

# Adjungierte Modelle zur Quantifizierung von Gewässer-Morphologie-Bauwerksinteraktionen

Uwe H. Merkel

Jan Riehme

Uwe Naumann

Interessenkonflikte an Fließgewässern sind zumeist eine Folge von räumlichen Wechselwirkungen zwischen Strömung, Sediment, Bauwerken und Wasserqualität. Diese räumlich heterogenen Komponenten beeinflussen potentiell lokal die Hochwassercharakteristiken, die Effizienz der Energiegewinnung, die Fahrrinnen der Wasserstraßen und nicht zuletzt lokale Habitate. Der Bau einer Buhne, eines Wehrs, die Einleitung von Abwässern oder eine nicht durchdachte Baggerung können ein sorgfältig ausbalanciertes Gefüge oft über viele Kilometer aus dem Gleichgewicht bringen.

Mittels *algorithmischer Differenziation* erweiterte numerische Strömungsmodelle können den Einfluss räumlicher Störgrößen auf Strömungen punktgenau und unabhängig von benachbarten Parametern rückrechnen, also sogenannte *Adjungierte* ( $\sim$  Gradienten) erzeugen. Diese in der Gewässermodellierung neue Technik ermöglicht die Lösung bisher physikalisch und numerisch kaum modellierbarer Fragestellungen, weil erstmals der Einfluss einzelner Modell-Knoten und Parameter unabhängig von anderen quantifiziert wird, in nur einem Arbeitsgang! In der Fließgewässerhydraulik kann dieses Verfahren zur Aufschlüsselung von Interaktionen, zur automatischen Kalibrierung und Optimierung strömungsrelevanter Formen, zur Data Assimilation und für hoch aufgelöste Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen verwendet werden.

Stichworte: Sensitivitätsanalyse, Automatische Kalibrierung, TELEMAC-AD, Algorithmische Differenziation, Adjungierte Modelle, Interaktion von Strömungsprozessen

## 1 Quantifikation von Abhängigkeiten in großräumigen Strömungsfeldern und bei hoher Parameterzahl

Viele Effekte in Fließgewässern lassen sich heute im Nahfeld einzeln numerisch simulieren oder physikalisch modellieren, beispielsweise eine isolierte Buhne oder ein kleines Buhnenfeld. Bei großmaßstäblichen Simulationen auf Flussgebietsmaßstab mit multiplen Einwirkungen sind bis heute die Unsicherheiten bei Designparametern, empirischen Beiwerten und die zahlreichen per Strömung

interagierende Nachbarzonen die limitierenden Faktoren für die Qualität der berechneten Aussage. Einflüsse überlagern sich und sind nur mit extrem hohen Rechenaufwand zu entschlüsseln.

Das Problem wird insbesondere für sogenannte *inverse Probleme* komplex. Als *inverses Problem* bezeichnet man Aufgabenstellungen, bei denen sehr viele Parameter (*N-dimensional*) einen Zielparameter (*1-dimensional*) beeinflussen, der sich direkt oder mittels Formeln aus einer Strömungssimulation ableiten lässt:

*Zielparameter (1-dimensional)* können sein: Erosion in einem bestimmten Punkt, punktueller Strömungsdruck, punktuelle Salinität etc. Aber auch statistische Kennwerte mehrdimensionaler Variablen wie z. B. aufsummierte Baggerkosten, gemittelter Sauerstoffgehalt, Maximalwert der flächigen Wassertemperatur, Fehlersummen zu Beobachtungswerten, akkumulierter und zeitlich gemittelter Sedimenttransport durch einen Querschnitt.

*Einflussgrößen (N-dimensional)* können sein: Jeder Punkt der umgebenden Topographie (N entspricht Anzahl der Knoten im FE/FV-Rechenetz), der Rauheitsverteilung oder dem anfänglichen Gewässerzustand (z. B. Geschwindigkeitsfeld oder Konzentrationsverteilung). Zusätzliche Abhängigkeiten bestehen zu einer Vielzahl weiterer 1-dimensionaler Parameter, z. B. Abfluss, Zufluss, kritischer Shieldswert, Meyer-Peter Müller Vorfaktor und eben generell alle empirischen Kalibrierungswerte, die ein Strömungsmodell besitzt. *N-dimensional* bedeutet also für ein 2D oder 3D Modell in heutigen üblichen Größen  $N=10^5$  bis  $N=10^9$ .

