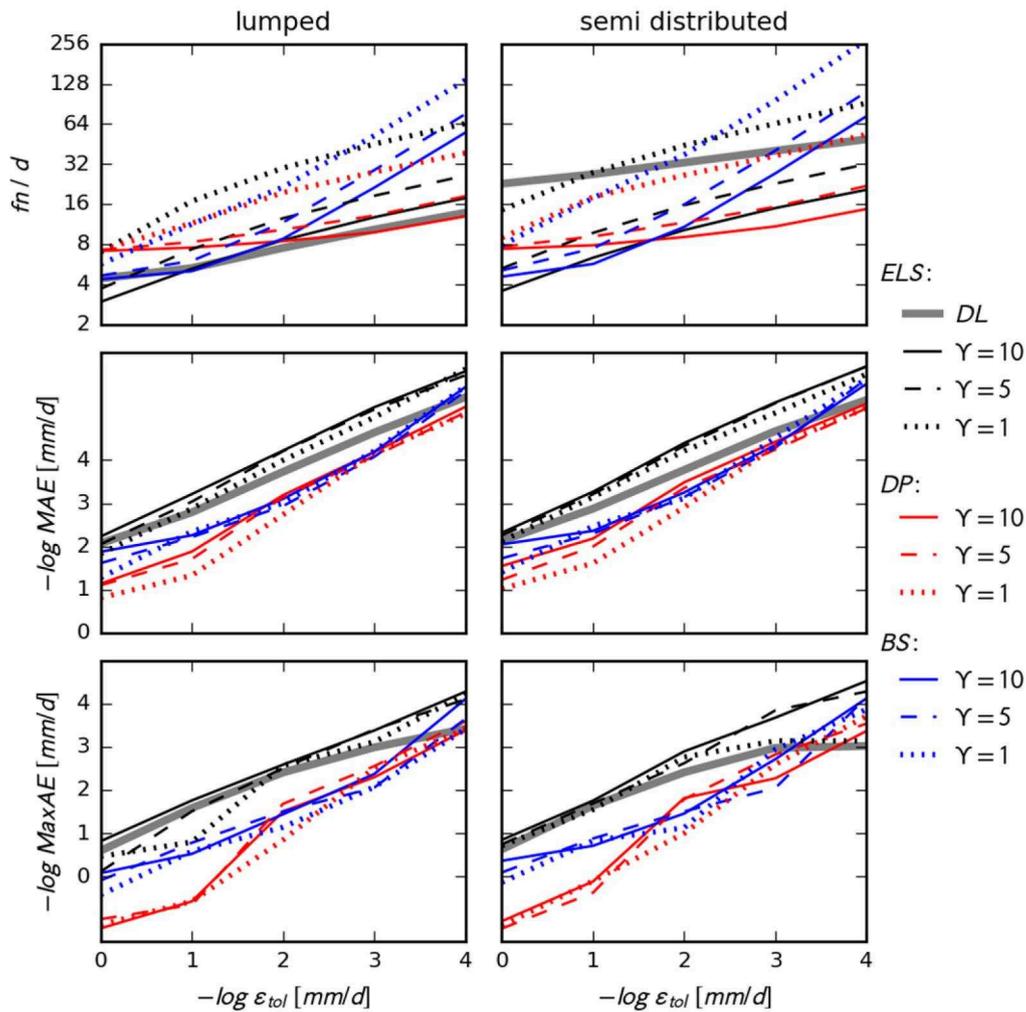


Abbildung 4.19: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Tageswertsimulation mit HBV₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.

Zwei Abweichungen von der HBV₉₆-Konfiguration der BfG werden vorgenommen. Erstens wird der Parameter EAT (siehe Gleichung 4.118) so hoch angesetzt, dass die Verdunstung aus dem Bodenkörper durch das Vorhandensein einer Schneedecke grundsätzlich nicht unterdrückt wird. Das Beibehalten des Originalwertes für EAT von null führt in der bisherigen Implementierung von HBV₉₆ in HydPy in Kombination mit dem discontinuity locking-Ansatz (DL) zu Problemen, die in Abschnitt 4.10 gesondert diskutiert werden. Zweitens wird der Parameter $RECSTEP$ auf den Wert eins gesetzt. Dies findet in der Diskussion der unten folgenden Sensitivitätsanalyse Erläuterung.

Abbildung 4.19 zeigt die Effizienz der verschiedenen Integrationsstrategien in der Lösung der Differentialgleichungen von HBV₉₆ für die Tageswertsimulation. Qualitativ besteht eine große Übereinstimmung mit der analogen Abbildung 4.15 für LARSIM_{ME}. Die bereits gewonnenen Erkenntnisse bestätigen sich, weshalb auf die detaillierte Diskussion in Abschnitt 4.8.1 verwiesen sei.

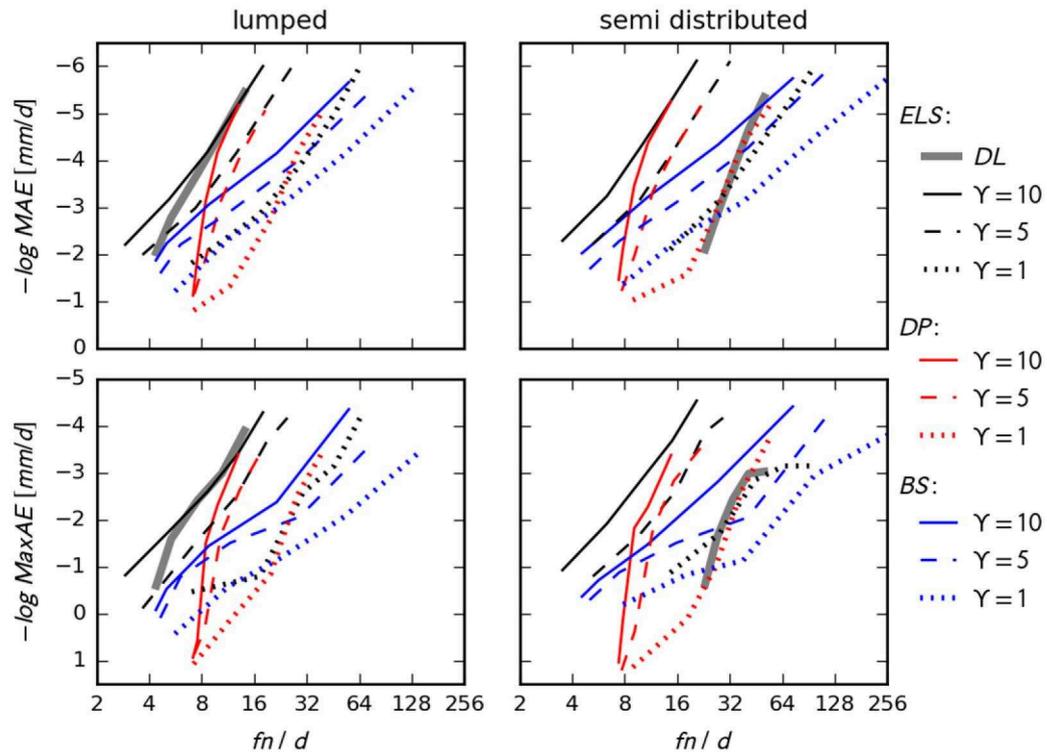


Abbildung 4.20: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.

Abbildung 4.20 stellt den mittleren (*MAE*) sowie den maximalen (*MaxAE*) absoluten Fehler der benötigten Anzahl an Funktionsaufrufen (*fn*) gegenüber. Verglichen mit $LARSIM_{ME}$ (Abbildung 4.16) erweist sich ELS (schwarze Linien) in der Integration von HBV_{96} bis zu einer höheren Genauigkeit effizienter als DP (rote Linien). Eine hohe Effizienz über den gesamten Genauigkeitsbereich zeigt sich erneut in Verbindung mit DL (graue Linie) bei fehlender räumlicher Differenzierung des Untersuchungsgebietes (links). Wird dagegen die räumlich differenzierte Konfiguration herangezogen (rechts), entspricht der Rechenaufwand in etwa dem der Lösung des am schwächsten regularisierten Differenzialgleichungssystems (gepunktete Linien).

In der analogen Analyse zur HBV_{96} -Stundenwertsimulation wird die lokale Fehlertoleranz (ε_{Tol}) über den Bereich 10^{-6} mm/h bis 10^0 mm/h variiert. Die Glättungsgrade (γ) betragen in der jeweils geeigneten Einheit mm, mm/h oder $^{\circ}C$ 10 (durchgezogene Linie), 5 (gestrichelte Linie) und 1 (gepunktete Linie).

DP (rot) zeigt sich über den gesamten Toleranzbereich unterfordert, ebenso BS (blau) bis zu einer Fehlertoleranz von etwa 10^{-3} mm/h. Bei Anwendung von ELS (schwarz) bestätigt sich i. d. R. bereits durch den zweiten Funktionsaufruf die Einhaltung der Toleranz durch das einstufige Verfahren (explizites Euler-Verfahren) bis zu einer globalen Genauigkeiten von etwa 10^{-5} mm/h (*MAE*) bzw. 10^{-3} mm/h (*MaxAE*).

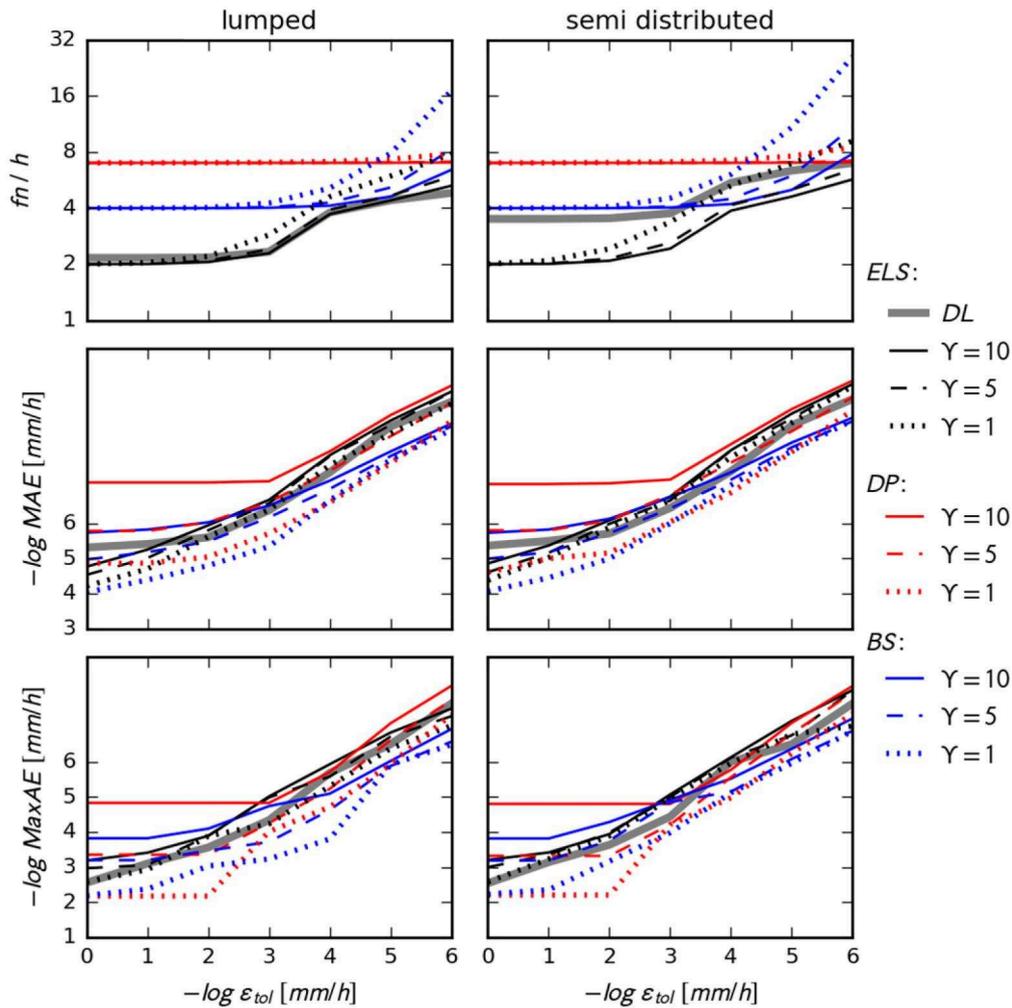


Abbildung 4.21: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Stundenwertsimulation mit HBV₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.

Die vorliegende HBV₉₆-Konfiguration zeigt in der Stundenwertsimulation ein derart träges Verhalten, dass die simpelsten Integrationsverfahren die effizientesten sind. Eine Gegenüberstellung analog zu Abbildung 4.20 kann entfallen. Da primär die minimale Stufenanzahl die Effizienz bedingt, ist ELS zwangsläufig im Vorteil und DP zwangsläufig im Nachteil.

Abbildung 4.22 stellt die Unterschiede einzelner Flusskomponenten bei Anwendung verschiedener Integrationsstrategien dar. Wie in der analogen Analyse für LARSIM_{ME} (Abbildung 4.17) dient ELS-DL als Referenzverfahren, angewandt auf die räumlich undifferenzierte HBV₉₆-Variante.

Gemäß der strukturellen Übereinstimmung des Interzeptionsmoduls beider Modelle wiederholt sich das in Abschnitt 4.8.1 diskutierte Muster. Die ad hoc-Implementierung schätzt die Interzeptionsverdunstung (*EI*) deutlich geringer und den durchfallenden Niederschlag (*TF*)

deutlich höher ein. Der Kompensationseffekt durch die Bodenverdunstung (EA) ist bei HBV_{96} allerdings deutlich schwächer ausgeprägt. Demzufolge ist die verbleibende mittlere Differenz im Abfluss (Q) mit $0,20 \text{ mm/d}$ ca. fünfmal größer als bei $LARSIM_{ME}$ und beträgt etwa 20% des simulierten Abflusses. Ob weitere numerische Unsicherheiten vorliegen, lässt sich aufgrund des Ausmaßes der Bilanzdifferenz des Interzeptionsmoduls aus Abbildung 4.22 nicht erkennen.

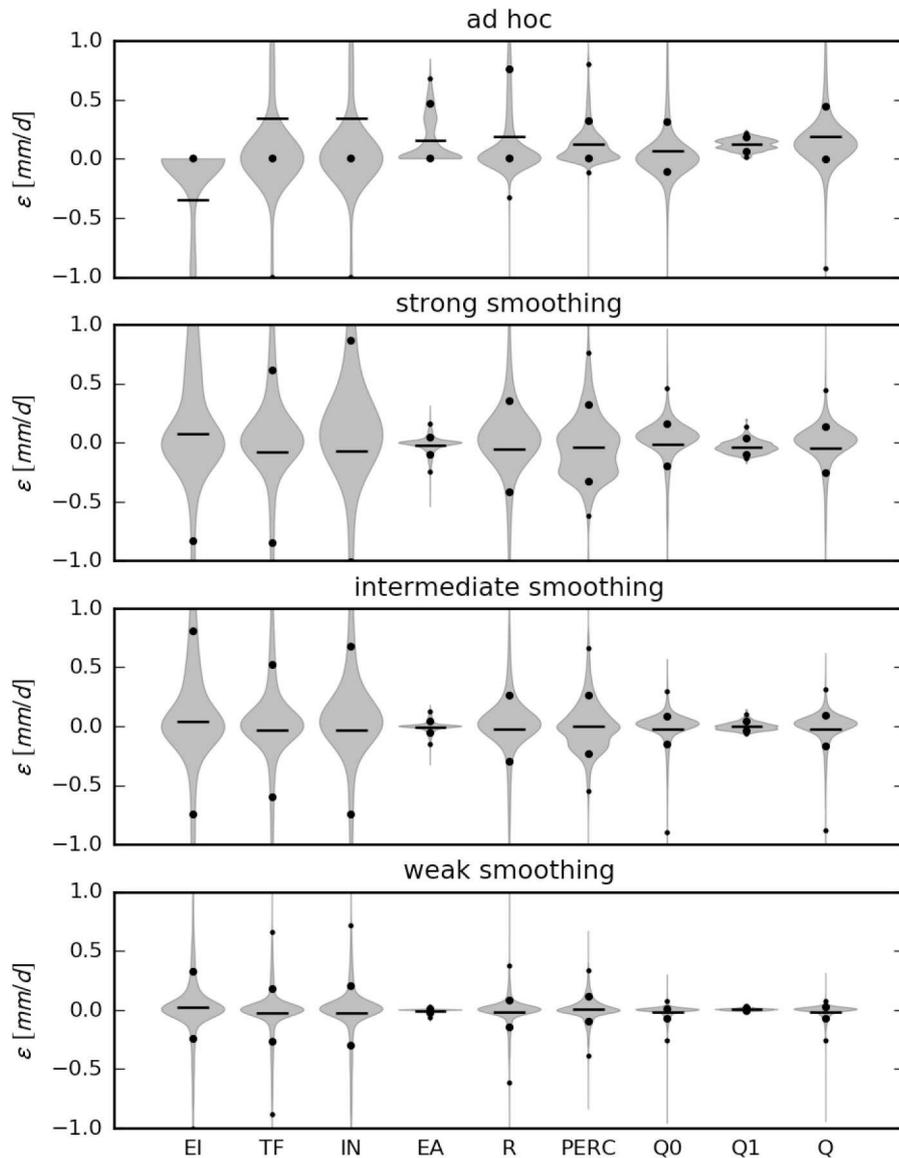


Abbildung 4.22: Flusskomponentenvergleich analog Abbildung 4.17 für die Tageswertsimulation mit HBV_{96} ohne Niederschlagsdisaggregation. Einfluss der Wahl der Integrationsstrategie auf die simulierten Werte der Flussgrößen Interzeptionsverdunstung (EI), Throughfall (TF), Bodeninfiltration (IN), Bodenverdunstung (EA), Abflusstehung (R), Perkolation ($PERC$), Direktabfluss ($Q0$), Basisabfluss ($Q1$) und Gesamtabfluss (Q).

Die gegenüber LARSIM_{ME} geringe Ausprägung des Kompensationseffektes durch das Bodenmoduls liegt zumindest teilweise in der abweichenden Berechnung der Verdunstung begründet (siehe Abschnitt 4.7.3). LARSIM_{ME} ermittelt die tatsächliche Bodenverdunstung aus der Bodenfeuchte sowie aus der Differenz von potenzieller Verdunstung und Interzeptionsverdunstung (Gleichung 4.143). Die Erhöhung des Throughfalls der ad hoc-Implementierung bewirkt eine Zunahme der Bodenfeuchte; die Verringerung der Interzeptionsverdunstung bewirkt eine Zunahme des „Restes“ an potenzieller Verdunstung. Beides verstärkt die Bodenverdunstung. Nach HBV₉₆ ermittelt sich die tatsächliche Bodenverdunstung dagegen aus der Bodenfeuchte und aus der (unveränderten) potenziellen Verdunstung (Gleichung 4.118), ggf. mit nachgeschalteter Korrektur (Gleichung 4.121). Somit greift bei HBV₉₆ einer der beiden Kompensationsmechanismen von LARSIM_{ME} kaum – bei der vorliegenden Belegung des Reduktionsfaktors *ERED* mit null gar nicht.

Bei Einsatz der Regularisierungstechnik zeigen sich in Abbildung 4.22 – wie für LARSIM_{ME} – selbst bei großen Glättungsgraden nur moderate Bilanzdifferenzen und hin zu geringen Glättungsgraden deutliche Rückgänge der Abweichungen aller Flusskomponenten gegenüber der DL-Lösung.

Mit dem Wechsel zur Stundensschrittweite (Abbildung 4.23) reduzieren sich die Unterschiede zur ad hoc-Integration extrem. Lediglich die 1%- und 99%-Quantile der Abweichungen einiger Flussgrößen bleiben erkennbar, verursacht durch das Interzeptionsmodul. Ein gewisser Effekt der unterschiedlichen Annahmen zum zeitlichen Niederschlagsverlauf verbleibt somit, ist gegenüber der Tageswertsimulation allerdings von deutlich geringerer Relevanz. Das ad hoc-Integrationsschema von HBV₉₆ führt, wie aufgrund der obigen Effizienzanalysen zu erwarten, zu keinen auffälligen Rechenfehlern.

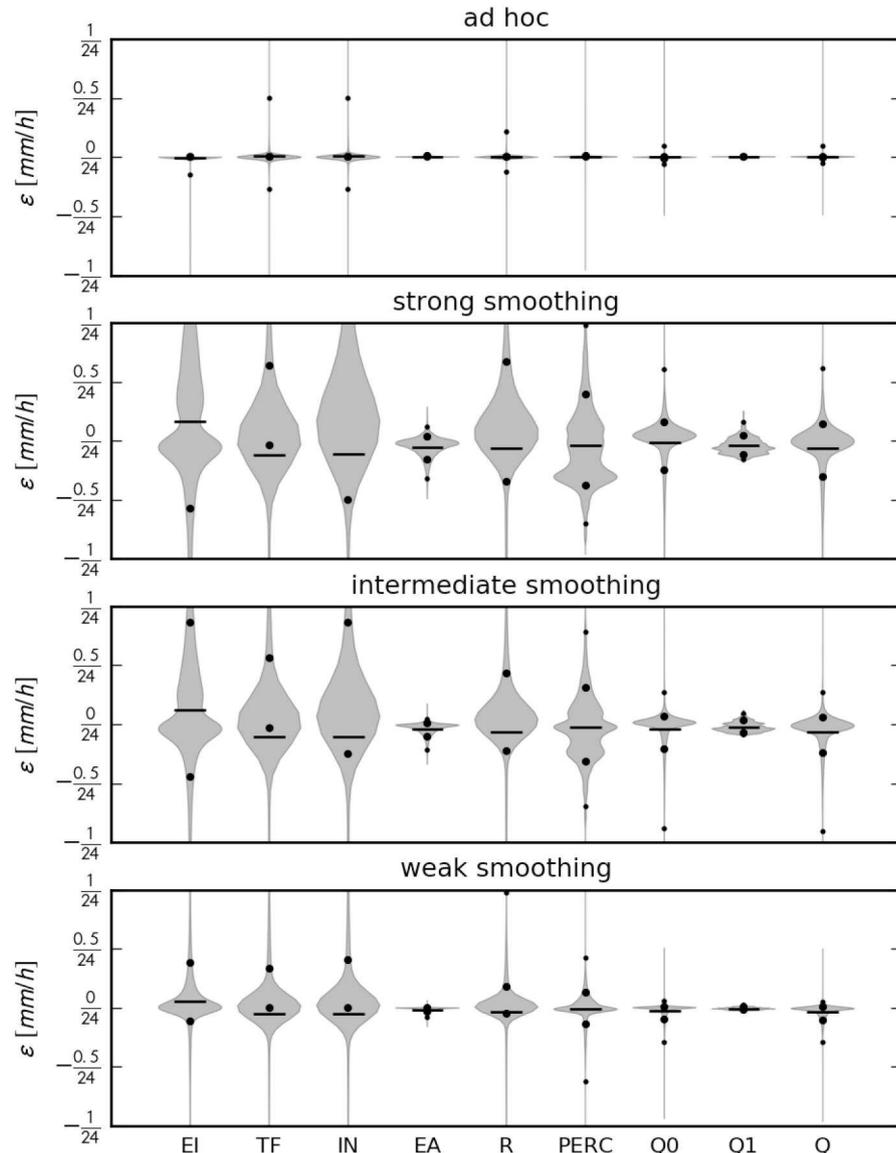


Abbildung 4.23: Flusskomponentenvergleich analog Abbildung 4.23 für die Stundenwertsimulation mit HBV_{96} ohne Niederschlagsdisaggregation.

Bei Anwendung der Regularisierungstechnik treten die bekannten Muster auf. Die Abweichungen zur ELS-DL-Lösung sind im Vergleich zu denen der ad hoc-Integrationsstrategie deutlich erhöht, was in Kombination mit dem ähnlichen Rechenaufwand für alle drei Glättungsgrade (Abbildung 4.21) die Verringerung der Glättungs-Metaparameter nahelegt.

Abbildung 4.24 und Abbildung 4.25 veranschaulichen für HBV_{96} , analog zu Abbildung 4.18 für $LARSIM_{ME}$, die Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit.

Teilweise lässt sich die Diskussion aus Abschnitt 4.8.1 auf HBV_{96} übertragen. Ein erhöhter Niederschlagskorrekturfaktor ($PCORR$) sowie eine verringerte Interzeptionskapazität

(*ICMAX*) verschärfen die Bilanzdifferenz des Interzeptionsmoduls. Der Temperaturgrenzwert (*TT*) sowie der Grad-Tag-Faktor (*GTF*) sind kaum sensitiv, zeigen in starker Vergrößerung allerdings diskontinuierliche Verläufe.

Einen markanten Unterschied gegenüber *LARSIM_{ME}* stellt die weitgehende Insensitivität des Korrekturfaktors der potenziellen Verdunstung (*ECORR*) dar, was mit dem verminderten Kompensationseffekt des Bodenmoduls in Verbindung steht. Die Kompensation verstärkt sich selbst dann nicht wesentlich, wenn der Reduktionsfaktor *ERED* bis zum Wert eins erhöht wird.

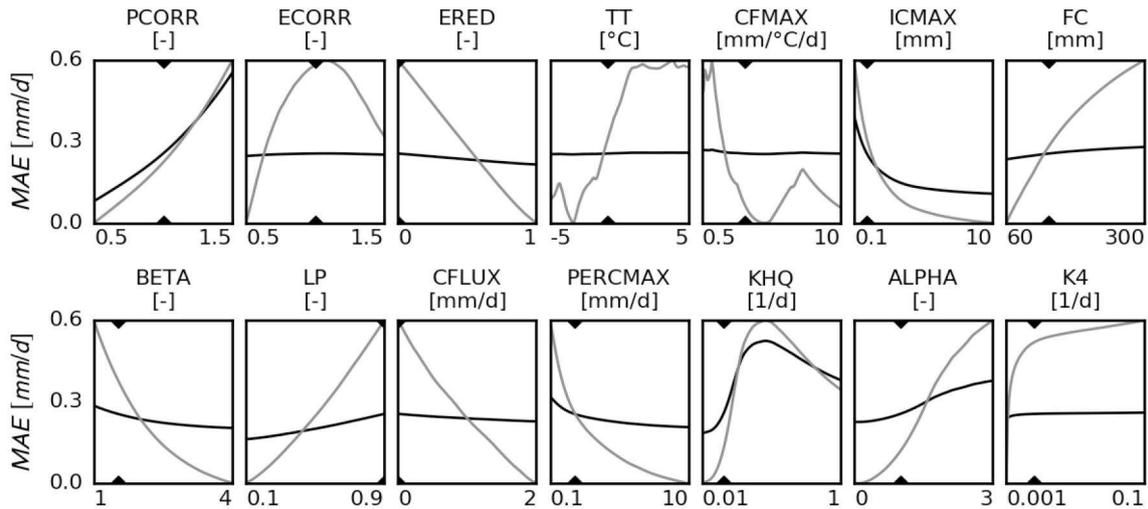


Abbildung 4.24: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit analog Abbildung 4.18 für die Tageswertsimulation mit *HBV₆* ohne Niederschlagsdisaggregation, dargestellt für den Niederschlagskorrekturfaktor (*PCORR*), den Verdunstungskorrekturfaktor (*ECORR*), den Reduktionsfaktor der Bodenverdunstung (*ERED*), den Temperaturgrenzwert (*TT*), den Grad-Tag-Faktor (*CFMAX*), die Interzeptionskapazität (*ICMAX*), die Feldkapazität (*FC*), den Nichtlinearitätsparameter der Abflussbildung (*BETA*), den relativen Grenzwert der Bodenverdunstung (*LP*), die Maximalrate des kapillaren Wiederaufstiegs (*CFLUX*), die Maximalrate der Perkolations (*PERCMAX*), den Retentionsparameter des Direktabflusses (*KHQ*), den Nichtlinearitätsparameter des Direktabflusses (*ALPHA*) und den Retentionsparameter des Basisabflusses (*K4*).

Ebenfalls auffällig ist der Sensitivitätsverlauf des Kalibrierparameters *KHQ* zur Einstellung der zeitlichen Verzögerung des Direktabflusses. Im gegebenen Fall hat ein *KHQ*-Wert von 0,01 mm/d eine extrem träge Einstellung des Speicherkoeffizienten *K* (Gleichung 4.151) mit dem Wert $3 \cdot 10^{-5} \text{ mm}^{-\text{ALPHA}}/\text{d}$ zur Folge, ein *KHQ*-Wert von 1 mm/d dagegen einen extrem reaktiven *K*-Wert von $3 \cdot 10^{-1} \text{ mm}^{-\text{ALPHA}}/\text{d}$. Die größten numerischen Fehler treten im mittleren Bereich auf. Der Fehlerrückgang hin zu einer geringeren Dynamik der Direktabflusskomponente ist unmittelbar nachvollziehbar. Der Fehlerrückgang hin zur höheren Dynamik erklärt sich eventuell über die (in ad hoc-Implementierungen hydrologischer Modelle gängige) nachgeschaltete Grenzwertkorrektur. Das Volumen des Direktabflusses über einen gewissen Zeitschritt ($h \cdot Q_0$) berechnet sich zunächst gemäß Gleichung 4.151, wird bei drohender Überdränung des oberen Grundwasserspeichers ($UZ < h \cdot Q_0$) jedoch auf dessen

Restvolumen zurückgesetzt. Bei sehr hohen K -Werten treten häufiger Situationen auf, in denen UZ sehr schnell über Q_0 entwässert und die nachgeschaltete Grenzwertkorrektur zu einer akzeptablen Annäherung an die analytische Lösung führt.

Die in Abschnitt 4.7.4 diskutierte mögliche Steifheit der Abflusskonzentration von HBV_{96} betreffend sei angemerkt, dass bei verschiedenen getesteten Fehlertoleranzen ein KHQ -Wert von 1 mm/d die etwa drei- bis vierfache Anzahl an Funktionsaufrufen gegenüber einem KHQ -Wert von 0,01 mm/d zur Folge hat. Keiner der anderen untersuchten Parameter zeigt innerhalb der gewählten Grenzen einen derart starken Einfluss auf die Effizienz von ELS-DL. Den Einsatz aufwendigerer stabilerer Iterationsverfahren legt dies jedoch nicht nahe, insbesondere da Detailanalysen die Effizienzverringerung mehr als Transienten- denn als Stabilitätsproblem (Shampine und Gear 1979) erscheinen lassen.

Ferner sei darauf hingewiesen, dass die ad hoc-Implementierung von HBV_{96} eine optionale Strategie zur genaueren Lösung des Abflusskonzentrationsmoduls vorsieht (siehe SMHI 2011 sowie Tyralla und Schumann 2013). Je nach Belegung des Parameters $RECSTEP$ wird jeder externe Zeitschritt zur Berechnung des Direktabflusses, der Perkolation sowie des kapillaren Aufstiegs in eine fixe Anzahl an Integrationsschritten unterteilt. In der Original-Implementierung von HBV_{96} lässt sich zudem eine dem Verfasser dieser Arbeit nicht genauer bekannte adaptive Schrittweitensteuerung hinzuschalten. Das Setzen von $RECSTEP$ auf einen hohen Wert reduziert den Sensitivitätsverlauf von KHQ etwa auf den Bereich 0,19 bis 0,29 mm/d.

Die numerische Unsicherheit der Stundenwertsimulation verändert sich durch die Variation der meisten Parameter kaum (Abbildung 4.25). KHQ zeigt die ausgeprägteste Sensitivität. Mit der Reduzierung der externen Zeitschrittweite auf das Vierundzwanzigstel eines Tages unter Beibehaltung der Parametergrenzen tritt im Gegensatz zu Abbildung 4.24 jedoch nur eine monotone Steigung auf.

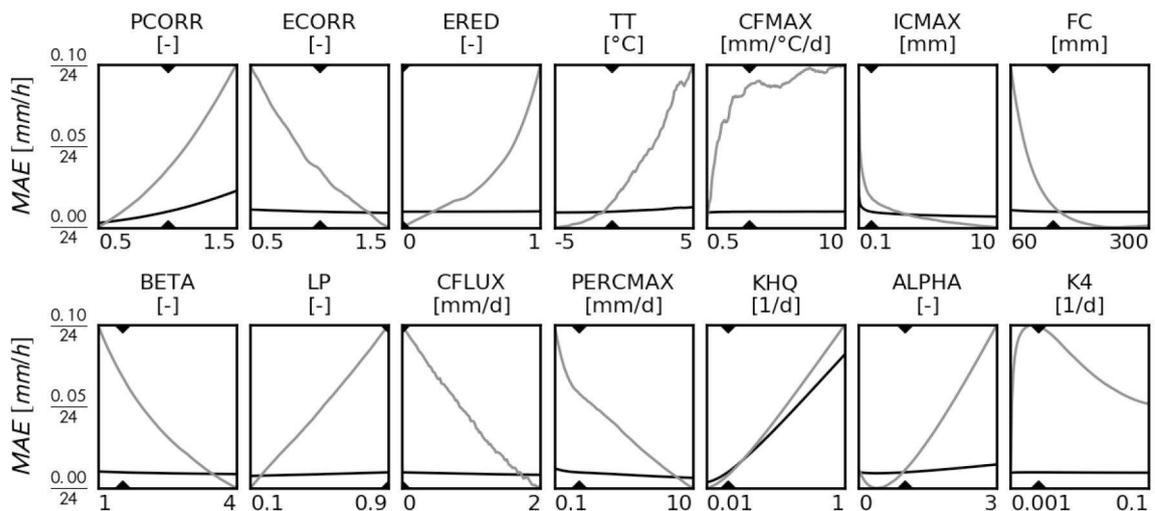


Abbildung 4.25: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit analog Abbildung 4.18 für die Stundenwertsimulation mit HBV_{96} ohne Niederschlagsdisaggregation.

In den obigen Analysen erweist sich die Art der Einspeisung der Niederschlagsdaten in die Differenzialgleichungssysteme von LARSIM_{ME} und HBV₉₆ als relevante Unsicherheitsquelle. Inwieweit der Einsatz der in Abschnitt 4.6 eingeführten statistisch-deterministischen Disaggregierungsfunktionen diese Unsicherheitsquelle verringert, wird im Folgenden exemplarisch für HBV₉₆ untersucht.

Vor einem möglichen Nutzen sei der unumgängliche Nachteil in Form einer erhöhten Rechendauer diskutiert. Abbildung 4.26 zeigt die Recheneffizienz der verschiedenen Integrationsverfahren unter Verwendung von Disaggregierungsfunktion ρ_d (Gleichung 4.69). In Annahme eines geringen Einflusses der gewählten Parametrisierung erfolgten die Rechnungen unter alleiniger Verwendung der für die Niederschlagsstation Essen ermittelten Regressionsparameter (siehe Tabelle 4.10 und Tabelle 4.11). Von der Niederschlagsdisaggregierung abgesehen, wird die oben beschriebene HBV₉₆-Konfiguration beibehalten.

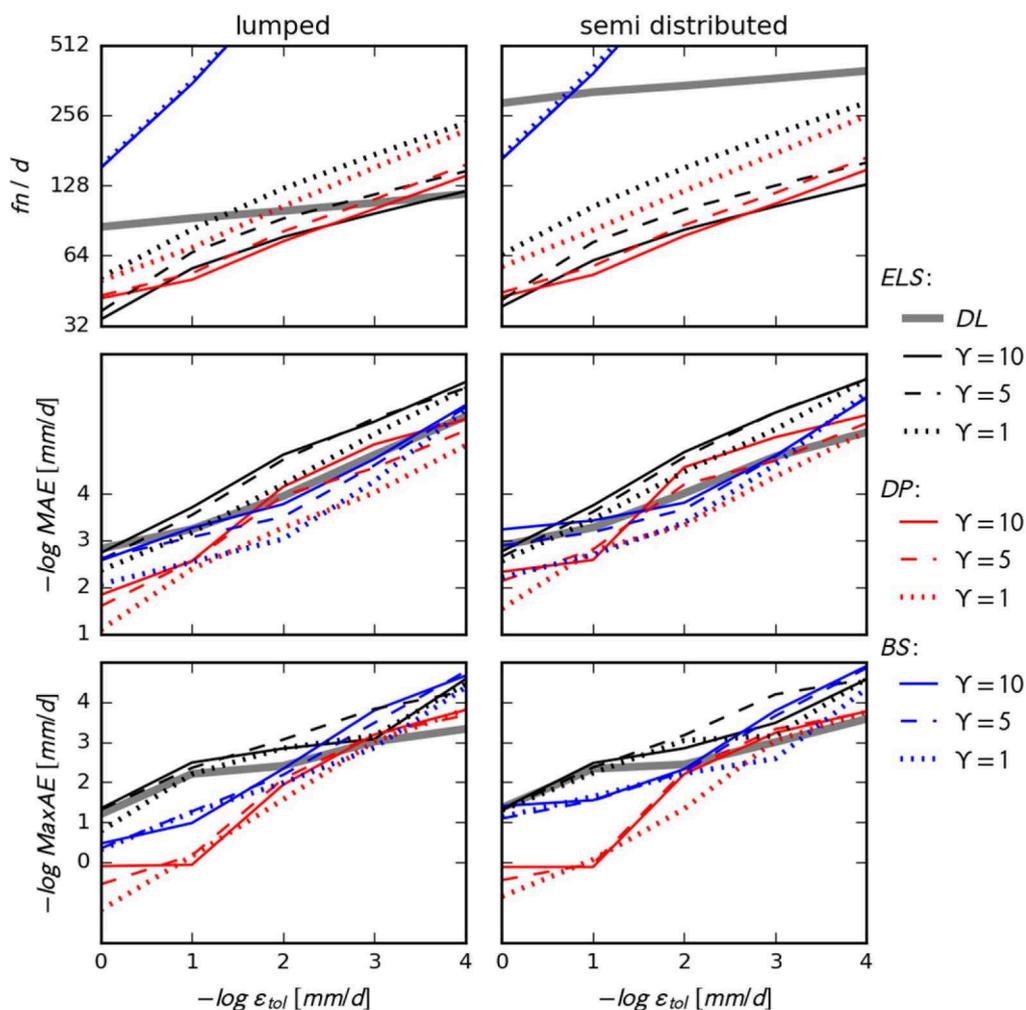


Abbildung 4.26: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19 für die Tagewertsimulation mit HBV₉₆ mit Niederschlagsdisaggregierung.

Details zur numerischen Integration mit ELS unter Verwendung von ρ_d finden sich in Abschnitt 4.6.3. Die darin beschriebene Einführung von Zwischenzeitpunkten kommt ebenfalls in der Umsetzung von DP und BS zum Einsatz. Da ρ_d stetig verläuft (siehe Abbildung 4.7), findet bei Anwendung von DP und BS jeder letzte „alte“ Funktionsaufruf an einem Zwischenzeitpunkt als erster „neuer“ Funktionsaufruf Verwendung, d. h. innerhalb externer Zeitschritte kommt die „first same as last“-Eigenschaft der Methoden zum Tragen. Zudem behalten DP und BS beim Passieren eines Zwischenzeitpunktes, im Gegensatz zum Wechsel von einem externen Zeitschritt zum nächsten, die aktuelle Schrittweitschätzung bei. Dies erscheint aufgrund der Stetigkeit von ρ_d effizienter als das initiale Ansetzen der Maximalschrittweite und brachte in Vorversuchen kleine Rechenzeiteinsparungen mit sich.

Der Vergleich von Abbildung 4.26 mit Abbildung 4.19 zeigt viele Übereinstimmungen in den erreichten mittleren (*MAE*) und maximalen (*MaxAE*) absoluten Fehlern. Die Anzahl an Funktionsaufrufen (*fn*) zu deren Erzielung ist grundsätzlich erhöht. Während die Erhöhung bei Anwendung von ELS und DP auf die regularisierten Differenzialgleichungssysteme moderat verläuft, erfordert BS bereits zum Erreichen der höchsten Fehlertoleranz (ϵ_{tol}) von 10^{-0} mm/d ca. 160 Funktionsaufrufe pro Tag. Dies sollte auf die geringe Ordnung des Verfahrens zurückzuführen sein, die zur exakten Reproduktion der Polynome dritten Grades, aus denen sich ρ_d zusammengesetzt, nicht ausreicht.

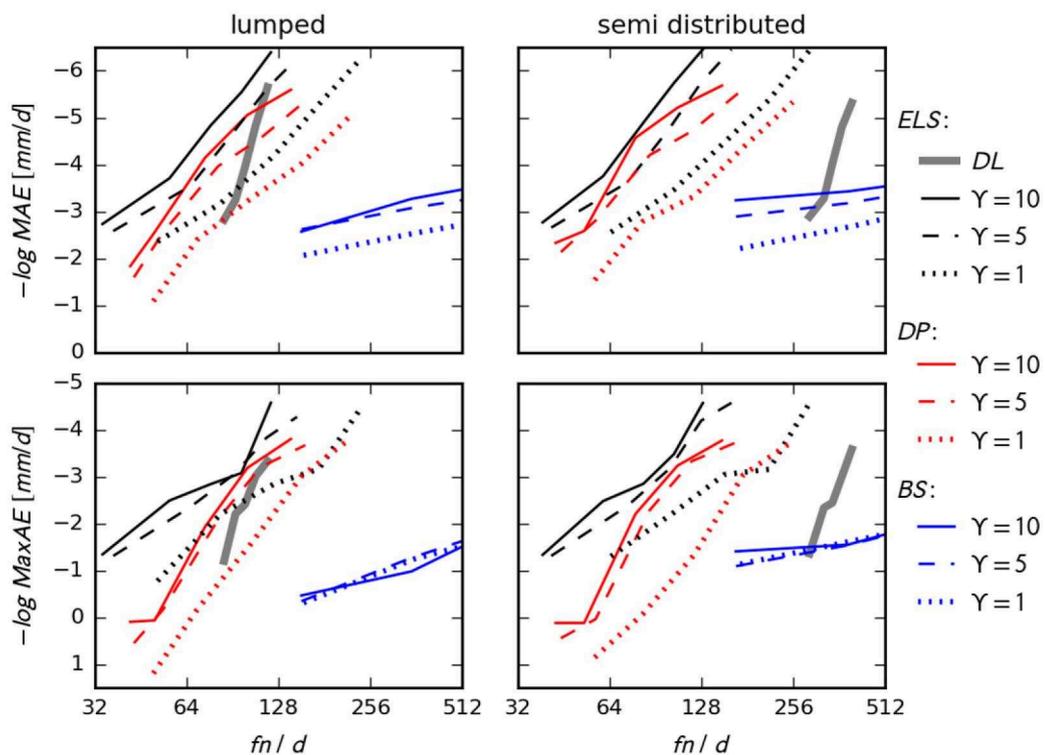


Abbildung 4.27: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.26, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.

Die direkte Gegenüberstellung von MAE und $MaxAE$ mit fn in Abbildung 4.27 zeigt deutliche Vorteile von ELS gegenüber DP insbesondere im Bereich geringer Genauigkeitsforderungen. Allerdings erhöht der discontinuity locking-Ansatz (graue Linie) fn deutlich, bei Lösung der räumlich differenzierten HBV₉₆-Konfiguration (rechts) sogar extrem. Mit Einführung von Variabilität in den eingehenden Niederschlag durch ρ_d wird eine größere Anzahl an Diskretisierungen der externen Zeitschritte notwendig. Einzelne Diskontinuitätsfunktionen (z. B. Gleichung 4.87) sind überhaupt nur dann von Relevanz, wenn wenigstens eine der Eingangsgrößen (im Beispiel Pc oder EPc) innerhalb externer Zeitschritte variiert.

Bei Durchführung derselben Analyse für die Stundenwertsimulation (Abbildung 4.28) wiederholen sich tendenziell die Ergebnisse der Stundenwertsimulation ohne Niederschlagsdisaggregation (Abbildung 4.21). Bereits die höchste Fehlertoleranz von 10^{-0} mm/h führt zu befriedigenden globalen Genauigkeiten. Über die Effizienz der verschiedenen Integrationsverfahren entscheidet primär die minimale Anzahl der Funktionsaufrufe pro Integrations-schritt.

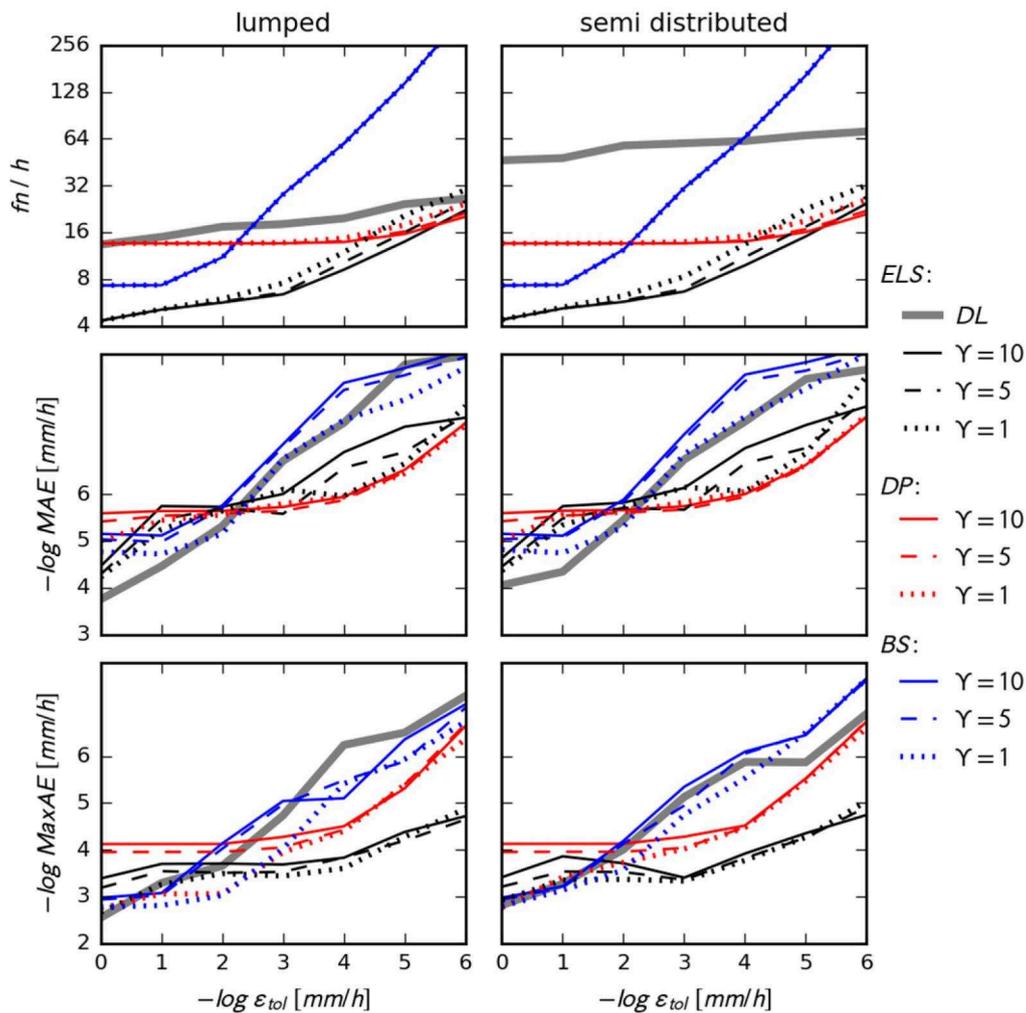


Abbildung 4.28: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.26 für die Tageswertsimulation mit HBV₉₆ mit Niederschlagsdisaggregation.

Bei Verwendung von ELS und DP erhöht sich fn überwiegend durch die Einführung von Zwischenzeitpunkten in die externen Zeitschritte, in denen Niederschlag fällt. Auffällig bei Verwendung von BS ist, dass fn in keiner Abhängigkeit zum gewählten Glättungsgrad steht (alle blauen Linien liegen übereinander). Erneut deutet sich eine Überforderung von BS mit der Quadratur der Disaggregierungsfunktion, in diesem Fall ρ_h , an.

Für ELS zeigt sich in Kombination mit DL eine Stagnation des maximalen absoluten Fehlers ($MaxAE$) etwa zwischen Fehlertoleranzen von 10^{-1} mm/h bis 10^{-4} mm/h. Da ELS bei noch höheren Fehlertoleranzen zur erreichten Genauigkeit der anderen Methoden aufschließt, scheint sich hier kein grundsätzliches Problem anzudeuten.

Für zu erwartende Genauigkeitsforderungen zeigt sich ELS in Abbildung 4.29 erneut am effizientesten. Die Kombination mit DL führt, wie in der Tageswertsimulation, jedoch zu einer unbefriedigenden Steigerung der Anzahl an Funktionsaufrufen.

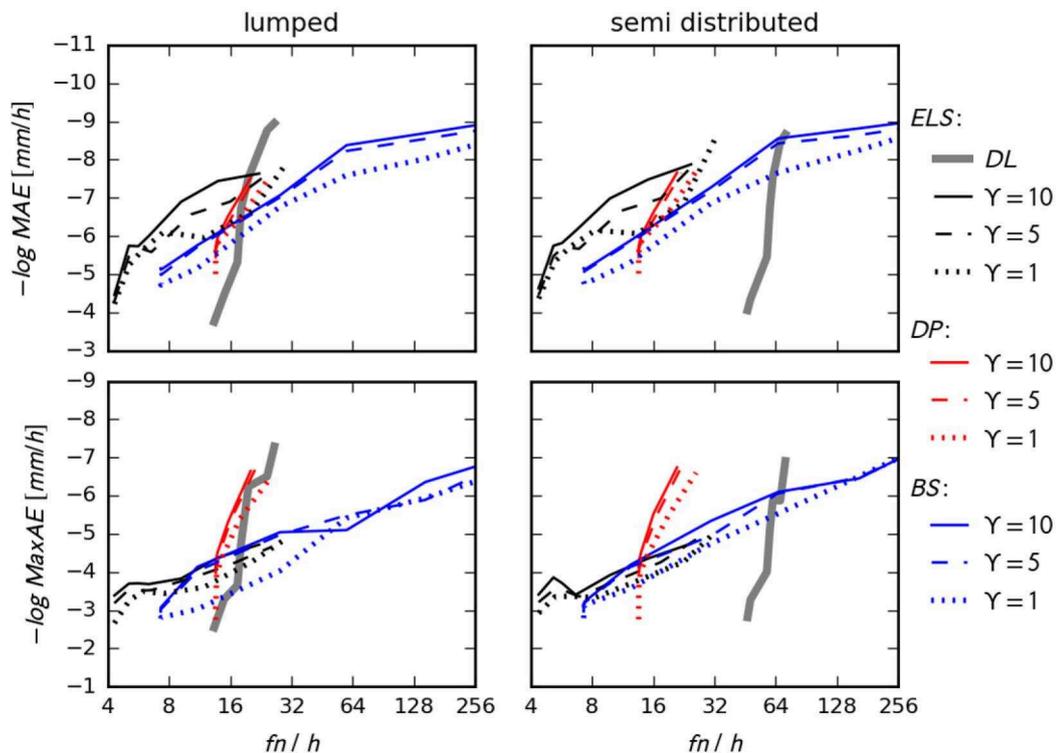


Abbildung 4.29: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.28, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.

Im Folgenden wird untersucht, ob die Anwendung der Disaggregierungsmethodik auf HBV_{96} (und vergleichbare Modelle) die Konsistenz der Simulationsergebnisse erhöht. Abbildung 4.30 stellt die „Zeitschrittunsicherheit“ der zentralen Flusskomponenten von HBV_{96} über den Vergleich von Stunden- und Tageswertsimulationen dar. Als Referenz dient jeweils die Simulation in Stundenschrittweite, deren Ergebnisse zu Tageswerten aggregiert werden. Damit verglichen werden die jeweiligen Ergebnisse der Tageswertsimulation, die auf Basis zuvor aggregierter Stundenwerte der Eingangsgrößen durchgeführt wird.

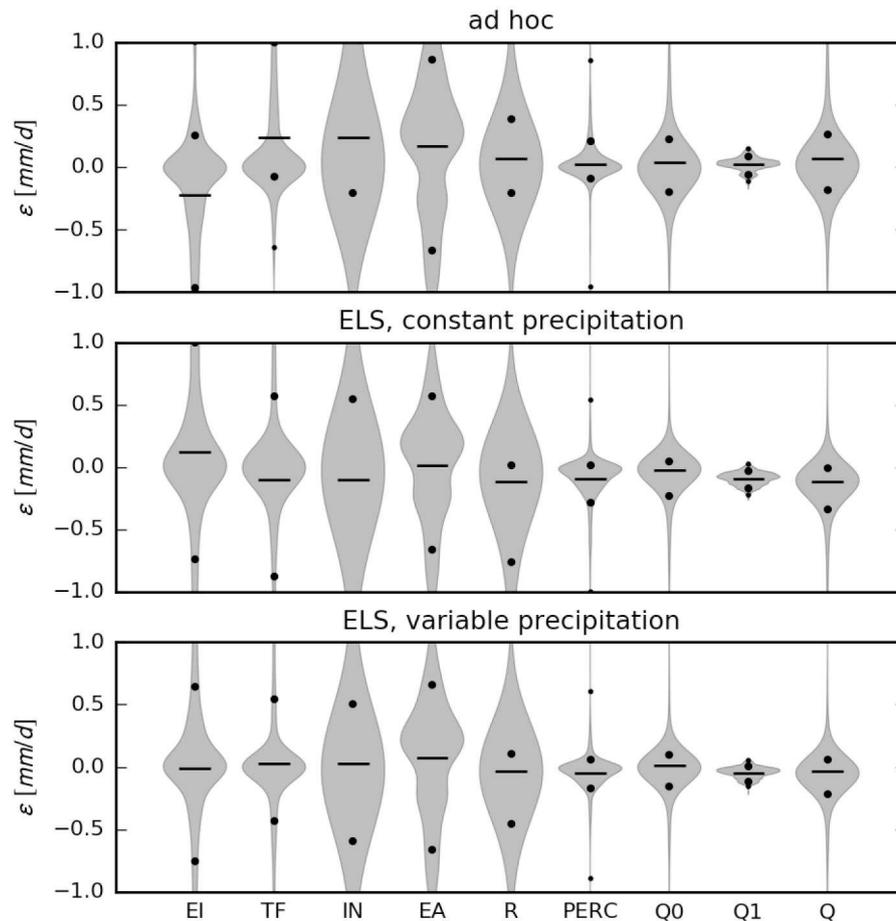


Abbildung 4.30: Flusskomponentenvergleich in Anlehnung an Abbildung 4.22 für die Simulation mit HBV_{96} in unterschiedlicher Zeitschrittweite. Die Residuen der einzelnen Flussgrößen ergeben sich aus dem Vergleich der (auf Tageswerte aggregierten) Stundenwertsimulation und der unmittelbaren Tageswertsimulation unter Einsatz der originalen ad hoc-Integration von HBV_{96} (oben) sowie der expliziten Lobatto-Sequenz in Kombination mit dem discontinuity locking-Ansatz ohne (Mitte) und mit (unten) Verwendung der Disaggregierungsfunktionen ρ_h und ρ_d .

Die obere Teilabbildung zeigt den Vergleich zwischen der Stunden- und der Tageswertsimulation unter Einsatz der ad hoc-Integrationsstrategie. Die Tageswertsimulation schätzt die Interzeptionsverdunstung (EI) deutlich geringer und den durchfallenden Niederschlag (TF) entsprechend höher ein. Die bis zum Gesamtabfluss (Q) verbleibende Bilanzdiskrepanz beträgt $0,073 \text{ mm/d}$, die Spanne zwischen den 10%- und 90%-Quantilen $0,493 \text{ mm/d}$ und die zwischen den 1 %- und 99 %-Quantilen $3,412 \text{ mm/d}$.

Bei Verwendung von ELS in Verbindung mit DL ohne Niederschlagsdisaggregation (mittlere Teilabbildung) verkehrt sich der Bilanzeffekt ins Gegenteil: die mittlere Differenz des Abflusses beträgt $-0,061 \text{ mm/d}$. Die genannten Quantilspannen verringern sich auf $0,367 \text{ mm/d}$ und $2,731 \text{ mm/d}$.

Die Verwendung der Disaggregierungsmethodik (untere Teilabbildung) eliminiert die Bilanzdiskrepanz weitgehend. Die Mittelwertlinien der Violinplots weichen für alle Komponenten kaum ersichtlich von der Nulllinie ab, die Mittelwertdifferenz des Abflusses beträgt nur $-0,006$ mm/d. Die Quantilsspannen reduzieren sich weiter auf $0,310$ mm/d und $2,656$ mm/d.