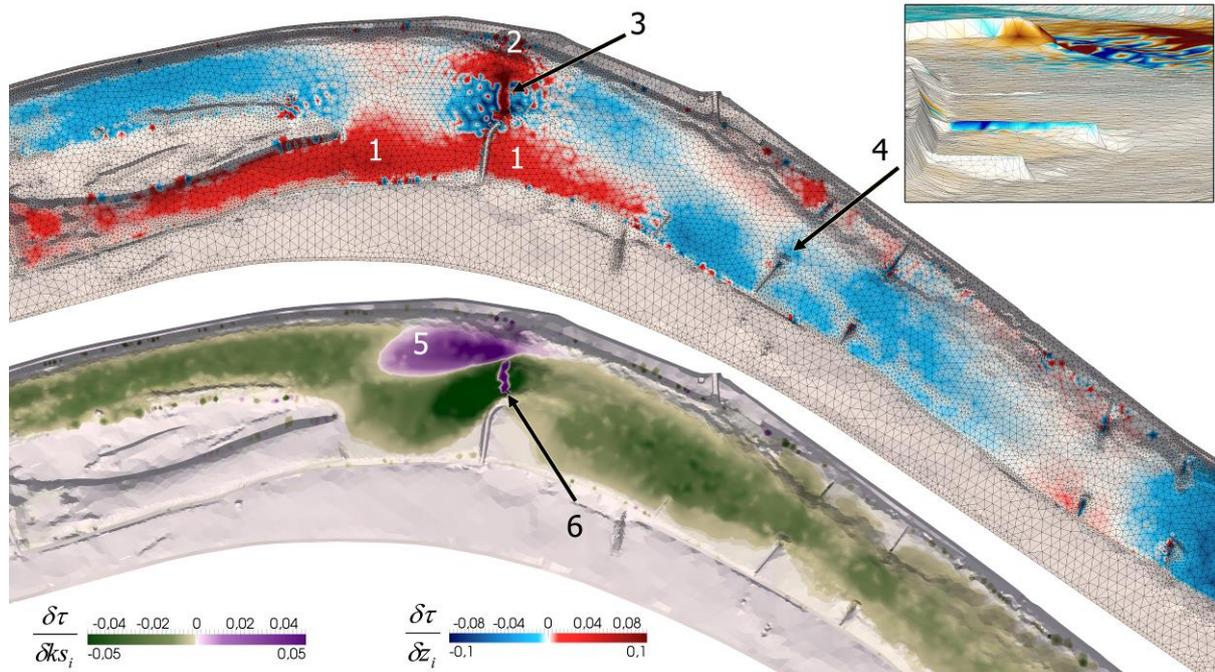
Die Quantifizierung einer einzelnen Abhängigkeit wird bisher zumeist per Differenzen-Gradient aus je 2 Modellläufen mit unterschiedlichen Parametern beschrieben. Für 100 000 Knoten mit je 2 Parametern (Geländehöhe, Rauheit) sind also 200 000 Modellvarianten gegenüber dem Ausgangszustand nötig, um den quantitativen Einfluss zu kartographieren.

Die für wasserbauliche Anwendungszwecke neue Methode der algorithmischen Differentiation von Programmen zur Erzeugung eben dieser Sensitivitäten schafft die Berechnung der 200 000 Einzelwerte in nur einem Arbeitsgang.

Bevor im Kapitel 2 die Vorgehensweise erklärt wird, wird zuerst mit einigen Beispielen visualisiert, was den Vorteil punktgenauer Abhängigkeitsinformationen ausmacht. Durch die Darstellung als Karte lässt sich ein räumliches Verständnis von Interaktionen beschreiben, die für manuelle oder gar automatisierte Optimierung von Formen oder Kalibrierung des Modells von großer Bedeutung sind. Nichts desto trotz soll nicht der Eindruck vermittelt werden, dass nur geographische Parameter für adjungierte Analysen geeignet sind. Geeignet sind alle

Parameter, die sich als Gleitkommazahl im Programm selbst befinden, auch 1-dimensionale, empirische Parameter, die nicht in räumlicher Darstellung gezeigt werden können.