Trotz der trägen Parametrisierung von HBV_{96} und des Einsatzes der Regressionsparameter der Stationsreihe Essen auf die Gebietsniederschlagsreihe des oberen Neckars führt der Einsatz der Disaggregierungsfunktionen zu einer gewissen Zunahme an Konsistenz der Simulationsergebnisse. Detailliertere Analysen zum Nutzen der Disaggregierungsmethodik folgen im nächsten Abschnitt.

4.8.3 Horton-Infiltration

Mit dem von Bauer (1974) modifizierten Horton-Infiltrationsansatz wird die bisherige Analyse durch eine potentiell dynamischere Modellkomponente ergänzt. Als Antriebsdaten dienen die in Abschnitt 4.6.5 zur Parametrisierung der Disaggregierungsfunktionen herangezogenen meteorologischen Reihen. Eventuelle Übertragungsprobleme sind, im Gegensatz zur Analyse im vorangegangenen Abschnitt, somit ausgeschlossen. Alle Vergleichsrechnungen erfolgen mit zwei Parametersätzen (PS A und PS B), gegeben in Tabelle 4.12. PS A nimmt mit einer niedrigen maximalen (INF_M) bzw. initialen (INF_A) Infiltrationskapazität von 2 mm/h eine eher „modelldienliche“ Funktion ein; PS B mit 20 mm/h eine eher „physikalische“ Funktion, wie weiter unten näher ausgeführt wird.

Tabelle 4.12: Horton-Parametersätze A und B.

Bauer	PS A	PS B	Horton	PS A	PS B
INF_M [mm/h]	2	20	INF_A [mm/h]	2	20
$LOSS_M$ [mm/h]	2	2	INF_E [mm/h]	1	1.81
S_M [mm]	40	22	k [1/h]	1	1

Die Effizienz der verschiedenen Integrationsstrategien in der Lösung der Differenzialgleichung des modifizierten Horton-Ansatzes unter Verwendung der Disaggregierungsmethodik ist in Abbildung 4.31 für die Tages- und in Abbildung 4.32 für die Stundenwertsimulation dargestellt (Station Essen, 1997 bis 2005). Erneut sind die Ergebnisse von ELS (Abschnitt 4.4.2) schwarz, die von DP (Dormand und Prince 1980) rot und die von BS (Bogacki und Shampine 1989) blau eingezeichnet. Durchgezogene Linien entsprechen einem großem Glättungsgrad ($Y = 10$ mm/d bzw. 10 mm/h, siehe Abschnitt 4.5.2), gestrichelte Linien einem mittleren Glättungsgrad (Glättungsgrad ($Y = 5$)) und gepunktete Linien einem geringem Glättungsgrad ($Y = 1$). Die graue Linie zeigt die Effizienz der Kopplung von ELS mit dem discontinuity locking-Ansatz (ELS-DL, Abschnitt 4.5.1).

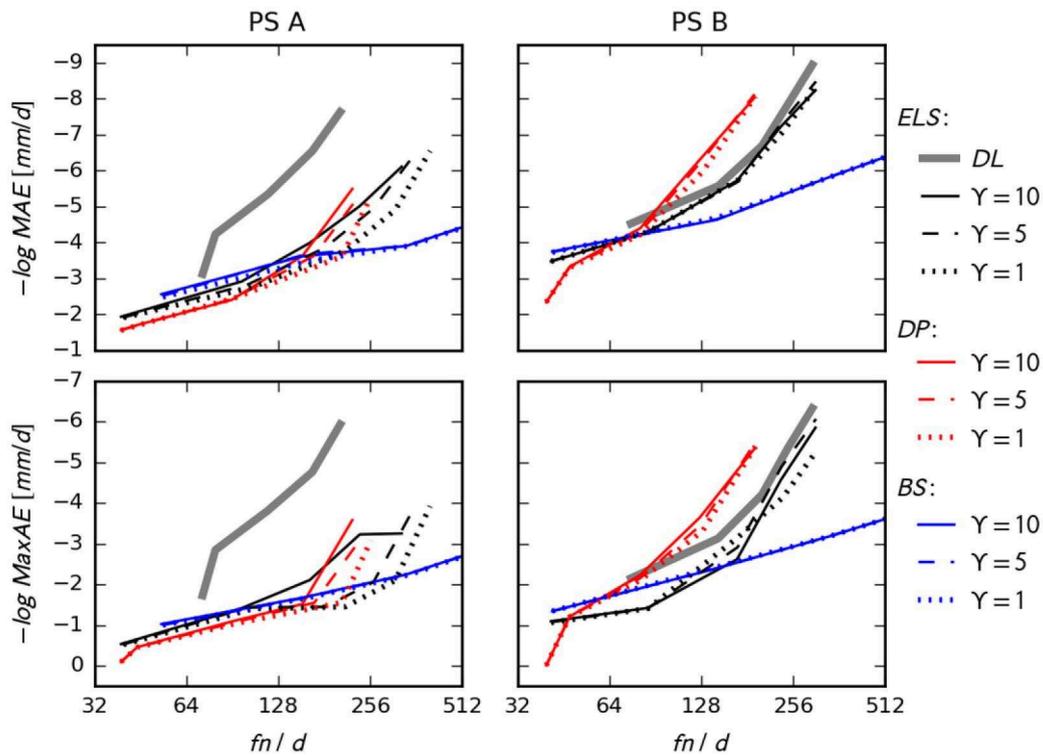


Abbildung 4.31: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Tageswertsimulation mit der modifizierten Horton-Infiltration unter Einsatz der Niederschlags-Diskretisierungstechnik für Parametersatz A (links) und Parametersatz B (rechts).

In der Tageswertsimulation (Abbildung 4.31) zeigen sich für PS A (links) große Effizienzunterschied zwischen der Regularisierungs- und der Diskretisierungsstrategie. Bei ersterer kommt die Konsistenzordnung von ELS und DP erst im Bereich höherer Genauigkeitsforderungen voll zum Tragen. Bei letzterer nehmen dagegen sowohl der mittlere (*MAE*) als auch der maximale (*MaxAE*) absolute Fehler gleichmäßig mit erhöhter Anzahl an Funktionsaufrufen (fn) zu. Dies lässt die Eliminierung der Diskontinuität der Horton-Infiltration nach Gleichung 4.159 in Verbindung mit den gewählten Glättungsgraden problematisch erscheinen. Für BS zeigt sich zudem, sowohl für PS A als auch für PS B (rechts), die bereits diskutierte Ineffizienz im Bereich hoher Genauigkeitsforderungen.

In der Stundenwertsimulation (Abbildung 4.32) erweist sich ELS als das effizienteste Verfahren. Wie zu erwarten unterliegt DP gegenüber BS bei geringen Genauigkeitsforderungen aufgrund seiner hohen Stufenanzahl. Auffallend ist, dass DP für PS A (links) bei verschiedenen lokalen Fehlertoleranzen (ε_{Tol} wurde variiert von 10^{-4} mm/h bis 10^0 mm/h) sehr ähnliche *MaxAE*-Werte erzielt, welche die von BS deutlich überschreiten. Da DP die Anzahl an Funktionsaufrufen (fn) kaum variiert, weist dies auf Ungenauigkeiten in der Fehlerschätzung des Verfahrens für das vorliegende Anfangswertproblem hin.

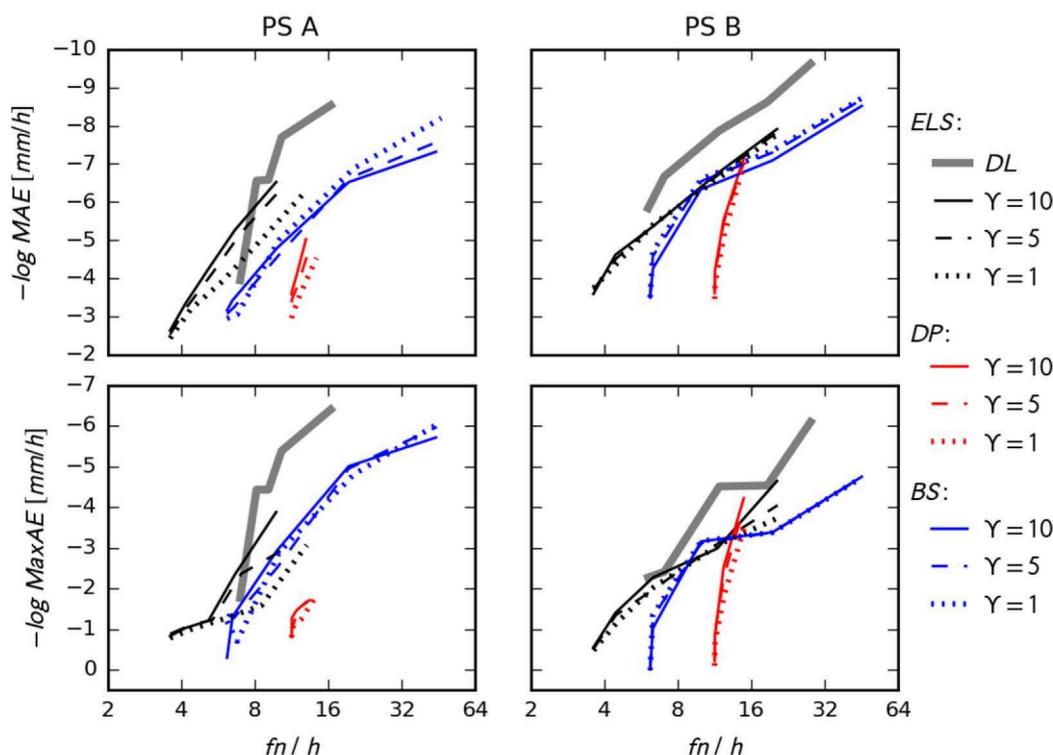


Abbildung 4.32: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.31 für die Stundenwertsimulation.

Die Nutzenbewertung der Disaggregierungsmethodik erfolgt wie für HBV_{96} (vgl. Abbildung 4.30) anhand von Vergleichsrechnungen in verschiedener Zeitschrittweite. Als Referenz dienen Simulationsrechnungen basierend auf den Niederschlagsreihen der Stationen Essen, Siegen und Herford mit einer Auflösung von fünf Minuten. Der Annahme folgend, dass 5 min-Intervalle die zeitliche Variabilität des Niederschlags ausreichend erfassen, wird die Intensität innerhalb jedes externen Zeitschritts konstant angesetzt. Tabelle 4.13 stellt den Mittelwert des jeweils simulierten (oberflächlichen) Abflusses (MQ) in der zweiten Spalte dar. Der „modelldienlichere“ Parametersatz A mit einem MQ-Wert von 1,06 mm/d für Station Essen wäre evtl. zu bevorzugen, sollte der Horton-Infiltrationsansatz pragmatisch zur Ermittlung des gesamten Direktabflusses verwandt werden. Der MQ-Wert von 0,20 mm/d des „physikalischeren“ PS B liegt näher an realen Oberflächenabflussvolumina, wobei diese für viele Böden noch deutlich geringer ausfallen (Kutilek und Nielsen 1994).

In den rechts folgenden Spalten finden sich die MQ-Werte der Stunden- und der Tageswertsimulation. Bei grundsätzlicher Verwendung schrittintern konstanter Intensitäten reduziert sich MQ beispielsweise für Station Essen bei Anwendung von PS A von 1,06 mm/d in der Referenzsimulation auf 0,69 mm/d in der Stundensimulation und weiter auf 0,03 mm/d in der Tageswertsimulation. Für PS B findet eine Reduzierung von 0,20 mm/d auf 0,07 mm/d und weiter auf 0,00 mm/d statt. Da alle Rechnungen mit ELS-DL (d. h. ohne Veränderung der Differenzialgleichung 3.3) und mit hoher Genauigkeit (d. h. ohne relevante numerische

Fehler) durchgeführt wurden, sind diese Diskrepanzen allein auf die Verringerung der Niederschlagsvariabilität mit Vergrößerung der externen Zeitschritte zurückzuführen.

Tabelle 4.13: Einfluss der Zeitschrittweite auf den mit der Horton-Infiltration simulierten Oberflächenabfluss bei schrittintern konstantem und variablem Niederschlag für Parametersatz A und B sowie für die meteorologischen Reihen der DWD-Stationen Essen-Bredene, Siegen und Herford. Alle Rechnungen wurden mit der expliziten Lobatto-Sequenz in Verbindung mit dem discontinuity locking-Ansatz durchgeführt. MQ ist der bei der jeweiligen Zeitschrittweite (5 min, 1 h, 1 d) ermittelte arithmetische Mittelwert des Oberflächenabflusses, R^2 beschreibt die von der Stundenwert- sowie der Tageswertsimulation erklärte Varianz der (passend aggregierten) 5 Minuten-Simulation des Oberflächenabflusses.

Schrittweite:		5 min		1 h				1 d			
		Niederschlag:		konstant		variabel		konstant		variabel	
Kriterium:		MQ	MQ	R^2	MQ	R^2	MQ	R^2	MQ	R^2	
		[mm/d]	[mm/d]	[-]	[mm/d]	[-]	[mm/d]	[-]	[mm/d]	[-]	
PS A	Essen	1,06	0,69	0,95	1,06	0,98	0,03	0,25	1,18	0,91	
	Siegen	1,00	0,63	0,94	1,08	0,97	0,05	0,30	0,95	0,90	
	Herford	0,86	0,53	0,94	1,05	0,96	0,02	0,15	1,03	0,90	
PS B	Essen	0,20	0,07	0,65	0,13	0,85	0,00	0,12	0,08	0,74	
	Siegen	0,13	0,05	0,69	0,10	0,87	0,00	0,29	0,04	0,69	
	Herford	0,13	0,04	0,65	0,12	0,83	0,00	0,06	0,05	0,65	

Die Niederschlagsdisaggregation reduziert die Zeitschritt-Diskrepanzen deutlich. Für PS A bleibt der MQ-Wert von 1,06 mm/d in der Stundenwertsimulation erhalten, in der Tageswertsimulation kommt es zu einem kleinen Anstieg auf 1,18 mm/d. Für PS B, der aufgrund einer größeren maximalen Infiltrationskapazität von 20 mm/h nur bei sehr hohen Niederschlagsintensitäten Abfluss produziert, zeigt sich zwar weiterhin eine Abnahme von 0,20 mm/d auf 0,13 mm/d und weiter auf 0,08 mm/d, aber von geringerem Ausmaß.

Als mittelwertunabhängiges Kriterium für die zeitliche Übereinstimmung der Simulationsergebnisse verschiedener Zeitschrittweite gibt Tabelle 4.13 zusätzlich das Bestimmtheitsmaß (R^2) an. Für Station Essen wird unter Verwendung von PS A bei schrittintern konstanten Niederschlagsintensitäten in der Stundenwertsimulation eine Varianzübereinstimmung von 95 % erzielt, in der Tageswertsimulation hingegen von lediglich 25 %. Bei PS B reduziert sich R^2 bereits in der Stundenwertsimulation auf 65 % und in der Tageswertsimulation weiter auf 12 %. Die Disaggregation des Niederschlags führt in allen Fällen zu einer erhöhten Varianzübereinstimmung; im problematischsten Fall (PS B, Tageswertsimulation) liegt die erklärte Varianz immerhin bei 74 %.

Die Vergleichsrechnungen mit der modifizierten Horton-Infiltration zeigen im Gegensatz zu den ähnlichen Analysen des relativ trägen HBV96-Modells, dass die (eingangsdatenbezogene) modelltechnische Unsicherheit auch in Stundenwertsimulationen die Größenordnung

der gesamten Simulationsunsicherheit annehmen kann. Der entwickelte statistisch-deterministische Disaggregierungsansatz kann diese Unsicherheit reduzieren. Weitere Reduktionen ließen sich bei Verbesserung der zugrundeliegenden Regressionsbeziehungen (Abschnitt 4.6.5) und eventuell bei Verwendung komplexerer Disaggregierungsfunktionen (Abschnitt 4.6.2) erwarten. Wo die Grenze des Ansatzes liegt, d. h. ein Wechsel zur aufwendigeren und potenziell fehlerträchtigeren, dafür aber varianzerhaltenden stochastischen Disaggregierung notwendig wird, bleibt zu untersuchen.

4.9 Untersuchungen zur Parameterkalibrierung

Die Analysen im vorangegangenen Abschnitt zeigen auf, welchen Rechenaufwand verschiedene Integrationstechniken bei verschiedenen geforderten Rechengenauigkeiten mit sich bringen. Welche Rechengenauigkeit im Anwendungsfall zu fordern ist, hängt zum einen von den jeweiligen Zielen und Präferenzen des Modellierers ab. Zum anderen von der Störanfälligkeit der ggf. an das hydrologische Modell gekoppelten Methoden. Im Folgenden wird für LARSIM_{ME} und HBV₉₆ der Frage nachgegangen, inwieweit Integrationsfehler die algorithmische Parameterkalibrierung beeinträchtigen.

Vor ihrer systematischen Untersuchung soll diese Fragestellung anhand eines Beispiels veranschaulicht werden. Abbildung 4.33 stellt den gemessenen sowie den mit LARSIM_{ME} berechneten Abfluss für den oberen Neckars dar. Die Simulation erfolgt mit der in Abschnitt 4.8.1 beschriebenen räumlich differenzierten Modellkonfiguration. Im gewählten Zeitraum weichen die simulierten Ganglinien der ad hoc-Integrationsstrategie und der Kopplung der expliziten Lobatto-Sequenz (ELS) mit dem discontinuity locking-Ansatz (DL) markant voneinander ab. Das Ergebnis der ad hoc-Integrationsstrategie stimmt besser mit der Beobachtung überein als das von ELS-DL.

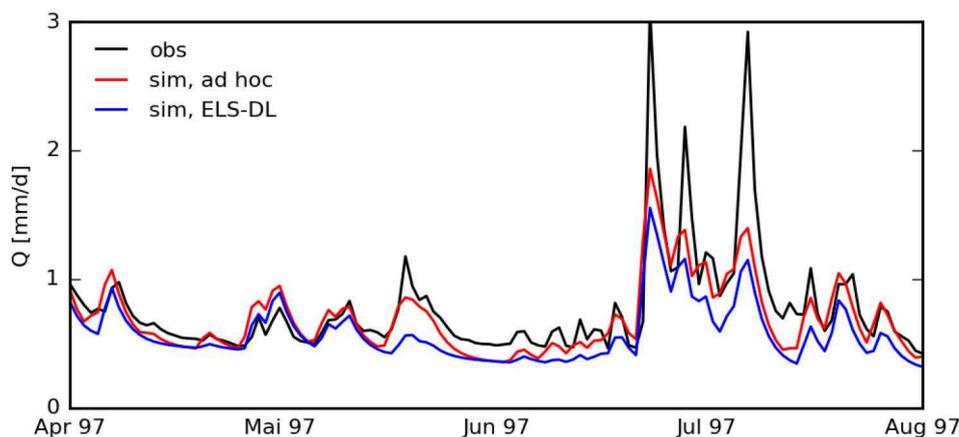


Abbildung 4.33: Vergleich der beobachteten Abflussganglinie (schwarz) mit zwei durch LARSIM_{ME} simulierte Abflussganglinien für den oberen Neckar. Die Prozessgleichungen wurden entsprechend der originalen ad hoc-Integration von LARSIM_{ME} (rot) sowie unter Einsatz der expliziten Lobatto-Sequenz (blau) gelöst; jeweils unter Verwendung des auf die ad hoc-Integration optimierten Modellparametersatzes.

Dieses Beispiel deutet an, dass der Wechsel zu einer rechnerisch genaueren Integrationsmethode nicht zwangsläufig zu besseren Simulationsgüten führt, solange die Werte effektiver Modellparameter numerische Unsicherheit kompensieren. Wenn „alte“ Parameterwerte unverändert auf „neue“ Modellkonfigurationen übertragen werden, kann sich die Simulationsgüte im Gegenteil deutlich verringern. Dies veranlasste Tyralla und Schumann (2014) zu einer Neukalibrierung der beiden verdunstungsrelevanten Parameter KE (Korrekturfaktor der potenziellen Verdunstung) und $HINZ$ (auf den Blattflächenindex bezogene Interzeptionsspeicherung), die hier unter leicht veränderten Bedingungen wiederholt wird. Als Zielkriterium dient die Effizienz nach Nash und Sutcliffe (1970).

Abbildung 4.34 zeigt die Fehleroberflächen beider Optimierprobleme in den gewählten Parameterintervallen. Die maximale NSE von ELS-DL im betrachteten Zeitraum fällt mit einem Wert von 0,75 nun geringfügig besser aus als die der ad hoc-Integrationsstrategie mit einer maximalen NSE von 0,72. Das Vorliegen des globalen Maximums an einer Parametergrenze ($HINZ = 0,4 \text{ mm}$) in beiden Fällen könnte auf Probleme in der Prozessabstraktion hindeuten. Der markante Unterschied, dass nur die ad hoc-Integration mit einer bimodalen Fehleroberfläche einhergeht, steht dagegen mit der technischen Unsicherheit in Verbindung. Das zweite lokale Maximum weist einen kaum kleineren NSE-Wert von 0,71 auf und kann Optimieralgorithmen in die „falsche“ Richtung lenken. Falsch in dem Sinn, dass ein $HINZ$ -Wert von 0 mm in der ad hoc-Integration von LARSIM_{ME} (jedoch nicht bei Verwendung von ELS-DL) zur vollständigen Abwesenheit von Interzeptionsprozessen im Untersuchungsgebiet entspricht, was dem hydrologischen Erfahrungswissen widerspricht.

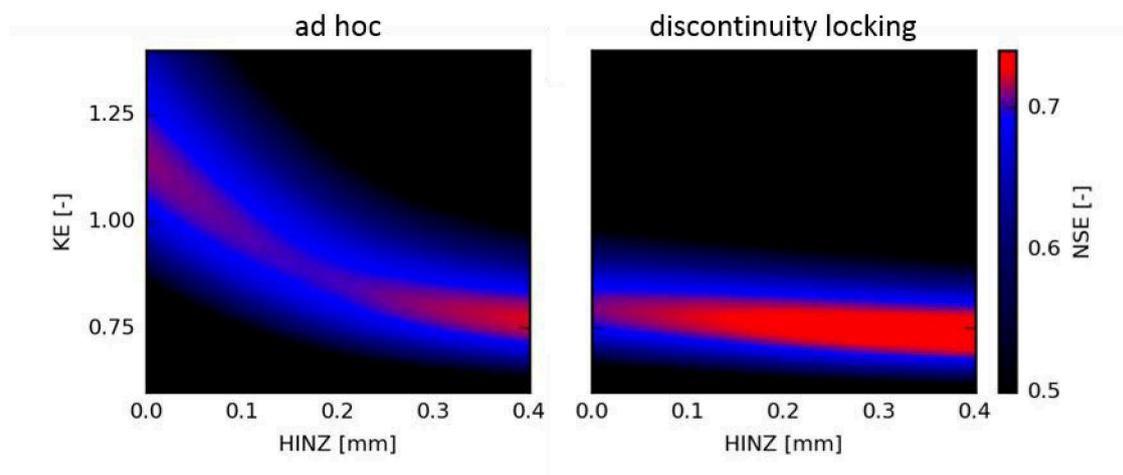


Abbildung 4.34: Fehleroberflächen der Neukalibrierung von LARSIM_{ME} unter Verwendung der originalen ad hoc-Integrationsstrategie von LARSIM_{ME} (links) und der expliziten Lobatto-Sequenz in Kombination mit dem discontinuity locking-Ansatz (rechts). Zur Optimierung der Nash-Sutcliffe-Effizienz (NSE) werden der Verdunstungskorrekturfaktor (KE) und die blattflächenindexbezogene Interzeptionskapazität ($HINZ$) variiert.

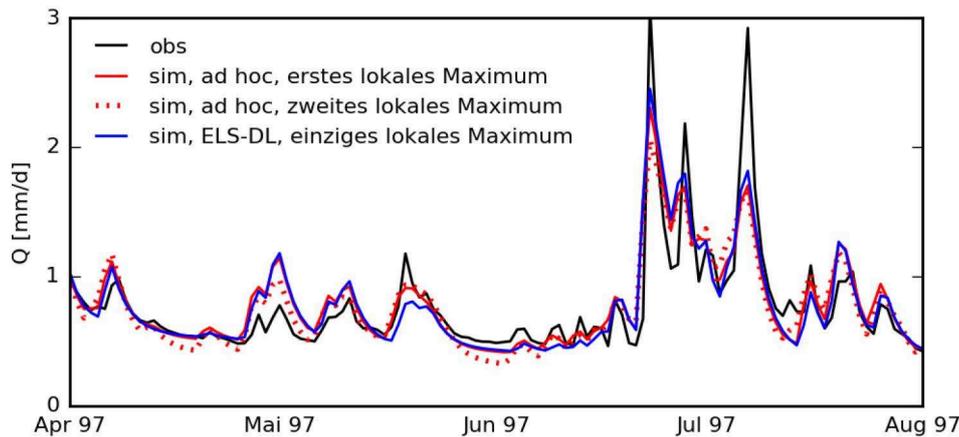


Abbildung 4.35: Darstellung der Simulationsgüte analog zu Abbildung 4.33 unter Verwendung der optimalen Parameterwerte entsprechend Abbildung 4.34. Das zweite lokale (nicht globale) Maximum der Fehleroberfläche der ad hoc-Integration ist als rote, gepunktete Linie eingezeichnet.

Nach Abbildung 4.35 weichen die mit den beiden lokalen Maxima gepaarten Ganglinien auffallend, aber nicht gravierend voneinander ab, was aus der Kompensation der Effekte von *HINZ* und *KE* resultiert. Ein negativer Effekt dieser Parameterinteraktion bei Verwendung der ad hoc-Integrationsstrategie ist, wie Abbildung 4.34 verdeutlicht, die Übertragung der schlechten Identifizierbarkeit von *HINZ* auf *KE*.

Wie das diskutierte Beispiel nahelegt, kann die technische Unsicherheit hydrologischer Modelle den Kalibriererfolg numerischer Optimierungsalgorithmen einschränken. Da die mehrdimensionale Fehleroberfläche mehrparametrischer Modelle graphisch kaum zugänglich ist, analysieren Kavetski und Clark (2010) diesen Effekt direkt durch Wiederholung von Kalibrierläufen von verschiedenen Startpositionen im Parameterraum.

Vergleichbare Experimente finden sich in den beiden folgenden Abschnitten für $LARSIM_{ME}$ und HBV_{96} . In Ergänzung zur von Kavetski und Clark (2010) vorgenommenen Analyse können mit den in HydPy implementierten ad hoc-Varianten der Modelle realistische „konventionelle“ Lösungsstrategien zum Vergleich herangezogen werden. Zudem wird der Effekt der Wahl der lokalen Fehlertoleranz sowie der Wahl des Regularisierungsgrades der Diskontinuitäten der Prozessgleichungen untersucht. Zur Vereinfachung werden die räumlich undifferenzierten Modellkonfigurationen von HBV_{96} (Abschnitt 4.8.1) und $LARSIM_{ME}$ (Abschnitt 4.8.2) verwendet. Als Untersuchungsgebiet dient weiterhin der obere Neckar (Abschnitt 3.3); der Kalibrierzeitraum umfasst die hydrologischen Jahre 1998 bis 2002 mit 1997 als Vorlaufzeit.

4.9.1 $LARSIM_{ME}$

Die Kalibrierung von $LARSIM_{ME}$ erfolgt innerhalb der in Abbildung 4.18 gegebenen Parametergrenzen, wobei die vergleichsweise „physikalischen“ Parameter *TGr*, *HINZ* und *nFK* auf die Werte 0 °C (Gefrierpunkt), 0,2 mm (Standardwert) und 149 mm (Bodenkarte) fixiert

bleiben. Die Optimierung der übrigen Parameterwerte erfolgt in 30 voneinander unabhängigen Kalibrierläufen, jeweils von einer anderen zufälligen Startposition im Parameterraum ausgehend. Um die Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Experimenten zu erhöhen, finden immer dieselben 30 Startpositionen Verwendung.

Abbildung 4.36 zeigt den Erfolg des Optimieralgorithmus BOBYQA (Abschnitt 3.4) in der Kalibrierung von LARSIM_{ME} gemäß der Effizienz nach Nash und Sutcliffe (1970). Die aus den 30 Kalibrierläufen hervorgehenden NSE-Werte sind in Form kumulativer Häufigkeitsverteilungen mit der empirischen Unterschreitungswahrscheinlichkeit (P_U) auf der Ordinate eingetragen. Als Referenz dienen die jeweils rot eingezeichneten Ergebnisse der ad hoc-Integrationsstrategie (in allen vier Teilabbildungen identisch). Den mit der expliziten Lobatto-Sequenz (ELS) erzielten Ergebnissen liegen die verschiedenen, in Abschnitt 4.8.1 gewählten Fehlertoleranzen (ε_{Tol}) zugrunde. Die größte Toleranz von 10^{-0} mm/d wird im hellsten Grau, die kleinste Toleranz von 10^{-4} mm/d im dunkelsten Grau dargestellt.

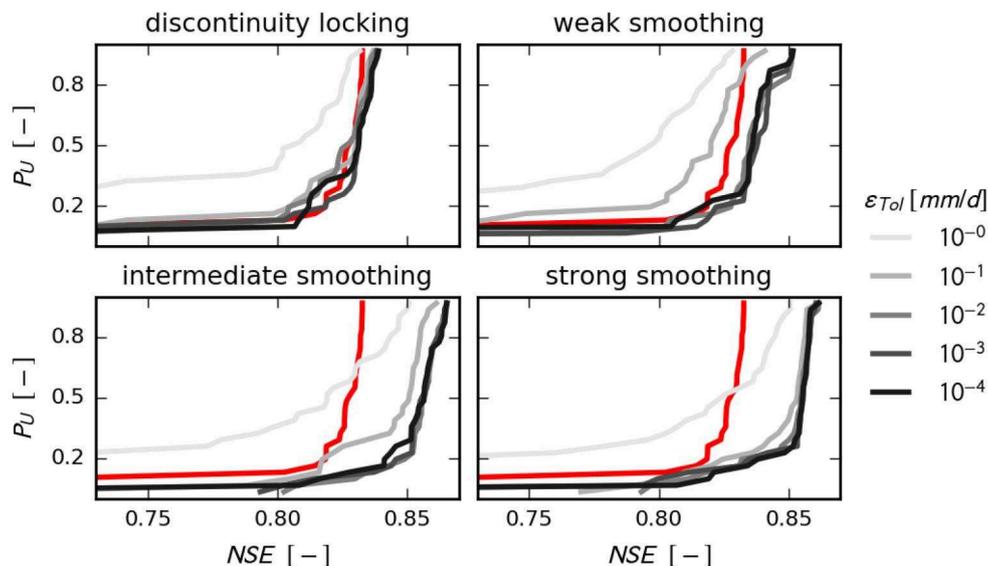


Abbildung 4.36: Darstellung des Kalibriererfolgs als kumulative Häufigkeitsverteilung der mit BOBYQA in 30 unabhängigen Kalibrierläufen erreichten Nash-Sutcliffe-Effizienzen (NSE) für die Tageswertsimulation mit LARSIM_{ME}. Als Referenz ist das Ergebnis unter Verwendung der originalen ad hoc-Integrationsstrategie von LARSIM_{ME} in allen Teilabbildungen als rote Linie eingezeichnet. Die Ergebnisse unter Verwendung der expliziten Lobatto-Sequenz sind für verschiedene Fehlertoleranzen (ε_{Tol}) dargestellt; oben links in Kombination mit dem discontinuity locking-Ansatz und in den übrigen Teilabbildungen in Kombination mit dem Regularisierungsansatz bei schwachem (oben rechts), mittlerem (unten links) und starkem (unten rechts) Glättungsgrad.

Beim Vergleich der Ergebnisse der ad hoc-Integration mit denen von ELS in Verbindung mit dem discontinuity locking-Ansatz (DL) zeigt sich (Teilabbildung oben links), dass die höchsten erzielten NSE-Werte für ELS-DL geringfügig besser ausfallen. Die Effizienz von

BOBYQA (der Idealfall wäre das Erreichen eines identischen hohen NSE-Wertes in allen 30 Kalibrierläufen) unterscheidet sich ebenfalls nicht markant – außer bei Verwendung der offenbar zu hoch angesetzten Fehlertoleranz von 1 mm/d.

Bei Anwendung der Regularisierungstechnik (Abschnitt 4.5.2) mit einer Belegungen der Glättungs-Metaparameter wie in Abschnitt 4.8.1 ändert sich die Effizienz von BOBYQA gegenüber der Anwendung von ELS-DL nicht wesentlich (übrige Teilabbildungen). Die Störung der NSE-Fehleroberfläche ist bei der höchsten gewählten Fehlertoleranz von 1 mm/d weiterhin gravierend. Die NSE steigt gegenüber der ad hoc-Integration insbesondere bei Verwendung hoher Glättungsgrade zwar weiter an, doch erlaubt die Berücksichtigung von nur einem Untersuchungsgebiet keine verallgemeinernden Aussagen zu diesem stark gebiets- und datenabhängigen Ergebnis.

Abbildung 4.37 illustriert die Ergebnisse analoger Experimente unter Verwendung des Runge-Kutta-Verfahrens nach Dormand und Prince (1980). Da in HydPy hierfür bislang keine Kopplung mit dem DL-Ansatz erfolgte, beschränkt sich diese Untersuchung auf die Anwendung von DP auf das regularisierte Differenzialgleichungssystem von LARSIM_{ME}.

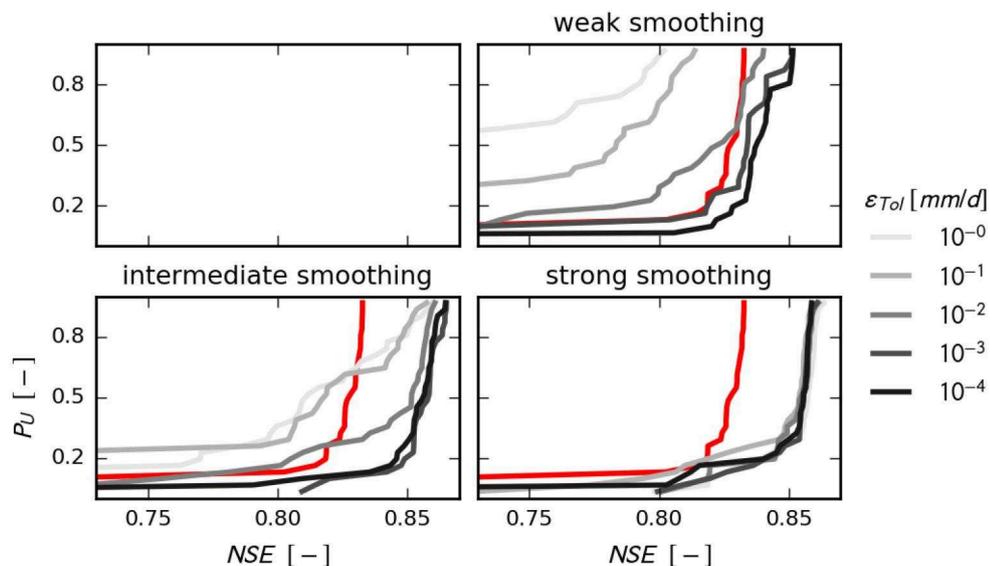


Abbildung 4.37: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber unter Verwendung des Dormand-Prince-Verfahrens als Integrationsverfahren.

Die höchsten mit DP erzielten NSE-Werte entsprechen bei geringer Fehlertoleranz weitgehend den höchsten mit ELS erzielten NSE-Werten. Insbesondere für die höchste Fehlertoleranz von 1 mm/d (hellstes Grau) treten jedoch relevante Unterschiede in den NSE-Verteilungen auf, die mit den in Abschnitt 4.8 diskutierten Eigenheiten von DP in Verbindung stehen.

ELS beeinträchtigt die NSE-Fehleroberfläche bei allen Glättungsgraden ähnlich, wie die gleichbleibende Effizienz von BOBYQA nahelegt. DP beeinträchtigt die Fehleroberfläche bei geringen Glättungsgraden (rechts oben) stärker; bei hohen Glättungsgraden (rechts unten) ist dagegen kein Störeffekt ersichtlich. Ersteres scheint mit den oftmals ungenauen Fehlerschätzungen von DP bei großer Fehlertoleranz in Verbindung zu stehen; letzteres mit der hohen Konsistenzordnung von DP, die aufgrund der Diskretisierung des Simulationszeitraums in externe Zeitschritte bei einfacher Modellparametrisierung (d. h. hoher Glättung) grundsätzlich zu einer hohen Rechengenauigkeit führt – unabhängig davon, ob diese gefordert wird oder nicht.

Für geringe (oben rechts) und mittlere (unten links) Glättungsgrade sind die Integrationsfehler von ELS (Abbildung 4.36) bereits bei der dritthöchsten getesteten Genauigkeitsforderung von 0,01 mm/d mit BOBYQA nicht nachweisbar. Für DP ist dies erst bei höheren Genauigkeitsforderungen der Fall (Abbildung 4.37), was vermutlich auf die verhältnismäßig geringe globale Genauigkeit von DP bei großen lokalen Fehlertoleranzen zurückzuführen ist (siehe Abschnitt 4.8).

Um den Effekt des Optimieralgorithmus auf die diskutierten Ergebnisse zu bewerten, wird die ELS-basierte Untersuchung mit dem Optimierverfahren TNC wiederholt (Abschnitt 3.4). Als gradientenbasiertes Verfahren reagiert TNC tendenziell empfindlicher auf Störungen der Fehleroberfläche als BOBYQA. Abbildung 4.38 zeigt allerdings für die ad hoc-Integration (rot) eine nur moderate Verschlechterung der Verteilung der erzielten NSE-Werte gegenüber Abbildung 4.36.

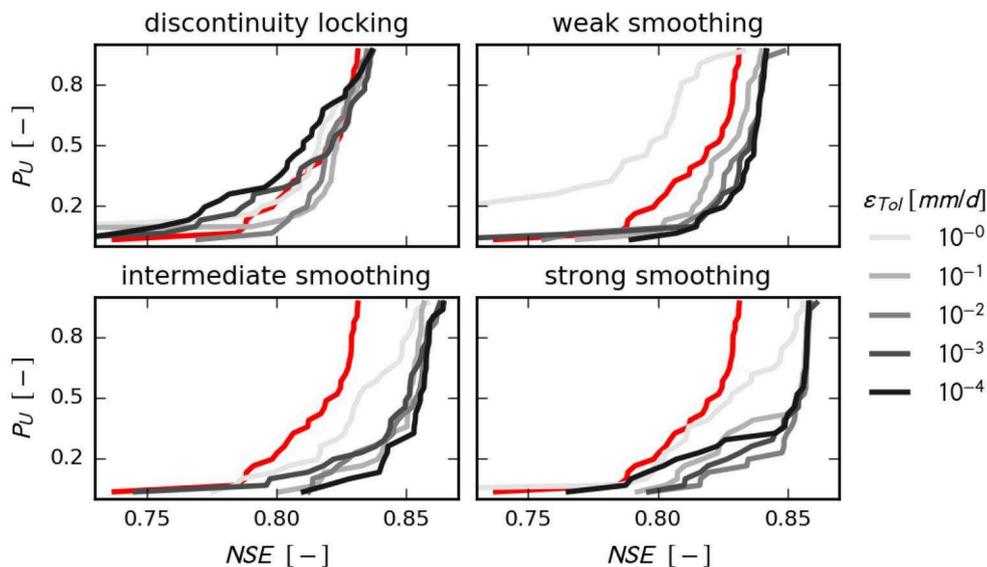


Abbildung 4.38: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber unter Verwendung des Truncated Newton Conjugate-Gradient-Algorithmus als Optimierverfahren.

Bei Verwendung der Regularisierungstechnik erweist sich die höchste gewählte Fehlertoleranz von 1 mm/d erneut als zu ungenau (hellstes grau). Bei den anderen Toleranzwerten deutet sich die geringere Robustheit von TNC gegenüber BOBYQA durch größere Unregelmäßigkeiten in den erzielten NSE-Verteilungen an. Bei Verwendung des discontinuity locking-Ansatzes zeigt sich TNC – entgegen der Erwartung – bei geringer Fehlertoleranz als am wenigsten effizient. Dies könnte auf (evtl. mit hohem Polynomgrad zunehmende) Ungenauigkeiten in der Zustandsinterpolation hinweisen (Abschnitt 4.5.1). Bei Verwendung von BOBYQA deutet sich derartiges allerdings nicht an, so dass die Frage der Signifikanz dieses Phänomens bis auf Weiteres ungeklärt bleibt.

Insgesamt lässt sich keine deutliche Effizienzsteigerung in der algorithmischen Parameterkalibrierung von LARSIM_{ME} durch die Verwendung genauigkeitsüberwachter Integrationsverfahren feststellen – auch nicht unter Verwendung der Regularisierungstechnik, die in ihrer ursprünglichen Form von Kavetski und Kuczera (2007) eben hierfür konzipiert wurde. In der ad hoc-Implementierung von LARSIM_{ME} werden im Rahmen eines operator splitting-Ansatzes (Clark und Kavetski 2010) verschiedene Prozessgleichungen getrennt berechnet; teils unter Anwendung analytischer Lösungen (z. B. für Direktabflussbildung und Abflusskonzentration) und teils unter Anwendung des nicht überwachten expliziten Euler-Verfahrens (z. B. für Interflowbildung und Bodenverdunstung). Wie in Abschnitt 4.8.1 dargestellt, führt dies zwar zu numerischer Unsicherheit; soweit die Ergebnisse dieses Abschnitts (und Abbildung 4.18) diese Aussage erlauben, verlaufen die korrespondierenden Simulationsfehler allerdings über alle Parametervariationen weitgehend glatt.

Kommen numerische Integrationsverfahren zum Einsatz, müssen diese mit einer gewissen Genauigkeitsforderung betrieben werden. Dies stimmt mit dem Ergebnis von Kavetski und Clark (2010) überein, dass nicht überwachte Verfahren geringer Ordnung Fehleroberflächen stark beeinträchtigen können. Für ELS erweist sich die getestete Fehlertoleranz von 0,01 mm/d in allen Fällen als ausreichend, für DP etwa die von 10^{-4} mm/d.

4.9.2 HBV₉₆

Die Experimente zur HBV₉₆-Tageswertsimulation erfolgen analog zu denen der LARSIM_{ME}-Tageswertsimulation (Abschnitt 4.9.1). Bis auf den auf 134 mm fixierten Bodenspeicherparameter *FC* findet die Kalibrierung in den in Abbildung 4.24 gegebenen Parametergrenzen statt.

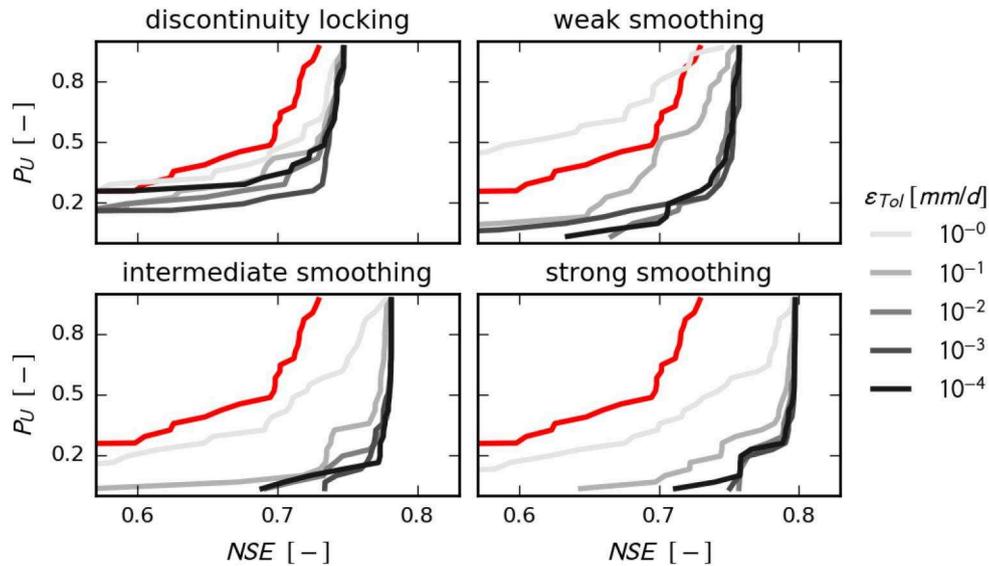


Abbildung 4.39: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber für die mit HBV₉₆ durchgeführte Tageswertsimulation.

Die Ergebnisse für HBV₉₆ ähneln tendenziell denen für LARSIM_{ME} und sind exemplarisch für die Kombination von ELS als Integrations- und BOBYQA als Optimierverfahren dargestellt (Abbildung 4.39). Der relevanteste Unterschied ist, dass ELS für HBV₉₆ eine deutliche Effizienzsteigerung von BOBYQA bewirkt. Bei Kopplung von ELS an den discontinuity locking-Ansatz liegen bei Fehlertoleranzen kleiner 1 mm/d mehr als die Hälfte der NSE-Werte der 30 Kalibrierläufe dicht am erzielten Maximalwert. Dass ca. ein Drittel der Kalibrierläufe sowohl bei Anwendung von ELS-DL als auch der ad hoc-Integrationsstrategie zu schlechten NSE-Werten führt, resultiert aus den extrem grenzwertlastigen Prozessbeschreibungen von HBV₉₆. Diskontinuierliche Differentialgleichungen können, unabhängig von der Genauigkeit ihrer numerischen Lösung, Optimierprobleme erschweren. Die Eliminierung der Diskontinuitäten steigert die Effizienz von BOBYQA weiter, erkennbar an der mit erhöhtem Regularisierungsgrad zunehmenden Stauchung der NSE-Verteilungen zum erreichten Maximum hin.

Den Effekt des Wechsels zur Stundenschnittweite auf die Verteilungen der NSE-Werte stellt Abbildung 4.40 dar. Wegen der einfachen Lösbarkeit von HBV₉₆ in der Stundenwertsimulation (Abschnitt 4.8.2) sind die NSE-Verteilungen weitgehend unabhängig von der gewählten Fehlertoleranz sowie der herangezogenen Integrationsmethode (im Beispiel ELS-DL und ad hoc, oben links dargestellt). Der markante Effekt der grenzwertlastigen Prozessabstraktion von HBV₉₆, bzw. die Effizienzsteigerung von BOBYQA durch die Regularisierung des Differentialgleichungssystems von HBV₉₆, zeigt sich ebenso in der Stundenwertsimulation.

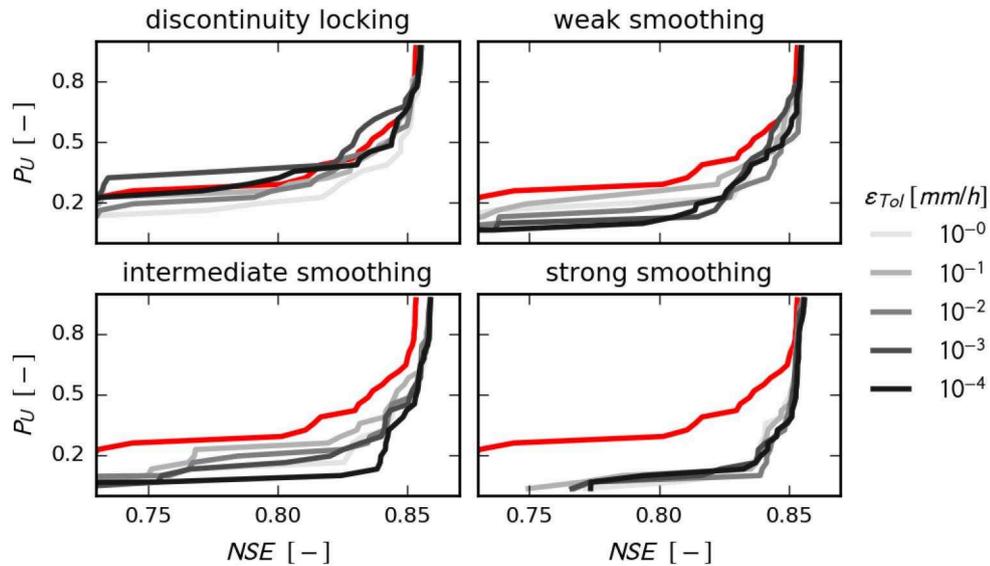


Abbildung 4.40: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber für die mit HBV₉₆ durchgeführte Stundenwertsimulation.

Die Einführung von Glättungsfunktionen erfüllt für HBV₉₆ den von Kavetski und Kuczera (2007) angestrebten Zweck. Ob die festgestellten Effizienzsteigerungen praxisrelevant sind, bleibt zu klären. Neben der numerischen Störanfälligkeit der gekoppelten (Optimier-)Methoden hat die Länge des berücksichtigten Zeitraums einen großen Einfluss auf den Nutzen der Regularisierung. Grundsätzlich gilt: je kürzer der betrachtete Zeitraum, desto stärker pausen sich Grenzwerte in den Prozessgleichungen auf Fehleroberflächen durch. Ein größerer Nutzen der Methodik ist folglich für die ereignisbezogene Kalibrierung und Zustands- bzw. Parameternachführungen zu vermuten. Entsprechende Experimente mit der von Lisniak et al. (2014) umgesetzten Methodik sind in Planung.

4.10 Anmerkungen zur Robustheit

Jede Integrationsmethode ist mit gewissen Schwierigkeiten verbunden. Typische ad hoc-Integrationsstrategien hydrologischer Modelle sind robust gegenüber extremen Rechenfehlern und Rechenabbrüchen, solange der Modellentwickler für alle möglichen Problemfälle Sicherungsroutinen vorsieht. Sie ermöglichen aber keine strenge Begrenzung numerischen Fehler. Dies gilt insbesondere für Modellanwendungen, die von den in der Entwicklungs- und Validierphase berücksichtigten Bedingungen stark abweichen.

Die Fehlerüberwachung adaptiver numerischer Integrationsalgorithmen schränkt im Idealfall sämtliche Integrationsfehler gemäß der gewählten Genauigkeitsforderung ein. Es ist allerdings nicht zu gewährleisten, dass dies in jedem Anwendungsfall gelingt und der ggf. erforderliche zusätzliche Rechenaufwand im praktikablen Rahmen verbleibt. Ein klassisches

Beispiel für eine Abweichung vom Idealfall ist die Zunahme von (unüberwachten) Rundungsfehlern bei extrem kleiner Rechenschrittweite. Im vorliegenden Zusammenhang relevanter sind Probleme, die aus der Diskontinuität der Prozessgleichungen hydrologischer Modelle resultieren.

Werden die Diskontinuitäten Abschnitt 4.5.2 folgend regularisiert, besteht die Gefahr der Verfälschung der Funktionsweise des Differenzialgleichungssystems; Aspekte der ursprünglichen Prozessabstraktion können verloren gehen. Die Vergleichsrechnungen in den Abschnitten 4.8.1 und 4.8.2 sprechen gegen das Vorliegen solcher Verfälschungen in den regularisierten Versionen von LARSIM_{ME} und HBV₉₆, lassen sich aber nicht auf alle möglichen Bedingungen verallgemeinern.

Die Umsetzung des discontinuity locking-Ansatzes (DL) aus Abschnitt 4.5.1 birgt weniger subjektive Entscheidungen mit potenzieller Veränderung des Systemverhaltens. Dennoch ist eine numerisch effiziente DL-kompatible Modellimplementierung schwieriger umzusetzen, wie Abschnitt 4.7 nahelegt. Nach Erfahrung des Autors ist insbesondere die Auflösung derjenigen Diskontinuitäten fehlerträchtig, die mit der Fixierung von Zuständen an Grenzwerten einhergehen sowie mit mehreren Flussgrößen verknüpft sind. Während die DL-Implementierung von LARSIM_{ME} sich bislang durchweg robust gezeigt hat, treten in der DL-Implementierung von HBV₉₆ bei Verwendung der beiden im Folgenden diskutierten Modellkonfigurationen Probleme auf.

Das erste Problem tritt auf, wenn der Parameter EAT nicht wie in Abschnitt 4.8.2 auf einen sehr hohen Wert, sondern wie in der Original-Implementierung von HBV₉₆ auf 0 mm gesetzt wird. Wie in Abschnitt 4.7.3 erläutert führt die Belegung von EAT mit null zur vollständigen Unterdrückung der Verdunstung aus dem Bodenkörper (EA) bei beliebig geringer vorliegender Schneebedeckung ($SP > 0$). Werden die in Abschnitt 4.8.2 angestellten Untersuchungen mit dem veränderten EAT -Wert wiederholt, ergibt sich für die Tageswertsimulation Abbildung 4.41 statt Abbildung 4.19 und für die Stundenwertsimulation Abbildung 4.42 statt Abbildung 4.21. Teilweise bereits in der Tageswertsimulation und besonders deutlich in der Stundenwertsimulation zeigt sich, dass beim Einsatz von DL (graue Linie) die Verringerung der lokalen Fehlertoleranz (ε_{Tol}) nicht zur gewünschten Abnahme der globalen Fehlermaße (MAE und $MaxAE$) führt, wie dies beim Einsatz der Regularisierungstechnik (übrige Linien) der Fall ist.

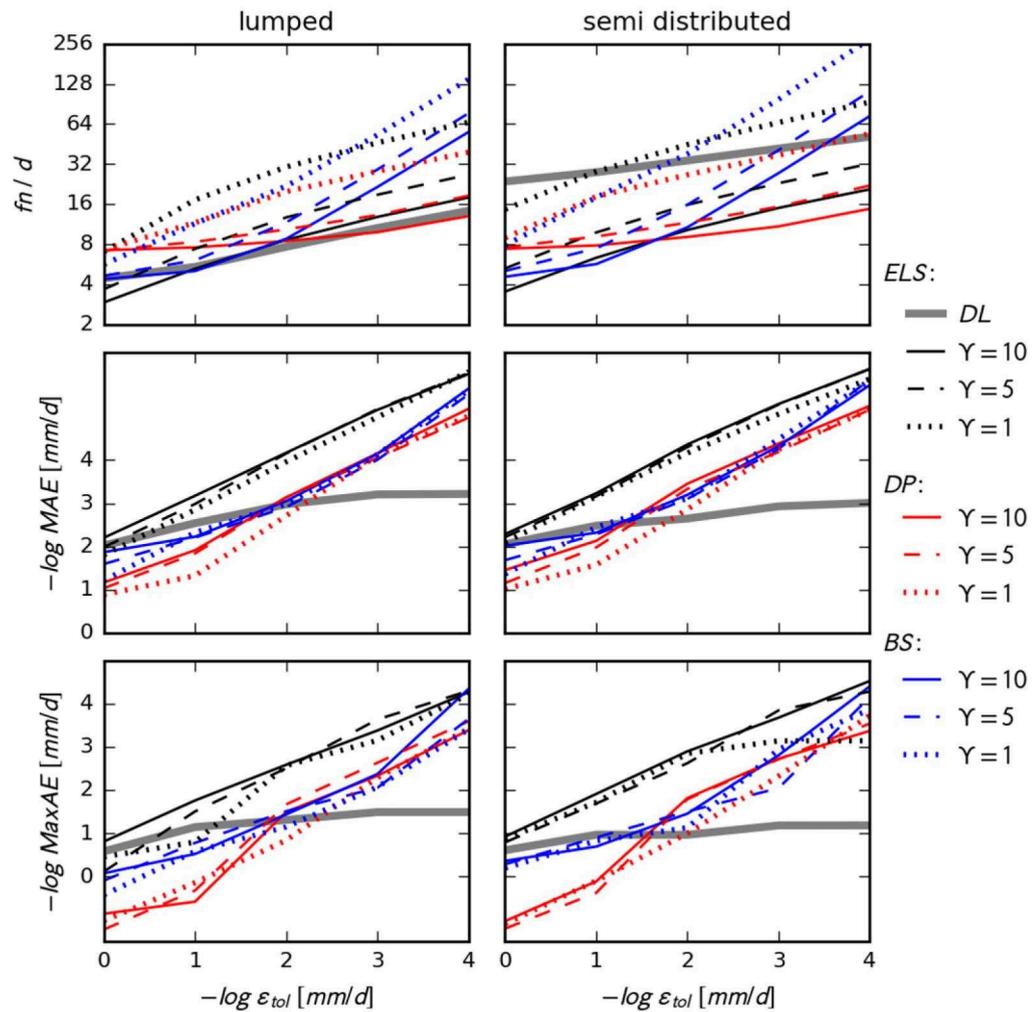


Abbildung 4.41: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19, aber mit Belegung des schneedeckenbezogenen Grenzwertes zur Unterdrückung der Bodenverdunstung (EAT) mit einem Wert von 0 mm.

Das zweite Problem tritt auf, wenn in einer räumlich differenzierten Modellkonfiguration (pro Teilgebiet mehrere Zonen) kapillarer Wiederaufstieg (CF) aus dem oberen Grundwasserspeicher (UZ) in den Bodenspeicher (SM) durch Setzen der maximalen Flussrate $CFLUX$ auf Werte größer 0 mm/d ermöglicht wird (siehe Gleichung 4.116). Dies führt zu einer gravierenden Form von „discontinuity sticking“ (Barton und Pantelides 1994): in Kombination mit der strengen Überwachung der lokalen Fehlerschranke entsprechend Abschnitt 4.8 fährt sich ELS-DL in einigen Situationen derart fest, dass die Simulationsrechnung nicht erfolgreich abgeschlossen werden kann.

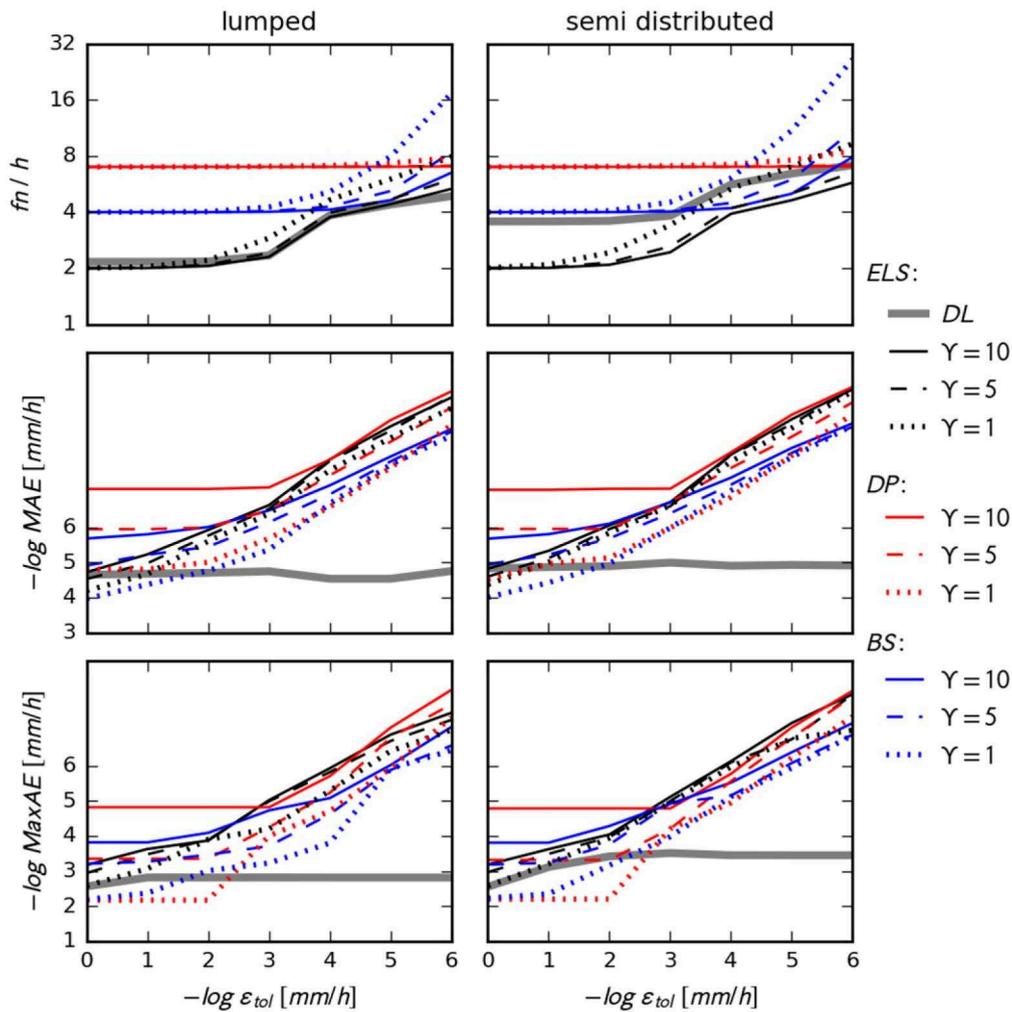


Abbildung 4.42: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.41, aber für die Stundenwertsimulation.

Ungeklärt bleibt, ob sich die beiden aufgedeckten Probleme mit den Methoden dieser Arbeit ohne Zuhilfenahme modellspezifischer Sicherungsroutinen lösen lassen. Mit Blick auf die Ursachen kann für das Verdunstungsproblem lediglich darauf hingewiesen werden, dass der Grenzwert null für den festen (*SP*) und den flüssigen (*WC*) Wasseranteil der Schneedecke ein vergleichsweise kritischer Punkt ist (Abschnitt 4.7.2). Beim Kapillaraufstiegsproblem liegt ein in anderer Hinsicht besonderer Fall vor: bei einer räumlich differenzierten Modellkonfiguration entnehmen mehrere Bodenspeicher einem einzelnen oberen Grundwasserspeicher entsprechend ihres eigenen Speicherdefizits Wasser, solange der obere Grundwasservorrat des gesamten Teilgebietes nicht gänzlich aufgebraucht ist. Verkomplizierend hinzu kommen die mögliche Einspeisung von potenziell abflusswirksamen Wasser (*R*) durch einen oder mehrere Bodenspeicher in den Grundwasserspeicher sowie die unterschiedlichen Flächenbezüge aller genannten Speicher (Tyralla und Schumann 2013).

4.11 Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick

Der Erarbeitung mathematisch-technischer Standards wird in der hydrologischen Modellierung bislang wenig Beachtung geschenkt. Kapitel 4 versucht mit einem spezialisierten Integrationsverfahren sowie methodischen Ergänzungen zur Berücksichtigung von Prozessdiskontinuitäten und zeitvariablen Randbedingungen Beiträge auf diesem Feld zu leisten. Exemplarische Anwendungen auf die hydrologischen Modelle HBV₉₆ und LARSIM_{ME} zeigen Schwierigkeiten und Chancen, auf diesem Wege die Transparenz, Kompatibilität und Plausibilität zukünftiger Modellimplementierungen zu erhöhen.

Aufgrund der in Abschnitt 4.2 angestellten Überlegungen zu den Besonderheiten konzeptioneller hydrologischer Speichermodelle werden verschiedene Strategien zu deren rechentechnischer Handhabung vorgeschlagen. Abschnitt 4.3 argumentiert für die numerische Integration der zu lösenden Differenzialgleichungssysteme mit expliziten Einschrittverfahren (Runge-Kutta-Verfahren). Abschnitt 4.4 leitet die „Explizite Lobatto-Sequenz“ (ELS) als ein entsprechendes, spezialisiertes Verfahren her. Dessen Anwendungsbereich wird durch die in Abschnitt 4.5 diskutierten Diskretisierungs- und Regularisierungstechniken auf grenzwertbasierte Speichermodelle erweitert. Die in Abschnitt 4.6 entwickelte Disaggregierungsmethode dient der plausiblen Einspeisung der zum Modellantrieb verwendeten Niederschlagsdaten. Abschnitt 4.7 stellt die mit den Methoden dieser Arbeit kompatible Formulierung der Prozessgleichungen der Modelle LARSIM_{ME} und HBV₉₆ sowie der von Bauer (1974) modifizierte Horton-Infiltration dar. In den Vergleichsrechnungen in Abschnitt 4.8 und den Kalibrier-Experimenten in Abschnitt 4.9 dienen einerseits die weitgehend originalgetreuen ad hoc-Implementierungen von LARSIM_{ME} (bislang unveröffentlichter BfG-Bericht) und HBV₉₆ (Tyralla und Schumann 2013) als Referenzverfahren, andererseits die Einschrittverfahren DP nach Dormand und Prince (1980) sowie BS nach Bogacki und Shampine (1989).

In Abschnitt 4.8 zeigt sich ELS bei der Lösung regularisierter Differenzialgleichungssysteme zumeist effizienter als DP und BS. Das antriebsdatenbedingte Diskretisieren der Simulationszeiträume in externe Zeitschritte kommt ELS entgegen und lässt die Vorteile von DP und BS („first same as last“-Eigenschaft, theoretisch fundierte Schrittweitensteuerung) wenig zum Tragen kommen. DP verursacht oftmals verhältnismäßig große Rechenfehler bei Genauigkeitsforderungen weit unterhalb seines Optimalbereiches. Dagegen dominiert DP in einigen Simulationsrechnungen mit schwierigen, nur in mehreren Integrationsschritten lösbaren externen Zeitschritten. Dies kann aus einer für hydrologische Verhältnisse hohen Genauigkeitsforderung oder am Vorliegen eines stark variablen Anfangswertproblems herrühren. Letzteres kommt bei den eher trägen Modellen LARSIM_{ME} und HBV₉₆ primär durch die Regularisierung von Diskontinuitäten mit geringen Glättungsgraden zustande.

Unter Einsatz der discontinuity locking-Technik (DL) entfallen die Diskontinuitäten der Prozessgleichungen im jeweils aktiven Modus gänzlich. Folglich sollte ELS in Verbindung mit

DL bis zu einer höheren Genauigkeitsforderung effizienter als DP sein. Die empirische Bestätigung dieser naheliegenden Vermutung steht jedoch noch aus, da das Modellframework HydPy (Tyralla und Schumann 2013) bislang keine Kopplung von DP mit DL vorsieht.

Die fast durchgängig geringe Effizienz von BS könnte zumindest teilweise der Kriterienwahl geschuldet sein. Für BS fällt gegenüber DP und oftmals auch gegenüber ELS weniger rechen technischer Mehraufwand in Form großer Matrixmultiplikationen an. Bei Betrachtung der Rechendauer statt der Anzahl an Funktionsaufrufen sollte sich dies zumindest bei schnell auswertbaren Differenzialgleichungssystemen positiv bemerkbar machen. Extrem große Diskrepanzen zwischen der Rechendauer und der Anzahl an Funktionsaufrufen, wie von Hairer et al. (1993) beim Vergleich sehr unterschiedlicher Integrationsverfahren festgestellt, sind bei adäquater Programmierung allerdings nicht zu erwarten. BS, DP und ELS sind allesamt explizite Runge-Kutta-Verfahren und deshalb funktional ähnlich.

Vom direkten Vergleich der Rechendauern wurde Abstand genommen, da dies einen durchweg hohen Grad rechen technischer Optimierung aller Integrationsverfahren voraussetzt. Die Programmierung der Verfahren zielte in der Entwicklungs- bzw. der Erstimplementierungsphase dagegen primär auf Übersichtlichkeit und Flexibilität ab.

Allgemein sind zur Rechendauer die folgenden Aussagen möglich: Erstens bringen alle numerischen Integrationsverfahren einen gewissen Overhead mit sich. Im Vergleich mit den ad hoc-Integrationsstrategien erhöht sich die Rechendauer daher stärker als die Anzahl an Funktionsaufrufen. Ausgenommen hiervon sind ad hoc-Lösungsstrategien, die Schrittweitenverfeinerungen oder Iterationstechniken zur Lösung von Teilproblemen vorsehen, wie optional für die Direktabflussberechnung von HBV₉₆ der Fall. Zweitens erhöht der Einsatz der Regularisierungstechnik die Rechendauer jedes einzelnen Aufrufs des Differenzialgleichungssystems durch den Gebrauch rechenzeitintensiver Exponentialfunktionen. Drittens sollte der Zeitaufwand zur Ereignislokalisierung bei Einsatz von DL (u. A. in Form von Polynominterpolationen) eine noch größere Steigerung des Verhältnisses aus Gesamtrechendauer und der Anzahl notwendiger Funktionsaufrufe zur Folge haben, als der Einsatz der Regularisierungstechnik.

Die graphische Darstellung der wesentlichen Flussgrößen von LARSIM_{ME} und HBV₉₆ mit Violinplots ermöglicht detaillierte Analysen des Einflusses der Integrationsstrategie auf das gesamte Systemverhalten. Die aus der Anwendung der Diskretisierungs- und der Regularisierungstechnik herrührenden Diskrepanzen im Systemverhalten verringern sich umso mehr, je geringer der Regularisierungsgrad angesetzt wird. Demzufolge erscheinen beide Methoden korrekt umgesetzt.

Analoge Vergleiche zwischen ELS-DL und den ad hoc-Integrationsstrategien zeigen deutliche Diskrepanzen auf. In den (identischen) Interzeptionsmodulen beider Modelle wird, je nach verwendeter Integrationsstrategie, der eingehende Niederschlag unterschiedlich auf den Stammabfluss sowie die Interzeptionsverdunstung aufgeteilt. Das Bodenmodul von

LARSIM_{ME} kompensiert diese Unterschiede zu einem großen Teil – primär durch die gegensteuernde Bodenverdunstung. Das Bodenmodul von HBV₉₆ hat einen geringeren Kompensationseffekt, wodurch sich die Unterschiede im Stammabfluss stärker bis zum Gebietsabfluss fortpflanzen. Mit der Parametrisierung des operationellen HBV-Modells der Bundesanstalt für Gewässerkunde bewirkt der Wechsel der Integrationsmethode für den oberen Neckar eine MQ-Differenz von ca. 20 %. Kleine Parametervariationen insbesondere vom Interzeptionsparameter *ICMAX* können diese Bilanzdifferenz erheblich vergrößern oder verkleinern.

Mit einem Wechsel zur Stundenschrittweite (nur für HBV₉₆ getestet) verringern sich die Bilanzdifferenzen sowie andere Rechenunterschiede deutlich. Das ursprünglich auf die Wasserhaushaltssimulation ausgerichtete HBV-Modell weist zumindest in der getesteten Konfiguration ein sehr träges Systemverhalten auf. Folglich erzielt in der Stundenwertsimulation bereits das simple explizite Euler-Verfahren weitgehend akzeptable Genauigkeiten. Das explizite Euler-Verfahren entspricht dem ersten Schritt von ELS und wird in der ad hoc-Strategie von HBV₉₆ (in der HydPy-Implementierung) als Grundlage der Lösung mehrerer Prozessgleichungen herangezogen.

Die genannten Unterschiede in den Interzeptionsmodulen resultieren nicht aus eigentlichen Rechenfehlern der ad hoc-Integration, sondern aus der Art der Einspeisung des Niederschlags in die Modelle: nach den ad hoc-Strategien wird das gesamte Niederschlagsvolumen jedes externen Zeitschrittes unmittelbar zu dessen Beginn an den Interzeptionsspeicher übergeben; bei der Anwendung numerischer Integrationsalgorithmen wird üblicherweise von einer zeitschrittweise konstanten Niederschlagsintensität ausgegangen. So bewirken die ad hoc-Strategien beider Modelle die Überschätzung des Stammabflusses sowie die Unterschätzung der Interzeptionsverdunstung und die Anwendung der numerischen Integrationsalgorithmen unter der genannten Annahme den umgekehrten Fall. Für HBV₉₆ durchgeführte Vergleichsrechnungen unter Rückgriff auf die entwickelte Disaggregierungsmethode zeigen, dass die Anwendung numerischer Integrationsalgorithmen nur dann die Konsistenz zwischen Simulationen in verschiedenen Zeitschrittweiten erhöht, wenn realistischere Annahmen zur zeitlichen Niederschlagsverteilung innerhalb externer Zeitschritte getroffen werden.

Die vorgeschlagenen statistisch-deterministischen Disaggregierungsfunktionen sind als modelldienlicher Kompromiss zwischen subjektiven deterministischen und aufwendigen stochastischen Disaggregierungsmethoden gedacht. Für die Horton-Infiltration durchgeführte Vergleichsrechnungen mit hoher Auflösung (5 min) zeigen, dass die Disaggregierungsmethode die Realitätsnähe von Stunden- und Tageswertsimulationen erhöht. Allerdings bleiben insbesondere bei Böden mit großer Infiltrationskapazität relevante Diskrepanzen zur hochaufgelösten Simulation bestehen. Es bleibt zu untersuchen, ob sich diese durch die Ermittlung besserer Regressionsbeziehungen zur Bestimmung der freien Parameter der Disaggregierungsfunktionen weiter verringern lassen.

Abschnitt 4.9 fasst Experimente zur Kalibrierung von LARSIM_{ME} und HBV₉₆ mit lokalen Optimieralgorithmen (BOBYQA und TNC, siehe Abschnitt 3.4) unter Verwendung verschiedener Integrationsstrategien und Rechengenauigkeiten zusammen. Für die Tageswertsimulation mit LARSIM_{ME} zeigen sich keine relevanten Unterschiede in der Effizienz beider Optimieralgorithmen bei Verwendung verschiedener Integrationsstrategien (ad hoc, ELS-DL sowie ELS und DP in Verbindung mit dem Regularisierungsansatz). Allerdings müssen alle numerischen Integrationsverfahren mit einer gewissen Genauigkeitsforderung betrieben werden. ELS verhält sich diesbezüglich relativ konstant; eine lokale Fehlerschranke von etwa 0,01 mm/d erscheint angemessen. Für DP zeigen sich deutlichere fallspezifische Variationen; die lokale Fehlerschranke sollte i. d. R. deutlich kleiner als für ELS angesetzt werden. Soweit ersichtlich, verhalten sich die Rechengenauigkeiten der ad hoc-Integration von LARSIM_{ME} hinsichtlich aller Parametervariationen so glatt, dass sie die Effizienz von Optimieralgorithmen nicht beeinträchtigen.

Die Ergebnisse analoger Untersuchungen von HBV₉₆ sind weitgehend kongruent. Einzige Ausnahme, sowohl in der Tages- als auch in der Stundenwertsimulation, ist die deutliche Effizienzsteigerung von BOBYQA bei Anwendung der Regularisierungstechnik. Diese ist vermutlich auf das extrem ausgeprägte Grenzwertverhalten von HBV₉₆ zurückzuführen. Somit erfüllt der auf Kavetski und Kuczera (2007) zurückgehende Vorschlag der Glättung der Grenzwerte konzeptioneller Speichermodelle im Untersuchungsgebiet für eines der beiden Modelle den beabsichtigten Zweck.

Die ausgeprägte Grenzwertlastigkeit von HBV₉₆ bzw. die damit einhergehende (scheinbar den Autor überfordernde) Komplexität des zu formulierenden Differenzialgleichungssystems ist als Ursache für die in Abschnitt 4.10 diskutierten Probleme der DL-Implementierung anzusehen. Diese treten bei bestimmten Modellkonfigurationen auf und zeigen gravierende Auswirkungen: das mit der Bodenverdunstung verbundene Problem schränkt die erreichbare Rechengenauigkeit ein; das mit dem kapillaren Aufstieg verbundene Problem bewirkt Rechenabbrüche. Wichtiger als die spezifische Frage, ob sich beide Probleme rein DL-basiert beheben lassen, erscheint die allgemeine Frage, welche Empfehlungen sich hieraus und aus den übrigen Befunden dieser Arbeit für zukünftige Implementierungen hydrologischer Modelle ableiten lassen.

Zunächst sei dem von Kavetski und Clark (2011) geforderten Paradigmenwechsel in der hydrologischen Modellierung hin zu einer stärkeren Berücksichtigung technischer Unsicherheiten beigepllichtet. Wohl aus der Erkenntnis heraus, dass räumlich fein aufgelöste Prozessmodelle wie SHE (Abbott et al. 1986) weder bessere Simulationsgüten (Reed et al. 2004) noch eine bessere theoretische Fundierung garantieren (Beven 1993), blieben die einfacheren Speichermodelle in der Forschung und insbesondere in der Praxis der Modellierung von Flussgebieten dominant. Und mit ihnen die althergebrachten ad hoc-Integrationsstrategien und andere technische Vereinfachungen. Der extreme Grad teils subjektiver Prozessabstraktionen in Speichermodellen, die großen Datenunsicherheiten in Flussgebieten und die gän-

gige Kalibrierpraxis, durch effektive Parameterwerte problematische Rechenfehler aufzuheben, scheinen die relativ geringen Innovations- und Standardisierungsbestrebungen in diesem Bereich zu rechtfertigen. Nach Auffassung des Autors liegen dennoch ausreichend gewichtige Gründe vor, die Verringerung technischer Unsicherheiten in konzeptionellen Speichermodellen stärker in den Fokus zu rücken. Dies sollte auf Grundlage adaptiver numerischer Integrationsalgorithmen erfolgen.

Zwei Einwände gegen deren Verwendung werden oftmals vorgebracht. Erstens: die unvermeidliche Zunahme an Rechenaufwand. Wie die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, hält sich diese Zunahme im akzeptablen Rahmen – insbesondere wenn sie zur Steigerung der Computerleistung seit der Entwicklung der ersten Speichermodelle in Relation gesetzt wird. Zum Erreichen ausreichender Genauigkeiten sind weder sehr kleine Rechenschrittweiten noch implizite Integrationsverfahren notwendig. Da in aller Regel auf stabile Iterationsverfahren verzichtet werden kann, steigt der Rechenaufwand nur linear mit der Größe des zu lösenden Differenzialgleichungssystems an. Adaptive numerische Integrationsverfahren stehen einer feineren räumlichen Differenzierung von Flussgebieten, z. B. in Form von hydrologischen Einheitsflächen, bei Verwendung konzeptioneller Speichermodelle daher nicht im Wege (mit der unten diskutierten Einschränkung für DL).

Des Weiteren schöpft die vorliegende Arbeit nicht alle vorhandenen Effizienzpotenziale aus. Beispielsweise ist ELS auf das Lösen externer Zeitschritte in nur einem Integrationsschritt ausgerichtet; eine elaboriertere Schrittweitensteuerung sollte das Lösen derjenigen Zeitschritte beschleunigen, für welche dies unmöglich oder zu aufwendig ist. Für reguläre Einzschrittverfahren wie DP und BS wäre die Einbettung in einem Metaalgorithmus naheliegend, der adaptiv das bestgeeignete Verfahren auszuwählen versucht; eventuell in ähnlicher Form wie von Tyralla und Schumann (2013) für die Kombination des expliziten Euler-Verfahrens mit dem klassischen vierstufigen Runge-Kutta-Verfahren vorgeschlagen.

Der zweite gängige Einwand gegen die Verwendung numerischer Integrationsverfahren zur Lösung konzeptioneller Speichermodelle ist deren geringere Robustheit. Werden alle Prozessgleichungen ad hoc-gelöster Modelle unhinterfragt in Differenzialformulierungen überführt, wie in dieser Arbeit zu Vergleichszwecken der Fall, kann dieser Einwand zutreffen (siehe Abschnitt 4.10). Die Potenziale der in dieser Arbeit diskutierten Methoden werden aber ohnehin nicht ausgeschöpft, solange ihre Anwendung nicht mit umfassenden modelltechnischen Weiterentwicklungen einhergeht. Welche Möglichkeiten zur Reduzierung von Unsicherheiten in der hydrologischen Modellierung bieten sich also über die oben zusammengefassten Befunde hinaus?

Bei der Auswahl einer Prozessgleichung kann deren Kompatibilität zur bereits feststehenden Integrationsmethode ein wesentliches Kriterium sein – nicht nur, aber insbesondere bei Verwendung von ad hoc-Integrationsstrategien. Beispielsweise hat die Umsetzung des Interzeptionsmoduls von LARSIM_{ME} und HBV₉₆ als einfacher Überlaufspeicher nicht den höchsten Realitätsgrad, dafür jedoch eine einfache analytische Lösung. Baut ein zu entwickelndes Modell von vornherein auf adaptive numerische Integrationsmethoden auf, ist das Vorliegen

akzeptabler analytischer Lösungen irrelevant, was größere Freiräume bei der Auswahl theoretisch fundierter Prozessbeschreibungen eröffnet. Die dann gewählten Gleichungen sollten nicht nur dem Systemverhalten zuträglicher sein, sondern aufgrund der selteneren Verwendung von Grenzwerten mit diskontinuierlicher Wirkung auch die Einfachheit und Robustheit der numerischen Implementierung erhöhen.

Analytische Lösungen von Speicheransätzen gehen von simplen zeitlichen Verläufen der Eingangsgrößen aus, die für meteorologische Phänomene wie dem Niederschlag letztlich unrealistisch sind. Durch die Verwendung numerischer Integrationsalgorithmen wird die Einspeisung meteorologischer Eingangsgrößen flexibilisiert. Die entwickelte Disaggregierungsmethode reduziert artifizielle *zeitliche* Skaleneffekte. Indirekt bieten die hierbei verwendeten Disaggregierungsfunktionen durch ihren statistischen Bezug zu subskaligen Niederschlagsseigenschaften ebenso Chancen zur Reduzierung artifizieller *räumlicher* Skaleneffekte. Hochfrequente Niederschlagscharakteristika sollten stark durch klimatische Effekte determiniert und daher mit einer gewissen Genauigkeit räumlich interpolierbar sein. Gebietspezifische Parametrisierungen der Disaggregierungsfunktionen könnten vorhandene räumliche Unterschiede explizit in den Modellierungsprozesse einbeziehen und so z. B. bodenbezogene Modellparameter ein Stückweit davon befreien, klimatische Unterschiede zu kompensieren.

Hierbei ist ebenfalls die Gebietsgröße in Betracht zu ziehen. Die gängige Gebietsniederschlagsbildung mindert die Niederschlagsvariabilität ähnlich wie das zeitliche Aggregieren. Äquivalent zum diskutierten artifiziellen zeitlichen Skaleneffekt zwischen kleiner und großer Zeitschrittweite tritt ein artifizieller räumlicher Skaleneffekt zwischen kleinen und großen Teilgebieten auf. Dies spricht für die durchgängige Verwendung kleiner Teilgebiete.

Die Bildung kleinerer und damit homogenerer Teilgebiete ist darüber hinaus aus numerischer Perspektive zu befürworten. Sie hält die einzelnen, getrennt lösbaren Differenzialgleichungssysteme und damit die Anzahl der darin enthaltenen Diskontinuitäten klein. Einzelne diskontinuierliche Prozessgleichungen werden aller Voraussicht auch in zukünftigen Modellkonzepten ihren Platz finden. In Fällen wie der (modifizierten) Horton-Infiltration erscheint die Regularisierung der Diskontinuitäten wenig wünschenswert. Für diese ist die Diskretisierung das Mittel der Wahl, welche jedoch nur dann ähnlich effizient oder effizienter als die Regularisierung ausfällt, wenn sich die Anzahl an Diskontinuitäten (genauer: wenn sich die Anzahl damit verbundener zustandsabhängiger Ereignisse) in Grenzen hält.

Kleine Teilgebiete vereinfachen darüber hinaus die explizite Berücksichtigung der räumlichen Heterogenität hydrologischer Prozesse. In starren Computerprogrammen wie der Originalimplementierung von HBV₉₆ beschränkt sich dies auf die räumlich variable Parametrisierung identischer Prozessgleichungen. (Man beachte die Kausalkette von technischer Einschränkung über die Prozessabstraktionsunsicherheit hin zur Parameterunsicherheit.) Moderne Frameworks sollten außerdem die räumliche Kombination verschiedener gebietsadäquater Prozessbeschreibungen ermöglichen (Mendoza et al. 2015). Theoretisch denkbar ist

sogar die enge, teilgebietsinterne Interaktion verschiedener Modellkonzepte. Allerdings stellen Inkompatibilitäten infolge unterschiedlicher Modelleigenheiten, wie z. B. dem erweiterten Sättigungsflächenansatz von HBV₉₆ (Bergström et al. 1997), hierfür eine relevante Hürde dar. Es bleibt zu hoffen, dass zukünftige modelltechnische Entwicklungen derartige, kritisch zu sehende Modelleigenheiten (Tyralla und Schumann 2016b) obsolet machen und so zur größeren Plausibilität und Kompatibilität hydrologischer Modellkonzeptionen beitragen.

Gewiss ist die rigorosere (und vielleicht sogar standardisierte) Handhabung technischer Unsicherheiten nicht das Universalmittel gegen alle Probleme der hydrologischen Modellierung. Den Blick verstärkt auf die Modelltechnik zu lenken, und weniger auf die oftmals blumig beworbene Modellkonzeption und die nach umfangreicher Kalibrierung erzielte Simulationsgüte, sollte jedoch zumindest zum Gewinn realistischer Erwartungshaltungen beitragen und den fundierten Umgang mit Modellen auf allen Ebenen fördern. Darüber hinaus betrifft die technische Implementierung nicht nur die technische Unsicherheit selbst, sondern eröffnet die in der obigen Diskussion angerissenen Chancen zur Reduktion anderer Unsicherheitsquellen. So birgt sie Potenziale, die Vergleich- und Übertragbarkeit von Simulationsergebnissen zu erhöhen, woran es bislang mangelt und was den wissenschaftlichen Fortschritt erschwert. Dem Appell von Kirchner (2006) folgend könnte hierin ein Teil des Weges liegen, die Einzugsgebietshydrologie hin zur „Gewinnung der richtigen Antworten aus den richtigen Gründen“ zu bewegen.

5 Prozessunsicherheit

Die in der hydrologischen Modellierung gängige Kalibrierpraxis überführt Daten- und Modellunsicherheit in Parameterunsicherheit (Abschnitt 2.2.3). Unabhängig von allen zukünftig zu erwartenden Reduktionen der datenbezogenen sowie der modelltechnischen Unsicherheit ist davon auszugehen, dass dieses Problem allein aufgrund der unvermeidbaren Wissensdefizite über das komplexe Prozessgefüge großer Flussgebiete niemals gänzlich zu beheben sein wird. Folglich besteht Bedarf an Methoden, die den negativen Einfluss der Prozessunsicherheit auf die Parameterunsicherheit möglichst gering halten oder bestehende Parameterunsicherheiten zur Identifikation von Prozessunsicherheit nutzen (Gattke 2006).

Im Gegensatz zur technischen Unsicherheit erhält die Parameterunsicherheit konzeptioneller Modelle seit langem viel Aufmerksamkeit in der hydrologischen Forschung. Die Entwicklung von Methoden zur Identifikation und Reduktion der Prozessunsicherheit wurde in den letzten Jahren ebenfalls intensiviert (Clark et al. 2015).

Abschnitt 5.1 entwickelt mit dem „Ensemble Range Approach“ (ERA) eine Verallgemeinerung sowohl des „Ensemble Point Approach“ (EPA, Bates und Granger 1969) sowie des „Ensemble Density Approach“ (EDA, Zarnowitz 1969). Der häufigste Einsatzzweck derartiger Ensembletechniken ist die Reduktion der Prozessunsicherheit in Vorhersagen (siehe z. B. Diks und Vrugt 2010). Dieser Zweck kann ebenfalls mit ERA verfolgt werden, in der vorliegenden Arbeit steht aber die Frage im Vordergrund, welche Potenziale ERA in der Identifikation struktureller Unsicherheiten hydrologischer Modelle bietet. Hierzu werden verschiedene Parameterensembleversuche durchgeführt (erste Strukturensembleversuche finden sich in Tyralla und Schumann 2016b). Abschnitt 5.3 greift die simplen synthetischen Fallstudien aus Tyralla und Schumann (2016a) auf und vergleicht die hierfür erzielten Ergebnisse von EPA, EDA und ERA sowie die der in Abschnitt 5.2 eingeführten Referenzmethoden. Abschnitt 5.4 wiederholt die in Tyralla und Schumann (2016b) angestellten realen Fallstudien mit stärkerem Fokus auf die Veranschaulichung der Wirkungsweise von ERA.

5.1 Ensemble Range Approach

Der Ensemble Range Approach (ERA) gründet auf die konventionellen Ensembletechniken von Bates und Granger (1969) sowie Zarnowitz (1969), die Abschnitt 5.1.1 aus statistischer Perspektive einführt. Abschnitt 5.1.2 interpretiert die Verfahren aus hydrologischer Perspektive und zeigt, dass beide mit unterschiedlichen Idealtypen modellstruktureller Unsicherheit in Verbindung stehen. Dies veranlasst die Zusammenführung der Verfahren in Abschnitt

5.1.3 zur Berücksichtigung von Kombinationen beider Unsicherheitstypen. Abschnitt 5.1.4 erläutert die Möglichkeiten und Grenzen der entwickelten Methode aus theoretischen und praktischen Gesichtspunkten sowie die ggf. erforderlichen zusätzlichen Spezifikationen.

5.1.1 Statistische Vorüberlegungen

Weder die Messung noch die Simulation des Abflusses verläuft fehlerfrei, sodass die jeweils gewonnenen Zeitreihen voneinander abweichen. Zu treffende Annahmen über die Fehlerquellen bestimmen maßgeblich, welche Strategie im Umgang mit den Abweichungen (Residuen) verfolgt werden sollte. Statistisch orientierte Strategien zur Charakterisierung der Gesamtheit aller Residuen werden in der englischsprachigen Literatur in Abhängigkeit ihrer wahrscheinlichkeitstheoretische Stringenz als *formal* oder *informal* bezeichnet (Smith et al. 2008b).

Die im Folgenden beschriebene Einbettung von Ensembletechniken in Likelihood-Funktionen ist dahingehend als *formal approach* zu betrachten, als dass der theoriegeleitete Versuch einer expliziten Beschreibung bzw. Trennung von Daten- und Modellfehlern unternommen wird. Sie bleibt allerdings dahingehend ein *informal approach*, als dass der statistische Versuch der expliziten Modellierung aller Residueneigenschaften ausbleibt; z. B. bleibt im Gegensatz zu Schoups und Vrugt (2010) die zeitliche Persistenz der Residuen unberücksichtigt.

Zunächst sei idealisierend angenommen, ein Modell ohne jegliche Form modellstruktureller Unsicherheit liegt samt absolut kompatibler, fehlerfreier Eingangsdaten vor. Ferner wurde dieses Modell auf Grundlage einer langen, repräsentativen Abflussmessung ohne systematische Fehler kalibriert. Dann lässt sich die Parameterunsicherheit als vernachlässigbar und die Abweichung zwischen dem simulierten (x) und dem gemessenen (\hat{y}) Abfluss zum Zeitpunkt t als rein zufälliger Abflussmessfehler (ε) auffassen:

$$\hat{y}_t = x_t + \varepsilon_t \quad 5.1$$

In diesem Idealfall ist das Prozessgefüge des Untersuchungsgebietes perfekt durch das einzelne deterministische Modell repräsentiert und der simulierte Abfluss (x) identisch mit dem tatsächlichen Abfluss (y):

$$x_t + \varepsilon_t = y_t + \varepsilon_t \quad 5.2$$

Die verbliebende Unsicherheit in der Schätzung der Abflussmessung (\hat{y}), ausgedrückt durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f_{\hat{y}}$ mit dem Funktionsargument z , ist allein der Zufälligkeit der Messfehler (ε), ausgedrückt als Dichte f_{ε} , geschuldet:

$$f_{\hat{y}_t}(z) = f_{\varepsilon(x_t)}(z - x_t) \quad 5.3$$

Die Erwartungswerte von $f_{\hat{y}}$ und f_{ε} sind wegen des Ausschlusses systematischer Messfehler x bzw. 0. (Die zusätzliche Verwendung von x in der Formulierung der Dichte f_{ε} erlaubt die

Berücksichtigung abflussspezifischer Abhängigkeiten des Messfehlers wie dessen Zunahme im Hochwasserbereich, siehe Abschnitt 5.1.4)

Der beschriebenen Ansatz – zur Vereinfachung im Folgenden „Single Model Approach“ (SMA) genannt – führt bei relevanter Modellunsicherheit zu systematischen Fehleinschätzungen. Parameterkalibrierungen auf Grundlage einer aus Gleichung 5.3 entwickelten Likelihood-Funktion bewirken (je nachdem wie mit den Parametern der Fehlerdichte f_ε verfahren wir, siehe Abschnitt 5.4.2), entweder eine Unterschätzung der Simulationsunsicherheit oder eine Überschätzung der Datenunsicherheit. Im Folgenden werden zwei Ensembleansätze eingeführt, die dem entgegenwirken sollen.

Bates und Granger (1969) schlagen die Zusammenfassung der simulierten Werte (x) mehrerer Ensemblemember durch eine Linearkombination vor:

$$y_t = \sum_{i=1}^k \beta_i \cdot x_{i,t} \quad 5.4$$

Die nach der Erweiterung von Granger und Ramanathan (1984) über den gewöhnlichen Fehlerquadratansatz zu bestimmten Wichtungsfaktoren (β) kombinieren die von k hydrologischen Modellen simulierten Abflusswerte zum (mutmaßlichen) tatsächlichen Abfluss y .

Die Wichtungsfaktoren erlauben in Verbindung mit der Ensemble-Streuung am jeweiligen Zeitschritt t die Überführung von y in eine Zufallsvariable: je größer die gewichtete Ensemble-Streuung, desto größer die Simulationsunsicherheit. Hier soll jedoch, analog zu SMA, weiterhin vom wahren Abfluss y ausgegangen werden, d. h. die trotz idealer Wichtungsfaktoren verbleibende Unvorhersagbarkeit der Abflussmessungen \hat{y} wird weiterhin allein auf zufällige Abflussmessfehler (ε) zurückgeführt:

$$\hat{y}_t = y_t + \varepsilon_t \quad 5.5$$

$$f_{\hat{y}_t}(z) = f_{\varepsilon(y_t)}(z - y_t) \quad 5.6$$

Bei dieser Methode, fortan als „Ensemble Point Approach“ (EPA) bezeichnet, liefert das Ensemble für jeden Zeitpunkt einen deterministischen Wert für y . Dagegen sieht die laut Wallis (2005) auf Zarnowitz (1969) zurückgehende Methode, fortan als „Ensemble Density Approach (EDA) bezeichnet, die Kombination von Wahrscheinlichkeiten oder Wahrscheinlichkeitsdichten vor:

$$f_{\hat{y}_t}(z) = \sum_{i=1}^k \alpha_i \cdot f_{\varepsilon(x_{i,t})}(z - x_{i,t}) \quad 5.7$$

Nach dem Prinzip der Mischverteilung wird die Dichte der Abflussmessung aus k modell-spezifischen Dichten gebildet. Daher darf keiner der Wichtungsfaktoren (α) negativ sein und muss deren Summe eins ergeben. Beides sei im Folgenden ebenfalls für die Wichtungsfaktoren von EPA (β) vorausgesetzt.

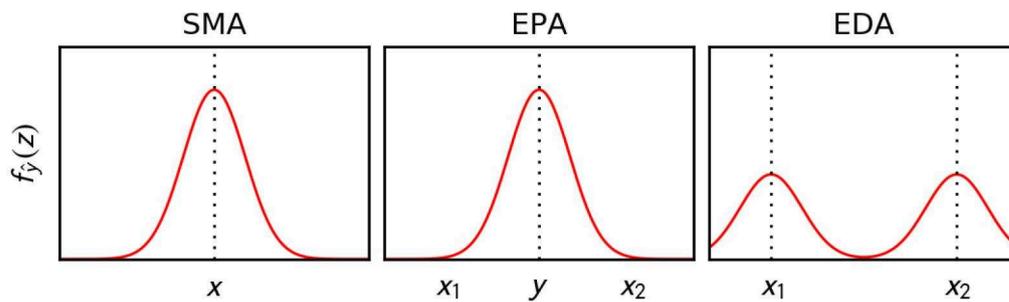


Abbildung 5.1: Veranschaulichung der Konstruktion der Wahrscheinlichkeitsdichte der Abflussmessung ($f_{\hat{y}}$, rote Linien) für den Single Model (links), Ensemble Point (mittig) und Ensemble Density Approach (rechts). Die x -Werte repräsentieren die für einen Zeitpunkt simulierten Abflusswerte eines oder mehrerer Modelle, der y -Wert einen gewichteten Abflusswert eines Ensembles. Die schwarz gepunkteten Linien repräsentieren (mögliche) tatsächliche Werte des Abflusses.

Abbildung 5.1 veranschaulicht die Unterschiede der definierten Methoden. Als Fehlerdichte wird exemplarisch die Normalverteilung herangezogen. Nach SMA entspricht der von einem einzelnen Modell simulierte Wert (x) dem tatsächlichen Abfluss (y , gestrichelte Linie). Nur aufgrund der im Einzelfall unbekanntem Messfehler treten Abweichungen zum gemessenen Abfluss (\hat{y}) auf, die statistisch über eine an x ausgerichtete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ($f_{\hat{y}}$) modelliert werden (rote Linie). EPA verändert an der deterministischen Handhabung der Modellunsicherheit nichts, da der tatsächliche Abfluss (y) als eindeutige Kombination mehrerer Modellausgaben (im Beispiel x_1 und x_2) geschätzt wird. Dagegen setzt EDA die Ensemblestreuung stochastisch um. Die beiden Modellausgaben (x_1 und x_2) geben zwei mögliche Werte des tatsächlichen Abflusses (y , gestrichelte Linien) an. So verringert sich, bei gleichbleibender Messunsicherheit (f_{ε}), die Vorhersagbarkeit der Abflussmessungen ($f_{\hat{y}}$, rote Linie) umso mehr, je stärker das Ensemble streut.

5.1.2 Hydrologische Vorüberlegungen

Mit Hilfe von Abbildung 5.2 wird der Versuch unternommen, die in Abschnitt 5.1.1 mathematisch eingeführten Methoden hydrologisch zu interpretieren. Die drei dargestellten hypothetischen Einzugsgebiete seien mit Ausnahme der Gewässernetzdichte identisch. Zur Simulation des Abflusses am Gebietsauslass steht ein hydrologisches Modell mit idealen Prozessgleichungen und Eingangsdaten zur Verfügung, das vorab ohne räumliche Differenzierung aufgesetzt wurde („lumped“).

Im linken Einzugsgebiet liegen keine räumlichen Unterschiede in der Gewässernetzdichte vor. Daher gestattet der „Single Model Approach“ (SMA) bei idealer Modellparametrisierung perfekte Abflussvorhersagen. Ist die Gewässernetzdichte unbekannt, lassen sich die damit verknüpften Parameterwerte bei bekannter Fehlerdichte der Abflussmessung (f_{ε}) über

den Maximum-Likelihood-Ansatz prinzipiell korrekt bestimmen (bzgl. Einschränkungen bei unvollständiger Parameter-Identifizierbarkeit s. Renard et al. 2010). Die verbleibende Parameterunsicherheit ist rein zufälliger Natur und umso kleiner, je günstiger die Relation aus dem Informations- und dem Fehleranteil der Abflussmessungen im Kalibrierzeitraum ausfällt

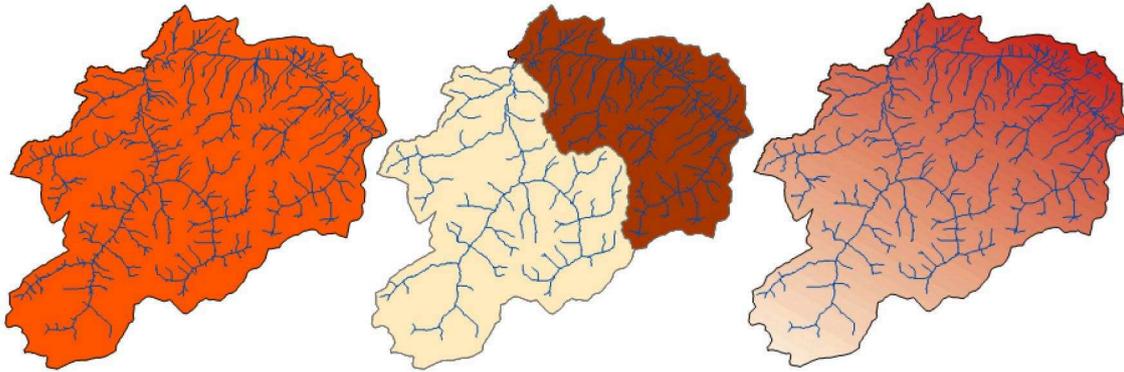


Abbildung 5.2: Hypothetische Einzugsgebiete mit unterschiedlichen Gewässernetzdichten.

Im mittig dargestellten Einzugsgebiet liegt eine deutliche Zweiteilung der Gewässernetzdichte mit geringer Ausprägung im linken Teilgebiet und starker Ausprägung im rechten Teilgebiet vor. Die Vernachlässigung einer solchen räumlichen Variabilität kann systematische Simulationsfehler bedingen. Diesen lässt sich selbst durch Kalibrierung nur bedingt entgegenwirken, wenn – wie i. d. R. zu erwarten - die mit der variablen Größe verbundenen Prozesse nichtlineare Abhängigkeitsstrukturen aufweisen.

Die klare Zweiteilung des hypothetischen Einzugsgebietes legt nahe, die Simulationsfehler unter Zuhilfenahme eines 2-Modell-Ensembles zu reduzieren. Angenommen, der Niederschlag fällt im gesamten Gebiet stets gleichmäßig. Dann ist die Kombination von zwei räumlich undifferenzierten Modellkonfigurationen mit dem „Ensemble Point Approach“ (EPA) mathematisch identisch zur Verwendung einer einzelnen räumlich differenzierten Modellkonfiguration in der dargestellten Gebietsunterteilung, insofern die EPA-Wichtungsfaktoren mit den relativen Flächenanteilen beider Teilgebiete übereinstimmen. Die simultane Kalibrierung der Parameter beider Ensemble-Member sowie der Wichtungsfaktoren ermöglicht in diesem Fall die erwartungstreue Parameteridentifikation und anschließend die (im Rahmen der verbliebenen Parameterunsicherheit) optimale Abflussvorhersage.

Den bisherigen Überlegungen folgend ist EPA die optimale Ensemblemethode zur Kompensation oder Identifikation von Prozessunsicherheiten, die aus der Vernachlässigung räumlicher Heterogenität resultieren. Hierfür müssen nicht zwangsläufig räumlich klar voneinander getrennte Prozessgefüge vorliegen wie im mittleren Beispiel von Abbildung 5.2. Ent-

scheidender ist, dass die unterschiedlichen Prozessgefüge in einem zeitlich konstanten Verhältnis zur Gesamtreaktion des Gebietes beitragen.

Während EPA verschiedene Prozessgefüge im Sinne eines (zeitkonstanten) Mischungsverhältnisses deterministisch kombiniert, ordnet der „Ensemble Density Approach“ diesen (zeitkonstanten) Wahrscheinlichkeiten zu. Frequentistisch betrachtet entspricht jede Wahrscheinlichkeit in etwa der relativen Häufigkeit, mit der ein Ensemble-Member das im Untersuchungsgebiet wirksame Prozessgefüge korrekt beschreibt. Das bedeutet, EDA geht nicht vom gleichzeitigen, sondern vom abwechselnden Wirken unterschiedlicher Prozessgefüge aus. Insofern werden verschiedene Prozessbeschreibungen zeitlich kombiniert, ohne dass deren konkrete zeitliche Abfolge zum Tragen kommt. Ist eine Modellstruktur mit fixierter Parametrisierung beispielsweise lediglich in der Lage, entweder advektiv oder konvektiv dominierte Niederschlags-Abfluss-Ereignisse befriedigend wiederzugeben, ermöglicht die Anwendung von EDA auf ein 2-Modell-Ensemble theoretisch die optimale Parameteridentifikation für beide Ereignistypen. Dies jedoch nur unter der Bedingung, dass die advektiven und konvektiven Witterungsbedingungen in Relation zur Persistenz des hydrologischen Systems von ausreichender Dauer sind.

5.1.3 Methodenentwicklung

Der vorangegangene Abschnitt konstruiert einfache Szenarien, in denen entweder EPA oder EDA die gegebene Prozessunsicherheit perfekt repräsentieren. Steht die Prozessunsicherheit mit einer fehlerhaften Berücksichtigung räumlicher Prozessheterogenität in Verbindung, erscheint EPA als geeignete Wahl. Bei einer primär aus zeitlicher Prozessheterogenität herührender Unsicherheit wäre dagegen EDA zu bevorzugen. Zwei Gründe legen nahe, beide Ansätze zusammenzuführen.

Erstens erfordert jeder Versuch, komplexe hydrologische Prozessgefüge mathematisch abzubilden, die Inkaufnahme sowohl räumlicher als auch zeitlicher Auslassungen und Vereinfachungen. Die Nichtberücksichtigung zeitlicher Prozessunsicherheit durch EPA sowie die Nichtberücksichtigung räumlicher Prozessunsicherheit durch EDA ist damit – zumindest wenn das Ziel der Unsicherheitsidentifikation im Vordergrund steht – problematisch.

Zweitens sind Heterogenitäten nicht immer so diskret ausgebildet, wie im Abschnitt 5.1.2 für die Gewässernetzdichte und den Niederschlagstyp diskutiert: die Gewässernetzdichte kann eher graduell zunehmen (Abbildung 5.2, rechts); konvektive Niederschlagszellen können in advektive Niederschlagsfronten eingebettet sein. Zudem wirken vorangegangene Witterungsbedingungen im hydrologischen System nach. Die damit verbundenen intermediären Prozessgefüge lassen sich durch EPA und EDA nur durch größere Ensembles approximieren, deren Modelle die gesamte Prozessbreite möglichst gleichmäßig abdecken. Die Vergrößerung eines Ensembles schränkt aber dessen Nutzbarkeit zur Identifikation modellstruktureller Unsicherheiten ein.

Der „Ensemble Range Approach“ (ERA) soll die geschilderten Probleme reduzieren. Der zugrundeliegende Gedanke ist, kleine Ensembles zu bilden, deren Member entgegengesetzte

Endpunkte der Prozessbreite einnehmen. Im Beispiel von Abbildung 5.2 (rechts) hieße dies, dass *ein* Ensemble-Member die kleinste Gewässernetzdichte im Gebiet repräsentiert und *der andere* Ensemble-Member die größte. Im Beispiel der Niederschlagstypen wäre *ein* Ensemble-Member gänzlich auf die Simulation rein advektiv geprägter Ereignisse spezialisiert und *der andere* ausschließlich auf die Simulation rein konvektiv geprägter Ereignisse. Zur Berücksichtigung des Kontinuums intermediärer Prozessgefüge dient eine zwischen den Ensemble-Membem aufgespannte Strukturunsicherheitsfunktion. Dies sei im Folgenden konkretisiert.

Die simulierten Abflusswerte $x_{1:k}$ aller k Ensemble-Member geben für jeden Zeitpunkt t das Intervall $[\min(x_{1:k}), \max(x_{1:k})]$ des tatsächlichen Abflusses (y) vor, d.h. es gilt die Annahme $P(y < \min(x_{1:k})) + P(y > \max(x_{1:k})) = 0$. Innerhalb des Intervalls sei eine beidseitig begrenzte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (f_s) zur genaueren Charakterisierung der erwarteten Lage des tatsächlichen Abflusses bzw. der modellstrukturellen Unsicherheit verwendet. Durch Faltung mit der Dichte der Abflussmessfehler (f_ε) definiert sich die Dichte der Abflussmessung:

$$f_{\hat{y}_t}(z) = \int_{\min(x_{1:k,t})}^{\max(x_{1:k,t})} f_{s(x_{1:k,t})}(u) \cdot f_{\varepsilon(u)}(z-u) du \quad 5.8$$

Während EDA modellstrukturelle Unsicherheit nur diskret über Wichtungsfaktoren in Simulationsunsicherheit transformiert (Summierung in Gleichung 5.7), ermöglicht ERA dies über f_s in kontinuierlicher Form (Integration in Gleichung 5.8). Damit ERA darüber hinaus für Ensembles beliebiger Größe sowohl EDA als auch EPA approximieren kann, bedarf die (univariate) Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f_s einer flexiblen Konstruktionsweise. Hierfür wird die (multivariate) Dichte der Dirichletverteilung (f_D) herangezogen:

$$f_{D(\gamma_{1:k})}(w_{1:k}) = \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^k \exp(\gamma_i)\right)}{\prod_{i=1}^k \Gamma(\exp(\gamma_i))} \cdot \prod_{i=1}^k w_i^{\exp(\gamma_i)-1} \cdot \mathbb{1}_{\left[w_{1:k} \in [0,1] \wedge \sum_{i=1}^k w_i = 1\right]} \quad 5.9$$

Der die Gammafunktion (Γ) enthaltende, vorangestellte Quotient dient der Normierung. Jeder Formparameter γ ist einem der k Ensemble-Member zugeordnet. Die Indikatorfunktion ($\mathbb{1}$) setzt die Dichte auf null, wenn wenigstens ein Funktionsargumente w einen Wert außerhalb des Intervalls $[0,1]$ annimmt oder die Summe aller w ungleich eins ist. Damit hat f_D in einem $(k - 1)$ -dimensionalen Teilraum des k -dimensionalen Intervalls $[0,1]^k$ die Wahrscheinlichkeitsmasse eins. Zur anschaulicheren Parametrisierung von ERA gehen die Formparameter, in Abweichung zur üblichen Formulierung der Dirichletverteilung, über den Term $\exp(\gamma)$ ein.

Um die mehrdimensionale Funktion f_D auf die eindimensionale Funktion f_s abzubilden, werden die genannten Funktionsargumente $w_{1:k}$ als konvexe Wichtungsfaktoren aufgefasst. Sind die Ausgaben $x_{1:k}$ der einzelnen Ensemble-Member für einen Zeitpunkt gegeben, ergibt sich für jede mögliche Kombination der Wichtungsfaktoren eine Ensemble-Gesamtausgabe im Intervall $[\min(x_{1:k}), \max(x_{1:k})]$ nach:

$$\chi_{x_{1:k,t}}(w_{1:k}) = \sum_{i=1}^k w_i \cdot x_{i,t} \quad 5.10$$

Die benötigte Strukturdichte f_s resultiert aus der mehrdimensionalen Integration über f_D mit Gleichung 5.10 als Selektionskriterium:

$$f_{s(x_{1:k,t})}(z) = S(x_{1:k,t}) \cdot \int_{(0,1)^k} f_{D(y_{1:k})}(u_{1:k}) \cdot \mathbb{1}_{[\chi_{x_{1:k,t}}(u_{1:k})=z]} du_{1:k} \quad 5.11$$

Während Gleichung 5.9 der Bestimmung der punktuellen Wahrscheinlichkeitsdichte einer bestimmten Wichtung der Ensemble-Member dient, gibt Gleichung 5.11 die kumulierte Wahrscheinlichkeitsdichte aller Wichtungen der Ensemble-Member an, die einen bestimmten Abflusswert zur Folge haben. Das Fehlen eines analytischen Ausdrucks für die Normierungskonstante S ist für die in Abschnitt 5.1.4 beschriebene Methodenumsetzung unerheblich.

Der so definierte Ensemble Range Approach lässt sich wie folgt in die Maximum-Likelihood-Methodik einbetten:

$$\theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{t=1}^n \log \int f_{s(x_{1:k,t}(M_{1:k}(\theta_{M,1:k})), \theta_s)}(u) \cdot f_{\varepsilon(u, \theta_\varepsilon)}(\hat{y}_t - u) du \right) \quad 5.12$$

Θ ist der gesamte zur Optimierung freigegebene Parameterraum und θ^* der darin enthaltene Parametersatz, der zur höchsten Likelihood über n gemessene Abflusswerte \hat{y} führt. Der gesamte Parametersatz θ setzt sich zusammen aus θ_s (statistische Parameter der Strukturdichte), θ_ε (statistische Parameter der Abflussmessfehlerdichte) sowie $\theta_{M,1:k}$ (deterministische Parameter der k im Ensemble enthaltenen Modelle M).

Die k Modellausgaben $x_t(M(\theta_M))$ bestimmen, wie beschrieben, direkt die Form der Strukturdichte f_s . Darüber hinaus können sie indirekt die Form der Abflussmessfehlerdichte f_ε beeinflussen. Abflussmessfehler sind heteroskedastisch, d. h. ihre Streuung verändert sich mit der Zeit. Wird beispielsweise die Dichte der Normalverteilung f_N zur Charakterisierung der Messfehler herangezogen:

$$f_{N(u, c_1, c_2)}(z) = \frac{1}{\sigma(u) \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{z - u}{\sigma(u)} \right)^2 \right), \quad 5.13$$

dann oftmals unter der Annahme, dass deren Standardabweichung σ in linearer Abhängigkeit zum tatsächlichen Abfluss y steht:

$$\sigma(y) = c_1 + c_2 \cdot y, \quad 5.14$$

Da ERA über f_ε einen kontinuierlichen Bereich möglicher tatsächlicher Abflusswerte vorschlägt, resultiert aus Gleichung 5.14 die Verwendung eines Kontinuums von Normalverteilungen in jedem Zeitschritt mit verschiedener Varianz.

5.1.4 Methodenumsetzung

Die Anwendung von ERA bringt numerische Quadraturen mit sich, welche mit großem Rechenaufwand verbunden sind. In Tyralla und Schumann (2016a) wird dieser Aufwand durch eine pragmatische Modifizierung der Betaverteilung (univariate Dirichletverteilung) gering gehalten, welche die Flexibilität der Dichte auf äquidistanten Auswertungsstellen erhöht. Bei einer beliebigen Anzahl von Dimensionen (bzw. Modellen) erscheint dem Autor allerdings die folgende Umsetzungsstrategie praktikabler.

Zunächst wird eine große Anzahl (m) an dirichletverteilten Zufallsvektoren erzeugt. Nach Gelman et al. (2013), Appendix C, stehen hierfür zwei Standardverfahren zur Verfügung.

Beim ersten Verfahren werden für jeden Vektor k gammaverteilte Zufallszahlen (g) erzeugt nach der Dichte:

$$f_{G(\gamma_i, 1)}(z) = \frac{z^{\exp(\gamma_i) - 1} \cdot \exp(-z)}{\Gamma(\exp(\gamma_i))} \quad 5.15$$

In f_G geht der jeweils mit dem i -ten Ensemble-Member korrespondierende Formparameter γ der Dirichletverteilung ein. Aufgrund der Verwendung des Terms $\exp(\gamma)$ in Gleichung 5.9 weicht Gleichung 5.15 ebenfalls von der gängigen Formulierung der Gammaverteilung ab.

Ein dirichletverteilter Zufallsvektor (ω) resultiert aus der Normierung von k so gewonnenen gammaverteilten Zufallszahlen:

$$\omega_i = g_i / \sum_{i=1}^k g_i \quad 5.16$$

Beim zweiten Verfahren werden für die ersten $k - 1$ Einträge jedes Vektors betaverteilte Zufallszahlen (Φ) erzeugt nach der Dichte:

$$f_{B(\delta_1, \delta_2)}(z) = \frac{\Gamma(\exp(\delta_1) + \exp(\delta_2))}{\Gamma(\exp(\delta_1)) \cdot \Gamma(\exp(\delta_2))} \cdot z^{\exp(\delta_1)-1} \cdot (1-z)^{\exp(\delta_2)-1} \cdot \mathbb{1}_{[z \in [0,1]]} \quad 5.17$$

Zur Erzeugung von Φ_i berechnen sich die beiden Betaparameter (δ_1 und δ_2) aus den k Dirichletparametern ($\gamma_{1:k}$) jeweils über $\delta_1 = \gamma_i$ und $\delta_2 = \sum_{j=i+1}^k \gamma_j$. Man berücksichtige erneut die unübliche Verwendung des Terms $\exp(\gamma)$.

Die jeweils k dirichletverteilten Zufallszahlen (ω) ergeben sich aus den $k - 1$ betaverteilten Zufallszahlen nach:

$$\omega_i = \begin{cases} \Phi_1 & | \quad i = 1 \\ \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \omega_j\right) \cdot \Phi_i & | \quad 1 < i < k \\ 1 - \sum_{j=1}^{k-1} \omega_j & | \quad i = k \end{cases} \quad 5.18$$

Nach Gelman et al. (2013) ist die Erzeugung über f_G effizienter. Für ERA wird dennoch im Folgenden die Erzeugung über f_B bevorzugt. Zur Approximation von EDA nehmen die Dirichletparameter extrem kleine Werte an (was für gängige Anwendungen von f_D ungewöhnlich ist). Bei Verwendung von f_G kann dies dazu führen, dass die Summe über alle g im Nenner von Gleichung 5.16 im Rahmen der rechentechnischen Genauigkeit null ergibt. Die Erzeugung der dirichletverteilten Zufallszahlen über f_G bedürfte somit einer Ergänzung.

Zu erzeugen sind m dirichletverteilte Zufallsvektoren der Länge k ($\omega_{1:m,1:k}$), wobei m ein ganzzahliges Vielfaches der Zeitreihenlänge n sein soll. Zur Approximation der Struktur-dichte f_s lassen sich diese wie folgt in Gleichung 5.12 integrieren:

$$\theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{t=1}^n \log \left(\frac{1}{m/n} \cdot \sum_{i=t-n}^{t-n+m/n} f_{\varepsilon(\chi_{x_{1:kt}}(\omega_{i:1:k}), \theta_{\varepsilon})}(\hat{y}_t - \chi_{x_{1:kt}}(\omega_{i:1:k})) \right) \right) \quad 5.19$$

Basierend auf m/n Zufallsvektoren werden in jedem Zeitschritt unterschiedliche Approximationen von f_s verwendet. Dies soll die Genauigkeit der über alle Zeitschritte ermittelten Likelihood-Werte erhöhen. Um ferner den negativen Einfluss verbleibender Zufallseffekte auf gekoppelte Verfahren, insbesondere deterministische Kalibriermethoden, zu verringern, werden alle Zufallsvektoren möglichst konsistent generiert. Hierfür wird der Startwert (seed) des Zufallszahlengenerators des Moduls numpy von Python vor jeder neuen Bestimmung aller dirichletverteilten Zufallsvektoren mit null initialisiert. Damit kommen immer dieselben grundlegenden gleichverteilten Zufallszahlen in derselben Reihenfolge zum Einsatz.

Die optimale Anzahl der Zufallsvektoren ist schwer abzuschätzen, da sie sowohl von der Ensemble-Streuung als auch von der Dirichletparametrisierung abhängig ist. Allgemein gilt:

je größer die Ensemblestreuung und je gleichverteilter die Form der Dirichletverteilung, desto mehr Zufallsvektoren sind zur Erzielung einer gewünschten Approximationsgüte notwendig. Die veranschaulichenden Abbildungen in Abschnitt 5.1.5 wurden mit Hilfe von jeweils 10^5 Zufallsvektoren angefertigt. In den Anwendungen in Abschnitt 5.4 kommen jeweils 10^2 Zufallsvektoren pro Tag bzw. Stunde zum Einsatz, was insgesamt etwa $1,5 \cdot 10^5$ bzw. $3,5 \cdot 10^6$ Zufallsvektoren entspricht.

5.1.5 Veranschaulichung

Die Funktionsweise von ERA wird durch die folgenden Abbildungen veranschaulicht. Abbildung 5.3 zeigt die Anwendung auf 2-Modell-Ensembles analog zu den Teilabbildungen für EPA und EDA in Abbildung 5.1. Als Abflussmessfehlerdichte (f_ϵ) dient weiterhin die Normalverteilung. f_s ist schwarz gepunktet eingezeichnet, die Dichte der Abflussmessungen ($f_{\hat{y}}$) als Faltung von f_s mit f_ϵ rot durchgezogen.

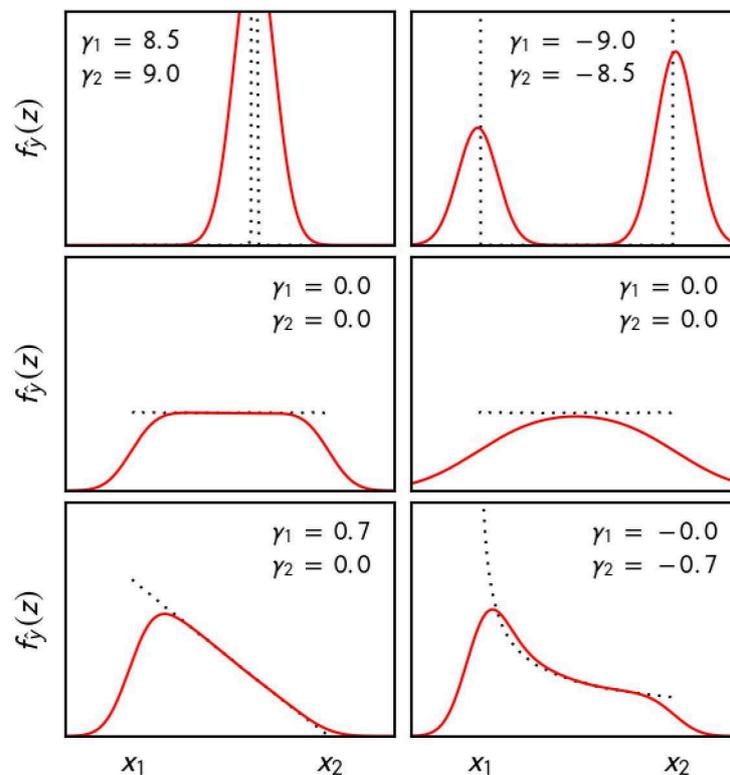


Abbildung 5.3: Veranschaulichung der Konstruktion der Wahrscheinlichkeitsdichte der Abflussmessung ($f_{\hat{y}}$, rote Linien) analog zu Abbildung 5.1, aber ausschließlich für den Ensemble Range Approach. Zusätzlich eingezeichnet sind die Wahrscheinlichkeitsdichte der Strukturunsicherheit f_s als gepunktete Linie sowie die zugehörigen Wichtungsfaktoren (γ) der Ensemble-Member.

Durch Belegung der beiden Formparameter γ_1 und γ_2 mit großen Werten wird EPA approximiert (oben links). Da $\gamma_1 \neq \gamma_2$ liegt die Strukturdichte f_s bzw. der vermutete tatsächliche Abfluss y nicht zentral zwischen den beiden Modellausgaben x_1 und x_2 , sondern ist zur

Ausgabe des höher gewichteten zweiten Ensemble-Members verschoben.

EDA wird dagegen durch Belegung der Formparameter mit kleinen Werten approximiert (oben rechts). Erneut ist $\gamma_2 > \gamma_1$. So findet der zweite Member stärkere Gewichtung, was in diesem Fall einer höheren Wahrscheinlichkeit der Modellausgabe x_2 entspricht.

In den mittleren Teilabbildungen nimmt f_s die Form einer Gleichverteilung an. Dies kann der Abbildung kontinuierlich ineinander übergehender Formen von Prozessunsicherheit dienen. Links überwiegt die Struktursicherheit die Messunsicherheit, wodurch sich die Form von f_s deutlich in der Form von $f_{\hat{y}}$ wiederfindet. Nicht so im rechts dargestellten Fall, in dem die Messunsicherheit die Strukturunsicherheit überwiegt. Hier spiegelt $f_{\hat{y}}$ primär die Messunsicherheit, ein Rückschluss auf die zugrundeliegende Strukturunsicherheit ist kaum möglich.

Die beiden unteren Teilabbildungen veranschaulichen zwei weitere mögliche Parametrisierungen für kontinuierlich ausgebildete Prozessunsicherheiten, wobei der erste Ensemble-Member jeweils die dominantere Rolle einnimmt.

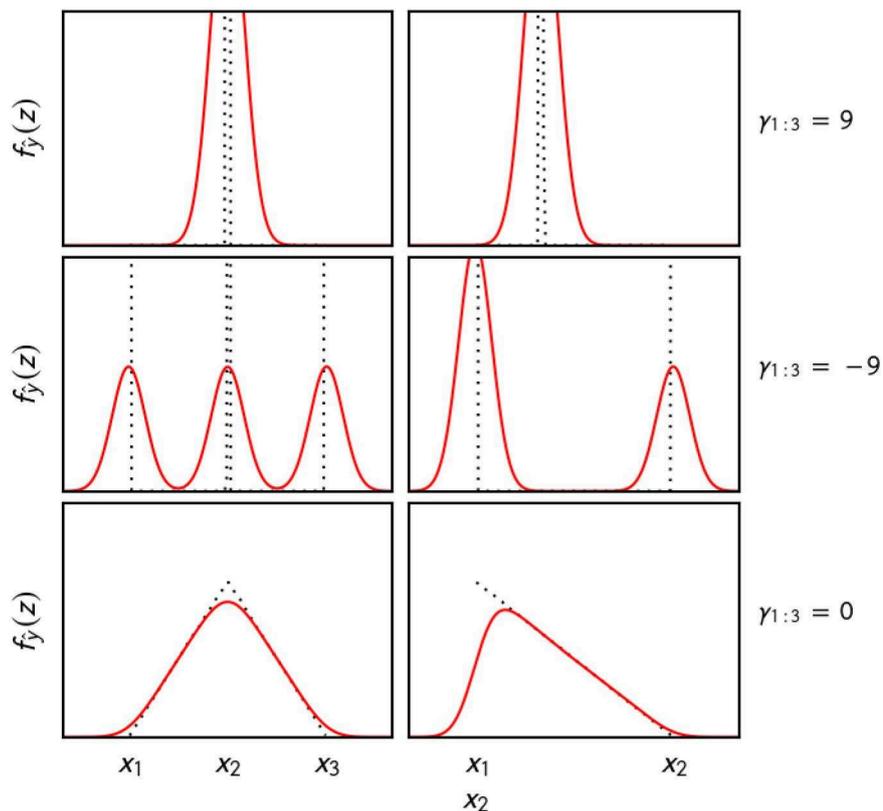


Abbildung 5.4: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 3-Modell-Ensembles.

Abbildung 5.4 veranschaulicht die Funktionsweise von ERA für 3-Modell-Ensembles. Mit jeweils identischer Wichtung aller Ensemble-Member wird oben EPA und in der Mitte EDA

approximiert. Für die EPA-Approximation hat die Verschiebung der Ausgabe des zweiten Members (x_2) aus der Mitte von x_1 und x_3 (link Teilabbildung) hin zu x_1 (rechte Teilabbildung) einen Versatz von f_s zur Folge hat. Bei der EDA-Approximation kommt es dagegen zur Überlagerung der „Einzeldichten“ von x_1 und x_2 .

In den beiden unteren Teilabbildungen ist die Dichte der zugrundeliegenden Dirichletverteilung infolge der Belegung aller Formparameter mit null identisch für alle möglichen Wichtungskombinationen. Dennoch ist f_s nicht gleichverteilt in $[x_1, x_3]$. Die Position von x_2 im Intervall korrespondiert mit einer Zunahme an Kombinationsmöglichkeiten der Ausgabe-werte der drei Ensemble-Member und somit mit einem Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte.

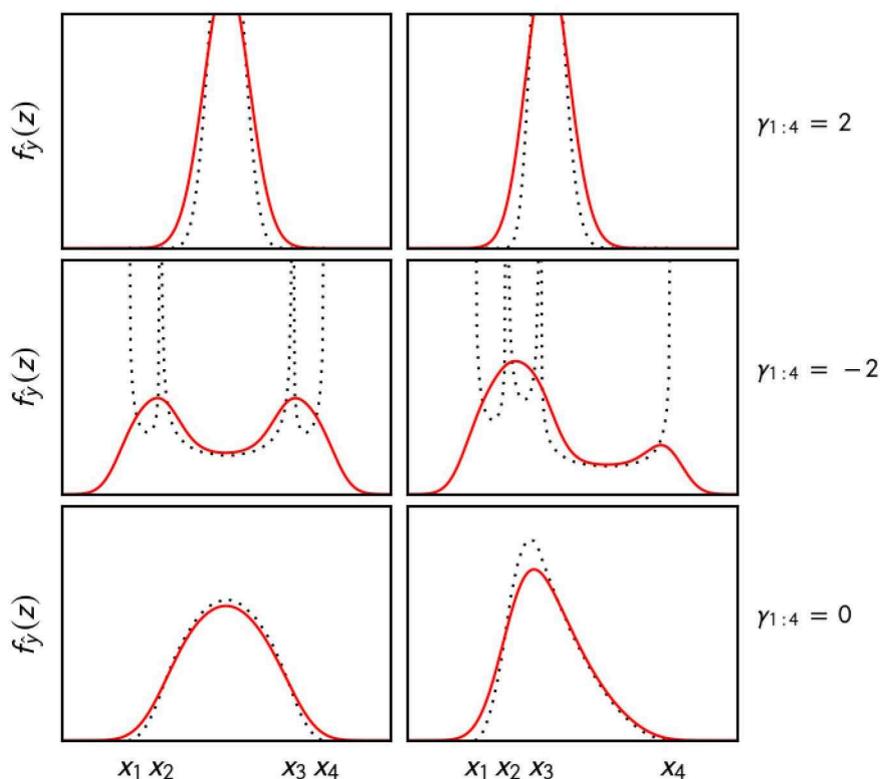


Abbildung 5.5: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 4-Modell-Ensembles.

Abbildung 5.5 veranschaulicht die Anwendung von ERA auf 4-Modell-Ensembles. Durch die (im Vergleich zu Abbildung 5.4) moderate Belegung der Formparameter mit zwei (oben) nähert sich ERA nur grob an EPA an. Die Strukturdichte f_s ist nicht auf ein bestimmtes Wichtungsverhältnis konzentriert, sondern nimmt einen größeren Bereich möglicher Wichtungen ein. Dies ist z. B. dann als plausibel zu erachten, wenn räumliche Prozessheterogenität unzureichend berücksichtigt ist und einzelne Prozessgefüge in einem zeitvariablen Verhältnis zum Gesamtabfluss beitragen.

Die Belegung aller Formparameter mit minus zwei ordnet den vier Modellausgaben die höchsten Wahrscheinlichkeitsdichten zu (Mitte). Im Gegensatz zur vollständigen Approximation von EDA sind auch sämtliche Kombinationsfälle mit einer relevanten Dichte versehen. Dies erscheint z. B. dann plausibel, wenn verschiedene Witterungen aufeinanderfolgen, die unterschiedliche hydrologische Prozessbeschreibungen erfordern und deren Änderungsfrequenz in Relation zur hydrologischen Persistenz hoch ausfällt.

Durch die Belegung der Formparameter mit null werden alle möglichen Kombinationen der vier Modellausgaben als gleich wahrscheinlich eingestuft (unten). Die Strukturdichte fällt umso größer aus, je stärker sich die einzelnen Ausgaben der Ensemble-Member an der betrachteten Stelle ballen.

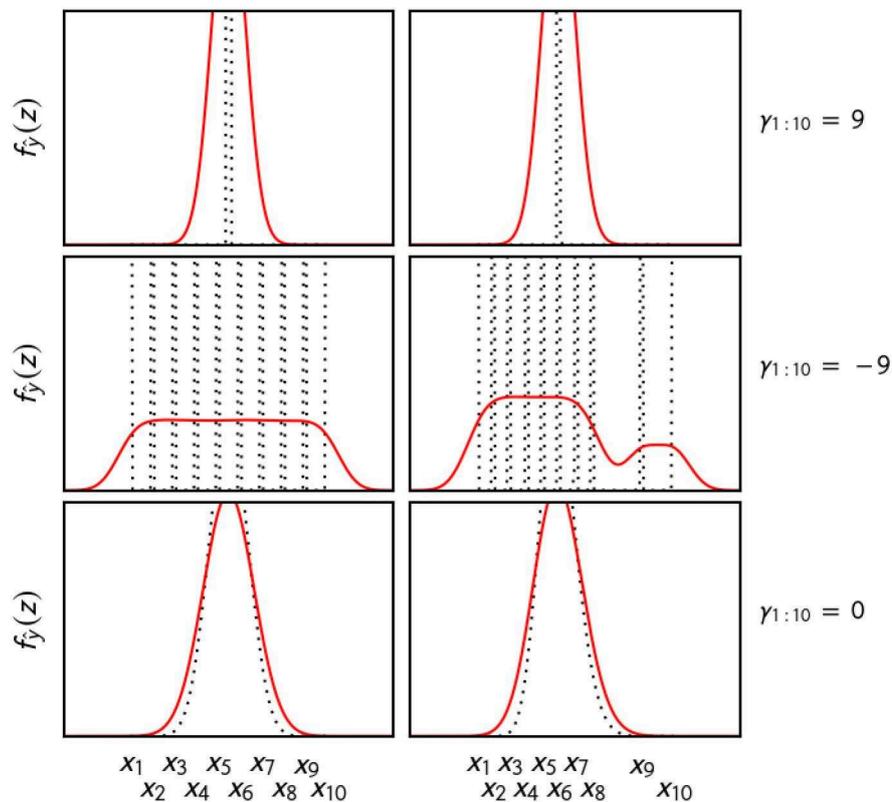


Abbildung 5.6: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 10-Modell-Ensembles.

Als letzte Veranschaulichung zeigt Abbildung 5.5 die Anwendung von ERA auf ein 10-Modell-Ensemble. Auch bei Verwendung größerer Ensembles werden EPA und EDA wie gewünscht approximiert. Bei Belegung aller Formparameter mit Null nimmt die Strukturdichte f_s im Randbereich der Ensemblespannweite Werte nur geringfügig größer null an, da relativ wenige Modellwichtigungen zu den korrespondierenden Abflusswerten führen.

5.2 Alternative Methoden

Abschritt 5.1 führt den Ensemble Range Approach (ERA) im Kontext der klassischen Ensemble-Modellierung ein. Die Idee hierzu entstand hingegen aus der Beschäftigung des Autors mit Verfahren, die in der hydrologischen Modellierung zumeist zur Berücksichtigung der Parameterunsicherheit dienen. Vier dieser etablierten Verfahren werden im Folgenden in den für diese Arbeit relevantesten Aspekten beschrieben und in Abschnitt 5.3 anhand einfacher synthetischer Fallstudien mit ERA verglichen.

5.2.1 Pareto-Optimierung

Gupta et al. (1998) und Yapo et al. (1998) schlagen vor, hydrologische Modelle multikriteriell nach dem Prinzip der Pareto-Optimalität zu kalibrieren. Efstratiadis und Koutsoyiannis (2010) diskutieren die Stärken und Schwächen dieses Ansatzes im Rahmen einer Literaturübersicht über zahlreiche Anwendungsstudien. Während die effiziente Methodenumsetzung komplizierte Algorithmen erfordert (z. B. Vrugt und Robinson 2007a), ist der Grundgedanke der Pareto-Optimierung – den genannten Autoren folgend – leicht erläutert.

Üblicherweise erfolgt die algorithmische Parameterkalibrierung anhand einer einzelnen Zielfunktion, die es zu minimieren oder maximieren gilt. Die Zielfunktion aggregiert alle Residuen (Abweichungen zwischen der simulierten und der gemessenen Zielgröße) in eindeutiger Form. Für ERA ist dies beispielsweise die Likelihoodfunktion in Gleichung 5.12. An der inhaltlichen Richtigkeit einer solchen Likelihood-Funktion besteht in Anbetracht gravierender Daten- und Modellunsicherheiten in der hydrologischen Modellierung grundsätzlich Zweifel.

Das Prinzip der Pareto-Optimalität gestattet die gleichzeitige Berücksichtigung mehrerer Zielkriterien, ohne diese zusammenfassen zu müssen. Stattdessen wird ein großes Parameter-Ensemble gebildet, welches die sogenannte Pareto-Front approximiert. Ein Parametersatz gehört dann zur Pareto-Front, wenn jede Verbesserung eines der Zielkriterien mit einer Verschlechterung wenigstens eines anderen Zielkriteriums einhergehen muss. Die vollständige Pareto-Front umfasst somit die Optima aller einzelnen Zielkriterien wie auch die Optima aller möglichen konvexen Kombinationen der einzelnen Zielkriterien.

Die Pareto-Optimalität entbindet den Modellanwender somit von der Notwendigkeit, sich auf eine einzelne Zielfunktion festlegen zu müssen. Dies erscheint insbesondere dann hilfreich, wenn mehrere Vergleichsmessungen (neben dem Abfluss z. B. der Grundwasserstand) in die Kalibrierung eingehen sollen. Zudem kann die Gestalt der Pareto-Front hinsichtlich des Ausmaßes und der Ursachen der vorliegenden Simulationsunsicherheit informativ sein (siehe Efstratiadis und Koutsoyiannis 2010 sowie die hierin zitierten Quellen). Gleiches gilt prinzipiell für die Gestalt der mit der Pareto-Front verknüpften Bänder der Simulationsunsicherheit, wobei diese aufgrund ihres fehlenden Bezugs zu Wahrscheinlichkeiten nicht frei von Interpretationsschwierigkeiten sind (Reichert und Schuwirth 2012).

5.2.2 Generalized Likelihood Uncertainty Estimation

1992 von Beven und Binley eingeführt, ist die Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode (GLUE) heute eine der am häufigsten eingesetzten Methoden zur Handhabung der Parameterunsicherheit hydrologischer Modelle (Beven und Binley 2014). Allerdings wird GLUE nicht nur häufig verwendet, sondern auch kritisch diskutiert. Hierbei stehen zu meist deren Subjektivität und geringe formale Strenge im Vordergrund; siehe z. B. Montanari (2005), Mantovan und Todini (2006) sowie die Diskussionsbeiträge zu Beven (2006b). Nichtsdestotrotz machen – neben der großen Verbreitung – die Einfachheit und Transparenz sowie die lose Anbindung an die Bayessche Statistik (Sadegh und Vrugt 2013) GLUE zu einer interessanten Referenzmethode, die sich überdies fundamental vom Ansatz der Pareto-Optimalität unterscheidet (Engeland et al. 2006).

Die Anwendung von GLUE lässt sich wie folgt zusammenfassen. Für jeden Modellparameter ist zu entscheiden, ob und wenn in welchem Intervall er variieren soll. Aus dem so definierten Parameterraum wird eine große zufällige Stichprobe von Parametersätzen gewonnen, wobei die einzelnen Parameterwerte jeweils gleichverteilt und voneinander unabhängig gezogen werden. Für jeden Parametersatz wird mit Hilfe einer zu wählenden Zielfunktion eine Simulationsgüte bestimmt. Von jeder Güte wird ein ebenfalls zu wählender Grenzwert abgezogen. Parametersätzen mit einer negativen modifizierten Güte wird eine Likelihood von null zugeordnet. Die Likelihood-Werte der übrigen Parametersätze ergeben sich durch die Normierung derer modifizierten Güten auf die Summe eins. Über die Interpretation dieser GLUE-spezifischen Likelihood-Werte als Wahrscheinlichkeiten lassen sich Unsicherheitsbänder der simulierten Zielgrößen ermitteln.

Die vergleichsweise offene Definition von GLUE erlaubt zahlreiche Abweichungen oder Ergänzungen des genannten Schemas. Beispielsweise ließen sich mehrere Modellstrukturen oder informativere a-priori-Verteilungen in die Analyse einbeziehen.

5.2.3 Dynamic Identifiability Analysis

Die von Wagener et al. (2003) vorgeschlagene Dynamic Identifiability Analysis (DYNIA) beinhaltet eine Modifikation der in Abschnitt 5.2.2 beschriebenen GLUE-Methode. Statt jedem Parametersatz einen Likelihood-Wert für den gesamten betrachteten Zeitraum zuzuordnen, erfolgt dies getrennt für mehrere aufeinanderfolgende Zeitfenster. Anschließend wird über das Aggregieren der Likelihood-Werte in Parameterwertklassen für jedes Zeitfenster der zeitliche Verlauf der approximativen Wahrscheinlichkeitsverteilung einzelner Parameter graphisch dargestellt.

Wie eine Reihe anderer zeitvariabler Varianten von Sensitivitätsanalysen (Choi und Beven 2007, Herman et al. 2013, Reusser et al. 2009, Reusser und Zehe 2011) dient DYNIA der Ausweisung von Zeiträumen mit guter Identifizierbarkeit verschiedener Parameter. Darüber hinaus können diese Zeiträume auf ihre Konsistenz hin untersucht werden. Treten systematische Unterschiede in der optimalen Belegung eines Parameters bei unterschiedlichen Be-

dingungen auf, kann dies auf strukturelle Defizite der damit verbundenen Modellkomponente hindeuten.

5.2.4 Partikel-Filterung

In sensitivitätsorientierten Monte-Carlo-Ansätzen wie DYNIA (Abschnitt 5.2.3) wird jede einzelne Simulationsrechnung mit einem festen Parametersatz durchgeführt. So kann z. B. die Ineffizienz eines reinen Hochwasser-Parametersatzes bei Niedrigwasser dessen Effizienz beim nachfolgenden Hochwasser schmälern. Dieses Problem lässt sich durch die dynamische Variation von Parametern und/oder Systemzuständen innerhalb des Simulationszeitraums reduzieren.

Frühe hydrologische Anwendungen spezifischer Techniken, z. B. des Kalman-Filters, zielten auf die Verbesserung von Prognosen ab (siehe die Zusammenfassung in Vrugt und Robinson 2007b). Im Rahmen der heutigen Rechenkapazitäten scheint allerdings auch die Identifikation struktureller Unsicherheiten nichtlinearer Modelle mit allgemeineren Filter-Techniken durchführbar. Beispiele hierfür sind die Implementierung von Modellparametern als stochastische Prozesse nach Reichert und Mieleitner (2009) sowie die Adaption von Partikel-Filtern (z. B. Moradkhani 2005). In dieser Arbeit sei der letztere Ansatz in der Umsetzung von Smith et al. (2008a) näher diskutiert.

Partikel-Filter sind auf dem Bayesschen Theorem aufbauende sequenzielle Monte-Carlo-Methoden (Arulampalam et al. 2002). Als „Partikel“ wird ein einzelnes Modell samt all seiner Spezifikationen bezeichnet. Zunächst wird ein großes Partikel-Ensemble gebildet. Jeder Partikel erhält einen eigenen Satz an Parametern und Zuständen, zufällig zu ziehen aus zu definierenden a-priori-Verteilungen. Der Simulationszeitraum wird in Aktualisierungsintervalle aufgeteilt. Auf jedes dieser Intervalle werden die folgenden vier Operationen angewandt (ausführlichere Erklärungen samt formaler Notation finden sich in Smith et al. 2008a).

Erstens werden sowohl die Parameter- als auch die Zustandswerte jedes Partikels mittels eines Random Walk gestört. Zweitens wird hiervon ausgehend eine Simulationsrechnung bis zum Intervallende durchgeführt, was eine weitere Modifikation der Zustände jedes Partikels bewirkt. Drittens wird die Akzeptanzwahrscheinlichkeit jedes Partikels anhand des Vergleiches zwischen der simulierten und der gemessenen Zielgröße im Intervall ermittelt. Viertens wird ein neues Ensemble für das nächste Intervall gebildet. Hierfür werden, bis zum Erreichen der alten Ensemble-Größe, Partikel mit gleicher Wahrscheinlichkeit aus dem alten Ensemble gezogen (mit zurücklegen) und mit ihrer Akzeptanzwahrscheinlichkeit übernommen.

Durch die wiederholte Anwendung dieser Operationen auf die aufeinanderfolgenden Aktualisierungsintervalle werden die gut zur Problembeschreibung geeigneten Partikel tendenziell vermehrt und die weniger gut geeigneten tendenziell eliminiert. Die gesuchten a-posteriori-Verteilungsfunktionen werden umso besser approximiert, je länger dieser Prozess bei einem nicht zu dynamischen Systemverhalten voranschreitet.

Ein großer Vorteil der Partikel-Filterung ist, dass beliebige, ggf. multimodale a-posteriori-Verteilungen approximiert werden können. Damit geht allerdings, im Vergleich zur für die hydrologische Modellierung zu restriktiven Kalman-Filterung, eine relativ geringe Effizienz einher (Arulampalam et al. 2002). Zudem sind eine Reihe von Annahmen zur Durchführung der genannten Operationen zu treffen (siehe Abschnitt 5.3.3).

5.3 Synthetische Fallstudien

Dieser Abschnitt greift die synthetischen Fallstudien von Tyralla und Schumann (2016a) auf. Diese sollen, erstens, die Funktionsfähigkeit der Implementierung des Ensemble Range Approach (ERA) belegen. Vergleichsrechnungen mit den Ausgangsmethoden aus Abschnitt 5.1.1 sollen, zweitens, die Wirkungsweise von ERA veranschaulichen. In Ergänzung zu Tyralla und Schumann (2016a) sollen, drittens, Vergleichsrechnungen mit den Referenzmethoden aus Abschnitt 5.2 die möglichen Vor- und Nachteile von ERA gegenüber gängigen hydrologischen Strategien zur Handhabung von Prozessunsicherheit beleuchten.

5.3.1 Studienaufbau

In allen synthetischen Fallstudien findet das folgende Modell Verwendung:

$$\frac{dS}{dt} = P_{eff}(t) - Q(t) = P_{eff}(t) - k \cdot S(t)^2 \quad 5.20$$

Dieser Abflusskonzentrationsansatz transformiert den eingehenden Effektivniederschlag (P_{eff}) entsprechend der jeweils aktuellen Speicherung (S) nichtlinear in Abfluss (Q). Zur Beschränkung auf nur einen Modellparameter, der Speicherkonstante k , bleiben alle anderen hydrologischen Prozesse außen vor. Das Modell ist zur einfachen Illustration der Identifikation nichtlinearer Prozesse geeignet, jedoch nicht zur Illustration von Unsicherheiten infolge von Parameterinteraktionen.

Für alle Fallstudien wird dieselbe, willkürlich gewählte Gebietsniederschlagsreihe (die des oberen Neckars, siehe Abschnitt 3.3) als wahre (effektive) Gebietsniederschlagsreihe herangezogen. Grundsätzlich sei angenommen, im hypothetischen Einzugsgebiet reagieren zwei separate Prozessstrukturen auf diesen Niederschlag. Beide lassen sich durch Gleichung 5.20 perfekt repräsentieren, allerdings nur mit unterschiedlicher Parametrisierung. Die wahren Parameterwerte beider Prozessstrukturen seien $10^{-3} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ (k_1) und $10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ (k_2).

Tabelle 5.1 stellt vier Szenarien dar, in denen die beiden Prozessstrukturen unterschiedlich zum wahren Abfluss des Gesamtgebietes (y) beitragen. Für Szenario A wird angenommen, bei räumlich gleicher Niederschlagsverteilung reagieren 50% der Fläche des Einzugsgebietes gemäß k_1 und 50% gemäß k_2 . Szenario B geht dagegen von einer zeitlichen Prozessabfolge aus, bei der die erste Hälfte des Zeitraums allein von k_1 und die zweite allein von k_2 geprägt wird.

Tabelle 5.1: Konstruktion und Benennung der synthetischen Fallstudien.

Szenario	Konstruktionsmechanismus	Variante 1	Variante 2
	tatsächlicher Niederschlag und Abfluss: P und y Ausgaben beider Modelle: x_1 und x_2	Niederschlagsmessung... ...mit Bias	...ohne Bias
A	$y = 1/2 \cdot x_1(P) + 1/2 \cdot x_2(P)$	A1	A2
B	$y_{1:n/2} = x_1(P)_{1:n/2}; y_{n/2:n} = x_2(P)_{n/2:n}$	B1	B2
C	$y = \alpha \cdot x_1(P) + (1 - \alpha) \cdot x_2(P)$	C1	C2
D	$y = 1/2 \cdot x_1(2 \cdot \alpha \cdot P) + 1/2 \cdot x_2(2 \cdot (1 - \alpha) \cdot P)$	D1	D2

Die Szenarien C und D repräsentieren variabelere Prozesskombinationen. Hierfür wird eine Zeitreihe von Wichtungsfaktoren (α) generiert, die im Intervall $[0,1]$ annähernd gleichverteilt ist und bei einem Lag von einer Stunde einen Autokorrelationskoeffizienten von 0,95 aufweist. Bei Szenario C werden diese Wichtungsfaktoren auf die Modellausgaben angewandt, bei Szenario D dagegen auf den eingehenden Niederschlag. Ersteres ließe sich als kontinuierliche Änderung des Dominanzverhältnisses beider Prozessstrukturen aus unbekanntem Grund auffassen; letzteres als kontinuierliche Änderung des Aktivierungsverhältnisses beider Prozessstrukturen infolge der zeitlichen Variation der räumlichen Niederschlagsverteilung.

Die entsprechend Tabelle 5.1 synthetisierten Abflussreihen werden mit ebenfalls synthetischen Abflussmessfehlern verfälscht. Hierfür wird eine Reihe normalverteilter, homoskedastischer und unkorrelierter Zufallszahlen erzeugt. Deren wahre Standardabweichung (σ) beträgt $0,015 \text{ m}^3/\text{s}$, was etwa 11 % der Standardabweichung von $x_1(P)$ und etwa 19 % der Standardabweichung von $x_2(P)$ gleichkommt.

Die beiden folgenden Abschnitte untersuchen, inwiefern verschiedene Methoden die Identifikation von k_1 , k_2 und σ ermöglichen. Dies wird für jedes Szenario in zwei Varianten getestet. In der ersten Variante steht die wahre Gebietsniederschlagsreihe zur Verfügung; in der zweiten Variante werden die Eingangsdaten durch die Multiplikation aller wahren Niederschlagswerte mit dem Faktor 0,95 systematisch verfälscht. Die Art der statistischen Verteilung der Abflussmessfehler (jedoch nicht das Ausmaß der Streuung) sei grundsätzlich als bekannt vorausgesetzt. Die Parameterschätzung erfolgt in allen acht Fällen (A1 bis D2) über einen Zeitraum von vier Jahren.

5.3.2 Anwendung der Ensembletechniken

Dieser Abschnitt legt dar, inwiefern sich die diskutierten Ensemblemethoden zur Identifikation der wahren hydrologischen Prozessgefüge sowie der wahren Datenunsicherheit der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen synthetischen Fallstudien eignen. Die folgenden Tabellen geben jeweils die Maximum-Likelihood-Schätzungen der Prozessparameter (\hat{k}_1 und \hat{k}_2) sowie der Standardabweichung der Abflussmessfehler ($\hat{\sigma}$) an. Die in der Szenarienkonstruktion

verwendeten Werte betragen für diese $10^{-3} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ und $10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ sowie $0,015 \text{ m}^3/\text{s}$. Die Einfachheit der Szenarien erlaubt, Optimierfehler als Ursache der Diskrepanzen zwischen diesen „wahren“ Werten und ihren Maximum-Likelihood-Schätzungen auszuschließen.

Als Referenz sei zunächst der in Abschnitt 5.1.1 definierte Single Model Approach (SMA) angewandt. Selbstverständlich kann SMA nicht beide Prozessgefüge zugleich identifizieren. Nach Tabelle 5.2 variiert die Schätzung des Modellparameters zwischen $3 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ und $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$. \hat{k} liegt somit in allen Szenarien etwa mittig zwischen den beiden wahren Parameterwerten. Infolge der fehlenden expliziten Berücksichtigung der Prozessunsicherheit, schätzt SMA die Datenunsicherheit grundsätzlich zu groß ein. In Szenario A ist dieser Kompensationseffekt am geringsten und in Szenario B am stärksten ausgeprägt. Diesbezüglich scheint die Verwendung eines effektiven Parametersatzes zur Adressierung räumlich ausgeprägter Prozessunsicherheit gangbarer als zur Adressierung zeitlich ausgeprägter Prozessunsicherheit. Die systematische Verfälschung der Niederschlagsmessung bewirkt keine signifikante Änderung von $\hat{\sigma}$, aber eine moderate Erhöhung von \hat{k} .

Tabelle 5.2: Maximum-Likelihood-Schätzung, SMA.

Parameter	A1	B1	C1	D1	A2	B2	C2	D2
$\hat{\sigma} (10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1})$	1,92	4,60	2,85	3,38	1,90	4,59	2,83	3,38
$\hat{k} (10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1})$	3,73	3,58	3,69	4,05	4,37	4,20	4,32	4,75

Der Ensemble Point Approach (EPA) beschreibt in Szenario A1 sowohl die beiden Prozessgefüge als auch die Datenunsicherheit befriedigend (Tabelle 5.3). Verbleibende kleinere Diskrepanzen sind auf den Zufallseffekt der Abflussmessfehler zurückzuführen. Der systematische Eingangsdatenfehler in Szenario A2 beeinträchtigt die Schätzung der Prozessparameter stärker als die Schätzung der Streuung der Abflussmessfehler. In den Szenarien B1 bis D1 weichen \hat{k}_1 und \hat{k}_2 deutlich, aber nicht gravierend und in jedem Fall mit derselben Tendenz von den wahren Parameterwerten ab. Die Überschätzung der wahren Datenunsicherheit durch $\hat{\sigma}$ ist dagegen fast genauso stark ausgeprägt wie bei Anwendung von SMA.

Tabelle 5.3: Maximum-Likelihood-Schätzung, EPA.

Parameter	A1	B1	C1	D1	A2	B2	C2	D2
$\hat{\sigma} (10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1})$	1,50	4,43	2,60	3,14	1,65	4,48	2,69	3,23
$\hat{k}_1 (10^{-3} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1})$	0,99	1,32	0,89	1,22	1,19	1,69	1,09	1,44
$\hat{k}_2 (10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1})$	0,98	1,32	0,86	1,23	1,61	2,02	1,53	1,88

So wie EPA – bei adäquater Methodenimplementierung zu erwarten – die genaueste Parameteridentifikation im „räumlichen“ Szenario A1 erzielt, ist dies für den Ensemble Density

Approach (EDA) im „zeitlichen“ Szenario B1 der Fall (Tabelle 5.4). Die Belegung der Eingangsdaten mit einem systematischen Fehler (Szenario B2) führt ebenfalls zur Überschätzung aller Parameterwerte. Es zeigen sich allerdings auch zwei abweichende Phänomene. Erstens fällt die Überschätzung der Streuung der Abflussmessfehler, mit Ausnahme von Szenario A, deutlich geringer aus. EDA setzt die geschätzte Prozessunsicherheit unmittelbar zu Simulationsunsicherheit um, was die fälschliche Zuordnung der Prozessunsicherheit zur Datenunsicherheit begrenzt. Zweitens weichen \hat{k}_1 und \hat{k}_2 nicht immer in dieselbe Richtung ab (Unter- oder Überschätzung sowohl von k_1 als auch von k_2), sondern in die tatsächliche Parameterspanne hinein (Unterschätzung von k_1 und Überschätzung von k_2). EDA versucht gewissermaßen, den Bereich der Prozessunsicherheit zentral abzudecken. Die tatsächliche Prozessheterogenität im Gebiet wird dadurch unterrepräsentiert.

Tabelle 5.4: Maximum-Likelihood-Schätzung, EDA.

Parameter	A1	B1	C1	D1	A2	B2	C2	D2
$\hat{\sigma}$ ($10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$)	1,75	1,50	2,14	2,36	1,72	1,73	2,16	2,34
\hat{k}_1 ($10^{-3} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$)	0,42	1,00	0,57	0,95	0,49	1,16	0,68	1,16
\hat{k}_2 ($10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$)	2,60	1,01	2,13	2,66	2,97	1,19	2,53	3,10

Die Ergebnisse in Tabelle 5.5 für die Szenarien A1 und B1 zeigen, dass die Implementierung von ERA tatsächlich sowohl EPA als auch EDA ausreichend genau zu verallgemeinern imstande ist. In beiden Fällen werden die Prozessparameter sowie die Streuung der Abflussmessfehler befriedigend identifiziert. Gleiches gilt für das Szenario C1. Sogar bei der kontinuierlichen Variation des Dominanzverhältnisses beider Prozesse lassen sich diese samt der Datenunsicherheit korrekt identifizieren. Seine Schranke findet ERA in Szenario D1. Die zeitvariable Modifikation der Eingangsdaten der Ensemble-Member tritt in Wechselwirkung mit der Nichtlinearität der Prozesse, was ERA nicht zu berücksichtigen imstande ist. Die resultierende Überschätzung der Streuung der Abflussmessfehler fällt nichtsdestotrotz vergleichsweise moderat aus, die Überschätzung der Werte der Prozessparameter dagegen stärker als bei der Anwendung von EPA.

Tabelle 5.5: Maximum-Likelihood-Schätzung, ERA.

Parameter	A1	B1	C1	D1	A2	B2	C2	D2
$\hat{\sigma}$ ($10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$)	1,50	1,50	1,51	1,78	1,64	1,73	1,64	1,88
\hat{k}_1 ($10^{-3} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$)	0,99	1,00	1,00	1,73	1,18	1,12	1,08	1,98
\hat{k}_2 ($10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$)	0,97	0,99	1,00	1,53	1,60	1,12	1,38	2,11

Es sei angemerkt, dass die in diesem Abschnitt gegebenen Maximum-Likelihood-Schätzungen Tyralla und Schumann (2016a) entnommen sind. Tabelle 5.5 beruht somit auf der darin vorgeschlagenen Umsetzung von ERA auf Basis einer modifizierten Betaverteilung. Die in dieser Arbeit vorgeschlagene Umsetzung von ERA führte in Testrechnungen zu Ergebnissen, die von den dargestellten in nicht relevantem Maße abweichen.

5.3.3 Anwendung der Parametertechniken

In Abschnitt 5.3.2 erschließt ERA die Unsicherheitsquellen der in Abschnitt 5.3.1 konstruierten Szenarien A1 bis C1 einwandfrei. In Szenario D1 sind zwar die Maximum-Likelihood-Schätzungen signifikant verfälscht. Davon abgeleitete, tendenzielle Aussagen über die Form der Prozessunsicherheit sowie die Relation von Prozess- und Datenunsicherheit wären aber dennoch zutreffend. Dieser Abschnitt stellt die Frage, inwiefern sich die in der hydrologischen Forschung etablierten Methoden aus Abschnitt 5.2 zur Analyse der Unsicherheitsquellen dieser Szenarien eignen.

In jeder dieser Methoden ist die graphische Analyse von zentraler Bedeutung. Daher sei als Referenz zunächst die Anwendung von ERA mittels Abbildung 5.7 visualisiert. Diese und die folgenden äquivalenten Abbildungen stellen einen Teilzeitraum von 120 Tagen dar, der etwa in der Mitte des Kalibrierzeitraums liegt. Der wahre Abfluss (ohne Messfehler) ist jeweils rot dargestellt. Die Strukturdichte, d. h. die mögliche Lage des wahren Abflusses nach ERA, ist in Grautönen dargestellt – je dunkler, desto höher die Wahrscheinlichkeitsdichte.

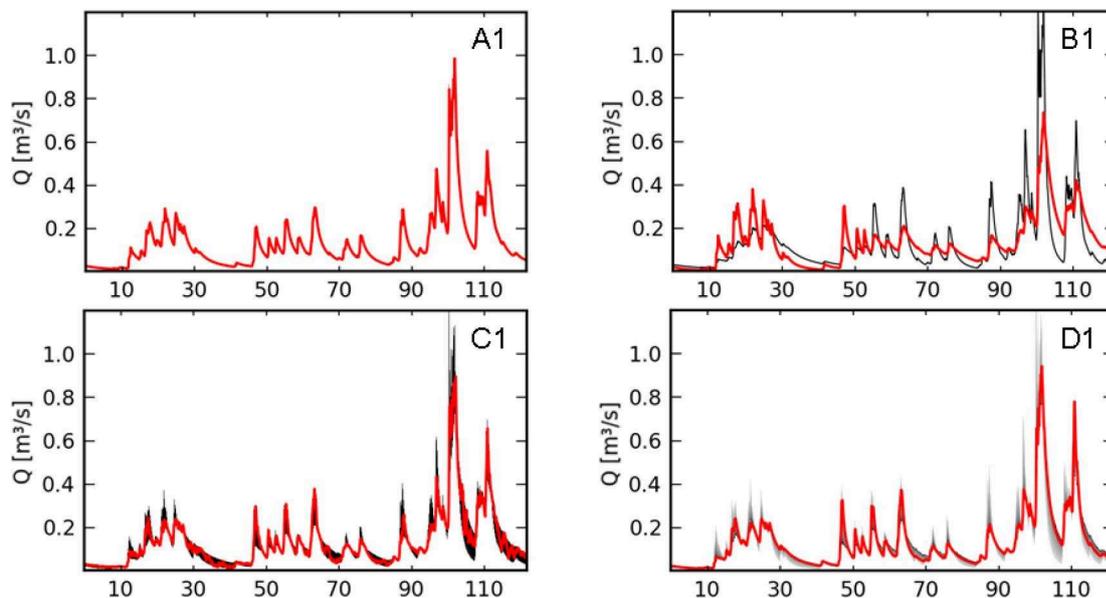


Abbildung 5.7: Veranschaulichung der Wirkungsweise des Ensemble Range Approach. In allen vier Teilabgebildungen ist der wahre Abfluss des jeweiligen Szenarios (A1, B1, C1, D1) über denselben Zeitraum von 120 Tagen als rote Linie dargestellt. Das aus der Strukturdichte gewonnene Unsicherheitsband ist, teils verdeckt, in Grautönen eingezeichnet, wobei dunklere Grautöne höheren Wahrscheinlichkeitsdichten entsprechen.

In Szenario A1 approximiert ERA, dem „räumlichen“ Charakter des Szenarios folgend, EPA. Die gesamte Masse der Strukturdichte konzentriert sich zu jedem Zeitpunkt annähernd an einem Abflusswert. Da ERA die Prozessunsicherheit perfekt repräsentiert, verschwindet die Linie der aufeinanderfolgenden Strukturdichten exakt hinter der Linie des wahren Abflusses.

In Szenario B1 approximiert ERA dagegen EDA und gibt für jeden Zeitpunkt zwei (in diesem Fall gleich wahrscheinliche) mögliche Werte des wahren Abflusses an. Die Ausgabe des aktuell zutreffenden Ensemble-Members wird stets von der Linie des wahren Abflusses verdeckt, sodass immer nur die Ausgabe des nicht zutreffenden Members erkennbar ist. So ist etwa bis zum 56. Tag das dynamischere Prozessgefüge aktiv, aber allein die Ausgabe des trägeren Members ersichtlich; danach gilt das Gegenteil.

In Szenario C1 nimmt die Strukturdichte die annähernde Gleichverteilung der Wichtungsfaktoren an, welche die beiden hydrologischen Prozessgefüge zeitvariabel kombinieren. Die Grenzen der Gleichverteilung entsprechen der ebenfalls in der Teilabbildung für Szenario B1 ersichtlichen Ensemble-Spanne. Der wahre Abfluss ist zu jedem Zeitpunkt darin enthalten.

In Szenario D1 weicht die Ensemble-Spanne zutreffenderweise leicht von derjenigen der anderen Szenarien ab. Die Strukturdichte weist statt der Gleichverteilung eine deutliche Schiefe auf. Die wahren Abflusswerte werden hiervon gut, aber nicht perfekt repräsentiert (einzelne Werte liegen außerhalb der Ensemble-Spanne).

Zur Anwendung des Prinzips der Pareto-Optimalität (siehe Abschnitt 5.2.1) sind wenigstens zwei Gütekriterien heranzuziehen. Da die Szenarien keine alternativen Messgrößen enthalten, sind mehrere unterschiedliche Zielfunktionen zur Bewertung der Abweichungen zwischen dem gemessenen und dem simulierten Abfluss zu wählen. Wegen der Normalverteilung der Abflussmessfehler ist die Verwendung eines Fehlerquadratkriteriums naheliegend, bspw. die häufig angewandte Effizienz nach Nash und Sutcliffe (1970). Gupta et al. (2009) zeigen, dass sich derartige Kriterien als Kombination von Mittelwertabweichung, Varianzabweichung und Korrelation auffassen lassen. Das den synthetischen Fallstudien zugrundeliegende Abflusskonzentrationsmodell schließt Mittelwertabweichungen aus. Daher seien im Folgenden die beiden verbleibenden Kriterien in Form des Verhältnisses der Standardabweichungen des simulierten und des gemessenen Abflusses (V) sowie des Bestimmtheitsmaßes (R) herangezogen.

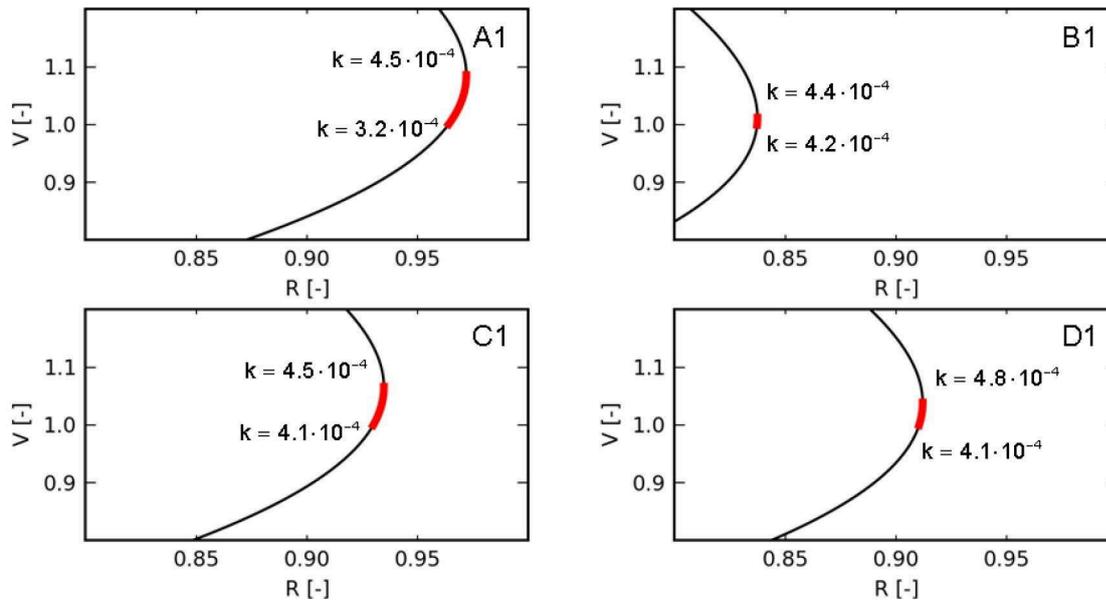


Abbildung 5.8: Veranschaulichung der sich aus der Kombination des Bestimmtheitsmaßes (R) und des Standardabweichungsverhältnisses (V) ergebenden Pareto-Fronten für die Szenarien A1, B1, C1 und D1. Der gesamte Zusammenhang zwischen R und V ist als schwarze Linie eingezeichnet, der pareto-optimale Bereich rot hervorgehoben. Zusätzlich eingetragen sind die mit den Endpunkten des pareto-optimalen Bereichs korrespondierenden Werte des Modellparameters k .

Abbildung 5.8 zeigt die aus der simultanen Betrachtung von V und R resultierenden Pareto-Fronten der Szenarien A1 bis D1. Die gesamten Fronten sind als schwarze Linien eingezeichnet, deren pareto-optimale Bereiche rot hervorgehoben. Zusätzlich sind diejenigen Werte des Modellparameters k eingetragen, welche mit den Endpunkten der Pareto-Fronten einhergehen. Offensichtlich sind sämtliche Pareto-Fronten im Vergleich zur tatsächlichen Prozessheterogenität äußerst eng, was wenig Interpretationsspielraum eröffnet. Es fällt allenfalls auf, dass das „räumliche“ Unsicherheitsszenario A1 mit der weitesten Front einhergeht und das „zeitliche“ Unsicherheitsszenario B1 mit der engsten.

Aufgrund der geringen Bandbreite der pareto-optimalen Parametersätze fallen die Bänder der Simulationsunsicherheit äußerst eng aus (Abbildung 5.9). Zumindest in Szenario B1 zeichnet sich (bei Vorliegen des wahren Abflusses ohne Messfehler) die zeitliche Variation im Prozessgefüge des hypothetischen Einzugsgebietes ab. Diese Erkenntnismöglichkeit ergäbe sich infolge einer einfachen Kalibrierung auf ein Fehlerquadratkriterium jedoch gleichermaßen. Verschiedene getestete Variationen der Art sowie der Anzahl der verwendeten Zielfunktionen bringen nur kleine Änderungen mit sich und ändern den geschilderten Befund nicht.

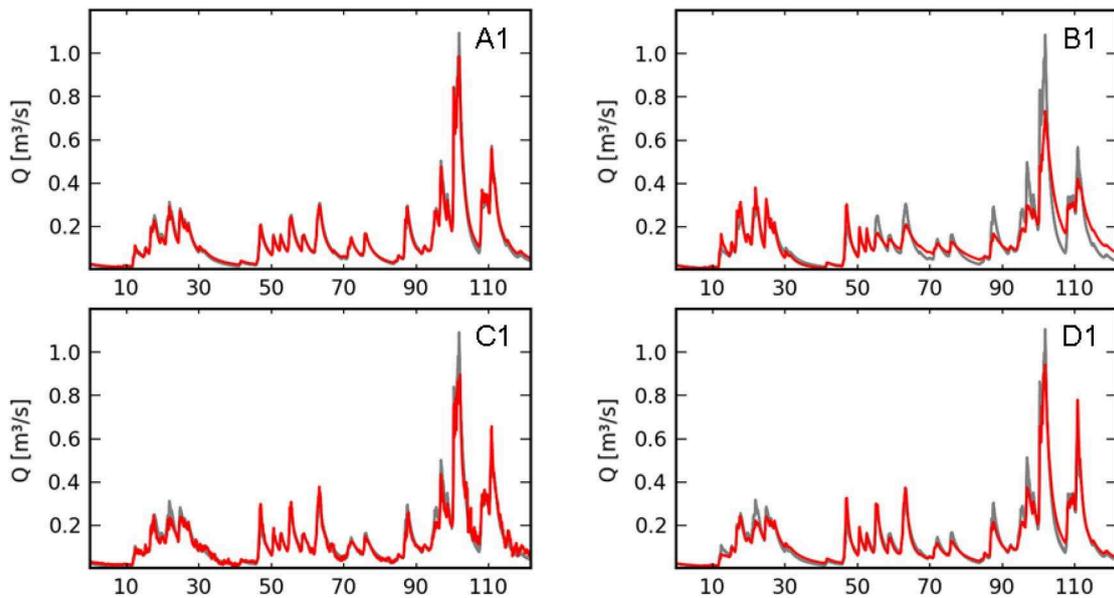


Abbildung 5.9: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Pareto-Optimierung analog zu Abbildung 5.7, wobei der grau schattierte Bereich Pareto-Unsicherheitsbändern entspricht.

Die Anwendung der Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode (GLUE, siehe Abschnitt 5.2.2) erfordert die Festlegung des Gütekriteriums, des Likelihood-Grenzwertes und der Parameterspanne. Der obigen Diskussion folgend sei die Nash-Sutcliffe-Effizienz (NSE) gewählt. Da ein einparametriges Modell betrachtet wird, entfällt die Notwendigkeit zur Durchführung einer Monte-Carlo-Simulation. Stattdessen wird die NSE an 1.000 Auswertungsstellen im Intervall $[1 \cdot 10^{-5} \text{mm}^{-1} \text{h}^{-1}, 2 \cdot 10^{-3} \text{mm}^{-1} \text{h}^{-1}]$ bestimmt. Die resultierenden Fehleroberflächen (Abbildung 5.10) zeigen für alle Szenarien einen ähnlichen, glatten, unimodalen Verlauf und liefern keine Hinweise auf die jeweils zugrundeliegenden Unsicherheitsquellen.

Zur Ermittlung der GLUE-Likelihoods wird für jedes Szenario die kleinste NSE im betrachteten k -Intervall als unterer Grenzwert verwandt. Abbildung 5.11 zeigt die assoziierten Bänder der Simulationsunsicherheit, definiert durch die likelihood-gewichteten 2,5%- und 97,5 %-Quantile. Die Unsicherheitsbänder ähneln sich szenarienübergreifend noch stärker als die Fehleroberflächen. In Szenario A1 liegt der wahre Abfluss in allen, in Szenario C1 in beinahe allen Fällen innerhalb des Unsicherheitsbandes; in Szenario B1 liegt er dagegen in 3,1 % und in Szenario D1 in 11,4 % der Fälle außerhalb. Trotz größerer Bandbreite als bei Anwendung von ERA besteht eine größere Misserfolgsrate, die wesentlich von den drei eingangs genannten, subjektiven Festlegungen abhängt. Relevanter als dieser Befund erscheint, dass die Unsicherheitsbänder keinerlei Sensitivität hinsichtlich der Form der zugrundeliegenden Prozessunsicherheit zeigen und bezüglich der Unsicherheitsanalyse daher wenig informativ sind.

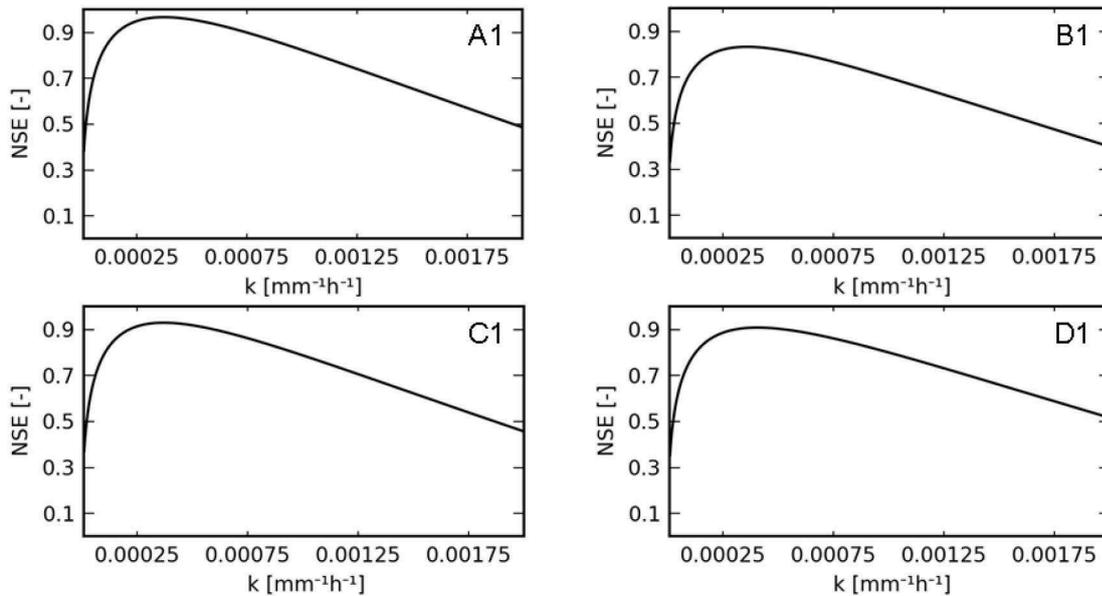


Abbildung 5.10: Zusammenhang zwischen der Nash-Sutcliffe-Effizienz (*NSE*) und dem Modellparameter *k* für die Szenarien A1, B1, C1 und D1.

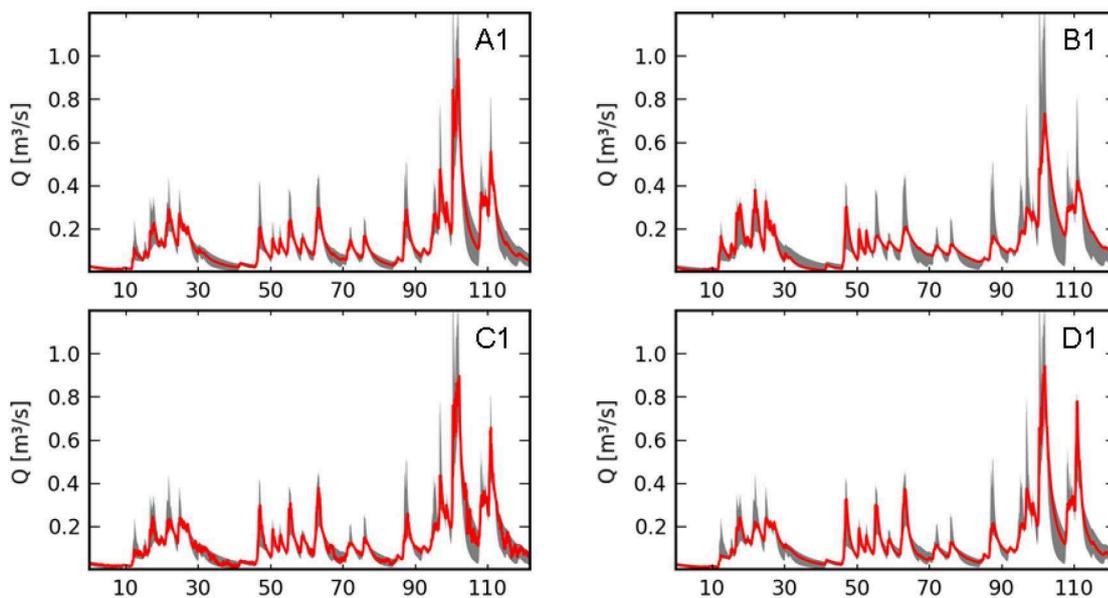


Abbildung 5.11: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode analog zu Abbildung 5.7, wobei der grau schattierte Bereich Simulationsunsicherheitsbändern entspricht.

Die Dynamic Identifiability Analysis (DYNIA, siehe Abschnitt 5.2.3) erfordert neben den (sofern nicht anders angegeben, gleichbleibenden) GLUE-spezifischen Festlegungen die Wahl der Filterbreite (oder Fensterbreite) sowie einer anschaulichen Visualisierungstechnik. Die Filterbreite sollte mit der charakteristischen Dauer der jeweils relevanten Prozesse korrespondieren (Wagner et al. 2003). Nach einigen Vorversuchen wurde die (inverse) absolute Abweichung (AE) als Zielfunktion auf jeden einzelnen Stunden-Zeitschritt angewandt.

Anschließend wurden hochfrequente (messfehlerbasierte) Störungen der AE-Werte mittels eines Gaußschen-Tiefpassfilters mit einer Standardabweichung von 48 Stunden reduziert. Die so gewonnenen Ergebnisse sind in Abbildung 5.12 dargestellt. Die wahren Werte des Parameters k beider Prozessgefüge finden sich auf der (nicht logarithmisch skalierten) Sekundärordinate. Werte von k mit kleiner Likelihood sind weiß bis hellblau eingezeichnet. Der Wert von k mit der jeweils größten Likelihood zum gegebenen Zeitpunkt ist dunkelblau eingezeichnet.

In allen Szenarien ist k innerhalb der ersten zehn dargestellten Tage bezogen auf AE wenig oder gar nicht sensitiv. In diesem Zeitraum liegt der simulierte Abfluss unabhängig von der Modellparametrisierung annähernd bei null. Entsprechend klein fallen die Simulationsunterschiede in Relation zu den (homoskedastischen) Abflussmessfehlern aus.

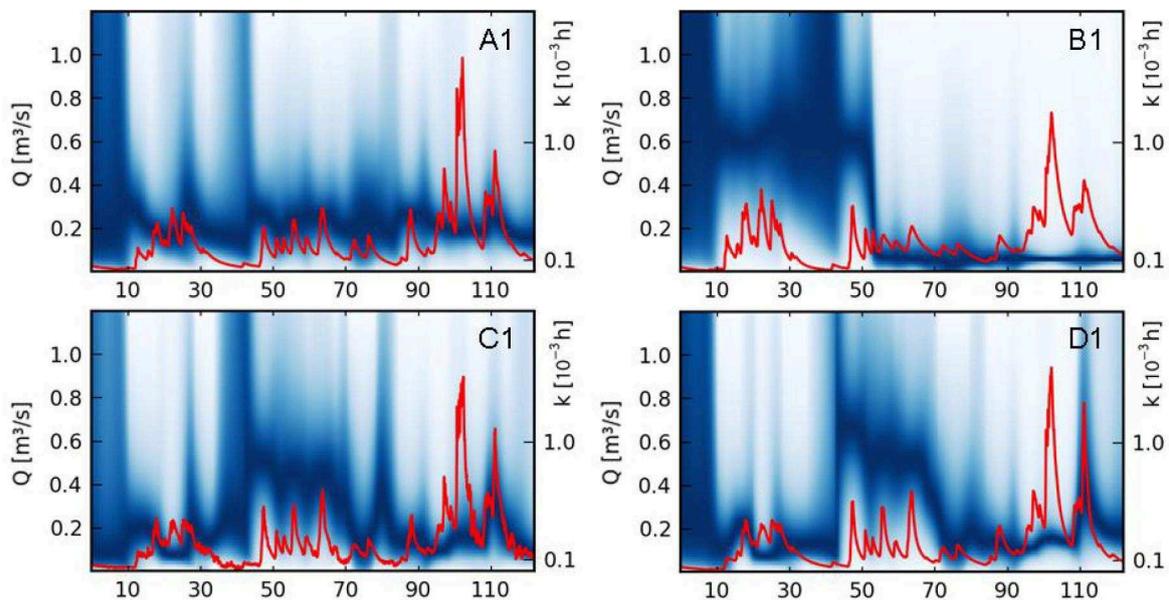


Abbildung 5.12: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Dynamic Identifiability Analysis analog zu Abbildung 5.7, wobei der blau schattierte Bereich der Parameter-Likelihood entspricht. Die höchste Likelihood zum jeweiligen Zeitpunkt ist dunkelblau eingezeichnet, die beiden wahren k -Werte sind auf der (nicht logarithmischen) sekundären Ordinate eingetragen.

Den eindeutigsten Befund ermöglicht DYNIA für Szenario B1, in dem der zeitliche Bruchpunkt im Prozessgeschehen unverkennbar ist. Danach wird das trägere Prozessgefüge präzise identifiziert; davor erschweren die hohe Prozessdynamik sowie die zwischenzeitlichen Trockenphasen die genaue Parameteridentifikation. Für Szenario C1 und – mit einer gewissen Verzerrung für Szenario D1 – zeigt DYNIA die Spanne der tatsächlichen Prozessheterogenität ebenfalls deutlich an. Für Szenario A1 deutet die geringe zeitliche Variation des blauen Bandes dagegen auf das vermeintliche Vorliegen eines einzelnen Prozessgefüges hin.

Jede Anwendung des in Abschnitt 5.2.4 beschriebenen Partikel-Filters basiert auf einem Ensemble von 3.000 Partikeln. Die Zustandsänderung des Speichers erfolgt rein deterministisch nach Modellgleichung 5.20. Der Modellparameter k wird mittels Random Walk innerhalb der für GLUE und DYNIA gewählten Grenzen variiert. Die stochastische Störung wiederholt sich alle 24 Stunden und folgt der Normalverteilung. Der Random Walk ist nicht im Modellkonzept begründet und unterliegt in seiner Ausgestaltung einer gewissen Subjektivität. Dem wird durch den Gebrauch zweier Störungsstärken begegnet. Dem schwachen Random Walk liegt eine Standardabweichung des additiven Störterms von $5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ zugrunde (Abbildung 5.13), dem starken Random Walk eine von $5 \cdot 10^{-5} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ (Abbildung 5.14). Die zur Aktualisierung des Partikel-Ensembles (alle 24 Stunden) benötigten Likelihood-Werte folgen einer Normalverteilung mit der tatsächlichen Standardabweichung der Abflussmessfehler von $0,015 \text{ m}^3/\text{s}$. Die Vorlaufzeit ist so groß angesetzt, dass die initiale a-priori-Verteilung von k (gewählt wurde die Gleichverteilung) die im Folgenden diskutierten Ergebnisse nicht relevant beeinflusst.

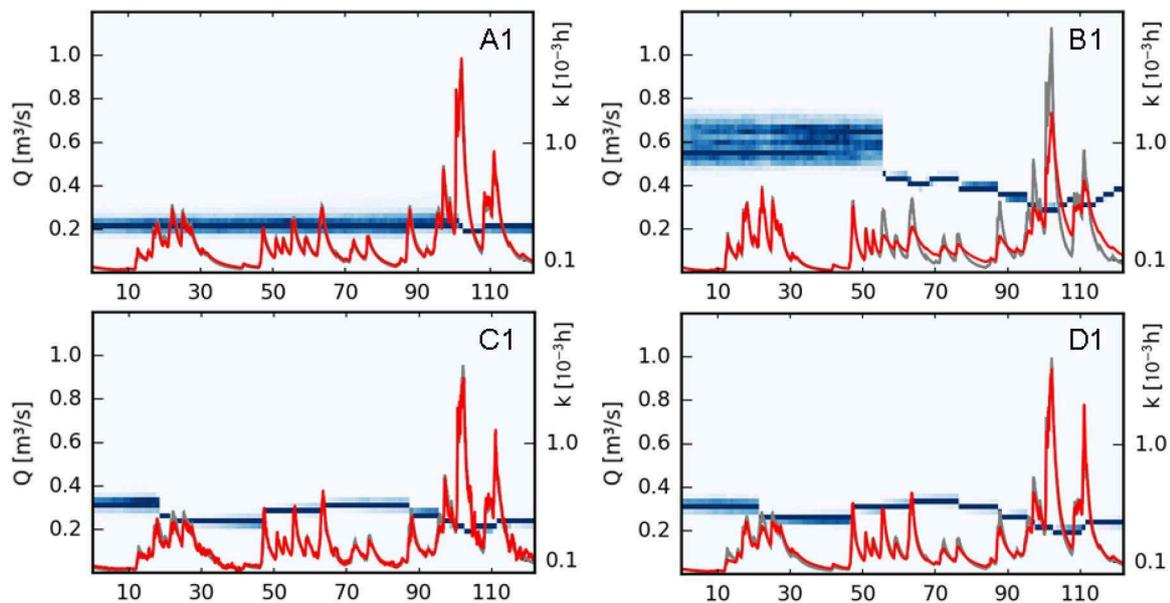


Abbildung 5.13: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Partikel-Filterung analog zu Abbildung 5.12 bei schwach ausgeprägtem Random Walk. Zusätzlich zu den in Blautönen dargestellten a-posteriori-Verteilungen des Modellparameters k ist in grau das Band der Simulationsunsicherheit eingezeichnet.

Die Partikel-Filterung schlägt in keinem Szenario und bei keiner gewählten Konfiguration bimodale a-posteriori-Verteilungen vor, die das simultane Wirken beider Prozessgefüge erkennen ließen.

Bei schwachem Random Walk (Abbildung 5.13) wird für Szenario A1 – noch ausgeprägter als bei Verwendung von DYNIA – zeitkonstant ein Kompromisswert für Parameter k ange-

zeigt. Für Szenario B1 wird k vor dem zeitlichen Bruchpunkt im Prozessgeschehen deutlicher identifiziert als durch DYNIA. Die Anpassung an das anschließende, trägere Prozessgeschehen erfolgt aber zu langsam, als dass die Identifikation des nun wirksamen Parameterwertes von $10^{-4} \text{ mm}^{-1} \text{ h}^{-1}$ bis zum Ende des dargestellten Zeitraums erfolgen könnte. Ähnliches gilt auch für die Szenarien C1 und D1, in denen der schwache Random Walk der schnellen Variation im Prozessgeschehen des Einzugsgebietes kaum folgt. Dieses Identifikationsproblem geht mit einer ausgeprägten Fehleinschätzung der Simulationsunsicherheit einher. Mit zu großer Häufigkeit verlässt der wahre Abfluss die grau eingezeichneten Bänder der Simulationsunsicherheit (erneut durch die 2,5 %- und 97,5 %-Quantile definiert). Stunden nur messfehlerbehaftete Abflussreihen zur Verfügung, wären diese Diskrepanzen allenfalls für Szenario B1 visuell ersichtlich. Die Diskrepanzen in Szenario C1 und D1 wären nur durch zeitübergreifende statistische Analysen erfassbar.

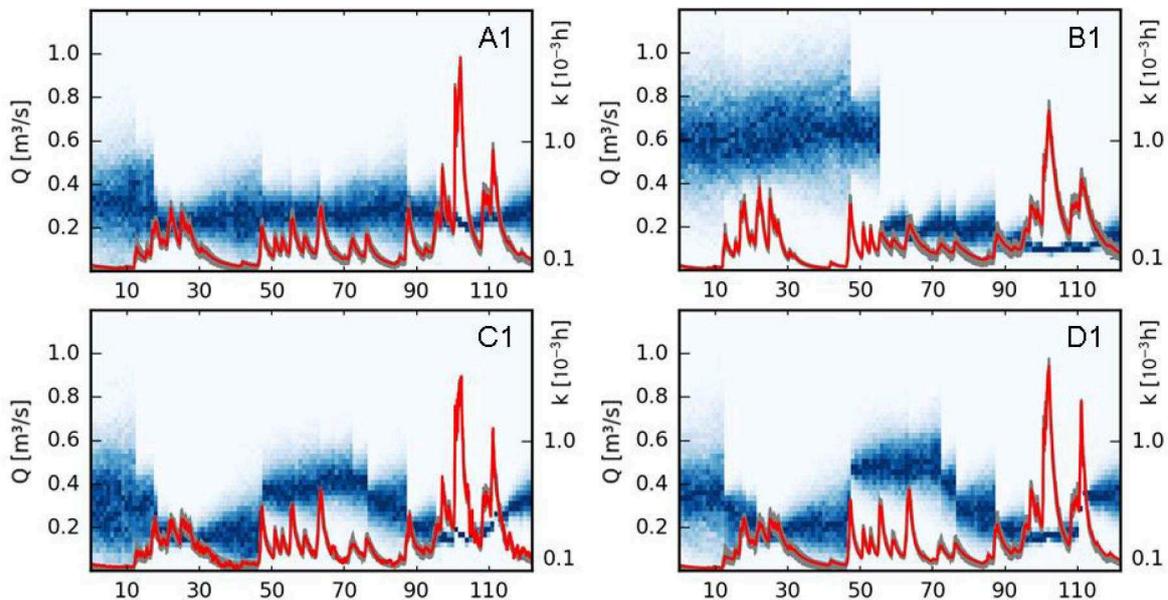


Abbildung 5.14: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Partikel-Filterung analog zu Abbildung 5.13 bei stark ausgeprägtem Random Walk.

Mit stärkerem Random Walk nähern sich die Ergebnisse der Partikel-Filterung deutlich denen von DYNIA an. Die a-posteriori-Verteilungen sind durchweg breiter. Die Anpassung an Änderungen im Prozessgeschehen erfolgt schneller und infolgedessen nimmt die für die Szenarien C1 und D1 wiedergegebene Prozessspanne zu. Ein systematischer Vorteil der Partikel-Filterung gegenüber der einfachen DYNIA-Anwendung ist nicht erkennbar.

5.3.4 Diskussion

Die Aussagekraft synthetischer Fallstudien für reale hydrologische Anwendungen wird mitunter gering eingeschätzt. Beven (2006a) diskutiert dies für die Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode (GLUE) und formale Ansätze (Bayessche Statistik). Erstere sei auf die Handhabung komplexer, wenig verstandener Interaktionen verschiedener

Unsicherheitsquellen ausgerichtet, letztere basieren dagegen auf konkreten, relativ simplen Fehlermodellen. In synthetischen Fallstudien treffen diese Fehlermodelle i. d. R. bis zu einem gewissen Grad zu, wodurch die größere theoretisch erreichbare Genauigkeit formaler Ansätze zum Tragen kommt. Bei unvollständiger und fehlerbehafteter Einschätzung der Unsicherheitsquellen in realen Anwendungen tendieren formale Ansätze dagegen zur gravierenderen Fehleinschätzung (i. d. R. Unterschätzung) der Gesamtunsicherheit, so dass GLUE hierfür als robuster anzusehen sei.

Dieser Argumentation ist im Kontext der vorliegenden Arbeit im Wesentlichen zuzustimmen; insbesondere da die synthetischen Fallstudien stark auf den Ensemble Range Approach (ERA) zugeschnitten sind, was vor allem beim Vergleich von ERA mit den Referenzverfahren in Abschnitt 5.3.3 zu berücksichtigen ist. Der eigentliche Zweck synthetischer Fallstudien ist allerdings nicht der Funktionsnachweis für reale Anwendungen, sondern das Aufzeigen von Verfahrens- oder Implementierungsdefiziten, die bereits unter simplen Bedingungen auftreten (siehe z. B. Maxwell et al. 2014). Kann eine Methodik eine bestimmte Form von Unsicherheit nicht unter synthetischen, idealisierten Bedingungen aufdecken, ist kaum davon auszugehen, dass dies unter realen Bedingungen gelingt. In diesem Sinne sollten die im Folgenden diskutierten Ergebnisse der vorangegangenen Abschnitte verstanden werden.

Abschnitt 5.3.2 demonstriert für einfache Testfälle, dass die Maximum-Likelihood-Implementierung von ERA automatisch, d. h. ohne externe Vorgabe, fallspezifisch korrekt entweder den Ensemble Point Approach (EPA) oder den Ensemble Density Approach (EDA) approximiert. Die Trennung der Simulationsunsicherheit in Prozess- und Ausgabedatenunsicherheit fällt in jedem Szenario zumindest befriedigend aus. Ebenso die Identifikation der einzelnen zugrundeliegenden Prozessgefüge, wobei sich ERA hier in einem Szenario (D) gegenüber EPA unterlegen zeigt. Die Szenarien erlauben keine Aussage darüber, ob die Vorteile von ERA gegenüber EPA und EDA auch beim Vorliegen starker Parameterinteraktionen von Relevanz sind.

In Abschnitt 5.3.3 zeigt sich ERA den untersuchten Referenzverfahren durchweg überlegen. Es soll jedoch erneut auf die gezielte Ausrichtung der Szenarien auf ERA, sowie auf die Beschränkung bei der Wahl der Referenzverfahren auf solche mit einer ähnlichen Umsetzungskomplexität wie ERA hingewiesen werden.

Weder die Pareto-Optimierung noch die Anwendung von GLUE in Abschnitt 5.3.3 führt zu präziseren Hypothesen über die Form der Prozessunsicherheit als die simple Maximum-Likelihood-Kalibrierung eines einzelnen Modells. Es erscheint fraglich, ob sich dieser Befund für abweichend konstruierte synthetische Fallstudien ändert, solange nicht mehrere voneinander unabhängige Messgrößen mit kommensurablen Simulationsgrößen einbezogen werden, was insbesondere die Stärken der Pareto-Optimierung besser zum Tragen kommen ließe. Die Insensitivität der GLUE-Unsicherheitsbänder lässt sich, im oben diskutierten

Sinne, als große Robustheit bezüglich verschiedener Unsicherheitsformen auffassen. Für die Extrapolation (Abflussvorhersage im Extrembereich, Klimaszenarien) mag dies einen Vorteil darstellen, aber nicht für den Versuch der Identifikation modellstruktureller Unsicherheiten.

Die Ergebnisse der Dynamic Identifiability Analysis (DYNIA) und der Partikel-Filterung nach Smith et al. (2008a) ähneln sich. Beide Verfahren erlauben in den von zeitlicher Prozessunsicherheit dominierten Szenarien ähnliche Schlüsse wie ERA, geben jedoch keinerlei Hinweise auf die räumliche Prozessunsicherheit von Szenario A.

Wie oben diskutiert, ist sowohl für ERA als auch für DYNIA und die Partikel-Filterung von deutlichen Einbußen an Aussageschärfe in realen, komplexen Anwendungsstudien auszugehen – allerdings in unterschiedlicher Form. ERA ist (wie die Pareto-Optimierung und GLUE) ein zeitübergreifender Ansatz. Die gesamte im Kalibrierzeitraum auftretende Unsicherheit wird durch lediglich zwei Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen abgebildet, in deren Schätzung die gesamte Datenbasis des Kalibrierzeitraums einfließt. Die zeitvariablen Schätzungen der Parameterwert-Verteilungen von DYNIA und der Partikel-Filterung berücksichtigen dagegen immer nur Teile der Datenbasis und sind somit anfälliger gegenüber kurz- und mittelfristigen Störungen. So könnte beispielsweise eine (in den synthetischen Fallstudien vernachlässigte) ausgeprägte zeitliche Persistenz der Abflussmessfehler Fehlinterpretationen begünstigen. Zudem kann die Interaktion einzelner Parameter die graphischen Darstellungen von DYNIA und der Partikel-Filterung gewissermaßen „verschmieren“, und so tatsächlich vorhandene zeitliche Abhängigkeiten der effektiven Parametrisierung verdecken. Andererseits enthalten DYNIA und die Partikel-Filterung mit der Darstellung des zeitlichen Verhaltens der Streuung der Parameterwert-Verteilungen einen Schutzmechanismus gegen eine Interpretation von Maximum-Likelihood-Resultaten, die im Rahmen der Äquifinalitätsproblematik als nicht haltbar einzustufen ist.

5.4 Reale Fallstudien

Tyralla und Schumann (2016a) und Tyralla und Schumann (2016b) dokumentieren die ersten Anwendungen des Ensemble Range Approach (ERA) in realen Einzugsgebieten. Die bislang gewonnenen Erkenntnisse fasst Abschnitt 5.4.1 zusammen. Die in dieser Arbeit gewählte und in Abschnitt 5.4.2 beschriebene Anwendungsstrategie fokussiert auf bislang nicht oder nur unzureichend beleuchteten Aspekte der Wirkungsweise von ERA. Die Ergebnisauswertung findet sich in Abschnitt 5.4.3.

5.4.1 Bisherige Erfahrungen

Die bisherigen Anwendungen des Ensemble Range Approach (ERA) in realen Einzugsgebieten beschränken sich auf 2-Modell-Ensembles. Tyralla und Schumann (2016a) vergleichen die Effizienz von ERA mit der Effizienz der in Abschnitt 5.1.1 diskutierten Herleitungsverfahren SMA (Single Model Approach), EPA (Ensemble Point Approach) und EDA

(Ensemble Density Approach). Mit lediglich einem untersuchten Modell (HBV₉₆) und Einzugsgebiet (oberer Neckar) liefert die Studie eher erste Eindrücke als repräsentative Ergebnisse. Die im Validierzeitraum erzielten Likelihood-Werte legen nahe, dass ERA bei Verwendung eines einfachen Modells der Abflussmessfehler (Homoskedastizität, Normalverteilung) relevante Vorteile gegenüber den anderen Verfahren mit sich bringt, nicht aber bei Verwendung eines komplexen Modells der Abflussmessfehler (Heteroskedastizität, Skewed Exponential Power Distribution [SEPD] nach Schoups und Vrugt 2010). Die Parameterbestimmung des Messfehlermodells erfolgte derart frei, dass die äußerst flexible SEPD neben der Unsicherheit der Abflussmessfehler auch die Unsicherheit der Modellstruktur zu repräsentieren imstande ist. Offenbar gelingt der SEPD dies im gegebenen Fall ähnlich effizient wie ERA.

Tyralla und Schumann (2016b) zielt auf die Kompensation modellstruktureller Unsicherheit von HBV₉₆ unter operationellen Bedingungen ab. Neben dem oberen Neckar werden die Lahn und die Nahe in die Analyse einbezogen. Die aus den meteorologischen Reihen synoptischer Stationen gewonnenen Modell-Eingangsdaten erhöhen den Anwendungsbezug, schränken aufgrund ihrer mäßigen Qualität allerdings die Erkenntnismöglichkeiten der Untersuchung ein. Zwei interessante Befunde deuten sich dennoch an. Erstens bringt ERA den größten Nutzen mit sich, wenn die Parameterfindung einzelner Modelle durch das Vorhandensein funktional unterschiedlicher, hinsichtlich des Gütekriteriums jedoch ähnlicher lokaler Optima behindert wird. Dieses Phänomen tritt für die Nahe und die Lahn auf. Die simultan kalibrierten Ensemble-Member erfassen beide lokalen Optima, was im gegebenen Fall mit einer Verringerung der Extrapolationsunsicherheit einhergeht. Zweitens tendiert ERA in allen drei Untersuchungsgebieten zur weitgehenden Approximation von EPA. Da die völlige Abwesenheit jeglicher zeitvariablen Form von Prozessunsicherheit unplausibel erscheint, deutet dies erneut auf einen zu großen Einfluss der SEPD in der Abbildung der Gesamtunsicherheit hin.

5.4.2 Studienaufbau

Aufbauend auf den in Abschnitt 5.4.1 geschilderten Erfahrungen im Umgang mit ERA werden die in Tyralla und Schumann (2016b) vorgenommenen Untersuchungen in veränderter Form wiederholt. Im Fokus steht dabei weniger die Modellevaluierung von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} als die Entwicklung eines kritischen Verständnisses von ERA. Konkret sei untersucht, welchen Einfluss die Fixierung der Parameter des Abflussmessfehlermodells zeigt, welche Effekte mit einer Ensemble-Vergrößerung einhergehen, inwiefern sich die Ergebnisse für weitgehend unabhängige Modellstrukturen unterscheiden, welche Rolle eingangsdatenbezogene Korrekturfaktoren spielen und als wie robust die mit ERA gewonnenen Hypothesen über modellstrukturelle Unsicherheiten einzuschätzen sind.

Wie in Tyralla und Schumann (2016b) dienen in der HBV₉₆-Anwendung der obere Neckar, die Lahn und die Nahe als Untersuchungsgebiete (Abschnitt 3.3). Als Eingangsdaten werden

die für die Kalibrierung des operationellen HBV-Modells der Bundesanstalt für Gewässerkunde ermittelten Gebietsreihen herangezogen (SMHI 2009). Diese sollten aufgrund ihrer erweiterten Datenbasis eine größere Genauigkeit als die in Tyralla und Schumann (2016b) verwendeten Eingangsdaten rein synoptischen Ursprungs aufweisen. Die Anwendung von LARSIM_{ME} beschränkt sich auf den oberen Neckar. Hierbei finden die für Tyralla und Schumann (2014) aggregierten Gebietsreihen Verwendung. Kalibrier- und Validierungszeitraum sind – jeweils zuzüglich einem Jahr Vorlaufzeit – die hydrologischen Jahre 1998 bis 2001 und 2002 bis 2005. Die Simulation erfolgt, mit HBV₉₆ in Stunden- und mit LARSIM_{ME} in Tagesschritten, jeweils unter Verwendung der originalgetreuen ad hoc-Implementierung in HydPy (Tyralla und Schumann 2013).

Als Fehlermodell der Abflussmessung dient die Normalverteilung mit einer vom Abflussniveau abhängigen Standardabweichung gemäß Gleichungen 5.13 und 5.14. Die Koeffizienten c_1 und c_2 werden für alle Gebiete auf die Werte $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$ und $0,05$ fixiert, was etwa den Annahmen vergleichbarer Studien wie McMillan et al. (2010) und Renard et al. (2011) entspricht. Der additive Term von $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$ erhöht den relativen Abflussmessfehler im Niedrigwasserbereich leicht und dient zudem der Vermeidung von Kalibrierabbrüchen infolge temporärer simulierter Abflussreihen mit Nullwerten.

Das definierte Fehlermodell impliziert mittlere absolute Abweichungen (MAE) zwischen dem tatsächlichen und dem gemessenen Abfluss von ca. 4 bis 5 %. Die MAE zwischen direkter Abflussmessung und Abflusstafel beträgt nach Steinrücke et al. (2012) am Pegel Kalkofen/Lahn 4,3 % und ist weitgehend unabhängig von der Abflusshöhe. Bei vernachlässigbarer Unsicherheit der direkten Abflussmessung wäre das Fehlermodell somit als akzeptabel einzuschätzen. Am Pegel Grolsheim/Nahe liegt die MAE nach Steinrücke et al. (2012) bei 15,6 %. Dieser hohe Wert liegt teils in systematischen Fehlern begründet, die durch eine Anpassung der Abflusstafel zwischenzeitlich behoben wurden. Fehleranalysen für die veränderte Abflusstafel liegen dem Autor nicht vor; in der Gesamtschau der vorliegenden Informationen wird von einer MAE zwischen etwa 5 % und 10 % ausgegangen. Die durch das Fehlermodell implizierte Unsicherheit liegt somit im unteren Bereich der erwarteten realen Unsicherheit der Abflussreihe der Nahe, vorausgesetzt die Unsicherheit der direkten Abflussmessung ist vernachlässigbar. Für den oberen Neckar (Pegel Horb) liegen dem Autor keine quantitativen Angaben zur Pegelgüte vor.

Die simultane Kalibrierung der Parameter aller Ensemble-Member erfolgt mit BOBYQA (Abschnitt 3.4). Zur Bewertung der Robustheit der Ergebnisse werden jeweils 30 voneinander unabhängige Kalibrierläufe vorgenommen, von denen die fünf besten ausgewertet werden. Die Kalibrierung der Modellparameter erfolgt innerhalb der in den Abschnitten 4.8 und 4.9 gewählten Grenzen, die Kalibrierung der Dirichlet-Parameter im Intervall $[-9,9]$. Die initialen Parameterwerte werden jeweils zufällig gleichverteilt gezogen. Jedem Ensemble-Member wird zu Beginn derselbe initiale Parametersatz zugewiesen.

Die Interzeptionsparameter ($ICMAX$ bzw. $HINZ$) und Bodenparameter (FC bzw. nFK) von HBV₉₆ und LARSIM_{ME} werden nicht kalibriert. Stattdessen werden die für die jeweilige

Zone bzw. Landnutzungsklasse tabellierten oder der Bodenkarte entnommenen Kapazitätswerte beibehalten. Die für die Kalibrierung freigegebenen Parameter werden in allen Zonen bzw. Landnutzungsklassen mit demselben Wert belegt. Ausgenommen hiervon ist der Grad-Tag-Faktor (*CFMAX* bzw. *GTF*). Hierfür wird der jeweils von BOBYQA vorgegebene Einzelwert für alle Zonen vom Typ *forest* oder alle Landnutzungsklassen vom Typ *Nadelwald*, *Laubwald* oder *Mischwald* um den Faktor $\sqrt{2}$ verringert und für alle übrigen um den Faktor $\sqrt{2}$ erhöht. Dies soll, wie bei Anwendung der originalen Modell-Implementierungen üblich, die stärkere Beschattung der Schneedecke unter Baumbestand berücksichtigen.

5.4.3 Ergebnisse

Tabelle 5.6 stellt die durch Anwendung von HBV₉₆ auf den oberen Neckar erzielten Ergebnisse dar. In dieser und den folgenden Tabellen sind jeweils die im Kalibrier- und Validierungszeitraum erzielten Likelihood-Werte der fünf erfolgreichsten Kalibrierläufe zusammengefasst. Die Farben (blau für den besten Parametersatz, rot für den zweitbesten usw.) ermöglichen die Zuordnung der Likelihood-Werte zu den Informationen der folgenden Abbildungen.

Bei der Anwendung eines einzelnen Modells entsprechend dem Single Model Approach (SMA, Abschnitt 5.1.1) liegen die im Kalibrierzeitraum erzielten Likelihood-Werte dicht beieinander. Die Validier-Likelihoods fallen allesamt ab, in einem Fall in extremem Ausmaß. Der laut Kalibrierung fünftbeste Parametersatz erzielt die beste Validier-Likelihood. Insofern erscheint es gerechtfertigt, zur Charakterisierung der Parameterunsicherheit hier und im Folgenden die fünf besten Parametersätze zu betrachten.

Tabelle 5.6: Likelihood-Werte, HBV₉₆, oberer Neckar.

1 Modell		2 Modelle		3 Modelle		4 Modelle	
Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.
-6.83	-7.55	-1.36	-1.34	-1.39	-1.73	-1.40	-1.64
-6.84	-7.44	-1.39	-1.42	-1.49	-1.44	-1.46	-1.36
-7.01	-16.50	-1.40	-1.48	-1.50	-1.57	-1.49	-1.53
-7.07	-8.09	-1.45	-2.22	-1.54	-2.44	-1.57	-1.59
-7.09	-7.25	-1.48	-3.70	-1.58	-1.62	-1.63	-1.71

Die signifikante Erhöhung der Likelihood-Werte unter Verwendung von ERA ist primär darauf zurückzuführen, dass das Fehlermodell von SMA in der gewählten Umsetzung nur die (angenommenen) Abflussmessfehler zu erfassen imstande ist. Durch die Hinzunahme der Strukturunsicherheitsfunktion von ERA findet dagegen zusätzlich die Modell- sowie die Eingangsdatenunsicherheit Berücksichtigung. Folglich müssen – die zutreffende Parametrisierung des Modells der Abflussmessfehler vorausgesetzt – die mit ERA erzielten Likelihood-Werte zwangsläufig höher ausfallen. Die Diskrepanzen zwischen den mit SMA und ERA erzielten Likelihood-Werten sind somit nicht als Hinweis auf die Stärke von ERA in

der Reduzierung von Simulationsunsicherheit zu deuten, sondern als Anhaltspunkt für die Relevanz der Modell- und Eingangsdatenunsicherheit im gegebenen Anwendungsfall.

Theoretisch ist die maximale Kalibrier-Likelihood jedes Ensembles wenigstens so groß wie die des nächstkleineren Ensembles, was nach Tabelle 5.6 praktisch nicht der Fall ist. Eventuelle positive Effekte größerer Ensembles scheinen zu schwach ausgeprägt, als dass BOBYQA diese trotz der Erhöhung der Komplexität des Optimierproblems ausfindig machen könnte.

Die Erhöhung der Anzahl der zu bestimmenden Modellparameterwerte um das zwei bis vierfache lässt die Überanpassung der Ensembles an den Kalibrierzeitraum befürchten. Eine mögliche Konsequenz wäre die zunehmende Verschlechterung der Likelihood-Werte zwischen dem Kalibrier- und dem Validierzeitraum mit zunehmender Ensemble-Größe. Tabelle 5.6 gibt hierfür keine Anhaltspunkte. Im Gegenteil zeigt sich allenfalls eine größere Robustheit mit zunehmender Ensemble-Größe in Form ausbleibender extremer Likelihood-Verschlechterungen.

Abbildung 5.15 bis Abbildung 5.17 stellen die jeweils fünf besten Parametersätze des 2-, 3- und 4-Modell-Ensembles dar. Die Farbwahl entspricht der von Tabelle 5.6. Um die Parametersätze der einzelnen Ensemble-Member erkennbar zu machen, sind diese (willkürlich) nummeriert.

Das markanteste Ergebnis der Anwendung des 2-Modell-Ensembles wird für den Niederschlags-Korrekturfaktor *PCORR* erzielt. Dessen Wert liegt beim höher gewichteten Member (γ etwa zwischen 1 und 2) an der unteren und beim geringer gewichteten Member (γ etwa zwischen 0 und 1) an der oberen Intervallgrenze. Zur Vereinfachung seien diese Member im Folgenden als „trocken“ und „feucht“ charakterisiert. Eine gewisse Abweichung von diesem Muster stellt lediglich der beste Parametersatz dar (blau), bei dem der trockene Member eine geringere Niederschlagsreduzierung erfährt. Dies wird aber durch eine ausgeprägte Verdunstungserhöhung (*ECORR* nahe der oberen Parametergrenze) kompensiert.

In der Mehrzahl der Fälle liegen die Werte der übrigen Parameter beider Member dicht beieinander. Auffällig ist, dass die beiden besten Parametersätze bezüglich der Abflussbildung (*BETA*, evtl. *CFLUX*) und der Basisabflusskonzentration (*K4*) Parallelen aufweisen: der trockene Member weist jeweils den größeren Abflussbeiwert bei gleicher Speicherfüllung und eine geringere Schwerpunktlaufzeit des Basisabflusses auf. Ersteres könnte mit der extremen Einfachheit des Abflussbildungsansatzes von *HBV₉₆* in Verbindung stehen, letzteres mit Schwächen von *HBV₉₆* im Niedrigwasserbereich (Tyralla und Schumann 2016b).

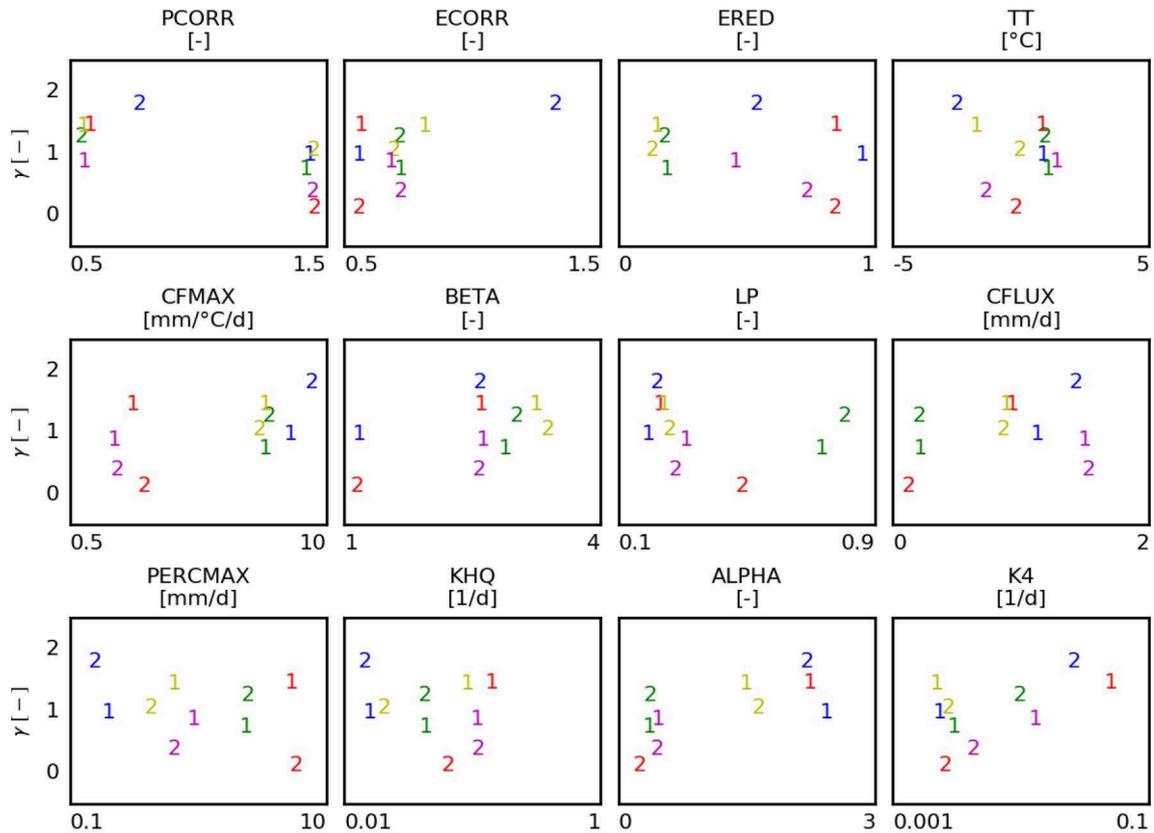


Abbildung 5.15: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV_{96} für den oberen Neckar. Die Wichtigkeitsfaktoren (γ) des ersten bzw. des zweiten Modells eines jeden Ensembles sind auf der Ordinate, die verschiedenen Parameterwerte auf den nicht logarithmisch skalierten Abszissen aufgetragen, auf denen die jeweiligen Kalibrierungsgrenzen eingetragen sind. Kalibriert wurden der Niederschlagskorrekturfaktor ($PCORR$), der Verdunstungskorrekturfaktor ($ECORR$), der Reduktionsfaktor der Bodenverdunstung ($ERED$), der Temperaturgrenzwert (TT), der Grad-Tag-Faktor ($CFMAX$), der Nichtlinearitätsparameter der Abflussbildung ($BETA$), der relative Grenzwert der Bodenverdunstung (LP), die Maximalrate des kapillaren Wiederaufstiegs ($CFLUX$), die Maximalrate der Perkolation ($PERCMAX$), der Retentionsparameter des Direktabflusses (KHQ), der Nichtlinearitätsparameter des Direktabflusses ($ALPHA$) und der Retentionsparameter des Basisabflusses ($K4$). Zur Unterscheidung der verschiedenen Ensembles wurde die Farbwahl von Tabelle 5.6 übernommen.

Die Anwendung des 3- sowie des 4-Modell-Ensembles bewirkt gegenüber der Anwendung des 2-Modell-Ensembles keine signifikante Likelihood-Verbesserung. Eine genauere Identifikation modellstruktureller Unsicherheit über die größeren Ensembles ist somit nicht zu erwarten. Die korrespondierenden Parametersätze sind dennoch in Abbildung 5.16 und Abbildung 5.17 dargestellt, um die grundsätzliche Wirkungsweise von ERA bei unterschiedlicher Ensemble-Größe zu veranschaulichen.

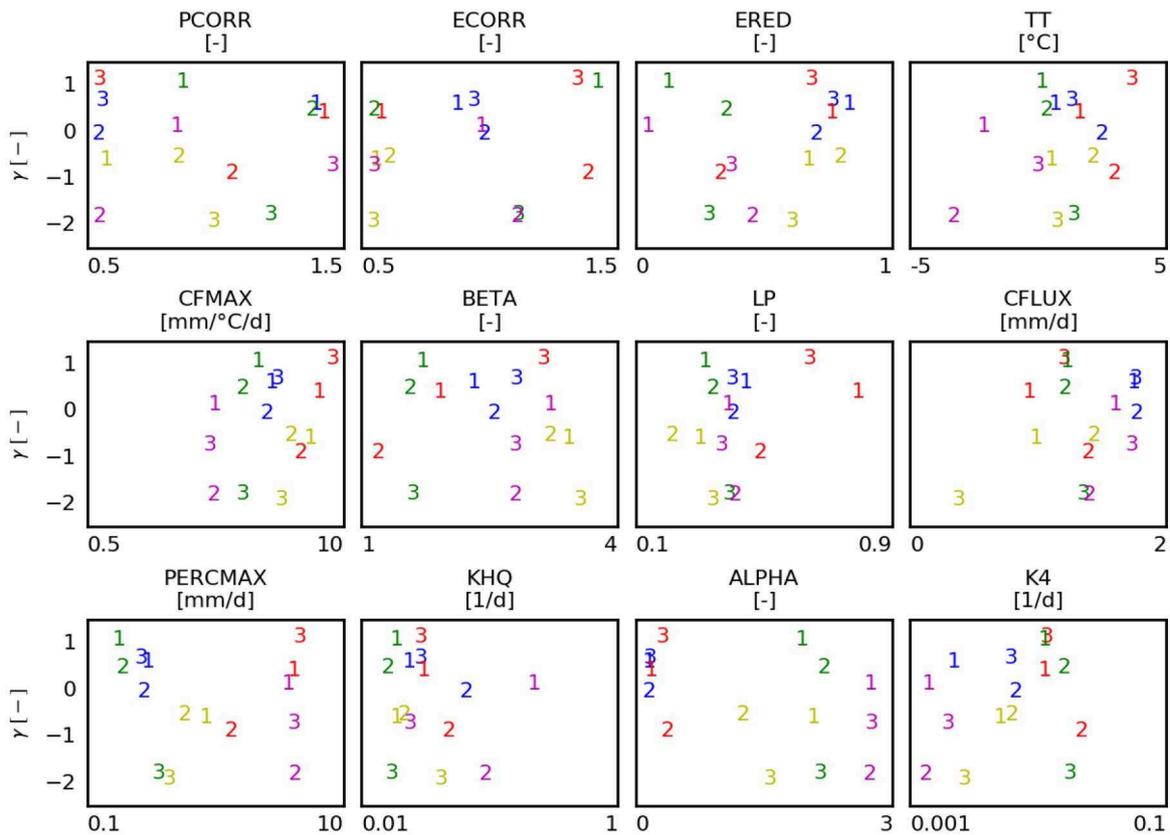


Abbildung 5.16: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.

Zunächst besteht mit zunehmender Ensemble-Größe die generelle Tendenz der Verschiebung der Dirichlet-Parameter hin zu kleineren Werten. Für das 2-Modell-Ensemble finden sich alle Werte etwa im Intervall $[0,2]$ wieder, für das 3-Modell-Ensemble etwa im Intervall $[-2,1]$ und für das 4-Modell-Ensemble etwa im Intervall $[-4,1]$. Hierbei sind zwei Idealfälle zu unterscheiden: Erstens können in größeren Ensembles einzelne Member durch verhältnismäßig geringe Wichtungen weitgehend ausgeschlossen werden, wie beim grün dargestellten 4-Modell-Ensemble sowohl für den ersten als auch für den dritten Member der Fall. (Die beiden übrigen Member entsprechen dagegen dem trockenen und dem feuchten Member der 2-Modell-Ensembles.) Zweitens können die Dirichlet-Parameter, wie beim magenta dargestellten Ensemble, einen ähnlichen, kleinen Wert annehmen. Dies steht in Verbindung mit der in Abschnitt 5.1.5 veranschaulichten Tendenz zur Verengung der Strukturdichte mit zunehmender Ensemble-Größe, welcher eine Verringerung der Werte der Dirichlet-Parameter entgegenwirkt.

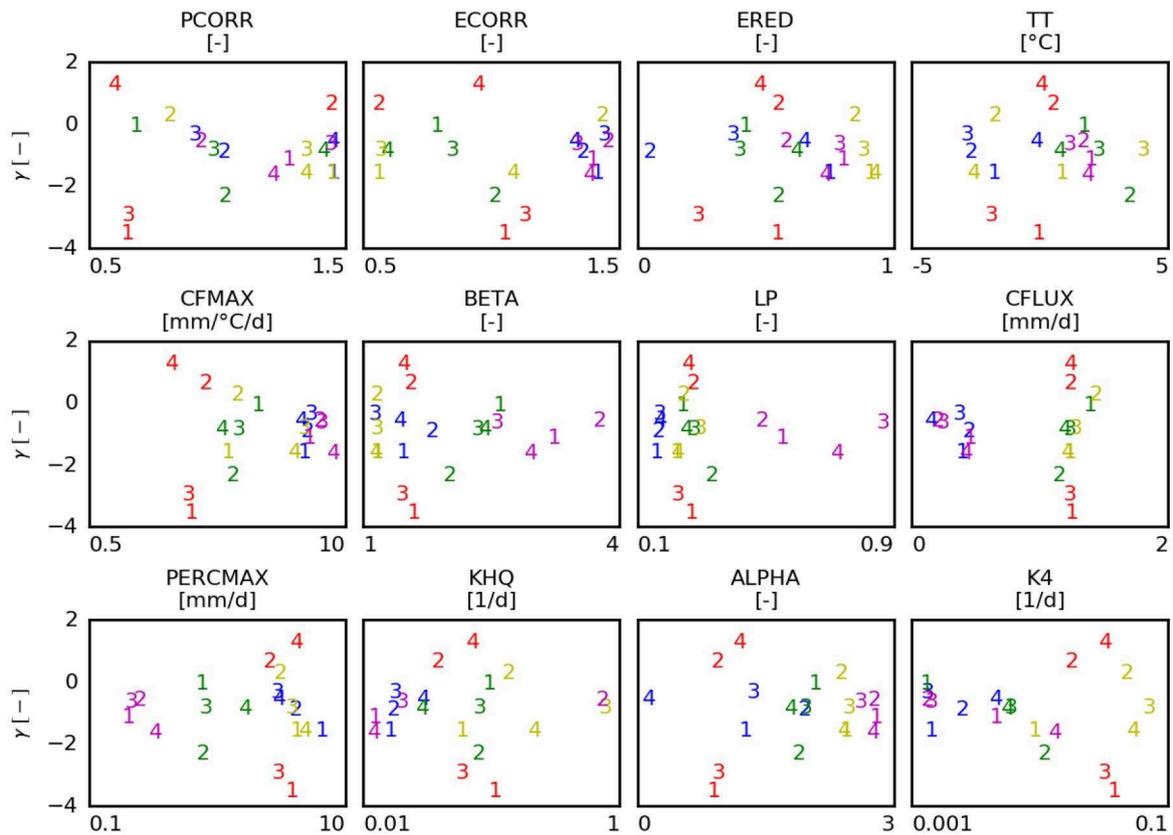


Abbildung 5.17: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 4-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV_{96} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.

Ensembleintern ist die Belegung der Parameter der Member – bis auf die von $PCORR$ und $ECORR$ – zumeist ähnlich. Die Parametervariation zwischen den Ensembles fällt – ebenfalls mit Ausnahme von $PCORR$ und $ECORR$ – deutlich stärker aus. Beispielsweise variieren die Werte der maximalen Perkolationsrate ($PERCMAX$) in Abbildung 5.15 ensembleintern etwa um maximal 1 mm/d, ensembleübergreifend aber beinahe im gesamten freigegebenen Kalibrierbereich von etwa 10 mm/d.

Da die Relevanz derartiger Parametervariationen aufgrund unterschiedlicher Parametersensitivitäten und -interaktionen schwer zu beurteilen ist, wird in Abbildung 5.18 deren Auswirkung auf die Abflusssimulation für das letzte Jahr des Validierzeitraums dargestellt. Neben den Abflussreihen der Ensemble-Member in den bislang gewählten Farben ist die gemessene Ganglinie in schwarz eingezeichnet. Zusätzlich eingefügt sind die korrespondierenden Verläufe der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Dirichletverteilung (f_D), welche für 2-Modell-Ensembles identisch mit den normierten Verläufen der Strukturunsicherheitsfunktion (f_S) sind. Der trockene Member ist zur einfacheren Vergleichbarkeit immer links positioniert.

Die Differenzierung in einen trockenen und einen feuchten Member ist für alle Ensembles offensichtlich. Eine weitere Gemeinsamkeit ist die größere Nähe der gemessenen Ganglinie

zum Simulationsergebnis des trockenen Ensemble-Members. Die Verläufe von f_D bzw. f_S sind, mit Ausnahme des rot dargestellten Ensembles, ensembleübergreifend ähnlich ausgeprägt.

Die Ganglinien der trockenen Member sowie der feuchten Member zeigen ensembleübergreifend gravierende Unterschiede. Mit einer Ausnahme (blau) treten Abflussereignisse auf, die sowohl mit einem markanten Knickpunkt beginnen als auch enden. Dieses Phänomen kann ebenfalls bei der Einzelmodell-Kalibrierung auftreten und steht mit Besonderheiten des Abflusskonzentrationsmoduls von HBV₉₆ in Verbindung (Tyralla und Schumann 2016b). Diese Besonderheiten können sich offenbar besonders stark auswirken, wenn der einzelne Parametersatz in ein Ensemble eingebunden ist und die Charakteristika der gemessenen Ganglinie nicht eigenständig reproduzieren muss.

Einen plausiblen Eindruck hinterlassen die blau eingezeichneten Ganglinien, denen sowohl in der Kalibrierung als auch in der Validierung die höchste Likelihood zugeordnet ist. Es zeigt sich eine klare funktionale Differenzierung. Der feuchte Member simuliert einen weitgehend konstanten Basisabfluss sowie Direktabflussereignisse mit schwacher Saisonalität. Der trockene Member fügt eine dritte Abflusskomponente hinzu, die sich als nur im hydrologischen Winterhalbjahr auftretende Interflowkomponente verstehen lässt. Diese Interpretation stimmt mit den in Tyralla und Schumann (2016b) gesammelten Indizien überein, wonach das Fehlen einer dritten Abflusskomponente als modellstrukturelles Defizit von HBV₉₆ aufzufassen ist.

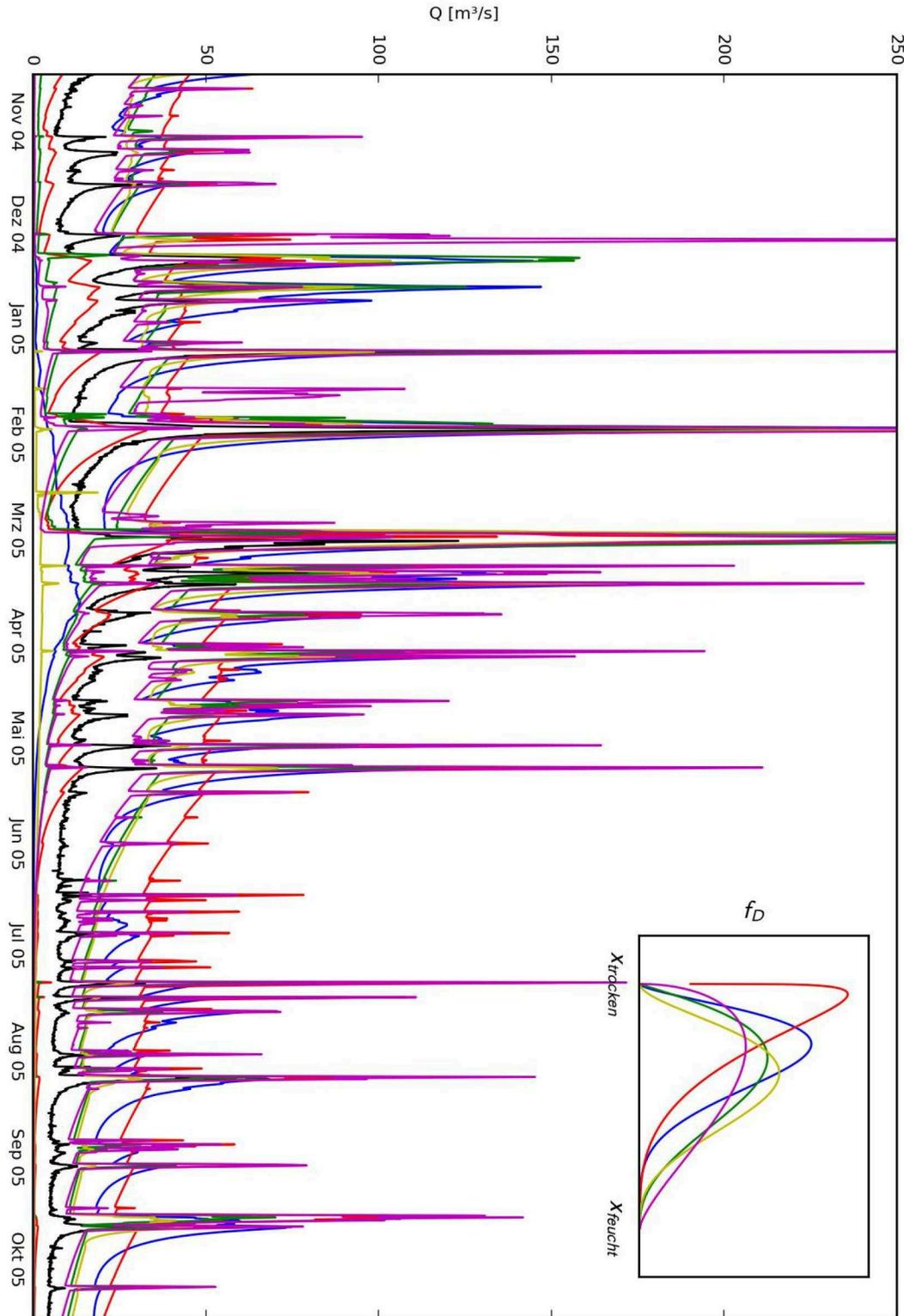


Abbildung 5.18: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für den oberen Neckar. Zusätzlich ist die univariate Dirichletverteilung (f_D) entsprechend ihrer ensemblespezifischen Parametrisierung veranschaulicht, wobei sich $x_{trocken}$ und x_{feucht} auf den kleine bzw. den hohe Abflusswerte simulierenden Member bezieht. Zur Unterscheidung der verschiedenen Ensembles wurde die Farbwahl von Tabelle 5.6 übernommen; zudem ist die beobachtete Abflussganglinie schwarz eingezeichnet.

Die in Tabelle 5.7 für die Lahn angegebenen Likelihood-Werte lassen sich weitgehend wie die des oberen Neckars interpretieren. ERA erreicht aus denselben Gründen markant höhere Likelihood-Werte als SMA, wobei das fixierte Modell der Abflussmessfehler in diesem Fall durch die unabhängige Analyse von Steinrücke et al. (2012) gedeckt ist. Im Unterschied zum oberen Neckar werden allerdings – wie theoretisch zu erwarten – die höchsten Likelihood-Werte mit dem 4-Modell-Ensemble erzielt. Die Verbesserungen gegenüber dem 2-Modell-Ensemble fallen in der Validierung deutlicher als in der Kalibrierung aus, was erneut gegen eine starke Überanpassung der größeren Ensembles an die Abflussmessung im Kalibrierzeitraum spricht.

Tabelle 5.7: Likelihood-Werte, HBV₉₆, Lahn.

1 Modell		2 Modelle		3 Modelle		4 Modelle	
Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.
-7.61	-10.41	-1.83	-2.77	-1.74	-1.77	-1.70	-1.96
-7.63	-10.71	-1.85	-2.93	-1.84	-2.16	-1.78	-1.94
-7.63	-9.71	-1.86	-1.95	-1.86	-1.89	-1.78	-1.89
-7.63	-10.51	-1.87	-2.07	-1.88	-1.98	-1.80	-2.04
-7.68	-10.10	-1.88	-2.83	-1.89	-2.21	-1.80	-1.76

Die in Abbildung 5.19 dargestellten Parametrisierungen der 2-Modell-Ensembles der Lahn fallen für *PCORR* und *ECORR* wie die des oberen Neckars aus. Erneut differenzieren sich die Ensembles in einen trockenen und einen feuchten Member, wobei der trockene Member stärkere Gewichtung findet. Ansonsten sind die Parameterähnlichkeiten innerhalb eines jeden Ensembles noch ausgeprägter als die des oberen Neckars. Die ERA-Analyse von HBV₉₆ lenkt die Aufmerksamkeit an der Lahn noch stärker auf die Korrekturfaktoren der meteorologischen Eingangsgrößen.

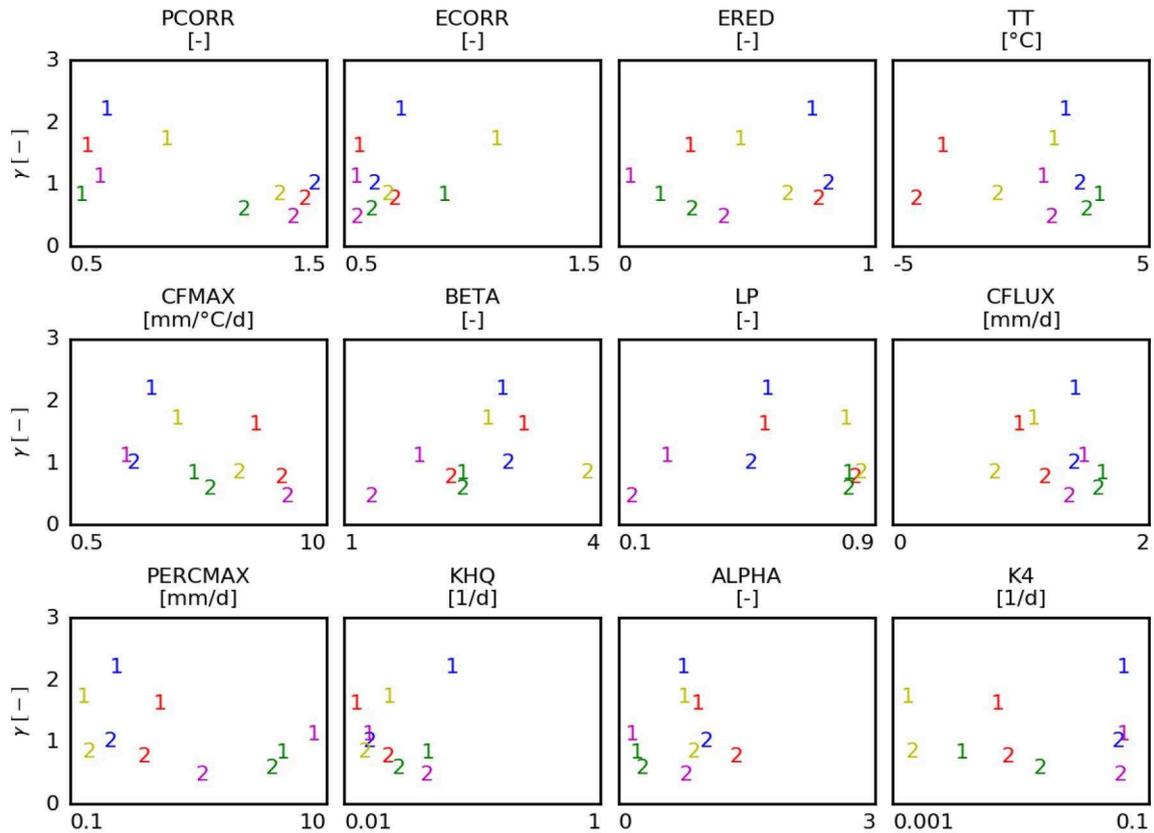


Abbildung 5.19: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für die Lahn analog Abbildung 5.15.

Abbildung 5.20 zeigt die Simulationsergebnisse der 2-Modell-Ensembles. Die für den oberen Neckar festgestellten Knickpunkte treten nicht auf. Die Ganglinien der feuchten Member zeigen eine größere Übereinstimmung in ihrem Verlauf. Die Ganglinien der trockenen Member unterscheiden sich darin, wie stark sie zur kurzfristigen Abflussdynamik beitragen, geben ansonsten aber recht konsistent eine winterliche Abflusserhöhung vor. Diese hält gegenüber dem oberen Neckar länger an und zieht sich im dargestellten Jahr bis in die Sommermonate.

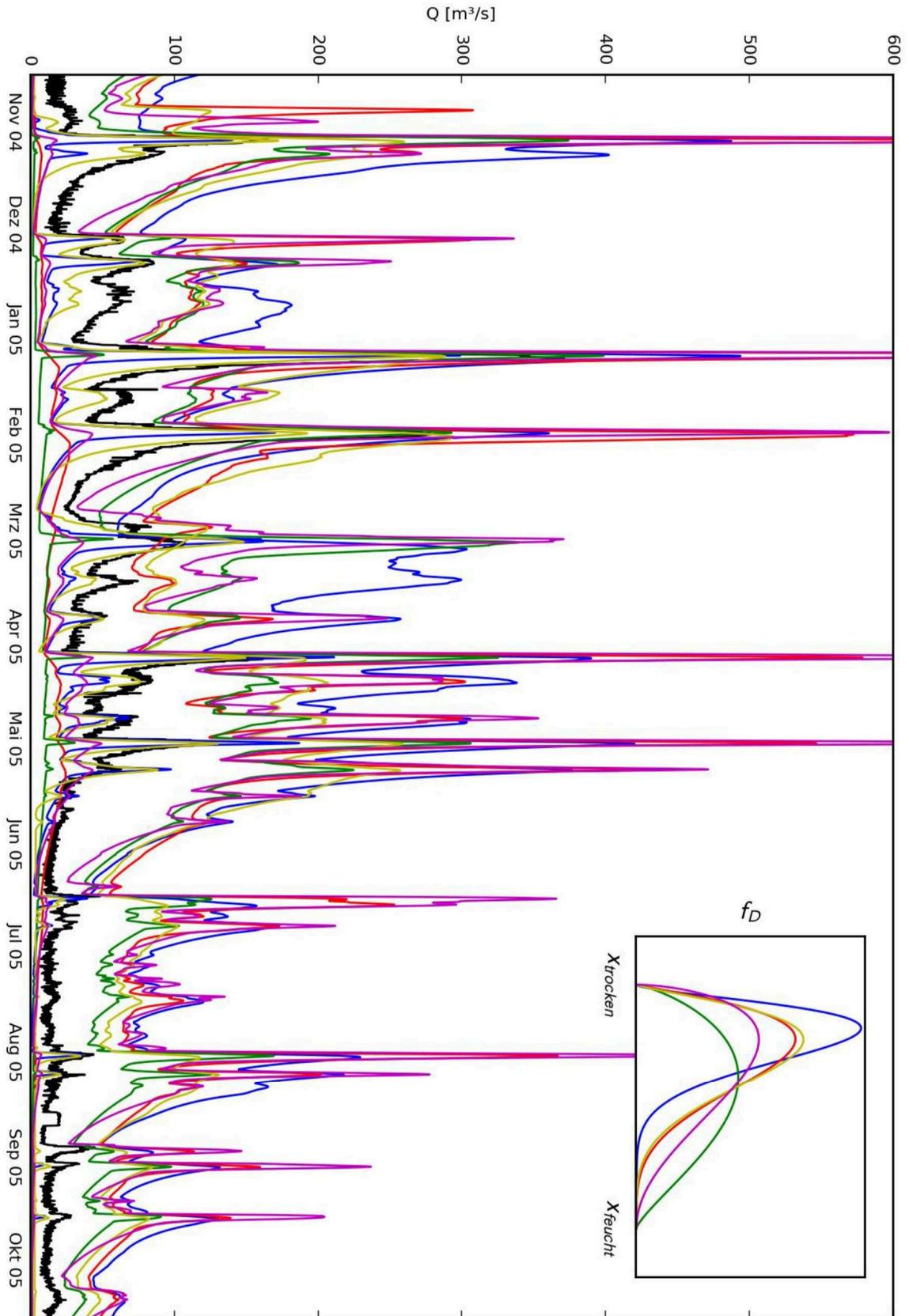


Abbildung 5.20: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV_{96} für die Lahn analog zu Abbildung 5.18.

Die gute Performance der größeren Ensembles in der Validierung lässt diese für die Identifikation modellstruktureller Unsicherheiten interessant erscheinen. Bei der Interpretation gilt es jedoch zu berücksichtigen, dass größere Ensembles aus zwei Gründen funktional identisch mit kleineren Ensembles sein können. Erstens beeinflussen schwach gewichtete Ensemble-Member die Strukturdichte nicht wesentlich. Die Parametrisierungen und Ganglinien solcher Member sind möglicherweise reine Zufallsprodukte. Zweitens simulieren funktional ähnliche Member ähnliche Abflussreihen und bringen keine neuen Informationen in die Analyse ein. In den 3-Modell-Ensembles der Lahn ist das in Abbildung 5.21 rot eingezeichnete Ensemble ein Beispiel für den ersten und das gelb eingezeichnete Ensemble ein Beispiel für den zweiten Fall.

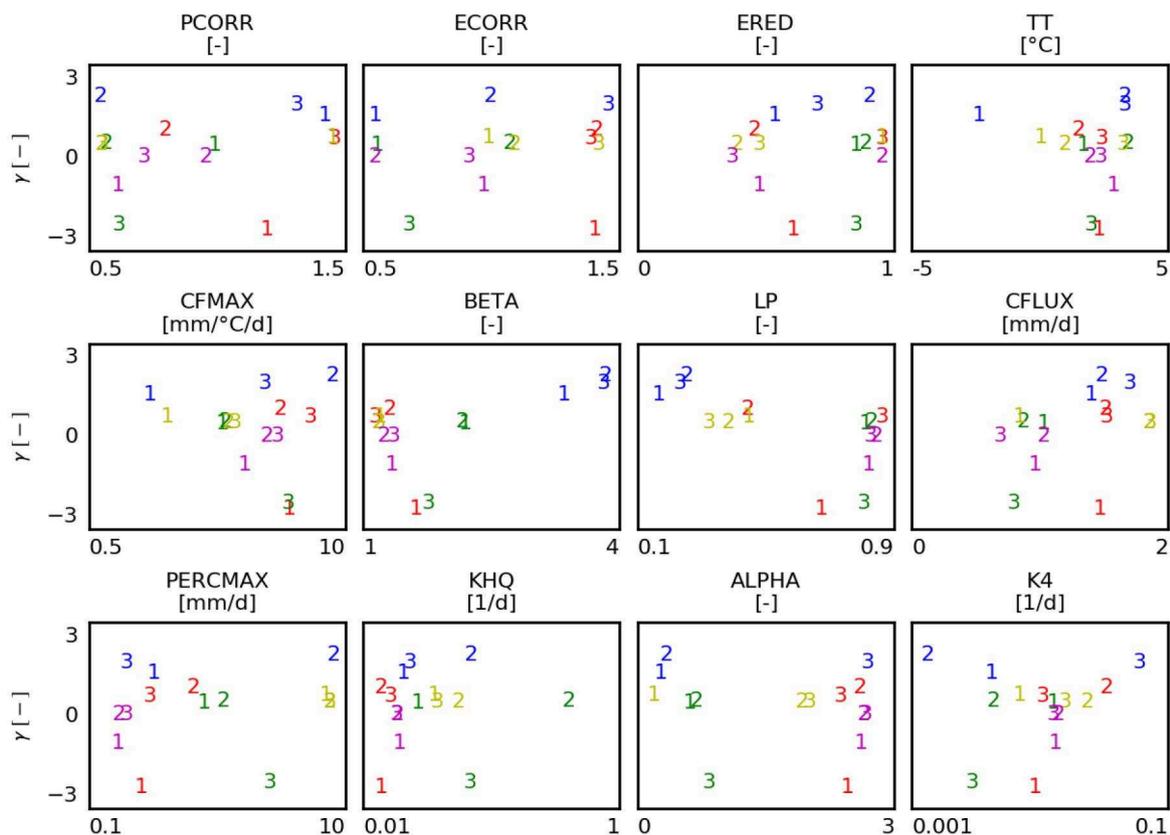


Abbildung 5.21: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für die Lahn analog Abbildung 5.15.

Von allen 3-Modell-Ensembles deutet das blau eingezeichnete den höchsten Informationsgehalt an. Zum einen sind alle drei Member bei ähnlicher Gewichtung unterschiedlich parametrisiert. Zum anderen fallen die erzielten Likelihood-Werte sowohl in der Kalibrierung als auch in der Validierung überdurchschnittlich aus.

Abbildung 5.22 zeigt die Simulationsergebnisse dieses 3-Modell-Ensembles. Da nicht nur f_D sondern auch die zeitvariablen Simulationsergebnisse der Member die Form von f_S bestimmen, sind deren Quantile in Rotschattierungen über die Zeit aufgetragen und ist f_D separat

in einem Mischungsdreieck dargestellt. Die verschiedenen Blautöne ermöglichen die Zuordnung der Ganglinien zu den Endpositionen dieses Mischungsdreiecks.

Die Ganglinie des feuchten Members des gewählten 3-Modell-Ensembles (dunkelblau) hebt sich nicht erkennbar von den Ganglinien der feuchten Member der 2-Modell-Ensembles ab. Der große Abstand des Maximums von f_D zur dunkelblau markierten Ecke des Mischungsdreiecks zeigt aber an, dass deren Gewichtung vergleichsweise gering ausfällt. Die Funktion des trockenen Members der 2-Modell-Ensembles ist beim gewählten 3-Modell-Ensemble ins Extrem gesteigert: die korrespondierende Ganglinie (mittelblau) befindet sich beinahe durchgehend nahe der Nulllinie. Hinzu kommt ein Member, dessen Beitrag zum Abfluss auf die feuchte Jahreszeit beschränkt ist (hellblau). Darin stimmt er mit den trockenen Members der 2-Modell-Ensembles überein, simuliert allerdings einen deutlich dynamischeren Abflussverlauf mit zahlreichen spitzen Hochwasserereignissen.

Auf die Simulationsgüte bezogen fällt die Bewertung des gewählten Ensembles gemischt aus. Einerseits wird die Dynamik des gemessenen Abflusses für HBV₉₆-Verhältnisse über weite Strecken sehr realistisch durch die Quantile von f_S nachgezeichnet. Die zahlreichen kleineren Abweichungen sind zu erwarten, da die Unsicherheit der Abflussmessung unberücksichtigt bleibt. Wird diese einbezogen, fallen die Quantile insbesondere in den höheren Abflussbereichen deutlich breiter aus. Andererseits finden sich in März und Mai Diskrepanzen, die allein über die fehlende Berücksichtigung der Abflussdatenunsicherheit nicht zu begründen sind. Offensichtlich sind die Quantile von f_S in Teilzeiträumen eine unzuverlässige Schätzung des Bereichs des tatsächlichen Abflusses.

Der extremste Simulationsfehler steht mit einer Schneeschmelze Ende März in Verbindung, resultierend aus einem markanten Temperaturanstieg. Der feuchte Member (dunkelblau) reagiert mit einem niedrigen Temperaturgrenzwert von ca. $-2,6\text{ °C}$ früh und mit einem niedrigen Grad-Tag-Faktor von ca. $2,5\text{ mm/°C/d}$ langsam. Der dynamische Member (hellblau) reagiert mit einem hohen Temperaturgrenzwert von ca. $3,6\text{ °C}$ spät und mit einem hohen Grad-Tag-Faktor von ca. $7,2\text{ mm/°C/d}$ schnell. Infolge der starken Gewichtung des dynamischen Members spiegelt die Strukturdicke dessen extremes Reaktionsverhalten zu stark wider.

Eine simple Nachkalibrierung des dynamischen Members auf einen Temperaturgrenzwert von 2 °C und einen mittleren Grad-Tag-Faktor von ca. $3,6\text{ mm/°C/d}$ behebt die extreme Fehleinschätzung des Schneeereignisses. Darüber hinaus erhöht sich die Likelihood im Kalibrierzeitraum von $-1,74$ auf $-1,70$ und im Validierzeitraum von $-1,77$ auf ebenfalls $-1,70$. Diese einfach erzielbare Verbesserung im Kalibrierzeitraum verweist deutlich auf ein Defizit der gewählten Kalibrierstrategie. Zudem wird deutlich, dass die Anwendung größerer Ensembles trotz höherer Langzeit-Likelihoods nicht zwangsläufig mit einer Zunahme an Robustheit für Einzelereignisse einhergeht – zumindest dann nicht, wenn ERA sich stark an EPA annähert und dadurch trotz weiter Ensemble-Spannen enge Schätzungen des tatsächlichen Abflussbereichs abgibt.

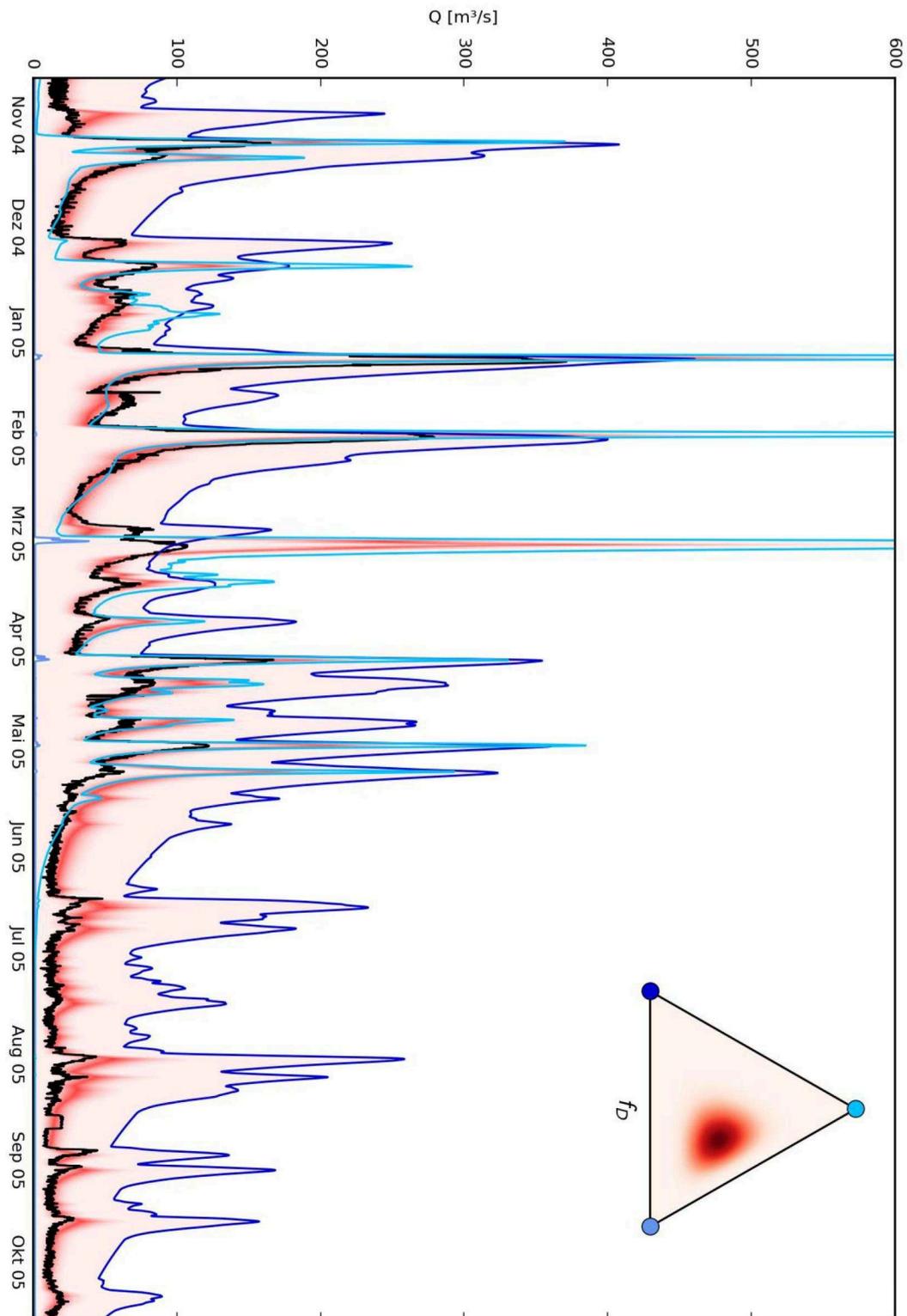


Abbildung 5.22: Darstellung der Abflussganglinien der Member eines 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für die Lahn. Zusätzlich ist die bivariate Dirichletverteilung (f_D) in einem Mischungsdreieck und die univariate Strukturunsicherheit (f_S) als Simulations-Unsicherheitsband in Rottönen eingezeichnet. Die verschiedenen Blautöne erlauben die Zuordnung der simulierten Ganglinien zu den Endpunkten des Mischungsdreiecks. Die beobachtete Abflussganglinie ist schwarz eingezeichnet.

Selbst unter Berücksichtigung der beschriebenen Verbesserung der Schneeereignis-Simulation bleibt es fraglich, ob das diskutierte 3-Modell-Ensemble ein Potenzial in der Identifikation modellstruktureller Unsicherheit birgt, welches über das der 2-Modell-Ensembles hinausgeht. Der dynamische Member simuliert eine ähnliche Saisonalität des Basisabflusses wie die trockenen Member der 2-Modell-Ensembles. Der extrem trockene Member des 3-Modell-Ensembles zieht die Strukturdichte nach unten und lässt der Ganglinie des dynamischen Members den Spielraum, die Ganglinien des feuchten Members zu kreuzen, ohne dass die Strukturdichte auf einen Punkt zusammenfällt. Dieses Verhalten scheint mehr mit der Funktionsweise der gewählten ERA-Umsetzung als mit der des hydrologischen Modells in Verbindung zu stehen.

Die in Tabelle 5.8 gegebenen Likelihood-Werte der Nahe bestätigen die obigen Ergebnisse. Erneut deutet sich keine systematische Überanpassung der 4-Modell-Ensembles an. Gegenüber dem 2-Modell-Ensemble fallen die Kalibrier-Likelihoods etwas schlechter und die Validier-Likelihoods (bis auf einen Ausreißer) besser aus.

Tabelle 5.8: Likelihood-Werte, HBV₉₆, Nahe.

1 Modell		2 Modelle		3 Modelle		4 Modelle	
Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Val.
-5.83	-7.06	-1.62	-1.72	-1.64	-1.93	-1.62	-1.55
-5.85	-7.16	-1.65	-2.26	-1.65	-2.22	-1.68	-1.63
-5.88	-7.21	-1.66	-2.08	-1.67	-2.22	-1.73	-1.99
-6.00	-7.58	-1.70	-1.98	-1.68	-1.63	-1.80	-1.80
-6.30	-7.47	-1.73	-1.97	-1.77	-2.10	-1.86	-2.84

Abbildung 5.23 zeigt für die Nahe die bereits für den oberen Neckar und die Lahn festgestellte Aufteilung der Ensembles in einen trockenen und einen feuchten Member (in allen Fällen) mit einer stärkeren Wichtung des trockenen Members (in vier von fünf Fällen). Unabhängig von der noch offenen Interpretation dieses Befunds ist festzuhalten, dass ein gebietsübergreifendes Phänomen vorliegt.

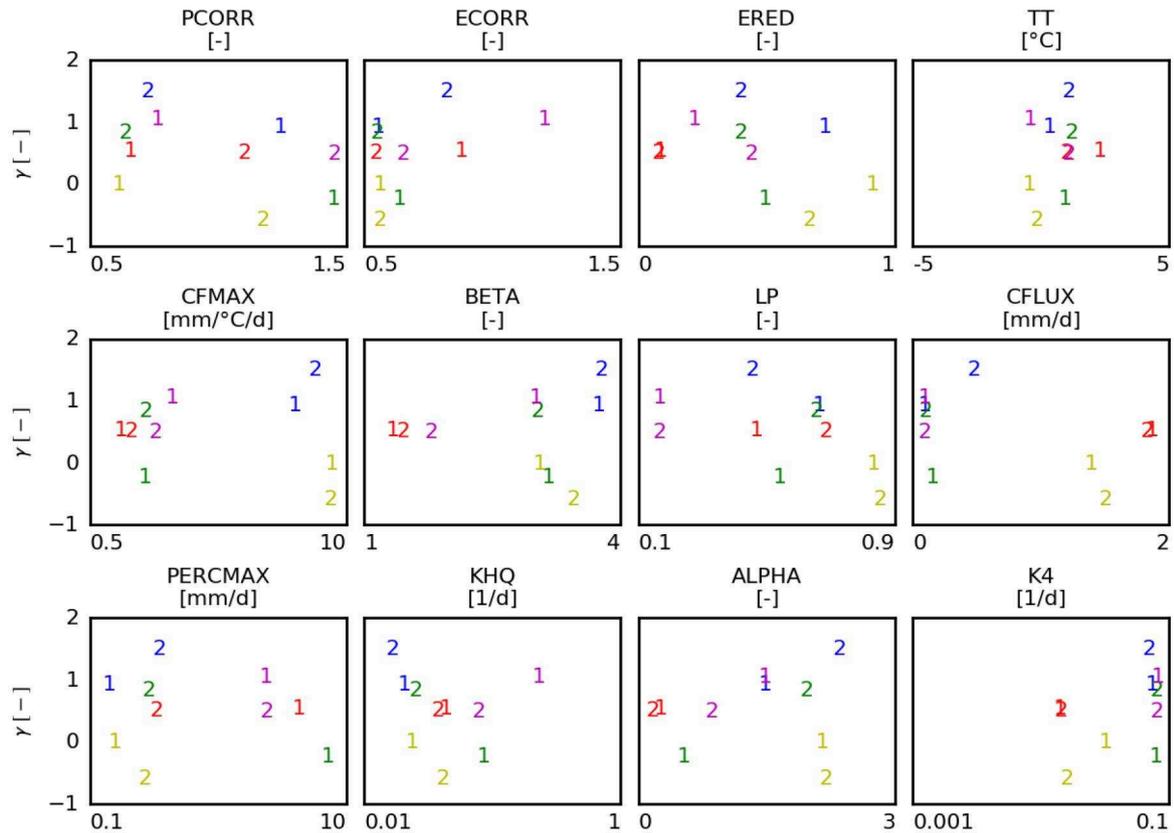


Abbildung 5.23: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für die Nahe analog Abbildung 5.15.

Einige der in Abbildung 5.24 dargestellten Simulationsergebnisse der 2-Modell-Ensembles zeigen die bereits für den oberen Neckar diskutierten Knickpunkte am Ende von Direktabflussereignissen (insb. rot und magenta). Die Ganglinien des 2-Modell-Ensembles mit der höchsten Kalibrier- und Validier-Likelihood (blau) ähneln denen der besseren 2-Modell-Ensembles des oberen Neckars und der Lahn. Einen gewissen funktionalen Unterschied weisen die gelb und grün eingezeichneten Ensembles auf, deren Strukturdichten zur Ausgabe der trockenen Member hin zunehmen. Diese trockenen Member produzieren Ganglinien, die im Winterhalbjahr stärker mit der Abflussmessung übereinstimmen und auch im Sommerhalbjahr einen relevanten Abflussbeitrag leisten.

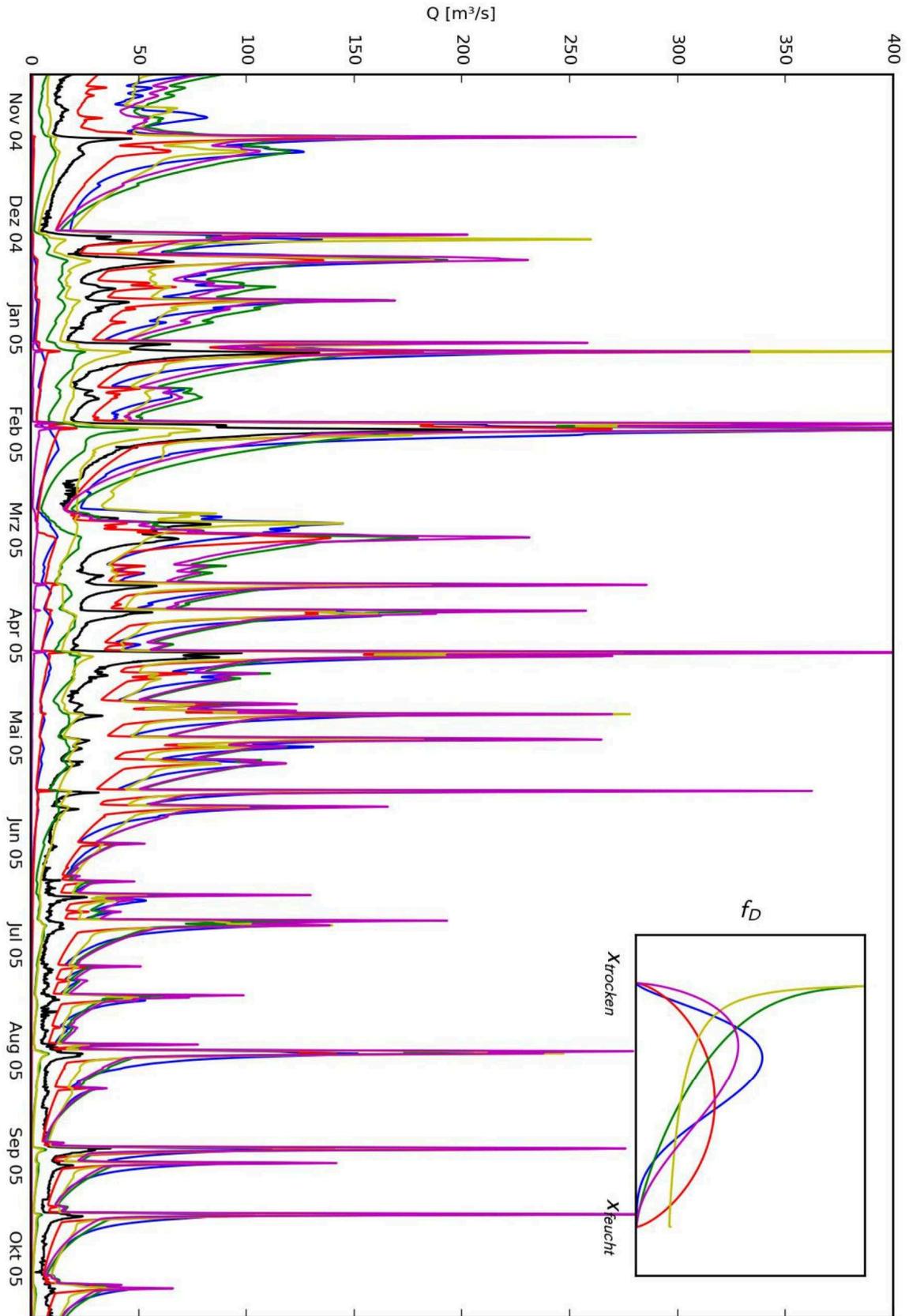


Abbildung 5.24: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV₉₆ für die Nahe analog zu Abbildung 5.18.

Durch die Wiederholung der Untersuchung für den oberen Neckar, allerdings unter Verwendung von LARSIM_{ME} statt von HBV₉₆, wird der Frage nachgegangen, inwiefern die bislang diskutierten Ergebnisse modellspezifischer Natur sind. Ferner wird geprüft, ob bei einer weiteren Vergrößerung der Ensembles auf zehn Member Überanpassungen an die Abflussmessreihen des Kalibrierzeitraums auftreten.

Die Likelihood-Werte in Tabelle 5.9 bestätigen die für HBV₉₆ angestellten Befunde zur Wirkungsweise von ERA. Die Verbesserung gegenüber der Verwendung von SMA ist erneut signifikant. Trotz etwas schlechterer Kalibrier-Likelihoods fallen die Validier-Likelihoods der 4-Modell-Ensembles besser als die der 2-Modell-Ensembles aus. Die Kalibrier- und Validier-Likelihoods der 10-Modell-Ensembles ähneln denen der 2-Modell-Ensembles. Soweit zeigt die Verwendung sehr großer Ensembles weder Vor- noch Nachteile gegenüber der Verwendung kleiner Ensembles.

Tabelle 5.9: Likelihood-Werte, LARSIM_{ME}, oberer Neckar (1) .

1 Modell		2 Modelle		3 Modelle		4 Modelle		10 Modelle	
Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Kal.	Kal.	Val.	Kal.	Val.
-4.79	-5.89	-1.29	-1.76	-1.24	-1.90	-1.41	-1.47	-1.22	-1.45
-4.79	-5.97	-1.35	-2.33	-1.36	-1.64	-1.42	-1.55	-1.38	-1.92
-5.09	-5.99	-1.36	-1.49	-1.43	-1.98	-1.54	-1.67	-1.42	-2.29
-5.09	-5.80	-1.40	-1.97	-1.52	-2.05	-1.56	-1.98	-1.55	-1.75
-5.12	-6.34	-1.40	-1.99	-1.54	-1.65	-1.59	-1.93	-1.67	-2.10

Die Parametrisierung der 2-Modell-Ensembles wird in Abbildung 5.25 dargestellt. Beachtenswert sind zunächst die Parameterwerte der Korrekturfaktoren des Niederschlags (*KG*) und der Verdunstung (*KE*). Unabhängig davon, ob HBV₉₆ oder LARSIM_{ME} zum Einsatz kommt, werden die Ensembles grundsätzlich in einen trockenen und einen feuchten Member differenziert. Mit einer Ausnahme (magenta) stimmen die Wichtungrelationen der Member ebenfalls überein. Bis auf den Eichfaktor *EQD* der Direktabflusskonzentration im genannten Parametersatz sowie die Abflussbildungsparameter *BSF* und *WZBo* im rot dargestellten Parametersatz ergeben sich keine deutlichen ensembleinternen Variationen in der Wertebelegung.

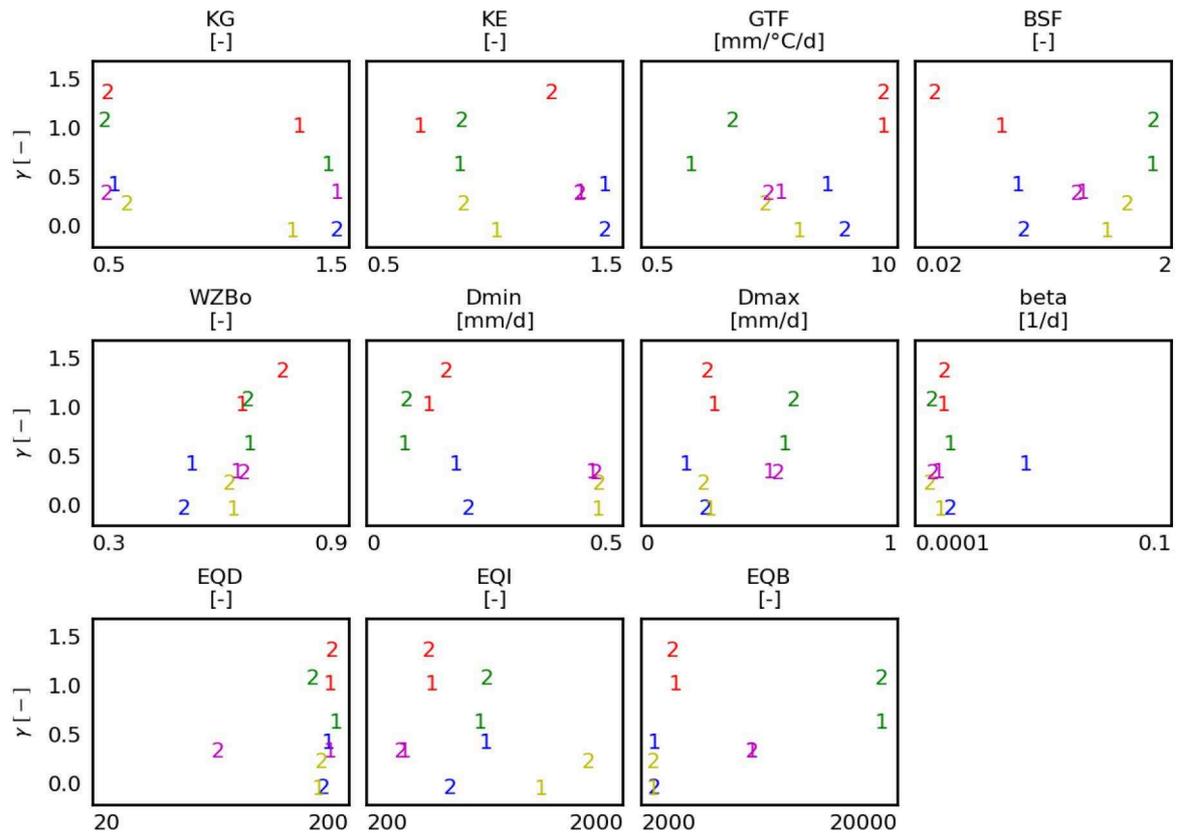


Abbildung 5.25: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von $LARSIM_{ME}$ für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15. Kalibriert wurden der Niederschlagskorrekturfaktor (KG), der Verdunstungskorrekturfaktor (KE), der Temperaturgrenzwert (TGr), der Grad-Tag-Faktor (GTF), die blattflächenindexbezogene Interzeptionskapazität ($HINZ$), die nutzbare Feldkapazität (nFK), der Bodensättigungsfläche-Parameter (BSF), der relative Bodenwassergrenzwert ($WZBo$), die Maximalrate des langsamen Interflow ($Dmin$), die Maximalrate des gesamten Interflow ($Dmax$), der Koeffizient der Basisabflussbildung ($beta$) sowie die Kalibrierfaktoren der Einzellinearspeicher für Direktabfluss (EQD), Interflow (EQI) und Basisabfluss (EQB).

Die Abflussreihen der trockenen sowie der feuchten Member fallen ensembleübergreifend noch ähnlicher aus, als für HBV_{96} festgestellt. Dies könnte auf die stetigere Prozessabbildung von $LARSIM_{ME}$ (siehe Abschnitt 4.9) oder den Wechsel von der Stunden- auf die Tagesschrittweite zurückzuführen sein. Im Gegensatz zu HBV_{96} gibt jeder Member eines Ensembles den zeitlichen Verlauf der (mittelwertverschobenen) gemessenen Ganglinie gut wieder. Auch hier bleibt offen, ob dies an einer effizienteren Abbildung der zugrundeliegenden hydrologischen Prozesse durch $LARSIM_{ME}$ liegt, worauf die Ergebnisse in Tyralla und Schumann (2016b) hindeuten, oder ob der Wechsel zur Tagesschrittweite ausschlaggebend ist.

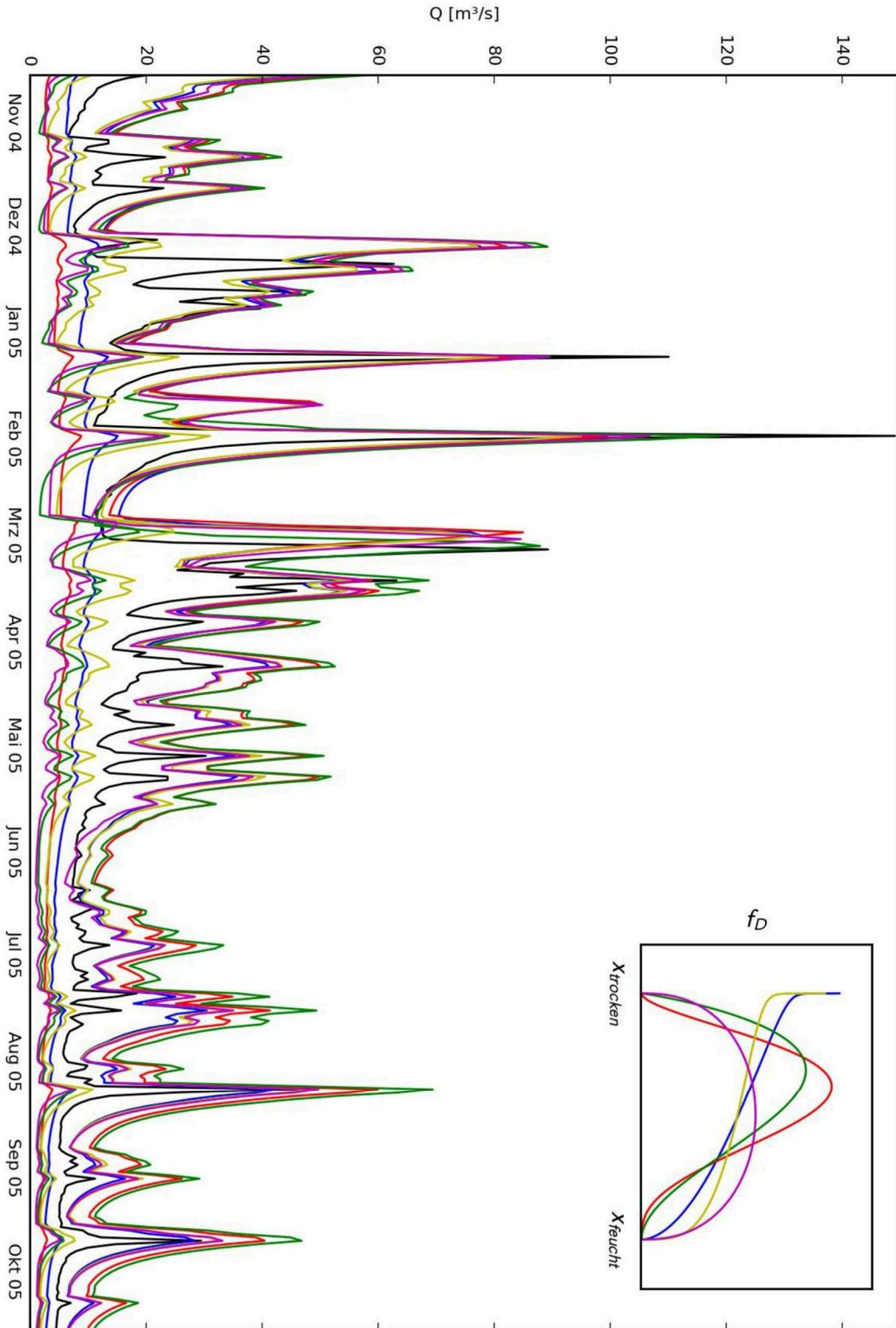


Abbildung 5.26: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von $\text{LARSIM}_{\text{ME}}$ für den oberen Neckar analog zu Abbildung 5.18.

Abbildung 5.27 gibt ergänzend die Parametrisierung der 10-Modell-Ensembles an. Der Wertebereich der Dirchlet-Parameter ist gegenüber den 2-Modell-Ensembles vom Positiv- in den Negativbereich verschoben. Beachtenswert, weil sehr unterschiedlich von den bislang diskutierten Beispielen, ist das gelb eingezeichnete Ensemble. Hierbei approximiert ERA EDA mit annähernd identischen Wichtungsfaktoren, weshalb der Wertebereich von KE und insbesondere der von KG relativ gleichmäßig durch die einzelnen Ensemble-Member abgedeckt wird. Ansonsten zeigen sich eher geringe ensembleinterne Variationen der Parameterwerte. Die größten treten für $beta$ und EQB auf, wobei aufgrund des gemeinsamen Einflusses dieser Parameter auf die Basisabflusskonzentration gewisse Aufhebungseffekte nicht auszuschließen sind.

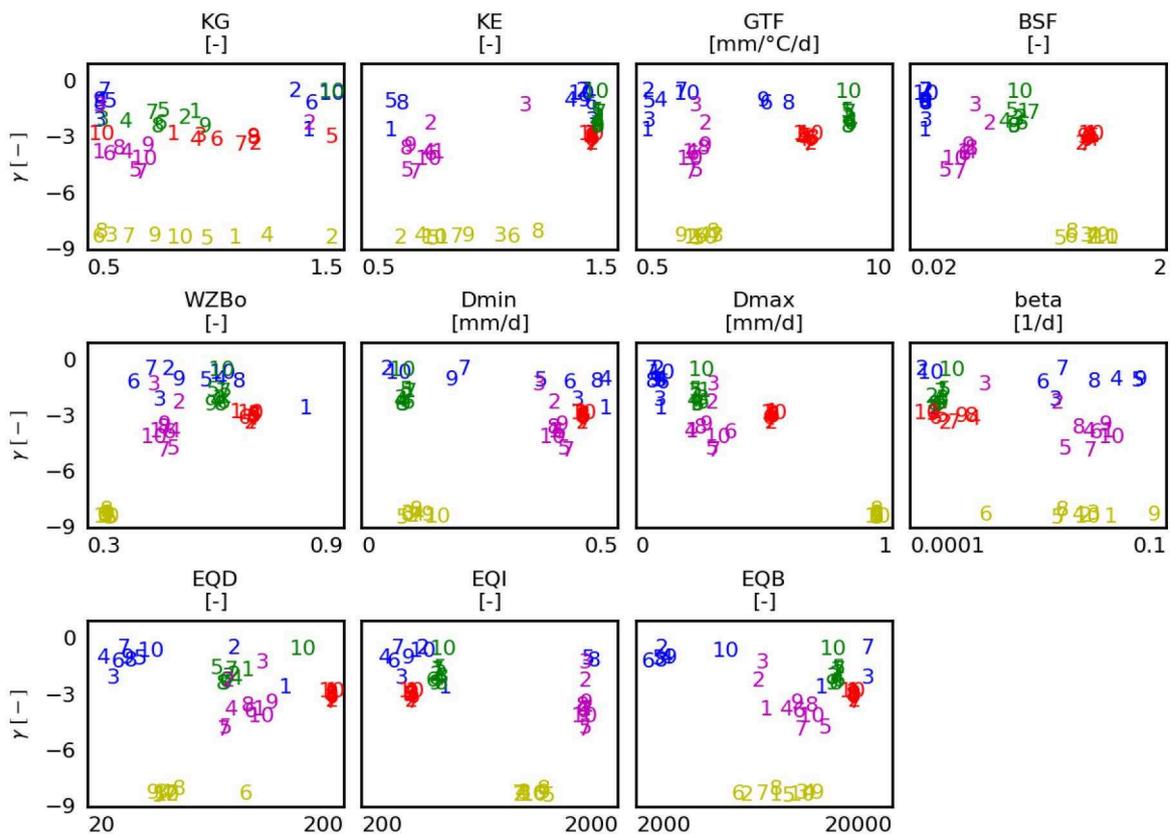


Abbildung 5.27: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 10-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.

Beim Einsatz kleiner Ensembles nehmen die einzelnen Member Extreme ein und die Strukturunsicherheitsfunktion transformiert diese Extreme in eine Schätzung des Kontinuums der durch das Modell nicht explizit berücksichtigten Prozessvariabilität. Die Member großer Ensembles können dieses Kontinuum dagegen direkt repräsentieren. Abbildung 5.28 veranschaulicht dies anhand der Simulationsergebnisse des diskutierten 10-Modell-Ensembles, wobei aufgrund der hohen Dimensionalität des Problems die graphische Darstellung der Dichte der Dirchletverteilung entfallen muss.

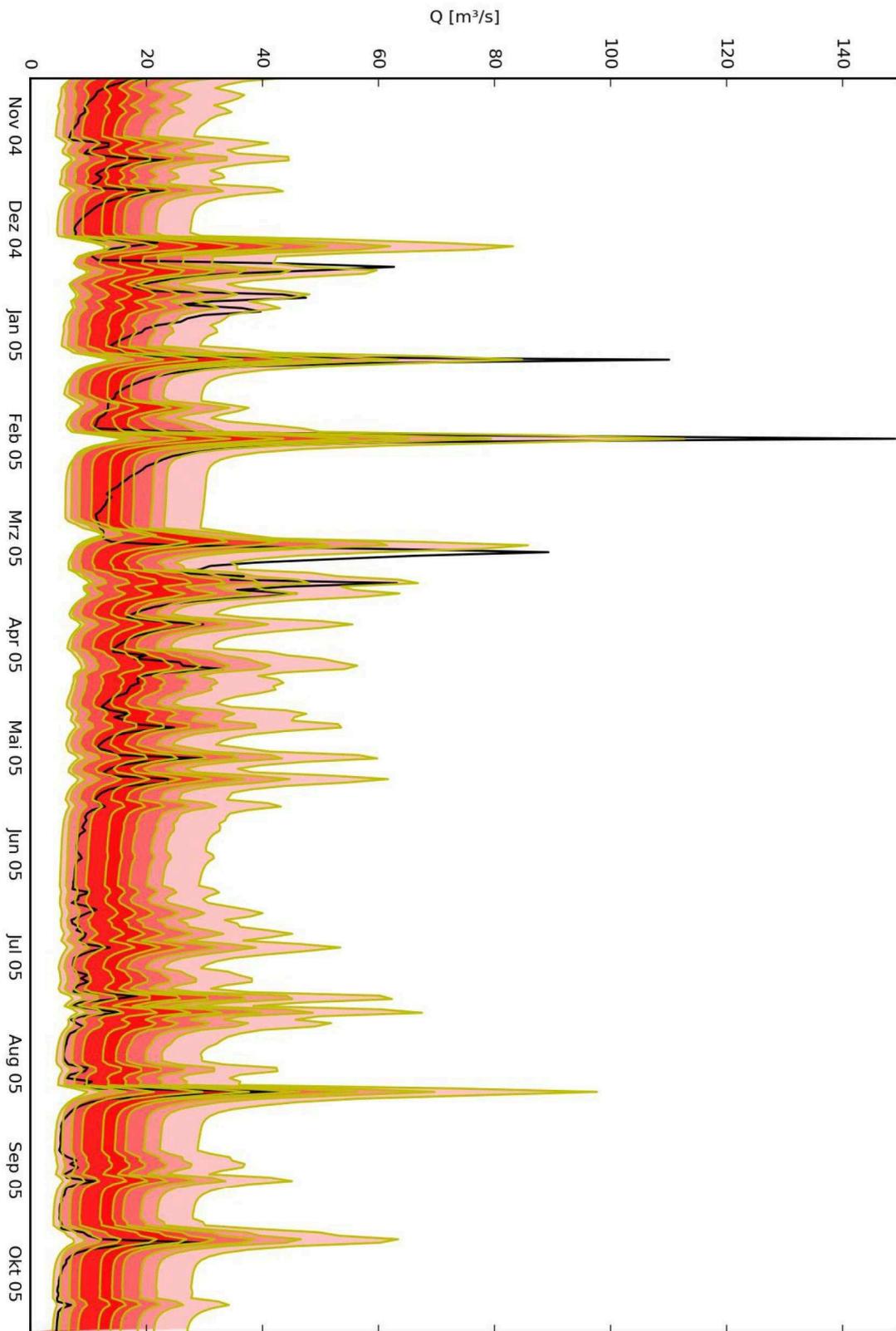


Abbildung 5.28: Darstellung der Abflussganglinien der Member eines 10-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar. Die beobachtete Abflussganglinie ist schwarz und die simulierten Abflussganglinien sind gelb eingezeichnet. Zusätzlich ist univariate Strukturunsicherheit (f_S) als Simulations-Unsicherheitsband in Rottönen dargestellt.

Die simulierten Ganglinien aller Member verlaufen weitgehend parallel; Schnittpunkte treten lediglich vereinzelt auf. Die gemessene Abflussganglinie liegt fast durchgehend im Schätzbereich des tatsächlichen Abflusses, welcher – im Gegensatz zu den in Abbildung 5.22 dargestellten EPA-nahen Ergebnissen – äußerst breit ausfällt. Als Unterschied zu den auf LARSIM_{ME} basierenden 2-Modell-Ensembles ist festzuhalten, dass die Abflussunterschätzung des trockensten Members im Sommerhalbjahr eher gering und die Abflussüberschätzung des feuchtesten Members im Sommerhalbjahr teils extrem ausfällt.

Die bisherigen Untersuchungen schließen nicht aus, dass die beständige Differenzierung der 2-Modell-Ensembles in einen trockenen und einen feuchten Member aus der gewählten Kalibrierstrategie resultiert. Jeder Kalibrierlauf startet mit der identischen Parametrisierung aller Member des Ensembles. Denkbar ist, dass BOBYQA von dieser Situation ausgehend den direktesten Weg zur Erhöhung der Likelihood stets über die Divergenz der Korrekturfaktoren der Eingangsdaten findet, aber auch andere Konstellationen auf indirekterem Weg zu ähnlichen finalen Likelihood-Werten führen. Um dies zu prüfen, wird der zuletzt diskutierte Versuchsaufbau mit dem Unterschied wiederholt, dass die Korrekturfaktoren *KG* und *KE* während des gesamten Kalibrierlaufs mit ensembleweit identischen Werten belegt werden. Dies soll die Suche nach einer alternativen, ähnlich wirksamen Hypothese über die zugrundeliegenden Unsicherheitsquellen erzwingen.

Tabelle 5.10 gibt die so erzielten Likelihood-Werte an. Am Prinzip der Kalibrierung des einzelnen Modells ändert die zusätzliche Restriktion nichts, weshalb die ersten beiden Spalten Tabelle 5.9 entnommen sind. ERA erhöht die Likelihood gegenüber SMA zwar weiterhin signifikant, die zuvor erzielte Likelihood (Tabelle 5.9) bleibt jedoch unerreicht. Folglich repräsentiert ERA die Simulationsunsicherheit schlechter, wenn die Korrekturfaktoren der Eingangsdaten nicht in die Konstruktion der Strukturunsicherheitsfunktion einbezogen werden.

Tabelle 5.10: Likelihood-Werte, LARSIM_{ME}, oberer Neckar (2).

1 Modell		2 Modelle		3 Modelle		4 Modelle		10 Modelle	
Kal.	Val.	Kal.	Val.	Kal.	Kal.	Kal.	Val.	Kal.	Val.
-4.79	-5.89	-2.10	-2.40	-1.93	-2.87	-1.72	-1.97	-1.57	-2.17
-4.79	-5.97	-2.38	-2.77	-2.05	-3.15	-1.93	-2.88	-1.90	-2.81
-5.09	-5.99	-2.43	-3.46	-2.40	-3.69	-1.96	-2.88	-1.93	-2.57
-5.09	-5.80	-2.44	-3.14	-2.55	-3.37	-2.31	-2.82	-2.00	-2.62
-5.12	-6.34	-2.65	-3.67	-2.56	-4.01	-2.34	-2.81	-2.01	-2.78

Die zusammengehaltenen Werte von *KG* und *KE* der 2-Modell-Ensembles liegen nach Abbildung 2.1 etwa mittig im Kalibrierintervall, d. h. es findet allenfalls eine geringe Volumen-anpassung statt. Die fehlende ensembleinterne Variationsmöglichkeit für *KG* und *KE* wird

durch andere Parameter kompensiert. Eine zentrale Rolle kommt hierbei den Abflussbildungsparametern des Bodenmoduls zu; beim in Kalibrierung und Validierung besten Ensemble (blau) insbesondere dem Basisabflussbildungsparameter β , der die Werte der beiden Kalibrierergrenzen annimmt.

Bei einem großen Wert für β wird das im Boden gespeicherte Wasser beinahe vollständig sowie beinahe saisonunabhängig an den Basisabflusskonzentrationspeicher weitergereicht. Es resultiert ein hoher, kaum saisonaler Basisabfluss. (Die blau eingezeichnete Ganglinie des korrespondierenden Members enthält zudem mehrere Direktabflussereignisse. Die Belegung des Parameters β mit dem Wert zwei führt bereits bei geringer relativer Bodenfeuchte zur Annahme hoher Sättigungsflächenanteile; siehe Abschnitt 4.7.3.)

Bei einem kleinen Werte von β verbleibt das gespeicherte Wasser dagegen längere Zeit im Boden und wird diesem primär durch die Verdunstung entzogen. Mit der geringen potenziellen Verdunstung im Winterhalbjahr steigt die Bodenfeuchte und infolgedessen nimmt die Direktabflussbildung zu.

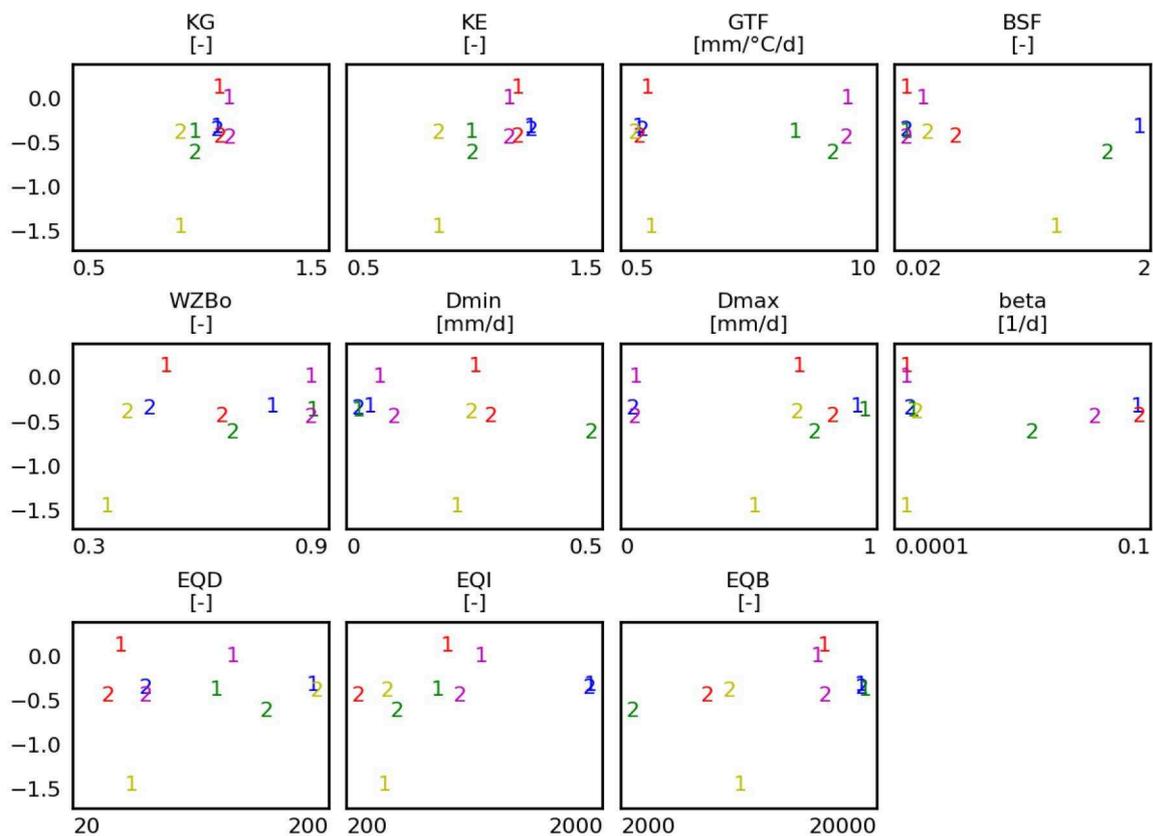


Abbildung 5.29: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.25, aber unter ensembleinterner Fixierung des Niederschlagskorrekturfaktors (KG) sowie des Verdunstungskorrekturfaktors (KE).

Abbildung 5.30 veranschaulicht den Effekt der Restriktion auf die Abflusssimulation, welcher anhand des bislang diskutierten, blau eingezeichneten Ensembles beschrieben sei. Meistens ist die (Basisabfluss-)Ganglinie des Members mit großem β -Wert die maximale Abflussschätzung des Ensembles. Während der winterlichen Hochwasserscheitel liegt diese jedoch deutlich unterhalb der (Direktabfluss-)Ganglinie des Members mit kleinem β -Wert. Folglich schneiden sich die beiden Ganglinien in den steigenden und fallenden Ästen der winterlichen Hochwasserereignisse. Die Ganglinien der anderen Ensembles weisen, wenn auch teils in unterschiedlicher Ausprägung und aus unterschiedlichen Gründen, dasselbe Muster auf.

Das Schneiden der Ganglinien des diskutierten 2-Modell-Ensembles verringert die erreichbare Likelihood und ist für die realistische Schätzung der Simulationsunsicherheit problematisch. Von einer kleinen Massekonzentration am Rand abgesehen, nimmt die Strukturdichte (f_S bzw. f_D) eine Gleichverteilung an. Der tatsächliche Abfluss wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit an allen Positionen innerhalb der jeweiligen Ensemble-Spanne vermutet; Abflusswerte außerhalb der Ensemble-Spanne gelten als unmöglich bzw. als Resultat von Messfehlern. Nun ist diese Spanne im Sommerhalbjahr relativ breit und insbesondere in den steigenden und fallenden Ästen der winterlichen Hochwasserereignisse ausgesprochen schmal. Die restriktivere Handhabung von KG und KE erzwingt offenbar eine dem hydrologischen Erfahrungswissen konträre Schätzung des zeitlichen Verlaufs der Unsicherheit des tatsächlichen Abflusses.

Es ließe sich vermuten, dass dieses Problem unter Verwendung größerer Ensembles umgangen werden kann. Umso mehr funktional unterschiedliche Member die Strukturdichte prägen, desto weniger fällt diese in einem Punkt zusammen, wenn sich zwei Ganglinien schneiden. Tabelle 5.10 liefert hierauf keinen Hinweis. Ob die gewählte Kalibrierstrategie die damit verbundenen Parameterkombinationen nicht zu finden imstande ist, oder ob diese Parameterkombinationen mit anderen, negativen Effekten einhergehen, bleibt offen.

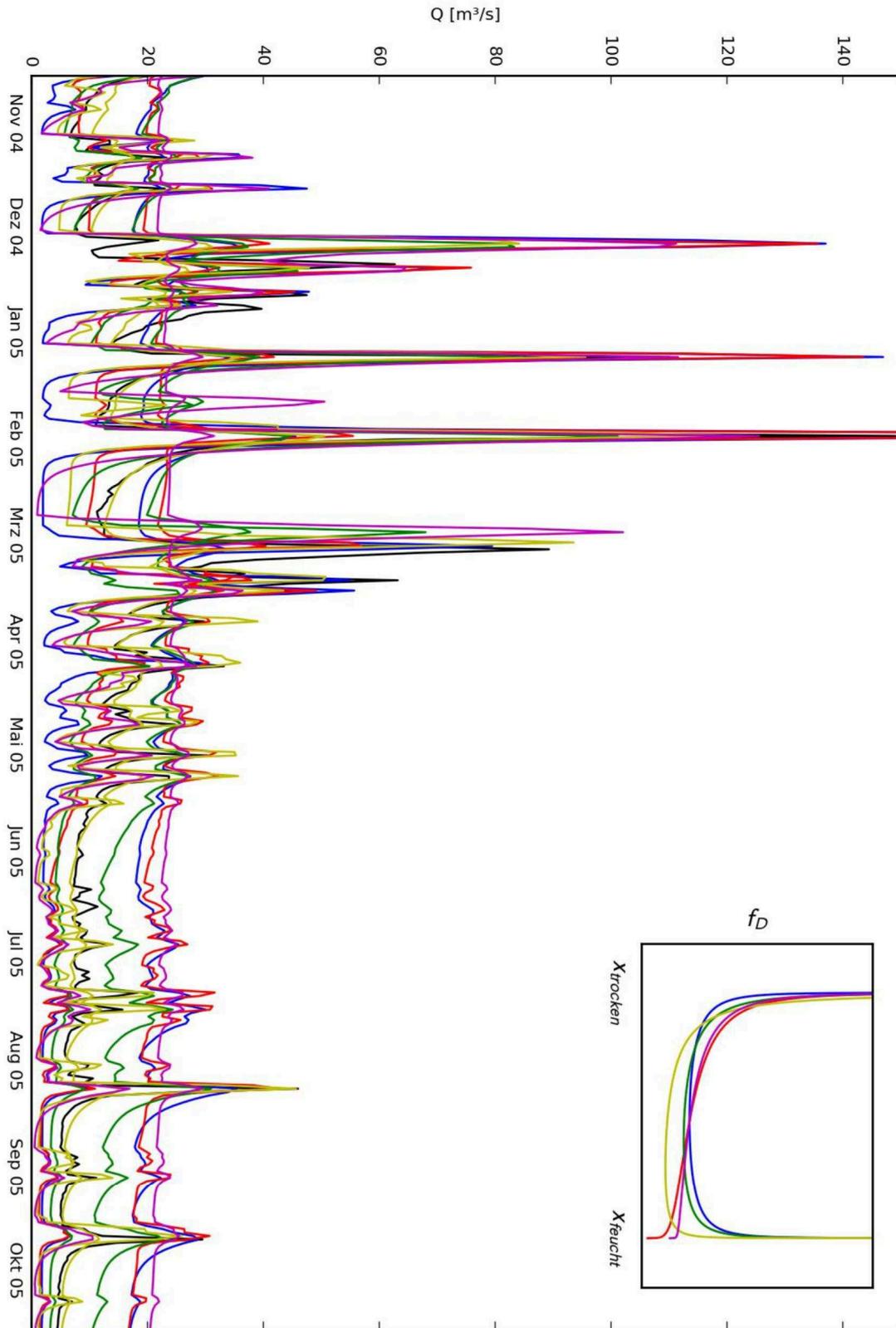


Abbildung 5.30: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar analog zu Abbildung 5.26, aber unter ensembleinterner Fixierung des Niederschlagskorrekturfaktors sowie des Verdunstungskorrekturfaktors.

5.4.4 Diskussion

Alle in Abschnitt 5.4.3 durchgeführten Untersuchungen weisen darauf hin, dass ERA die Simulationsunsicherheit nur adäquat abzubilden imstande ist, wenn die eingangsdatenbezogenen Korrekturfaktoren $PCORR$ und $ECORR$ (HBV₉₆) bzw. KG und KE (LARSIM_{ME}) bei der Konstruktion der Strukturunsicherheitsfunktion f_S Berücksichtigung finden. Ansonsten schneiden sich die Ganglinien der einzelnen Member eines Ensembles und f_S fällt – zumindest beim Einsatz von nur zwei Modellen – an ebendiesen Schnittpunkten in sich zusammen. In der Konsequenz gibt ERA (in der für LARSIM_{ME} angestellten Untersuchung) ausgerechnet in den steigenden und fallenden Ästen winterlicher Hochwasser vermeintlich exakte Schätzungen des tatsächlichen Abflusses ab.

Abschnitt 5.4.1 verweist auf die Beobachtung von Tyralla und Schumann (2016b), dass ERA bei Verwendung von 2-Modell-Ensembles zur weitgehenden Approximation von EPA neigt. Dieser scheinbare Widerspruch zu den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit löst sich auf, wenn die unterschiedlichen Versuchsspezifikationen in Betracht gezogen werden.

Nach ERA ergibt sich die Simulationsunsicherheit idealtypisch aus der durch f_S repräsentierten Prozessunsicherheit und der durch f_ε repräsentierten Unsicherheit der Abflussmessung. Im aktuellen Versuchsaufbau, beschrieben in Abschnitt 5.4.2, wird die Form und Breite von f_ε , möglichst konsistent mit unabhängigen Abflussmessfehleranalysen, bereits vor der algorithmischen Parameterkalibrierung festgelegt. Somit wird f_S geradezu gezwungen, die verbleibende Simulationsunsicherheit – welche nicht nur aus der Prozess-, sondern auch aus der Eingangsdatenunsicherheit resultiert – abzubilden.

Dem Versuchsaufbau von Tyralla und Schumann (2016b) folgend wird die Form und Breite von f_ε ohne realitätsbezogene Einschränkung simultan mit den Ensemble- und Modellparametern bestimmt. Im Ergebnis bildet f_ε die gesamte Simulationsunsicherheit ab und reduziert sich f_S auf die einfache gewichtete Mittelung der Modellausgaben entsprechend EPA. Daher können sich, wie in Tyralla und Schumann (2016b) in Abschnitt 7.2 visualisiert, die Ganglinien der Ensembles schneiden, ohne dass sich die geschätzte Simulationsunsicherheit verringert.

Zudem ist auf Unterschiede in der Wahl der Parametergrenzen hinzuweisen. In der vorliegenden Arbeit wird eine Korrektur des Niederschlags und der potentiellen Evapotranspiration um jeweils $\pm 50\%$ als zulässig angesehen, in Tyralla und Schumann (2016b) dagegen nur um $\pm 20\%$. Die engere Restriktion schließt die in den aktuellen Ergebnissen dominante Differenzierung der Ensembles in einen extrem feuchten und einen extrem trockenen Member aus.

Woher rührt das Schnittpunkt-Problem? Nach Auffassung des Autors primär daraus, dass die Eingangsdatenunsicherheit in ERA keine explizite Berücksichtigung findet. Bislang werden jedem Ensemble-Member dieselben Eingabereihen zugeordnet, aus denen – ggf. nach einer Volumen Anpassung – für jeden Zeitpunkt ein eindeutiger Abflusswert bestimmt wird. Durch die Berücksichtigung der Unsicherheit der Eingabereihen läge, trotz der Verwendung

deterministischer Modellkonzepte, bereits die Ausgabe jedes einzelnen Members für jeden Zeitpunkt als Wahrscheinlichkeitsaussage vor, z. B. in Form einer Dichtefunktion f_I . Aus Schnittpunkten würden Schnittbereiche mit einem vergleichsweise geringeren Rückgang der geschätzten Simulationsunsicherheit; zumal f_S zumindest ein Stück weit davon entlastet wäre, die Eingangsdatenunsicherheit zu berücksichtigen, d. h. zwangsläufig schmaler ausfiele.

Der Vergleich der in Abschnitt 5.4.3 ermittelten Indizien zur modellstrukturellen Unsicherheit von HBV₉₆ (in der Stundenwertsimulation) und LARSIM_{ME} (in der Tageswertsimulation) bestärkt die in Tyralla und Schumann (2016b) erlangte Präferenz für LARSIM_{ME}.

Wird ein HBV₉₆-Ensemble gebildet, zeigen die Ganglinien der einzelnen Member ein oftmals unrealistisches Verhalten, das mit kritisch zu sehenden Besonderheiten des Abflusskonzentrationsmoduls in Verbindung steht. Die ensembleübergreifende Unterschiedlichkeit der Ganglinien des trockenen sowie des feuchten Members könnte zum Teil den stark diskontinuierlichen Prozessabbildungen von HBV₉₆ geschuldet sein und die ensembleinterne Unterschiedlichkeit dem Fehlen einer dritten Abflusskomponente.

LARSIM_{ME} wurde nur zur Tageswertsimulation des Abflusses des oberen Neckars eingesetzt, die hierbei erzielten Ergebnisse werden aber durch die Resultate von Tyralla und Schumann (2016b) gestützt. Gegenüber HBV₉₆ fallen die ensembleübergreifenden und ensembleinternen Unterschiede der Ganglinien der Ensemble-Member geringer aus. Letzteres resultiert daraus, dass sich die ensembleinterne Variation der Parameterwerte noch stärker auf die eingangsdatenbezogenen Korrekturfaktoren beschränkt.

Für LARSIM_{ME} stellt sich die Frage, ob die mäßige Qualität der verwendeten meteorologischen Eingangsdaten überhaupt Schlüsse auf die modellstrukturelle Unsicherheit erlaubt, welche nach Auffassung des Autors deutlich geringer als die von HBV₉₆ ausfällt. Es bleibt unklar, inwiefern die Unsicherheit der meteorologischen Gebietsreihen und inwiefern die fehlende räumliche Variation der meteorologischen Größen in den Gebieten als treibende Kraft hinter der Differenzierung der Ensembles in feuchte und trockene Member anzusehen ist. Zur Beantwortung dieser Fragen mit ERA ist wohl die bereits erwähnte Methodenerweiterung um die explizite Berücksichtigung der Eingangsdatenunsicherheit erforderlich.

Mit der Vergrößerung der Ensembles von zwei auf vier Member gehen, gemessen an den in Kalibrierung und Validierung erzielten Likelihood-Werten, gewisse Vorteile in der zeitlichen Übertragbarkeit einher. Der Effekt ist in Anbetracht der geringen Anzahl an Untersuchungsgebieten allerdings zu variabel und zu schwach ausgeprägt, um als signifikant eingestuft werden zu können. Das Potenzial größerer Ensembles in der Reduktion der Simulationsunsicherheit bleibt zu untersuchen.

Ein inhaltlicher Nutzen größerer Ensembles, im Sinne einer verfeinerten Hypothesenbildung bezüglich der Quellen der Simulationsunsicherheit, lässt sich ebenfalls nicht nachweisen. Dies ist ein Stück weit zu erwarten, weil ERA auf die Beschreibung der Prozessunsicherheit mit möglichst kleinen Ensembles ausgerichtet ist. Neben diesem positiven Grund sind die folgenden negativen Gründe in Erwägung zu ziehen. Erstens scheint die mäßige Datenqualität der vorliegenden Untersuchung und wohl auch die Größe der betrachteten Gebiete der Identifikation subtiler modellstruktureller Defizite im Wege zu stehen. Zweitens deuten sich gewisse, mit der Ensemble-Größe zunehmende Defizite der gewählten Optimierstrategie an, die dazu führen könnten, dass das inhaltliche Potential größerer Ensembles nicht ausgereizt wird. Drittens ist das gewählte Konstruktionsprinzipien von f_S für größere Ensembles eventuell nicht flexibel genug; beispielsweise ermöglicht es nicht die gleichzeitige Kombination von EPA- und EDA-nahen Approximationen für Untergruppen der Member des Gesamtensembles.

5.5 Zusammenfassung und Ausblick

Ensembletechniken haben sich in vielen Anwendungsbereichen zur *Quantifizierung* modellstrukturell bedingter Simulationsunsicherheit bewährt. Kapitel 5 entwickelt mit dem Ensemble Range Approach (ERA) eine Methodik, die stärker auf die *Identifikation* der eigentlichen modellstrukturellen Defizite abzielt. Gegenüber verschiedenen gängigen Verfahren zur Strukturbewertung hydrologischer Modelle weist ERA theoretische Vorteile auf; bestehende Implementierungsdefizite lassen diese in komplexen Anwendungsfällen bislang aber nur bedingt zum Tragen kommen.

Auf Basis einer statistisch-hydrologischen Interpretation der grundlegenden Ensemble-Techniken nach Bates und Granger (1969) und Zarnowitz (1969) – hier Ensemble Point Approach (EPA) und Ensemble Density Approach (EDA) genannt – entwickelt Abschnitt 5.1 den Ensemble Range Approach (ERA). Als Verallgemeinerung von EPA und EDA soll ERA die in hydrologischen Simulationsstudien unausweichliche Prozessunsicherheit flexibel beschreiben. Das verfolgte Prinzip ist die Bildung kleiner Ensembles, deren Member die Extreme der vom Modell unzureichend berücksichtigten Prozessheterogenität des Untersuchungsgebiets einnehmen. Eine Strukturunsicherheitsfunktion zur Approximation verschiedener Formen von Prozessheterogenität (z. B. rein zeitliche oder rein räumliche Ausprägung) führt die Simulationsergebnisse der einzelnen Member zusammen. Die Interpretation der Art und des Ausmaßes der Unterschiede zwischen den Membern eines Ensembles sowie der Form der Strukturunsicherheitsfunktion soll Aufschluss über modellstrukturelle Defizite geben. Hierfür ist die simultane Kalibrierung der Modellparameter aller Member sowie der Parameter der Strukturunsicherheitsfunktion erforderlich.

Die Anwendung von ERA in Abschnitt 5.3.2 auf die in Abschnitt 5.3.1 definierten synthetischen Fallstudien demonstriert die grundsätzliche Funktionsfähigkeit der Methodenimplementierung. Solange keine Eingangsdatenunsicherheit vorliegt, bilden die Ensemble-Member die den Fallstudien zugrundeliegenden Einzelprozesse und die Strukturunsicherheitsfunktion die raumzeitliche Kombination dieser Einzelprozesse zufriedenstellend ab. Mit der Einbeziehung der Eingangsdatenunsicherheit treten Ungenauigkeiten in der Identifikation der Einzelprozesse sowie der Prozesskombinationen auf.

In Abschnitt 5.3.3 kommen die in Abschnitt 5.2 beschriebenen Referenzverfahren (Pareto-Optimierung, GLUE, DYNIA, Partikel-Filterung) in ausgewählten synthetischen Fallstudien zum Einsatz. Der im Vergleich zu ERA geringe Erfolg der Referenzverfahren in der Identifikation der jeweiligen Prozessunsicherheit darf aufgrund des Zuschnitts der extrem simplen synthetischen Fallstudien auf ERA nicht überinterpretiert werden. Es zeigen sich jedoch systematische Unterschiede in der Wirkungsweise aller Methoden und eine größere Flexibilität von ERA in der Berücksichtigung unterschiedlicher Formen von Prozessunsicherheit.

Der geringe Informationsgewinn der GLUE-Methode (Generalized Likelihood Uncertainty Estimation) steht in starkem Kontrast zur deren häufiger Anwendung in der hydrologischen Modellierung. GLUE reagiert in allen synthetischen Fallstudien weitgehend gleich und kann somit nicht zur Identifikation der unterschiedlichen Unsicherheitsformen beitragen. Dies deckt sich mit den theoretischen Befunden von Mantovan und Todini (2006) zur begrenzten statistischen Lernfähigkeit von GLUE. Nach Einschätzung von Montanari (2005) quantifiziert GLUE weniger die Simulationsunsicherheit als vielmehr das Auswirkungsspektrum der vom Modellanwender anerkannten Unsicherheit des Modellierungsprozesses.

Nicht nur GLUE weist eine gewisse Subjektivität auf. Auch die anderen Referenzverfahren (und ERA) beinhalten Spielräume (z. B. die Wahl der Zielfunktion) mit großer Auswirkung auf die zu erzielenden Ergebnisse, die fachlich-objektiv nur schwer einzuengen sind. Die robuste, praxisrelevante Bewertung der Vor- und Nachteile der verschiedenen Methoden erfordert nicht nur eine größere Breite an synthetischen Fallstudien, sondern auch die unabhängige Anwendung derselben Methoden auf dieselben Fallstudien durch verschiedene Methoden-anwender.

Abschnitt 5.4 beleuchtet die Wirkungsweise von ERA anhand realer Fallstudien. Als Untersuchungsgebiete dienen der obere Neckar, die Lahn und die Nahe (Abschnitt 3.3), als Untersuchungsmodelle HBV₉₆ und LARSIM_{ME} (Abschnitt 3.2). Im Gegensatz zur Vorgängerstudie in Tyralla und Schumann (2016b) kommen auch größere Ensembles zum Einsatz und werden realitätsnahe Festlegungen zur Unsicherheit der Abflussdaten vorgenommen. Die gewonnenen Erkenntnisse legen die folgenden Weiterentwicklungen von ERA nahe.

Als erster Schritt der Weiterentwicklung bietet sich die Verknüpfung von ERA mit einer Methodik zur expliziten Berücksichtigung der Eingangsdatenunsicherheit an. ERA kann – bei Verwendung realistischer Abflussmessfehlermodelle – die Simulationsunsicherheit der

realen Fallstudien nur dann akzeptabel abbilden, wenn eingangsdatenbezogene Korrekturfaktoren in die Konstruktion der Strukturunsicherheitsfunktion einfließen. Konkret bedeutet das z. B. für 2-Modell-Ensembles, dass ein Member einen geringen meteorologischen Nettoinput erhält und der andere einen hohen. Wird diese Ensemble-Differenzierung in einen trockenen und einen feuchten Member unterbunden, fallen die Ganglinien beider Member zu ähnlich aus als dass sie die Strukturunsicherheitsfunktion dauerhaft plausibel aufspannen könnten.

Aussichtsreicher als die simultane Quantifizierung der Eingangsdaten- und Modellstrukturunsicherheit (siehe z. B. Ajami et al. 2007) erscheint die vorgeschaltete, von Abflussmessungen unabhängige Analyse der Eingangsdatenunsicherheit (Renard et al. 2011). Nach Auffassung des Autors bietet sich für das operationelle HBV-Vorhersagemodell der Bundesanstalt für Gewässerkunde hierfür ein Kriging-basierter Simulationsansatz mittlerer Komplexität wie der von Moulin et al. (2009) als Ausgangspunkt an.

Moulin et al. (2009) setzen unter anderem voraus, dass die räumliche Abhängigkeitsstruktur des Niederschlags zeitinvariant ist und dass die zeitliche Abhängigkeitsstruktur der Kriging-Interpolationsfehler einem autoregressiven Prozess erster Ordnung folgt. Sind diese starken Annahmen erfüllt, lassen sich mittels einfacher Monte-Carlo-Simulation unmittelbar zufällige, statistisch plausible Zeitreihen der interpolationsbedingten Gebietsniederschlagsfehler erzeugen, die jeweils zur fixen Zeitreihe der Erwartungswerte hinzuaddiert werden. Jede der resultierenden, durch Niederschlagsmessungen konditionierten, im Rahmen der nicht erklärten Varianz aber zufällig variierenden Gebietsniederschlagsreihen geht in die hydrologische Simulationsrechnung ein. Somit liegt für jeden Zeitpunkt eine (memberspezifische) Stichprobe an Abflusswerten vor, die den auf die Niederschlagsinterpolation zurückzuführenden Anteil der Simulationsunsicherheit repräsentiert.

Mit der Integration der memberspezifischen Stichproben in die Faltung von Strukturdichte und Abflussmessfehlerdichte (Gleichung 5.8) sollte eine vertretbare Steigerung des Rechenaufwands verbunden sein. Gravierender fiel die Zunahme der Rechenzeit der Ensemble-Member aus. So konstruieren Moulin et al. (2009) ihre Eingabedichten auf Basis von jeweils 100 Simulationen. Außerdem bedürfte die Methodik gewisser Erweiterungen. Zum einen zur Einhaltung der Korrelationsstruktur unterschiedlicher generierter Reihen (z. B. von Niederschlag und Temperatur oder vom Niederschlag benachbarter Gebiete). Zum anderen zur Berücksichtigung von Messfehlern, insbesondere denen des Niederschlags. Zwar lassen sich zufällige Messfehler über den Nugget-Effekt im Semivariogramm abbilden, jedoch nicht systematische Messfehler. Eine adäquate Heuristik wäre vielleicht, die verschiedenen Korrekturfunktionen von Richter (1995) wiederholt in zufälliger Zuordnung auf die Stationsreihen anzuwenden.

Der zweite Schritt der Weiterentwicklung von ERA sollte auf die Effizienz der Kalibrierstrategie abzielen. Bei der Kalibrierung der größeren Ensembles in Abschnitt 5.4.3 deuten sich relevante Defizite von BOBYQA (Abschnitt 3.4) an. Eine größere Kalibrierdauer in Kauf nehmend, lässt sich die damit verbundene Unsicherheit durch den Wechsel zu einem robusten globalen Kalibrieralgorithmus zumindest verringern. Ferner eröffnen Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren (z. B. Vrugt und Ter Braak 2011) größere Chancen in der objektiven Quantifizierung der Parameterunsicherheit, als die in Abschnitt 5.4.2 definierte Mehrstart-Implementierung des lokalen Kalibrieralgorithmus. Hierbei gilt es allerdings zu berücksichtigen, dass ERA in der aktuellen Version keine „formalen“ Likelihoods erzeugt (siehe Abschnitt 5.1.1).

Ebenfalls in Erwägung zu ziehen ist die Entwicklung einer hypothesengeleiteten (zumindest in Teilen manuellen) Kalibrierstrategie, um den hohen Informationsgehalt besonderer hydrologischer Bedingungen (Singh und Bárdossy 2012) zur Entwicklung eines detaillierteren Verständnisses modellstruktureller Defizite zu nutzen. Beispielsweise ließe sich, ausgehend von einem bestmöglich kalibrierten „1-Modell-Ensemble“, die Ensemble-Größe schrittweise erhöhen. Ist geklärt, in welchen Zeiträumen oder Teilgebieten Diskrepanzen zwischen Abflussmessung und -simulation bestehen, stellt sich die Frage, wie sich diese unter Hinzunahme eines weiteren Members beheben lassen. Der Prozess der Ensemble-Vergrößerung wird solange fortgesetzt, bis die Abflussmessung zu keinem Zeitpunkt unplausibel von der Ensemblespanne abweicht, das Ensemble also sämtliche (erfassten) hydrologischen Bedingungen repräsentiert. Die über den Gesamtzeitraum ermittelte Likelihood dient dabei als Hilfsmittel, die Ensemble-Spanne bzw. die Strukturdichte nicht übermäßig zu weiten, d. h. eine Überschätzung der Simulationsunsicherheit zu vermeiden.

Drittens könnte die Erweiterung von ERA um alternative Konstruktionsweisen der Strukturunsicherheitsfunktion in verschiedenen Situationen hilfreich sein, insbesondere wenn die Bildung großer Ensembles angestrebt wird. Ein Manko an der in Abschnitten 5.1.3 vorgeschlagenen Konstruktion der Strukturunsicherheitsfunktion aus der Dirichletverteilung ist deren Tendenz zur ensembleweiten Vereinheitlichung. So ist z. B. die gleichzeitige Approximation von EPA und EDA für miteinander kombinierte Teilensembles ausgeschlossen. Die Approximation von EPA erfordert große Werte der Dirichletparameter, die Approximation von EDA kleine. Gleichzeitig korrespondieren die Parameterwerte mit der Gewichtung der einzelnen Member. Enthält ein Ensemble sowohl Member mit sehr großen als auch sehr kleinen Werten, prägen nur erstere die Strukturunsicherheitsfunktion.

Das Problem sei an folgendem Szenario veranschaulicht. Angenommen, in einem Untersuchungsgebiet liegt eine Form von räumlicher Prozessunsicherheit vor, die durch ein 2-Modell-Ensemble mit großen Dirichletwerten, d. h. einer engen Strukturdichte, grundsätzlich gut erfasst wird. Bei einzelnen Schneereignissen kommt eine Form von zeitlicher Prozessunsicherheit hinzu. Naheliegender wäre es, zwei neue Member als Duplikate der alten

Member zu erzeugen und die Schneemodulparameter beider Gruppen so unterschiedlich anzusetzen, dass sich die Ensemble-Spanne bei Schneeereignissen angemessen weitet.

Wie ist zu erreichen, dass sich die Strukturunsicherheitsfunktion bei den Schneeereignissen aufweitet, ansonsten aber eng bleibt? Ein möglicher Lösungsansatz ist, die Strukturdichte nicht über Zufallszahlen der multivariaten Dirichletverteilung zu approximieren (Abschnitt 5.1.4), sondern über Zufallszahlen hintereinandergeschalteter univariater Dirichletverteilungen bzw. Betaverteilungen. Praktikabel wäre im genannten Beispiel folgendes Modell: Zunächst werden für jeden Zeitpunkt sowohl basierend auf den Ausgaben der alten Member als auch basierend auf den Ausgaben der neuen Member EPA-nahe Zufallswerte erzeugt. Paare von Zufallswerten beider Teilensembles dienen als Randpunkte für die Erzeugung gleichverteilungsnaher Zufallswerte. Das so ermittelte Kollektiv aller Zufallswerte fächert sich nur in denjenigen Teilzeiträumen auf, in denen die teilensembleübergreifenden Parametervariationen des Schneemoduls von Relevanz sind.

Viertens sollte eine auf den Grundgedanken von ERA abgestimmte Ensemblekomposition in Erwägung gezogen werden. Nach ERA nehmen die Member eines Ensembles, soweit erforderlich, verschiedene Extreme im Prozessgefüge eines Flusseinzugsgebiets an. Dies ist in dieser Arbeit insbesondere bei Verwendung des strukturell problematischeren Modells HBV₉₆ der Fall. Die hierfür gewonnenen Ensembles geben zwar als Ganzes die Abflussvariabilität verschiedener Einzugsgebiete befriedigend wieder, die einzelnen Member repräsentieren aber in keiner Weise das jeweilige Gesamtsystem. Derartige Befunde lassen sich zur Identifikation möglicher modellstruktureller Defizite nutzen. Die spätere Anwendung eines Ensembles erscheint aber riskant, solange die effektive Funktionsweise der Member mit deren Konzeption in Widerspruch steht.

Statt vollständige Wasserhaushaltsmodelle durch ungewöhnliche Parametrisierungen zur Erfüllung von Spezialaufgaben zu zwingen, ließen sich von vornherein spezialisierte Modelle in Ensembles zusammenführen. Denkbar wäre beispielsweise die Kombination aus einem „Talmmodell“ mit dynamischer Reaktion auf unterschiedliche Niederschlagsimpulse entsprechend einem Sättigungsflächenansatz, einem „Hangmodell“ mit starker Reaktion auf hohe Niederschlagsimpulse entsprechend einem Intensitätsansatz und ansonsten starker Interflowkomponente sowie einem „Höhenmodell“ mit primärem Beitrag zur Basisabflusskomponente infolge einer fehlenden Direktabflussanbindung an den Vorfluter.

Eine derartige Ensemblekomposition legt die Interpretation der Strukturunsicherheitsfunktion von ERA als (zeitvariables) Dominanzverhältnis einzelner Prozessgefüge nahe. Lässt sich eine Relation zu Gebietscharakteristika herstellen, bieten sich Chancen zur Regionalisierung der durch ERA erfassten Prozessunsicherheit hydrologischer Modelle.

Literaturverzeichnis

DIN 1319-3, 5.1996: Messtechnik - Grundlagen der Messtechnik.

Abbott, M.B; Bathurst, J.C; CUNGE, J. A.; O'Connell, P.E; Rasmussen, J. (1986): An introduction to the European Hydrological System — Systeme Hydrologique Europeen, "SHE", 1: History and philosophy of a physically-based, distributed modelling system. In: *Journal of Hydrology* (87), S. 45–59.

Ajami, Newsha K.; Duan, Qingyun; Sorooshian, Soroosh (2007): An integrated hydrologic Bayesian multimodel combination framework: Confronting input, parameter, and model structural uncertainty in hydrologic prediction. In: *Water Resour. Res.* 43 (1), S. n/a.

Alsoudani, Tareg M.; Bogle, I.D.L. (2014): From discretization to regularization of composite discontinuous functions. In: *Computers & Chemical Engineering* 62, S. 139–160.

Arulampalam, M. S.; Maskell, S.; Gordon, N.; Clapp, T. (2002): A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-Gaussian Bayesian tracking. In: *IEEE Trans. Signal Process.* 50 (2), S. 174–188.

ATV-DVWK (2002): Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Abfall. Verdunstung in Bezug zu Landnutzung, Bewuchs und Boden. September 2002. Hefenef: GFA-Gesellschaft zur Förderung der Abwassertechnik (ATV-DVWK-Regelwerk, M 504).

Bahl, Vishal; Linninger, Andreas A. (2001): Modeling of Continuous-Discrete Processes. In: Gerhard Goos, Juris Hartmanis, Jan van Leeuwen, Di Benedetto, Maria Domenica und Alberto Sangiovanni-Vincentelli (Hg.): *Hybrid Systems: Computation and Control*, Bd. 2034. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg (Lecture notes in computer science), S. 387–402.

Barthels, H. (2004): Projekt RADOLAN - Routineverfahren zur Online-Aneicherung der Radarniederschlagsdaten mit Hilfe von automatischen Bodenniederschlagsstationen (Ombrometer). Unter Mitarbeit von E. Weigl, T. Reich, P. Lang, A. Wagner, O. Kohler, N. Gerlach und u.a. Deutscher Wetterdienst. Online verfügbar unter <http://www.dwd.de>, zuletzt aktualisiert am 25.01.2005, zuletzt geprüft am 15.11.2012.

Barton, P. I.; Pantelides, C. C. (1994): Modeling of combined discrete/continuous processes. In: *AIChE J.* 40 (6), S. 966–979.

- Bates, J. M.; Granger, C. J.W. (1969): The combination of forecasts. In: *Operational Research Quarterly* 40 (4), S. 451–468.
- Bauer, S. W. (1974): A modified Horton equation for infiltration during intermittent rainfall. In: *Hydrological Sciences Bulletin* 19 (2), S. 219–225.
- Bergström, S. (1995): The HBV model. In: V. P. Singh (Hg.): Computer models of watershed hydrology. Rev. ed. Highlands Ranch, Colo.: Water Resources Publications.
- Bergström, S.; Carlsson, B.; Grahn, G., Johansson (1997): A more consistent approach to catchment response in the HBV model. In: *Vannet i Norden Uppsala* (4), S. 1–7.
- Bergström, S.; Forsman, A. (1973): Development of a conceptual deterministic rainfall-runoff model. In: *Nordic Hydrology* 4 (3), S. 147–170.
- Beven, K.J (1989): Changing ideas in hydrology - The case of physically-based models. In: *Journal of Hydrology* (105), S. 157–172.
- Beven, Keith (1993): Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modeling. In: *Advances in Water Resources* 16 (1), S. 41–51.
- Beven, Keith (2006a): A manifesto for the equifinality thesis. In: *Journal of Hydrology* 320 (1-2), S. 18–36.
- Beven, Keith (2006b): On undermining the science? In: *Hydrol. Process.* 20 (14), S. 3141–3146.
- Beven, Keith; Binley, Andrew (1992): The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction. In: *Hydrol. Process.* 6 (3), S. 279–298.
- Beven, Keith; Binley, Andrew (2014): GLUE: 20 years on. In: *Hydrol. Process.* 28 (24), S. 5897–5918.
- Beven, Keith; Young, Peter (2003): Comment on “Bayesian recursive parameter estimation for hydrologic models” by M. Thiemann, M. Trosset, H. Gupta, and S. Sorooshian. In: *Water Resour. Res.* 39 (5).
- Beven, Keith J. (2001): Rainfall-runoff modelling - The primer. 1. Aufl. Chichester: Wiley.
- Beven, Keith J. (2006c): Streamflow generation processes. Wallingford: International Association of Hydrological Sciences (Benchmark papers in hydrology, 1).
- BMVI (Hg.) (2015): KLIWAS : Auswirkungen des Klimawandels auf Wasserstraßen und Schifffahrt in Deutschland - Abschlussbericht des BMVI. Fachliche Schlussfolgerungen aus den Ergebnissen des Forschungsprogramms KLIWAS. Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur. Berlin, Bonn.
- Bogacki, P.; Shampine, L. F. (1989): A 3(2) pair of Runge - Kutta formulas. In: *Applied Mathematics Letters* 2 (4), S. 321–325.

- Bremicker, M. (2000): Das Wasserhaushaltsmodell LARSIM - Modellgrundlagen und Anwendungsbeispiele (Freiburger Schriften zur Hydrologie, 11).
- Bundesanstalt für Gewässerkunde; Institut für Hydrologie, Universität Freiburg i. Br. (2003): Hydrologischer Atlas von Deutschland. Bonn/Berlin: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit.
- Butcher, J. C. (1964a): Implicit Runge-Kutta Processes. In: *Mathematics of Computation* 18 (85), S. 50.
- Butcher, J. C. (1964b): On Runge-Kutta processes of high order. In: *JAZ* 4 (02), S. 179.
- Carver, M. B. (1978): Efficient integration over discontinuities in ordinary differential equation simulations. In: *Mathematics and Computers in Simulation* 20 (3), S. 190–196.
- Cellier, F. E. (1979): Combined continuous/discrete system simulation languages - usefulness, experiences and future development. In: *Methodology in systems modelling and simulation*.
- Chipman, F. H. (1971): A-stable Runge-Kutta processes. In: *BIT* 11 (4), S. 384–388.
- Choi, Hyung Tae; Beven, Keith (2007): Multi-period and multi-criteria model conditioning to reduce prediction uncertainty in an application of TOPMODEL within the GLUE framework. In: *Journal of Hydrology* 332 (3-4), S. 316–336.
- Clark, Martyn P.; Fan, Ying; Lawrence, David M.; Adam, Jennifer C.; Bolster, Diogo; Gochis, David J. et al. (2015): Improving the representation of hydrologic processes in Earth System Models. In: *Water Resour. Res.* 51 (8), S. 5929–5956.
- Clark, Martyn P.; Kavetski, Dmitri (2010): Ancient numerical daemons of conceptual hydrological modeling: 1. Fidelity and efficiency of time stepping schemes. In: *Water Resour. Res.* 46 (10).
- Clark, Martyn P.; Slater, Andrew G.; Rupp, David E.; Woods, Ross A.; Vrugt, Jasper A.; Gupta, Hoshin V. et al. (2008): Framework for Understanding Structural Errors (FUSE): A modular framework to diagnose differences between hydrological models. In: *Water Resour. Res.* 44.
- Crawford, N. H.; Linsey, R. K. (1966): Digital Simulation in Hydrology: Stanford Watershed Model IV. Department of Civil Engineering, Stanford University. Stanford (Technical Report, 39).
- Curtiss, C.F; Hirschfelder, J. O. (1952): Integration of stiff equations. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* (38), S. 235–243.
- Dahlquist, G. G. (1963): A special stability problem for linear multistep methods. In: *BIT* (3), S. 27–43.

- Dahmen, Wolfgang; Reusken, Arnold (2008): Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler. 2. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg (Springer-Lehrbuch).
- Deuffhard, Peter; Bornemann, Folkmar (2013): Numerische Mathematik 2. Gewöhnliche Differentialgleichungen. 4. Aufl. [durchges. und erg.]. Berlin: De Gruyter (De Gruyter Studium). Online verfügbar unter http://www.degruyter.com/search?f_0=isbnissn&q_0=9783110316360&searchTitles=true.
- Diks, Cees G. H.; Vrugt, Jasper A. (2010): Comparison of point forecast accuracy of model averaging methods in hydrologic applications. In: *Stoch Environ Res Risk Assess* 24 (6), S. 809–820.
- Disse, M. (1995): Modellierung der Verdunstung und der Grundwasserneubildung in ebenen Einzugsgebieten. Dissertation. Universität Karlsruhe, Karlsruhe. Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft.
- Dooge, J.C.I. (1968): The hydrologic cycle as a closed system. In: *International Association of Scientific Hydrology. Bulletin* 13 (1), S. 58–68.
- Dormand, J. R.; Prince, P. J. (1980): A family of embedded Runge-Kutta formulae. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 6 (1), S. 19–26.
- Dowell, M.; Jarratt, P. (1971): A modified regula falsi method for computing the root of an equation. In: *BIT* 11 (2), S. 168–174.
- Dowell, M.; Jarratt, P. (1972): The “Pegasus” method for computing the root of an equation. In: *BIT* 12 (4), S. 503–508.
- Duan, Qingyun; Sorooshian, Soroosh; Gupta, Vijai (1992): Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models. In: *Water Resour. Res.* 28 (4), S. 1015.
- Dunne, Thomas; Black, Richard D. (1970): Partial Area Contributions to Storm Runoff in a Small New England Watershed. In: *Water Resour. Res.* 6 (5), S. 1296–1311.
- Dutt, Alok; Greengard, Leslie; Rokhlin, Vladimir (2000): Spectral deferred correction methods for ordinary differential equations. In: *Bit Numerical Mathematics* 40 (2), S. 241–266.
- DVWK (1984): Arbeitsanleitung zur Anwendung von Niederschlag-Abfluß-Modellen in kleinen Einzugsgebieten. Hamburg: Parey (DVWK-Regeln zur Wasserwirtschaft, 113).
- Ebel, M.; Ludwig, K.; Richter, K.-G (2000): Ein mesoskaliges Wasserhaushaltsmodell für das Rheineinzugsgebiet. In: *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* (6), S. 308–312.
- Eberle, M. (2007): Hydrological Modelling in the River Rhine Basin, Part II. Report on Hourly Modelling. Hg. v. Bundesanstalt für Gewässerkunde. Koblenz (BfG-Berichte, BfG-1338).

- Efstratiadis, Andreas; Koutsoyiannis, Demetris (2010): One decade of multi-objective calibration approaches in hydrological modelling: a review. In: *Hydrological Sc. J.* 55 (1), S. 58–78.
- Ehle, B. L. (1969): On Pade approximations to the exponential function and A-stable methods for the numerical solution of initial value problems. Dissertation. University of Waterloo, Waterloo, Ontario. Department of Applied Analysis and Computer Science.
- Engeland, Kolbjørn; Braud, Isabelle; Gottschalk, Lars; Leblois, Etienne (2006): Multi-objective regional modelling. In: *Journal of Hydrology* 327 (3-4), S. 339–351.
- Enright, W. H.; Jackson, K. R.; Nørsett, S. P.; Thomsen, P. G. (1988): Effective solution of discontinuous IVPs using a Runge-Kutta formula pair with interpolants. In: *Applied Mathematics and Computation* 27 (4), S. 313–335.
- Ernesti, Johannes; Kaiser, Peter (2008): Python. Das umfassende Handbuch. 1. Aufl., 1., korrig. Nachdr. Bonn: Galileo Press (Galileo Computing). Online verfügbar unter http://deposit.d-nb.de/cgi-bin/dokserv?id=3001841&prov=M&dok_var=1&dok_ext=htm.
- esri Deutschland (Hg.) (2015): ArcGIS. Online verfügbar unter <http://www.esri.de/produkte/arcgis>, zuletzt aktualisiert am 04.08.2015, zuletzt geprüft am 12.08.2015.
- Fenicia, Fabrizio; Kavetski, Dmitri; Savenije, Hubert H. G. (2011): Elements of a flexible approach for conceptual hydrological modeling: 1. Motivation and theoretical development. In: *Water Resour. Res.* 47 (11).
- Frank, Reinhard; Ueberhuber, Christoph W. (1977): Iterated defect correction for the efficient solution of stiff systems of ordinary differential equations. In: *BIT* 17 (2), S. 146–159.
- Freeze, R.Allan; Harlan, R. L. (1969): Blueprint for a physically-based, digitally-simulated hydrologic response model. In: *Journal of Hydrology* 9 (3), S. 237–258.
- Gattke, C. (2006): Modellvergleiche zur Untersuchung struktureller Unsicherheiten - Anwendung objektorientierter Methoden in der hydrologischen Modellierung. Dissertation. Ruhr-Universität, Bochum. Lehrstuhl für Hydrologie, Wasserwirtschaft und Umwelttechnik.
- Gear, C. W.; Osterby, O. (1984): Solving Ordinary Differential Equations with Discontinuities. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 10 (1), S. 23–44.
- Gelman, A.; Carlin, J.B; Stern, H.; Dunson, D. B.; Vehtari, A.; Rubin, D. B. (2013): Bayesian data analysis. Third edition (Chapman & Hall/CRC texts in statistical science).
- Götzinger, Jens; Bárdossy, András (2008): Generic error model for calibration and uncertainty estimation of hydrological models. In: *Water Resour. Res.* 44.

- Granger, C.W.J.; Ramanathan, R. (1984): Improved methods of combining forecasts. In: *J. Forecast.* 3 (2), S. 197–204.
- Grayson, Rodger; Blöschl, Günter (2001): Spatial patterns in catchment hydrology. Observations and modelling. Cambridge: Cambridge Univ. Press.
- Gupta, Hoshin; Thiemann, Michael; Trosset, Michael; Sorooshian, Soroosh (2003): Reply to comment by K. Beven and P. Young on “Bayesian recursive parameter estimation for hydrologic models”. In: *Water Resour. Res.* 39 (5).
- Gupta, Hoshin V.; Clark, Martyn P.; Vrugt, Jasper A.; Abramowitz, Gab; Ye, Ming (2012): Towards a comprehensive assessment of model structural adequacy. In: *Water Resour. Res.* 48 (8).
- Gupta, Hoshin V.; Kling, Harald; Yilmaz, Koray K.; Martinez, Guillermo F. (2009): Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. In: *Journal of Hydrology* 377 (1-2), S. 80–91.
- Gupta, Hoshin Vijai; Sorooshian, Soroosh; Yapo, Patrice Ogou (1998): Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and noncommensurable measures of information. In: *Water Resour. Res.* 34 (4), S. 751–763.
- Hairer, Ernst; Nørsett, Syvert P.; Wanner, Gerhard (1993): Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. 2. Aufl. Berlin: Springer (Springer Series in Computational Mathematics, 8).
- Hairer, Ernst; Wanner, Gerhard (1999): Stiff differential equations solved by Radau methods. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 111 (1-2), S. 93–111.
- Hairer, Ernst; Wanner, Gerhard (2010): Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. 2., rev. ed. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg (Springer Series in Computational Mathematics, 14). Online verfügbar unter <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-05221-7>.
- Herman, J. D.; Reed, P. M.; Wagener, T. (2013): Time-varying sensitivity analysis clarifies the effects of watershed model formulation on model behavior. In: *Water Resour. Res.* 49 (3), S. 1400–1414.
- Horton, R. E. (1939): Analysis of runoff-plot experiments with varying infiltration capacity. In: *Trans. Amer. Geophys. Un.* (20), S. 693–711.
- Huff, D. D.; O'Neill, R. V.; Emanuel, W. R.; Elwood, J. W.; Newbold, J. D. (1982): Flow variability and hillslope hydrology. In: *Earth Surf. Process. Landforms* 7 (1), S. 91–94.
- Hundecha, Yeshewatesfa; Bárdossy, András (2004): Modeling of the effect of land use changes on the runoff generation of a river basin through parameter regionalization of a watershed model. In: *Journal of Hydrology* 292 (1-4), S. 281–295.

- Jayakrishnan, R.; Srinivasan, R.; Santhi, C.; Arnold, J. G. (2005): Advances in the application of the SWAT model for water resources management. In: *Hydrol. Process.* 19 (3), S. 749–762.
- Kavetski, Dmitri; Clark, Martyn P. (2010): Ancient numerical demons of conceptual hydrological modeling: 2. Impact of time stepping schemes on model analysis and prediction. In: *Water Resour. Res.* 46 (10).
- Kavetski, Dmitri; Clark, Martyn P. (2011): Numerical troubles in conceptual hydrology: Approximations, absurdities and impact on hypothesis testing. In: *Hydrol. Process.* 25 (4), S. 661–670.
- Kavetski, Dmitri; Kuczera, George (2007): Model smoothing strategies to remove microscale discontinuities and spurious secondary optima in objective functions in hydrological calibration. In: *Water Resour. Res.* 43 (3).
- Kavetski, Dmitri; Kuczera, George; Franks, Stewart W. (2003): Semidistributed hydrological modeling: A “saturation path” perspective on TOPMODEL and VIC. In: *Water Resour. Res.* 39 (9).
- Kirchner, James W. (2003): A double paradox in catchment hydrology and geochemistry. In: *Hydrol. Process.* 17 (4), S. 871–874.
- Kirchner, James W. (2006): Getting the right answers for the right reasons: Linking measurements, analyses, and models to advance the science of hydrology. In: *Water Resour. Res.* 42 (3).
- Koutsoyiannis, D. (2003): Rainfall disaggregation methods: theory and applications. Workshop on Statistical and Mathematical Methods for Hydrological Analysis. Rom.
- Kraft, Philipp; Vaché, Kellie B.; Frede, Hans-Georg; Breuer, Lutz (2011): CMF: A Hydrological Programming Language Extension For Integrated Catchment Models. In: *Environmental Modelling & Software* 26 (6), S. 828–830.
- Krayer von Krauss, M.P.; Walker, W.E.; van der Sluijs, J.P.; Janssen, P.; van Asselt, M.B.A.; Rotmans, J. (2006): Response to “To what extent, and how, might uncertainty be defined” by Norton, Brown, and Mysiak. In: *The Integrated Assessment Journal* 6 (1), S. 89–94.
- Kutilek, M.; Nielsen, D. R. (1994): Soil hydrology. Cremlingen-Destedt: Catena Vlg (Geoecology).
- Kutta, W. M. (1901): Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen. In: *Zeitschr. für Math. und Phys.* (46), S. 435–453.
- Layton, Anita T.; Minion, Michael L. (2005): Implications of the Choice of Quadrature Nodes for Picard Integral Deferred Corrections Methods for Ordinary Differential Equations. In: *Bit Numer Math* 45 (2), S. 341–373.

- Lindström, Göran; Johansson, Barbro; Persson, Magnus; Gardelin, Marie; Bergström, Sten (1997): Development and test of the distributed HBV-96 hydrological model. In: *Journal of Hydrology* 201 (1-4), S. 272–288.
- Lisniak, D.; Meißner, D.; Klein, B.; Pinzinger, R. (2014): Konzept zur Nachführung von Anfangszuständen eines operationellen hydrologischen Modells für die Verbesserung von Abflussvorhersagen. In: *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* (58), S. 106–118.
- Mantovan, Pietro; Todini, Ezio (2006): Hydrological forecasting uncertainty assessment: Incoherence of the GLUE methodology. In: *Journal of Hydrology* 330 (1-2), S. 368–381.
- Mao, Guiyou; Petzold, L. R. (2002): Efficient integration over discontinuities for differential-algebraic systems. In: *Computers & Mathematics with Applications* 43 (1-2), S. 65–79.
- Matott, L. Shawn; Babendreier, Justin E.; Purucker, S. Thomas (2009): Evaluating uncertainty in integrated environmental models: A review of concepts and tools. In: *Water Resour. Res.* 45 (6).
- Maxwell, Reed M.; Putti, Mario; Meyerhoff, Steven; Delfs, Jens-Olaf; Ferguson, Ian M.; Ivanov, Valeriy et al. (2014): Surface-subsurface model intercomparison: A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. In: *Water Resour. Res.* 50 (2), S. 1531–1549.
- McCarthy, G.T (1938): The unit hydrograph and flood routing. Providence: Army Engineer District.
- McCulloch, James S.G.; Robinson, Mark (1993): History of forest hydrology. In: *Journal of Hydrology* 150 (2-4), S. 189–216.
- McDonnell, Jeffrey J. (2003): Where does water go when it rains? Moving beyond the variable source area concept of rainfall-runoff response. In: *Hydrol. Process.* 17 (9), S. 1869–1875.
- McGlynn, B.L; McDonnell, J.J; Brammer, D.D (2002): A review of the evolving perceptual model of hillslope flowpaths at the Maimai catchments, New Zealand. In: *Journal of Hydrology* 257 (1-4), S. 1–26.
- McMillan, Hilary; Freer, Jim; Pappenberger, Florian; Krueger, Tobias; Clark, Martyn (2010): Impacts of uncertain river flow data on rainfall-runoff model calibration and discharge predictions. In: *Hydrol. Process.*, S. n/a.
- Mendoza, Pablo A.; Clark, Martyn P.; Barlage, Michael; Rajagopalan, Balaji; Samaniego, Luis; Abramowitz, Gab; Gupta, Hoshin (2015): Are we unnecessarily constraining the agility of complex process-based models? In: *Water Resour. Res.* 51 (1), S. 716–728.

- Michel, C.; Perrin, C.; Andreassian, V. (2003): The exponential store: a correct formulation for rainfall—runoff modelling. In: *Hydrological Sciences Journal* 48 (1), S. 109–124.
- Miller, Cass T.; Dawson, Clint N.; Farthing, Matthew W.; Hou, Thomas Y.; Huang, Jingfang; Kees, Christopher E. et al. (2013): Numerical simulation of water resources problems: Models, methods, and trends. In: *Advances in Water Resources* 51, S. 405–437.
- Minhas, B. S.; Parikh, K. S.; Srinivasan, T. N. (1974): Toward the structure of a production function for wheat yields with dated inputs of irrigation water. In: *Water Resour. Res.* 10 (3), S. 383–393.
- Minion, M. (2003): Semi-implicit spectral deferred correction methods for ordinary differential equations. In: *Comm. Math. Sci.* 1 (3), S. 471–500.
- Mises, R. V. (1930): Zur numerischen Integration von Differentialgleichungen. In: *Z. angew. Math. Mech.* 10 (1), S. 81–92.
- Montanari, Alberto (2005): Large sample behaviors of the generalized likelihood uncertainty estimation (GLUE) in assessing the uncertainty of rainfall-runoff simulations. In: *Water Resour. Res.* 41 (8), S. n/a.
- Montanari, Alberto (2007): What do we mean by ‘uncertainty’? The need for a consistent wording about uncertainty assessment in hydrology. In: *Hydrol. Process.* 21 (6), S. 841–845.
- Montanari, Alberto; Koutsoyiannis, Demetris (2012): A blueprint for process-based modeling of uncertain hydrological systems. In: *Water Resour. Res.* 48 (9).
- Moradkhani, Hamid (2005): Uncertainty assessment of hydrologic model states and parameters: Sequential data assimilation using the particle filter. In: *Water Resour. Res.* 41 (5).
- Morton, M. (1993): Mathematical Models: Questions of Trustworthiness. In: *The British Journal for the Philosophy of Science* 44 (4), S. 659–674.
- Moulin, L.; Gaume, E.; Obled, C. (2009): Uncertainties on mean areal precipitation: assessment and impact on streamflow simulations. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 13 (2), S. 99–114.
- Nash, J.E; Sutcliffe, J.V (1970): River flow forecasting through conceptual models part I — A discussion of principles. In: *Journal of Hydrology* 10 (3), S. 282–290.
- Nash, Stephen G. (1984): Newton-Type Minimization via the Lanczos Method. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 21 (4), S. 770–788.
- Norton, J.P; Brown, J.D; Mysiak, J. (2006): To what extent, and how, might uncertainty be defined? In: *The Integrated Assessment Journal* 6 (1), S. 83–88.

- Park, Taeshin; Barton, Paul I. (1996): State event location in differential-algebraic models. In: *ACM Trans. Model. Comput. Simul.* 6 (2), S. 137–165.
- Perrin, C.; Michel, C.; Andreassian, V. (2003): Improvement of a parsimonious model for streamflow simulation. In: *Journal of Hydrology* (279), S. 275–289.
- Powell, M.J.D. (2009): The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives.
- Qu, Yizhong; Duffy, Christopher J. (2007): A semidiscrete finite volume formulation for multiprocess watershed simulation. In: *Water Resour. Res.* 43 (8), S. n/a.
- Reed, Seann; Koren, Victor; Smith, Michael; Zhang, Ziya; Moreda, Fekadu; Seo, Dong-Jun; DMIP Participants, and (2004): Overall distributed model intercomparison project results. In: *Journal of Hydrology* 298 (1-4), S. 27–60.
- Reichert, P.; Schuwirth, N. (2012): Linking statistical bias description to multiobjective model calibration. In: *Water Resour. Res.* 48 (9), S. n/a.
- Reichert, Peter; Mieleitner, Johanna (2009): Analyzing input and structural uncertainty of nonlinear dynamic models with stochastic, time-dependent parameters. In: *Water Resour. Res.* 45 (10).
- Renard, Benjamin; Kavetski, Dmitri; Kuczera, George; Thyer, Mark; Franks, Stewart W. (2010): Understanding predictive uncertainty in hydrologic modeling: The challenge of identifying input and structural errors. In: *Water Resour. Res.* 46 (5), S. n/a.
- Renard, Benjamin; Kavetski, Dmitri; Leblois, Etienne; Thyer, Mark; Kuczera, George; Franks, Stewart W. (2011): Toward a reliable decomposition of predictive uncertainty in hydrological modeling: Characterizing rainfall errors using conditional simulation. In: *Water Resour. Res.* 47 (11), S. n/a.
- Ren-Jun, Zhao (1992): The Xinanjiang model applied in China. In: *Journal of Hydrology* 135 (1-4), S. 371–381.
- Reusser, D. E.; Blume, T.; Schaefli, B.; Zehe, E. (2009): Analysing the temporal dynamics of model performance for hydrological models. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 13 (7), S. 999–1018.
- Reusser, D. E.; Zehe, E. (2011): Inferring model structural deficits by analyzing temporal dynamics of model performance and parameter sensitivity. In: *Water Resour. Res.* 47 (7).
- Richter, Dieter (1995): Ergebnisse methodischer Untersuchungen zur Korrektur des systematischen Meßfehlers des Hellmann-Niederschlagsmessers. Offenbach am Main: Selbstverl. des Dt. Wetterdienstes (Berichte des Deutschen Wetterdienstes, 194).

- Saad, Youcef; Schultz, Martin H. (1986): GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. In: *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.* 7 (3), S. 856–869.
- Sadegh, M.; Vrugt, J. A. (2013): Bridging the gap between GLUE and formal statistical approaches: approximate Bayesian computation. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 17 (12), S. 4831–4850.
- Schoups, G.; Vrugt, J. A.; Fenicia, F.; van de Giesen, N. C. (2010): Corruption of accuracy and efficiency of Markov chain Monte Carlo simulation by inaccurate numerical implementation of conceptual hydrologic models. In: *Water Resour. Res.* 46 (10).
- Schoups, Gerrit; Vrugt, Jasper A. (2010): A formal likelihood function for parameter and predictive inference of hydrologic models with correlated, heteroscedastic, and non-Gaussian errors. In: *Water Resour. Res.* 46 (10).
- Seibert, J.; McDonnell, J. J. (2002): On the dialog between experimentalist and modeler in catchment hydrology: Use of soft data for multicriteria model calibration. In: *Water Resour. Res.* 38 (11).
- Seibert, J.; Vis, M. J. P. (2012): Teaching hydrological modeling with a user-friendly catchment-runoff-model software package. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 16 (9), S. 3315–3325.
- Shampine, L. F.; Gear, C. W. (1979): A User's View of Solving Stiff Ordinary Differential Equations. In: *SIAM Rev.* 21 (1), S. 1–17.
- Singh, Shailesh Kumar; Bárdossy, András (2012): Calibration of hydrological models on hydrologically unusual events. In: *Advances in Water Resources* 38, S. 81–91.
- Singh, V. P. (Hg.) (1995): Computer models of watershed hydrology. Rev. ed. Highlands Ranch, Colo.: Water Resources Publications.
- SMHI (Hg.) (2009): Improvement HBV model Rhine in FEWS. Final report. Unter Mitarbeit von G. Berglöv, J. German, H. Gustavsson, U. Harbman und B. Johansson (Hydrology, 112).
- SMHI (2011): Manual IHMS - Integrated Hydrological Modelling System. Version 6.2.
- Smith, P. J.; Beven, K. J.; Tawn, J. A. (2008a): Detection of structural inadequacy in process-based hydrological models: A particle-filtering approach. In: *Water Resour. Res.* 44 (1).
- Smith, Paul; Beven, Keith J.; Tawn, Jonathan A. (2008b): Informal likelihood measures in model assessment: Theoretic development and investigation. In: *Advances in Water Resources* 31 (8), S. 1087–1100.

- Sommeijer, B. P.; Shampine, L. F.; Verwer, J. G. (1998): RKC: An explicit solver for parabolic PDEs. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 88 (2), S. 315–326.
- Steinrücke, J.; Fröhlings, B.; Weißhaupt, R. (2012): HYMOG - Hydrologische Modellierungsgrundlagen im Rheingebiet. Hg. v. Internationale Kommission für die Hydrologie des Rheingebietes (KHR-Bericht, I-24).
- Thiemann, M.; Trosset, M.; Gupta, H.; Sorooshian, S. (2001): Bayesian recursive parameter estimation for hydrologic models. In: *Water Resour. Res.* 37 (10), S. 2521.
- Tromp-van Meerveld, H. J.; McDonnell, J. J. (2006): Threshold relations in subsurface stormflow: 2. The fill and spill hypothesis. In: *Water Resour. Res.* 42 (2), S. n/a.
- Tyralla, C.; Schumann, A. (2013): HydPy – ein interaktiv nutzbares Framework zur Erstellung und Anwendung hydrologischer Modelle. Hg. v. Bundesanstalt für Gewässerkunde. Koblenz (BfG-1795).
- Tyralla, C.; Schumann, A. (2014): Die numerische Integration von HBV96 und LARSIM-ME als Unsicherheitsquelle. In: *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* (58), S. 138–147.
- Tyralla, C.; Schumann, A. (2016a): Incorporating structural uncertainty of hydrological models in likelihood functions via an ‘ensemble range approach’. In: *Hydrological Sciences Journal* Special issue: Facets of Uncertainty.
- Tyralla, C.; Schumann, A. (2016b): Parameter- und Modellstrukturunsicherheit von HBV96 in der operationellen Rheinvorhersage – Analysen und Verbesserungsvorschläge. Bericht an die Bundesanstalt für Gewässerkunde im Rahmen des Projektes Quantifizierung und Reduktion von Unsicherheiten durch Datenassimilation und Ensemble-Techniken für Kurz-, Mittel- und Langfristvorhersagen der BfG. Hg. v. Bundesanstalt für Gewässerkunde. Koblenz (BfG-Berichte, 1877).
- van Der Houwen, P. J.; Sommeijer, B. P. (1980): On the Internal Stability of Explicit, m-Stage Runge-Kutta Methods for Large Values. In: *Z. angew. Math. Mech.* 60 (10), S. 479–485.
- Vrugt, J. A.; Robinson, B. A. (2007a): Improved evolutionary optimization from genetically adaptive multimethod search. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 104 (3), S. 708–711.
- Vrugt, J. A.; Ter Braak, C.J.F. (2011): DREAM_(D): an adaptive Markov Chain Monte Carlo simulation algorithm to solve discrete, noncontinuous, and combinatorial posterior parameter estimation problems. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 15 (12), S. 3701–3713.
- Vrugt, Jasper A.; Robinson, Bruce A. (2007b): Treatment of uncertainty using ensemble methods: Comparison of sequential data assimilation and Bayesian model averaging. In: *Water Resour. Res.* 43 (1), S. n/a.

- Wagener, T.; McIntyre, N.; Lees, M. J.; Wheater, H. S.; Gupta, H. V. (2003): Towards reduced uncertainty in conceptual rainfall-runoff modelling: dynamic identifiability analysis. In: *Hydrol. Process.* 17 (2), S. 455–476.
- Wagener, Thorsten; Sivapalan, Murugesu; Troch, Peter; Woods, Ross (2007): Catchment Classification and Hydrologic Similarity. In: *Geography Compass* 1 (4), S. 901–931.
- Walker, W.E; Harremoes, P.; van der Sluijs, J.P; van Asselt, M.B.A; Janssen, P.; Krayenbühl, M.P von (2003): Defining Uncertainty Defining Uncertainty - A Conceptual Basis for Uncertainty Management in Model-Based Decision Support. In: *The Integrated Assessment Journal* 4 (1), S. 83–88.
- Wallis, Kenneth F. (2005): Combining Density and Interval Forecasts: A Modest Proposal*. In: *Oxford Bull Econ & Stats* 67 (s1), S. 983–994.
- Williams, J. R. (1969): Flood Routing With Variable Travel Time or Variable Storage Coefficients. In: *Transactions of the ASAE* 12 (1), S. 0100–0103.
- Wood, Eric F. (1976): An analysis of the effects of parameter uncertainty in deterministic hydrologic models. In: *Water Resour. Res.* 12 (5), S. 925.
- Yapo, P.O; Gupta, H.V; Sorooshian, S. (1998): Multi-objective global optimization for hydrologic models. In: *Journal of Hydrology* 204 (1-4), S. 83–97.
- Zarnowitz, Victor (1969): The New ASA-NBER Survey of Forecasts by Economic Statisticians. In: *The American Statistician* 23 (1), S. 12.
- Zehe, E.; Sivapalan, M. (2009): Threshold behaviour in hydrological systems as (human) geo-ecosystems: manifestations, controls, implications. In: *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 13 (7), S. 1273–1297.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1: Wechselwirkung der Quellen der Simulationsunsicherheit.	10
Abbildung 2.2: Parameterunsicherheit unterschiedlich komplexer Modelle.	12
Abbildung 3.1: Mögliche Modellvernetzungen in HydPy.	15
Abbildung 3.2: Skizze der Prozessabstraktion nach HBV ₉₆	20
Abbildung 3.3: Skizze der Prozessabstraktion nach LARSIM _{ME}	22
Abbildung 3.4: Lage der Untersuchungsgebiete im Einzugsgebiet des Rheins.	24
Abbildung 3.5: Einzugsgebiet des oberen Neckars bis zum Zufluss der Eyach.	25
Abbildung 3.6: Einzugsgebiet der Lahn bis Pegel Kalkofen.	26
Abbildung 3.7: Einzugsgebiet der Nahe bis unterhalb Pegel Grolsheim.	27
Abbildung 4.1: Anwendung von ELS ohne stufenbezogene Fixpunkt-Iteration auf ein nichtsteifes Testproblem.	49
Abbildung 4.2: Vergleichsanwendung analog zu Abbildung 4.1 unter Verwendung äquidistanter Auswertungsstellen.	51
Abbildung 4.3: Anwendung von ELS ohne und mit einmaliger stufenbezogener Fixpunkt-Iteration auf ein (potenziell) steifes sowie ein unstetiges Testproblem.	52
Abbildung 4.4: Drei Unstetigkeitstypen (schwarz) und deren Regularisierung mit unterschiedlichem Glättungsgrad (rot: schwach, grün: mittel, blau: stark).	61
Abbildung 4.5: Veranschaulichung des Konstruktionsprinzips der Regularisierungsfunktion \hat{f}_3 (rot) aus w (grün) und zwei \hat{f}_2 -basierten Komponenten (blau) bei schwacher (oben), mittlerer (mittig) und starker (unten) Glättung.	63
Abbildung 4.6: Disaggregation von Stundenwerten des Niederschlages.	68
Abbildung 4.7: Disaggregation von Tageswerten des Niederschlages.	70
Abbildung 4.8: Veranschaulichung der Parametrisierung der Disaggregierungsfunktion ρh	73
Abbildung 4.9: Veranschaulichung der Parametrisierung der Disaggregierungsfunktion ρd	74

Abbildung 4.10: Abweichung von der geforderten Variabilität.	75
Abbildung 4.11: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\sigma_h, 5m$) vs. der Niederschlagssumme (Ph) einzelner Stundenfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu.....	76
Abbildung 4.12: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\sigma_d, 5m$) vs. der Niederschlagssumme (Pd) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu.	77
Abbildung 4.13: Relative Variabilität der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\sigma_d, 5m$) vs. der Mitteltemperatur (Td) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu... 77	
Abbildung 4.14: Relative Schwerpunktabweichung der 5-Minuten-Werte des Niederschlags ($\delta_d, 5m$) vs. der Niederschlagssumme (Pd) einzelner Tagesfenster, DWD-Station Essen-Bredeneu.....	79
Abbildung 4.15: Veranschaulichung der Solvereffizienz für die Tageswertsimulation mit LARSIM _{ME} ohne Niederschlagsdisaggregation.....	103
Abbildung 4.16: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.	105
Abbildung 4.17: Flusskomponentenvergleich für die Tageswertsimulation mit LARSIM _{ME} ohne Niederschlagsdisaggregation.....	106
Abbildung 4.18: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit der Tageswertsimulation mit LARSIM _{ME} ohne Niederschlagsdisaggregation.....	108
Abbildung 4.19: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Tageswertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.....	110
Abbildung 4.20: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.	111
Abbildung 4.21: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Stundenwertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.	112
Abbildung 4.22: Flusskomponentenvergleich analog Abbildung 4.17 für die Tageswertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.....	113
Abbildung 4.23: Flusskomponentenvergleich analog Abbildung 4.23 für die Stundenwertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.	115
Abbildung 4.24: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit analog Abbildung 4.18 für die Tageswertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation,	116
Abbildung 4.25: Parametersensitivität der numerischen Unsicherheit analog Abbildung 4.18 für die Stundenwertsimulation mit HBV ₉₆ ohne Niederschlagsdisaggregation.....	117

Abbildung 4.26: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19 für die Tageswertsimulation mit HBV ₉₆ mit Niederschlagsdisaggregation.	118
Abbildung 4.27: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.26, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.	119
Abbildung 4.28: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.26 für die Tageswertsimulation mit HBV ₉₆ mit Niederschlagsdisaggregation.	120
Abbildung 4.29: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.28, aber als direkter Vergleich von erreichter Genauigkeit und Rechenaufwand.	121
Abbildung 4.30: Flusskomponentenvergleich in Anlehnung an Abbildung 4.22 für die Simulation mit HBV ₉₆ in unterschiedlicher Zeitschrittweite.	122
Abbildung 4.31: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.15 für die Tageswertsimulation mit der modifizierten Horton-Infiltration unter Einsatz der Niederschlags-Disaggregationstechnik für Parametersatz A (links) und Parametersatz B (rechts).	124
Abbildung 4.32: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.31 für die Stundenwertsimulation.	125
Abbildung 4.33: Vergleich der beobachteten Abflussganglinie (schwarz) mit zwei durch LARSIM _{ME} simulierte Abflussganglinien für den oberen Neckar.	127
Abbildung 4.34: Fehleroberflächen der Neukalibrierung von LARSIM _{ME}	128
Abbildung 4.35: Darstellung der Simulationsgüte analog zu Abbildung 4.33 unter Verwendung der optimalen Parameterwerte entsprechend Abbildung 4.34.	129
Abbildung 4.36: Darstellung des Kalibriererfolgs als kumulative Häufigkeitsverteilung der mit BOBYQA in 30 unabhängigen Kalibrierläufen erreichten Nash-Sutcliffe-Effizienzen (NSE) für die Tageswertsimulation mit LARSIM _{ME}	130
Abbildung 4.37: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber unter Verwendung des Dormand-Prince-Verfahrens als Integrationsverfahren.	131
Abbildung 4.38: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber unter Verwendung des Truncated Newton Conjugate-Gradient-Algorithmus als Optimierverfahren.	132
Abbildung 4.39: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber für die mit HBV ₉₆ durchgeführte Tageswertsimulation.	134
Abbildung 4.40: Darstellung des Kalibriererfolgs analog zu Abbildung 4.36, aber für die mit HBV ₉₆ durchgeführte Stundenwertsimulation.	135
Abbildung 4.41: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.19, aber mit Belegung des schneedeckenbezogenen Grenzwertes zur Unterdrückung der Bodenverdunstung (<i>EAT</i>) mit einem Wert von 0 mm.	137

Abbildung 4.42: Veranschaulichung der Solvereffizienz analog zu Abbildung 4.41, aber für die Stundenwertsimulation.....	138
Abbildung 5.1: Veranschaulichung der Konstruktion der Wahrscheinlichkeitsdichte der Abflussmessung (f_y , rote Linien) für den Single Model (links), Ensemble Point (mittig) und Ensemble Density Approach (rechts).	150
Abbildung 5.2: Hypothetische Einzugsgebiete mit unterschiedlichen Gewässernetzdichten.	151
Abbildung 5.3: Veranschaulichung der Konstruktion der Wahrscheinlichkeitsdichte der Abflussmessung (f_y , rote Linien) analog zu Abbildung 5.1, aber ausschließlich für dem Ensemble Range Approach.	157
Abbildung 5.4: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 3-Modell-Ensembles.....	158
Abbildung 5.5: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 4-Modell-Ensembles.....	159
Abbildung 5.6: Veranschaulichung des Ensemble Range Approach analog zu Abbildung 5.3, aber für 10-Modell-Ensembles.....	160
Abbildung 5.7: Veranschaulichung der Wirkungsweise des Ensemble Range Approach.	168
Abbildung 5.8: Veranschaulichung der sich aus der Kombination des Bestimmtheitsmaßes (R) und des Standardabweichungsverhältnisses (V) ergebenden Pareto-Fronten.....	170
Abbildung 5.9: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Pareto-Optimierung analog zu Abbildung 5.7.....	171
Abbildung 5.10: Zusammenhang zwischen der Nash-Sutcliffe-Effizienz (NSE) und dem Modellparameter k	172
Abbildung 5.11: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Generalized Likelihood Uncertainty Estimation-Methode analog zu Abbildung 5.7.....	172
Abbildung 5.12: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Dynamic Identifiability Analysis analog zu Abbildung 5.7	173
Abbildung 5.13: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Partikel-Filterung analog zu Abbildung 5.12 bei schwach ausgeprägtem Random Walk.....	174
Abbildung 5.14: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Partikel-Filterung analog zu Abbildung 5.13 bei stark ausgeprägtem Random Walk.....	175
Abbildung 5.15: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für den oberen Neckar.....	182

Abbildung 5.16: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.	183
Abbildung 5.17: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 4-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.	184
Abbildung 5.18: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für den oberen Neckar.	186
Abbildung 5.19: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Lahn analog Abbildung 5.15.	188
Abbildung 5.20: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Lahn analog zu Abbildung 5.18.	189
Abbildung 5.21: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Lahn analog Abbildung 5.15.	190
Abbildung 5.22: Darstellung der Abflussganglinien der Member eines 3-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Lahn.	192
Abbildung 5.23: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Nahe analog Abbildung 5.15.	194
Abbildung 5.24: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von HBV ₉₆ für die Nahe analog zu Abbildung 5.18.	195
Abbildung 5.25: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM _{ME} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.	197
Abbildung 5.26: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM _{ME} für den oberen Neckar analog zu Abbildung 5.18.	198
Abbildung 5.27: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 10-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM _{ME} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.15.	199
Abbildung 5.28: Darstellung der Abflussganglinien der Member eines 10-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM _{ME} für den oberen Neckar.	200

Abbildung 5.29: Darstellung der fünf besten ermittelten Parametersätze des 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar analog Abbildung 5.25, aber unter ensembleinterner Fixierung des Niederschlagskorrekturfaktors (*KG*) sowie des Verdunstungskorrekturfaktors (*KE*). 202

Abbildung 5.30: Darstellung der Abflussganglinien der beiden Member der fünf besten 2-Modell-Ensembles unter Verwendung von LARSIM_{ME} für den oberen Neckar analog zu Abbildung 5.26, aber unter ensembleinterner Fixierung des Niederschlagskorrekturfaktors sowie des Verdunstungskorrekturfaktors. 204

Tabellenverzeichnis

Tabelle 4.1: Veranschaulichung Butcher-Tableau.	36
Tabelle 4.2: Koeffizienten Lobatto-IRK(4) nach Butcher.....	40
Tabelle 4.3: Koeffizienten Lobatto-IIIA(4) nach Ehle.....	42
Tabelle 4.4: Übertragskoeffizienten Lobatto-IIIA(4 → 6).....	44
Tabelle 4.5: Koeffizienten der expliziten Lobatto-Sequenz ohne Fixpunkt-Iteration.....	47
Tabelle 4.6: Koeffizienten der expliziten Lobatto-Sequenz mit einmaliger Fixpunkt-Iteration.....	47
Tabelle 4.7: Interpolationskoeffizienten für Speichergrößen, Lobatto-IIIA(4).....	59
Tabelle 4.8: Interpolationskoeffizienten für Flussintegrale, Lobatto-IIIA(4).	60
Tabelle 4.9: Mittlere Niederschlagsvariabilität in Stundenintervallen.....	76
Tabelle 4.10: Regression zur relativen Niederschlagsvariabilität in Tagesintervallen.	78
Tabelle 4.11: Regression zur relativen Schwerpunktsabweichung in Tagesintervallen.	80
Tabelle 4.12: Horton-Parametersätze A und B.....	123
Tabelle 4.13: Einfluss der Zeitschrittweite auf den mit der Horton-Infiltration simulierten Oberflächenabfluss	126
Tabelle 5.1: Konstruktion und Benennung der synthetischen Fallstudien.	165
Tabelle 5.2: Maximum-Likelihood-Schätzung, SMA.....	166
Tabelle 5.3: Maximum-Likelihood-Schätzung, EPA.....	166
Tabelle 5.4: Maximum-Likelihood-Schätzung, EDA.	167
Tabelle 5.5: Maximum-Likelihood-Schätzung, ERA.....	167
Tabelle 5.6: Likelihood-Werte, HBV ₉₆ , oberer Neckar.....	180
Tabelle 5.7: Likelihood-Werte, HBV ₉₆ , Lahn.	187
Tabelle 5.8: Likelihood-Werte, HBV ₉₆ , Nahe.....	193
Tabelle 5.9: Likelihood-Werte, LARSIM _{ME} , oberer Neckar (1)	196
Tabelle 5.10: Likelihood-Werte, LARSIM _{ME} , oberer Neckar (2).....	201

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

Zeichen	Dimension ¹	Bezeichnung, ggf. Kontext ²
\mathbf{a}		RK-Koeffizienten zur Berechnung von $\hat{\mathbf{y}}_{1:s}$, ODE
$\mathbf{a}^{\{s\}}$		\mathbf{a} für IRK mit s Stufen, ODE
A_G	\mathbf{L}^2	gesamte Einzugsgebietsfläche, LARSIM
A_S	\mathbf{L}^2	gesättigte Einzugsgebietsfläche, LARSIM
$ABQB$	\mathbf{LT}^{-1}	QB nach Abflusskonzentration, LARSIM
$ABQD$	\mathbf{LT}^{-1}	QD nach Abflusskonzentration, LARSIM
$ABQI$	\mathbf{LT}^{-1}	QI nach Abflusskonzentration, LARSIM
$ALPHA$	-.....	Nichtlinearitätsparameter der Abflusskonzentration, HBV
ATV		Abwassertechnische Vereinigung e. V.
\mathbf{b}		RK-Koeffizienten zur Berechnung von $\hat{\mathbf{y}}^1$, ODE
$\tilde{\mathbf{b}}$		RK-Koeffizienten zur Berechnung von $\tilde{\mathbf{y}}^1$, ODE
$beta$	\mathbf{T}^{-1}	Speicherkonstante der Basisabflussfreisetzung, LARSIM
$BETA$	-.....	Nichtlinearitätsparameter der Abflussbildung, HBV
BfG		Bundesanstalt für Gewässerkunde
BMVI.....		Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur
$BNID$	\mathbf{LT}^{-1}	Bestandsniederschlag, LARSIM
BOBYQA		Bound Optimization BY Quadratic Approximation-Verfahren

¹ Nur für physikalische Größen angegeben. Verwendete Symbole: \mathbf{L} für die Länge, \mathbf{T} für die Zeit oder die Dauer, Θ für die Temperatur und - bei Dimensionslosigkeit. Im numerischen (ODE, DL, RE) und statistischen (ERA) Zusammenhang wird grundsätzlich von der Angabe kontextspezifischer Dimensionen abgesehen.

² Zur eindeutigen Zuordnung wiederholt verwendeter Symbole wird für diese der zutreffende Kontext angegeben.

<i>BOWA</i>	L	aktuelles Gebietsmittel der Bodenspeicherung, LARSIM
<i>BOWAx</i>	L	aktuelles Gebietsmaximum des Bodenspeicherung, LARSIM
BS		Bogacki-Shampine-Verfahren
<i>BSF</i>	-	Nichtlinearitätsparameter der Abflussbildung, LARSIM
<i>c</i>		Heteroskedastizitätsparameter, ERA
<i>c</i>		Regressionsparameter, DIS
<i>c</i>		RK-Koeffizienten als Anteile von <i>h</i> , ODE
<i>c</i> ^{s}		<i>c</i> für IRK mit <i>s</i> Stufen, ODE
<i>CF</i>	LT⁻¹	aktueller kapillarer Aufstieg, HBV
<i>CFLUX</i>	LT⁻¹	maximaler kapillarer Aufstieg, HBV
<i>CFMAX</i>	LT⁻¹Θ⁻¹	Grad-Tag-Faktor, HBV
<i>CFR</i>	-	Gefrierfaktor als relativer Anteil von <i>CFMAX</i> , HBV
CMF		Catchment Modelling Framework
DGM		Digitales Geländemodell
Dichte		Wahrscheinlichkeitsdichte(funktion)
<i>Dmin</i>	LT⁻¹	Maximalrate von <i>Q_L</i> , LARSIM
<i>Dmax</i>	LT⁻¹	Maximalrate der Summe von <i>Q_L</i> und <i>Q_S</i> , LARSIM
DIN		Deutsches Institut für Normung
DIS		Disaggregation
DL		Discontinuity Locking-Verfahren
DP		Dormand-Prince-Verfahren
DVWK		Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e. V.
DWD		Deutscher Wetterdienst
DYNIA		DYnamic Identifiability Analysis
<i>E</i>		Diskontinuitätsfunktion, DL
<i>EA</i>	LT⁻¹	aktuelle Bodenwasserverdunstung, HBV
<i>EAT</i>	L	<i>SP</i> -Grenzwert der Bodenverdunstung, HBV
<i>ECORR</i>	-	Verdunstungskorrekturfaktor, HBV
EDA		Ensemble Density Approach

EI	\mathbf{LT}^{-1}	aktuelle Interzeptionsverdunstung, HBV
ELS		Explizite Lobatto-Sequenz
EPA		Ensemble Point Approach
EPc	\mathbf{LT}^{-1}	korrigierte potenzielle Evapotranspiration, HBV
EQB	-	Kalibrierfaktor der Basisabflusskonzentration, LARSIM
EQD	-	Kalibrierfaktor der Direktabflusskonzentration, LARSIM
EQI	-	Kalibrierfaktor der Zwischenabflusskonzentration, LARSIM
ERA		Ensemble Range Approach
$ERED$	-	Faktor zur Reduktion von Verdunstungsüberschüssen, HBV
EVB	\mathbf{LT}^{-1}	aktuelle Bodenwasserverdunstung, LARSIM
EVI	\mathbf{LT}^{-1}	aktuelle Interzeptionsverdunstung, LARSIM
$EVPO$	\mathbf{LT}^{-1}	potenzielle Verdunstung, LARSIM
f_B		Dichte der Betaverteilung, ERA
f_D		Dichte der Dirichletverteilung, ERA
f_G		Dichte der Gammaverteilung, ERA
f_N		Dichte der Normalverteilung, ERA
f_s		Dichte der Strukturunsicherheit, ERA
$f_{\hat{y}}$		Dichte von \hat{y} , ERA
f_{ε}		Dichte von ε , ERA
$f(x, \mathbf{y}(x))$		gewöhnliches Differenzialgleichungssystem, ODE
$\hat{f}(x)$		Interpolationspolynome für $f(x, \mathbf{y})$, ODE
$f_{t^0, \mathbf{y}(t^0)}(t, \mathbf{y}(t))$		$f(x, \mathbf{y}(x))$ angepasst für DL, DL
\hat{f}		Regularisierungsfunktion, RE
F	\mathbf{LT}^{-1}	Flussgröße, ODE
\hat{F}	\mathbf{LT}^{-1}	Approximation von F , ODE
FC	\mathbf{L}	maximale Bodenspeicherfüllung, HBV
fn		Anzahl an Funktionsaufrufen
FUSE		Framework for Understanding Structural Errors
g		gammaverteilte Zufallszahl, ERA

g	ELS-Koeffizienten für den Zustandsübertrag, ODE
$g^{\{s \rightarrow s+1\}}$	g für den Übertrag von s zu $s + 1$ Stufen, ODE
GLUE	Generalized Likelihood Uncertainty Estimation
GMRES	Generalized Minimal Residual
$Grasref_r$	-	Koeffizient der Bodenverdunstung, LARSIM
GTF	$LT^{-1}\Theta^{-1}$	Grad-Tag-Faktor, LARSIM
h	Integrationsschrittweite, ODE
HBV ₉₆	Hydrologiska Byråns Vattenbalansavdelning – 1996
$HINZ$	-	auf Blattflächenindex bezogene Interzeptionskapazität, LARSIM
I	meteorologische Eingangsinformation, ODE
IC	L	aktuelle Interzeptionsspeicherung, HBV
$ICMAX$	L	Interzeptionskapazität, HBV
ILS	Implizite Lobatto-Sequenz
IN	LT^{-1}	aktueller Bodenwassereintrag, HBV
INF_A	LT^{-1}	Anfangsinfiltrationskapazität, Horton
INF_E	LT^{-1}	Endinfiltrationskapazität, Horton
INF_K	LT^{-1}	aktuelle Infiltrationskapazität, Horton
INF_M	LT^{-1}	maximale Infiltrationskapazität, Horton
IRK	Implizites Runge-Kutta-Verfahren
k	Anzahl der Member eines Ensembles, ERA
k	$L^{-1}T^{-1}$	tatsächliche Speicherkonstante, ERA
\hat{k}	$L^{-1}T^{-1}$	geschätzte Speicherkonstante, ERA
k	T^{-1}	Speicherkonstante, Horton & ODE
K	Proportionalitätskonstante Konsistenzordnung, ODE
K	$L^{-ALPHAT^{-1}}$	Speicherkonstante Direktabfluss, HBV
$K4$	T^{-1}	Speicherkonstante Basisabfluss, HBV
KE	-	Verdunstungskorrekturfaktor, LARSIM
KG	-	Niederschlagskorrekturfaktor, LARSIM
KHQ	T^{-1}	Kalibrierfaktor der Direktabflusskonzentration, HBV

KLIWAS.....	Auswirkungen des Klimawandels auf Wasserstraßen und Schifffahrt
l	Anzahl an Grenzwerten, DL
LARSIM _{ME}	Large Area Runoff Simulation Model – Mitteleuropa
LOSS _M	LT⁻¹ Maximalrate Speicherungsverlust, Horton
LP.....	-..... Verdunstungsgrenzwert, HBV
LZ.....	L aktuelle untere Grundwasserspeicherung, HBV
m	Anzahl dirichletverteilter Zufallsvektoren, ERA
m	Anzahl Flussgrößen, ODE
M	Modellfunktion, ERA
MaxAE.....	maximale absolute Abweichung
MAE.....	mittlere absoluter Abweichung
MAXBAZ.....	T Basislänge des Dreiecks-Unit-Hydrograph, HBV
ME.....	mittlere Abweichung
MELT.....	LT⁻¹ aktuelles Schmelzen von <i>SP</i> , HBV
MQ.....	LT⁻¹ oder L³T Mittlerer Abfluss
n	Zeitreihenlänge, ERA
n	Anzahl Speichergrößen, ODE
nFK	L Maximalwert von <i>BOWA</i> , LARSIM
$nFKx$	L Maximalwert von <i>BOWAx</i> , LARSIM
N_{EFF}	LT⁻¹ Effektivniederschlag, Horton
NSE.....	Nash-Sutcliffe-Effizienz
ODE.....	ordinary differential equation
p	Konsistenzordnung, ODE
P	Wahrscheinlichkeit, ERA
P_d	L Tagesniederschlagsmenge, DIS
P_{eff}	LT⁻¹ Effektivniederschlag, ERA
P_h	L Stundenniederschlagsmenge, DIS
p^i	LT⁻¹ aktuelle Niederschlagsintensität im externen Zeitschritt i , DIS
\bar{p}^i	LT⁻¹ mittlere Niederschlagsintensität im externen Zeitschritt i , DIS

pCF	LT^{-1}	potenzieller kapillarer Aufstieg, HBV
pEA	LT^{-1}	potenzielle Bodenwasserverdunstung, HBV
pEE	LT^{-1}	möglicher Verdunstungsüberschuss, HBV
$pMELT$	LT^{-1}	potenzielles Schmelzen von SP , HBV
$pPERC$	LT^{-1}	potenzielle Perkolation, HBV
$pREFR$	LT^{-1}	potenzielles (Wieder-)Gefrieren von WC , HBV
Pc	LT^{-1}	korrigierter Niederschlag, HBV
$PCORR$	-	Gesamtniederschlagskorrekturfaktor, HBV
$PERC$	LT^{-1}	aktuelle Perkolation, HBV
$PERCMAX$	LT^{-1}	maximale Perkolation, HBV
PS		Parametersatz
Q	LT^{-1} oder L^3T	aktueller Gesamtabfluss, ERA
Q	LT^{-1} oder L^3T	aktueller Gesamtabfluss, HBV & LARSIM
$Q0$	LT^{-1}	aktueller Direktabfluss, HBV
$Q1$	LT^{-1}	aktueller Basisabfluss, HBV
QB	LT^{-1}	aktueller Basisabfluss, LARSIM
QD	LT^{-1}	aktueller Direktabfluss, LARSIM
QD^*	LT^{-1}	modifizierter aktueller Direktabfluss, LARSIM
QI	LT^{-1}	aktueller Zwischenabfluss, LARSIM
QI_L	LT^{-1}	langsame Komponente von QI , LARSIM
QI_S	LT^{-1}	schnelle Komponente von QI , LARSIM
r		Anzahl an Wichtungskoeffizienten ω , ODE
R	LT^{-1}	potenziell abflusswirksamer Anteil von IN , HBV
R^2		Bestimmtheitsmaß
$RAIN$	LT^{-1}	flüssiger Anteil von TF , HBV
RE		Regularisierung
$RECSTEP$		Anzahl Rechenschritte Direktabflusskonzentration, HBV
$REFR$	LT^{-1}	aktuelles (Wieder-)Gefrieren von WC , HBV
$RFCF$	-	Korrekturfaktor für den flüssigen Niederschlagsanteil, HBV

RK.....	Runge-Kutta-Verfahren
RK(p).....	Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung p
s	Stufenanzahl von RK-Verfahren, ODE
s	L , LT⁻¹ oder Θ Glättungsparameter, RE
S	L Speicherung, ERA & Horton & ODE
S	Normierungskonstante von f_s , ERA
\hat{S}	L Approximation von S , ODE
S_M	L Maximalspeicherung, Horton
SCE-UA.....	Shuffled Complex Evolution, University of Arizona
SDC.....	Spectral Deferred Correction
SEPD.....	Skewed Exponential Power Distribution
$SFCF$	-..... Korrekturfaktor für den gefrorenen Niederschlagsanteil, HBV
SHE.....	Systeme Hydrologique Europeen
SM	L aktuelle Bodenspeicherfüllung, HBV
SMA.....	Single Model Approach
SMHI.....	Swedish Meteorological and Hydrological Institute
$SNOW$	LT⁻¹ gefrorener Anteil von TF , HBV
SP	L aktueller Eisgehalt der Schneedecke, HBV
SWAT.....	Soil and Water Assessment Tool
t	Index der externen Zeitschritte, ERA
t	Zeitpunkt, ODE
t	Zeitpunkt innerhalb des aktuellen externen Zeitschrittes, DIS
t_0	Zeitpunkt zu Beginn des aktuellen externen Zeitschrittes, DIS
t_1	Zeitpunkt am Ende des aktuellen externen Zeitschrittes, DIS
t^*	Ereigniszeitpunkt, DL
t^0	t zu Beginn eines Integrationsschrittes, DL
t^1	t am Ende eines Integrationsschrittes, DL
$t^{[i]}$	t am i -ten Zwischenzeitpunkt eines externen Zeitschrittes, DIS
T_d	Θ Tagesmittel der Lufttemperatur, DIS

T_c	Θ	korrigierte Lufttemperatur, HBV
TF	LT^{-1}	Bestandsniederschlag, HBV
TGr	Θ	Temperaturgrenzwert der Niederschlagsform, LARSIM
TNC		Truncated Newton Conjugate-Gradient-Verfahren
TT	Θ	Temperaturgrenzwert der Niederschlagsform, HBV
$TTINT$	Θ	Temperaturintervall mit gemischter Niederschlagsform, HBV
TTM	Θ	Schmelzpunkt der Schneedecke, HBV
u		relativer Zeitpunkt innerhalb eines λ -Segments, DIS
u_0		u für $t = t_0$, DIS
u_1		u für $t = t_1$, DIS
UH	-	Unit-Hydrograph-Ordinaten, HBV
UZ	L	aktuelle obere Grundwasserspeicherung, HBV
v		ELS-Koeffizienten zur Ermittlung von w , DL
V		Standardabweichungsverhältnis Simulation/Messung
w		Polynomkoeffizienten zur zeitvariablen Abbildung von $\hat{f}(x)$, DL
w		Wichtungsfaktor zur Konstruktion von \hat{f}_3 , RE
w		Anzahl Zwischenzeitpunkte in einem externem Zeitschritt, DIS
$WADA$	LT^{-1}	aktueller Bodenwassereintrag, LARSIM
WB	L	Grenzwert für Q_B und Q_{I_L} , LARSIM
WC	L	aktueller Wassergehalt der Schneedecke, HBV
$WCMAX$	L	maximaler Wassergehalt der Schneedecke, HBV
WHC	-	relative Wasserhaltekapazität, HBV
WZ	L	absoluter Grenzwert fürs Q_{I_S} , LARSIM
$WZBo$	-	relativer Grenzwert fürs Q_{I_S} , LARSIM
x		simulierter Abfluss, ERA
x		unabhängige Größe, ODE
x^0		x zu Beginn eines Integrationsschrittes, ODE
x^1		x am Ende eines Integrationsschrittes, ODE
y		tatsächlicher Abfluss, ERA

\hat{y}	gemessener Abfluss, ERA
y	Systemzustände, ODE
y^0	y gegeben für x^0 , ODE
y^1	y für x^1 basierend auf y^0 , ODE
\hat{y}^1	Schätzung von y^1 , ODE
$\hat{y}^{1\{s\}}$	\hat{y}^1 für IRK mit s Stufen, ODE
\tilde{y}^1	Vergleichsschätzung von y^1 , ODE
\hat{y}_i	Zwischenschätzung von y für $x = c_i$, ODE
\hat{y}_i^*	\hat{y}_i ermittelt beim IRK-Übertrag nach ELS, ODE
$\hat{y}_i^{[q+1]}$	\hat{y}_i^* nach q Picard-Iterationsschritten, ODE
$\hat{y}_i^{\{s\}}$	\hat{y}_i für IRK mit s Stufen, ODE
Z	Berechnung einer Speicheränderung aus Flussgrößen, ODE
α	EDA-Wichtungsfaktor, ERA
α	Zufallsreihe zur Erzeugung der synthetischen Fallstudien, ERA
α_h	Ereignisdauerparameter für ρ_h , DIS
α_d	Ereignisdauerparameter für ρ_d , DIS
β	EPA-Wichtungsfaktor, ERA
β_d	Ereignisversatzparameter für ρ_d , DIS
γ	ERA-Wichtungsfaktor, ERA
γ	natürlicher Logarithmus der größten Gleitkommazahl, RE
γ_d	Ereignisverhältnisparameter für ρ_d , DIS
Γ	Gammafunktion, ERA
δ	Formparameter von f_B , ERA
δ	relative Schwerpunktabweichung im externen Zeitschritt, DIS
δ_d	δ für Tageswerte, DIS
$\hat{\delta}_d$	geforderter Wert für δ_d , DIS
$\delta_{d,5m}$	aus 5-Minuten-Reihe ermittelter Wert für δ_d , DIS
Δ	Intervalllänge, ODE

$(\Delta \mathbf{y})$	Systemzustandsänderungen, ODE
ε	Abflussmessfehler, ERA
ε	numerische Fehlerabschätzung, ODE
ε_{tol}	Fehlertoleranz, ODE
$\varepsilon^{\{s\}}$	Fehlerabschätzung eines s -stufigen IRK, ODE
E	Maximumsfunktion über alle E , DL
ζ -	Sicherheitsfaktor für QD^* , LARSIM
θ	Modellparametersatz, ODE
θ	gesamter Parametersatz, ERA
θ_M	Modellparametersatz, ERA
θ_s	Parameter von f_s , ERA
θ_ε	Parameter von f_ε , ERA
θ^*	gesamter Maximum-Likelihood-Parametersatz, ERA
Θ	Parametersuchraum, ERA
λ	Polynomsegment für von ρ_d und ρ_h , DIS
λ_k	Korrekturfaktor für λ , DIS
ξ	Vergleichswertfunktion, DL
Ξ	Grenzwertfunktion, DL
ρ_d	Disaggregierungsfunktion für Tageswerte, DIS
ρ_h	Disaggregierungsfunktion für Stundenwerte, DIS
$\rho_{h,i}$	i -te Komponente von ρ_d , DIS
σ	tatsächliche Standardabweichung des Abflusses, ERA
$\hat{\sigma}$	geschätzte Standardabweichung des Abflusses, ERA
σ	relative Niederschlagsvariabilität in externem Zeitschritt, DIS
σ_d	σ für Tageswerte, DIS
$\hat{\sigma}_d$	geforderter Wert für σ_d , DIS
$\check{\sigma}_d$	mit ρ_d erzielter Wert für σ_d , DIS
$\sigma_{d,5m}$	aus 5-Minuten-Reihe ermittelter Wert für σ_d , DIS
σ_h	σ für Stundenwerte, DIS

$\hat{\sigma}_h$	geforderter Wert für σ_h , DIS
$\check{\sigma}_h$	mit ρ_h erzielter Wert für σ_h , DIS
$\sigma_{h,5m}$	aus 5-Minuten-Reihe ermittelter Wert für σ_h , DIS
T	Bedingung für eine Diskontinuitätsfunktion, DL
ω	dirchletverteilte Zufallszahl, ERA
ω	Koeffizienten zur zeitfixierten Abbildung von $\hat{f}(x)$, ODE
χ	gewichtete Mittelung der Ausaben aller Ensemble-Member, ERA
Υ_T Θ	Metaparameter für „temperaturbasierte“ Grenzwerte, RE
Υ_W L oder LT⁻¹	Metaparameter für „wasserbasierte“ Grenzwerte, RE
Φ	betaverteilte Zufallszahl, ERA
Ψ -	aktueller Abflussbeiwert, HBV
Ω	Berechnung einer Flussgröße aus Speichergrößen, ODE
$\mathbb{1}$	Indikatorfunktion, ERA

Heft	Jahr	Autor und Titel
1	1983	Klatt, Peter Vorhersage von Hochwasser aus radargemessenem und prognostiziertem Niederschlag
2	1983	Scheider, Klaus Modell zur gleichzeitigen Erzeugung von Tagesabflussdaten an mehreren Stellen eines Einzugsgebietes
3	1984	Strübing, Gert Satellitendaten als Basis der Bestimmung von monatlichen Abflüssen für wasserwirtschaftliche Planungen
4	1985	Harboe, Ricardo Optimaler Betrieb wasserwirtschaftlicher Verbundsysteme mit Speichern und anderen Anlagen
5	1986	Tegtmeier, Ulrike Wasserwirtschaftliche Projektbewertung – Methoden und Anwendungsbeispiele
6	1987	Richter, Karl Gerd Vergleichende hydrologische Untersuchungen des Hochwasserablaufes in Testeinzugsgebieten mit unterschiedlicher Bebauungsdichte
7	1989	Salas, Edgar Anwendung der Bayesschen Theorie auf wasserwirtschaftliche Planungen mit hydrologischen Datenreihen
8	1990	Vogt, Roland Stauraumverlandung – Naturmessung und Computersimulation
9	1992	Tiedt, Michael Freizeitnutzung als Komponente der Wasserwirtschaftlichen Projektbewertung
10	1993	Gyau-Boakye, Philip Filling Gaps in Hydrological Runoff Data Series in West-Africa Ergänzung lückenhafter Abflussreihen in West-Afrika
11	1993	Schumann, Andreas H. Der Einfluss von Veränderungen der Umweltbedingungen und sozio-ökonomischer Faktoren auf Hydrologie und Wasserwirtschaft
12	1993	Fett, Werner Die Nutzung räumlich hoch aufgelöster Gebietsinformationen für die Simulation von Hochwasserganglinien in humiden Mittelgebirgslandschaften

Heft	Jahr	Autor und Titel
13	1994	Papadakis, Ioannis Berechnung historischer Abflüsse mit Hilfe multispektraler und multitemporaler digitaler Satellitenbilder
14	1995	Schultz, G.A. (Hrsg.) Verfügbarkeit von Wasser Beiträge zur 8. wissenschaftlichen Tagung des DVWK vom 22.-23.03.1995 an der Ruhr-Universität Bochum
15	1996	Su, Zhongbo Remote Sensing Applied to Hydrology: The Sauer River Basin Study Fernerkundung angewandt in der Hydrologie: Die Sauer-Einzugsgebiets-Studie
16	1997	Wolbring, Frank Wissensbasierte Methoden für den Betrieb von Talsperren
17	1998	Hornbogen, Martin Die Planung von Wasserversorgungssystemen auf der Basis des Nachhaltigkeitsprinzips
18	2002	Schumann, Andreas H. (Hrsg.) Proceedings Workshop HydroGIS NRW 2002 23.05.2002 Ruhr-Universität Bochum
19	2003	Quirnbach, Markus Nutzung von Wetterradar-daten für Niederschlags- und Abflussvorhersagen in urbanen Einzugsgebieten
20	2006	Brass, Carsten Betrieboptimierung von Talsperrensystemen mittels Stochastisch Dynamischer Programmierung (SDP) unter Berücksichtigung veränderlicher Ziele und Randbedingungen
21	2006	Dietrich, Jörg Entwicklung einer Methodik zur systemanalytischen Unterstützung adaptierbarer Entscheidungsprozesse bei der integrierten Flussgebietsbewirtschaftung
22	2006	Gattke, Christian Modellvergleiche zur Untersuchung struktureller Unsicherheiten – Anwendung objektorientierter Methoden in der hydrologischen Modellierung
23	2009	Schumann, Andreas H. (Hrsg.) Verbundvorhaben Entwicklung integrativer Lösungen für das operationelle Hochwassermanagement am Beispiel der Mulde – Abschlussbericht

Heft	Jahr	Autor und Titel
24	2009	Schumann, Andreas H. (Hrsg.) Integrative Nutzung des technischen Hochwasserrückhalts in Poldern und Talsperren am Beispiel des Flussgebiets der Unstrut
25	2009	Klein, Bastian Ermittlung von Ganglinien für die risikoorientierte Hochwasserbemessung von Talsperren
26	2010	Wisser, Dominik Modeling of Irrigation and Reservoirs in Regional and global Water Cycles
27	2013	Nijssen, David Improving spatiality in decision making for river basin management
28	2015	Schulte, Markus Anwendung von Copula-Modellen in der Hochwasserstatistik zur Planung technischer Rückhaltmaßnahmen
29	2016	Tyralla, Christoph Identifikation und Reduktion struktureller Unsicherheiten in hydrologischen Modellen

Lehrstuhl für Hydrologie, Wasserwirtschaft und Umwelttechnik
Ruhr-Universität Bochum, 2009

Universitätsstraße 150, 44780 Bochum
Tel. +49 (0234) 32 - 24693, Fax. - 14153

ISSN 0949-5975