### Beispiel 1: Schubspannung in Abhängigkeit von Topographie und Rauheit

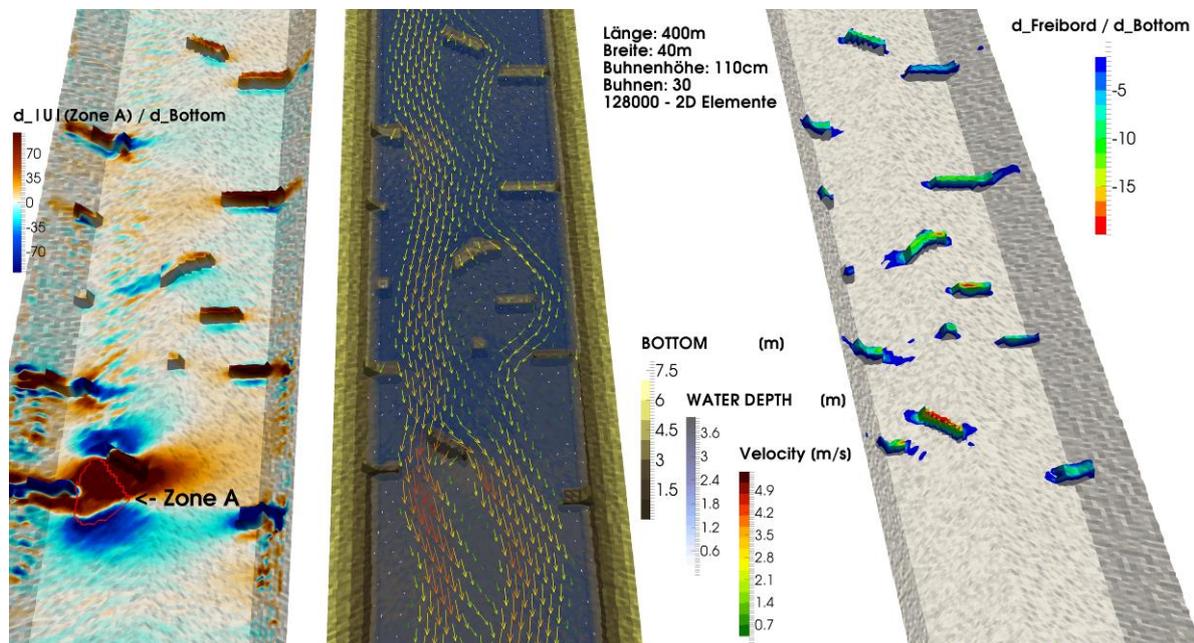


**Abbildung 1:** Sensitivitäten, die als Karte darstellbar sind (Donau). Aufschlüsselung der Interaktion zwischen Umgebung (hier Topographie und Rauheit) und  $\tau$  im Buhnenkopfkolk. Die Fernwirkung von Buhnen ist teilweise noch aus einigen Kilometern Entfernung quantifizierbar.

Abbildung 1 zeigt als Beispiel an einem Abschnitt der Donau die Fernwirkung von topographischen Merkmalen (oben) und Rauheitswerten in einem hydraulischen 2D FE-Modell mit 47500 einzelnen Knoten. Als Untersuchungsziel wurde die Schubspannung  $\tau$  im Buhnenkopfkolk in der Fahrrinne gewählt (3 & 6):

Wird die Topographie  $z$  in den roten Zonen 1 & 2 erhöht ( $\partial z$  in [m]), so erhöht sich die Schubspannung  $\tau$  im Untersuchungsziel (durch Kanalisierung der Strömung zur Mitte). Denselben Effekt würde man in der räumlich sehr klar umrissenen Zone 5 erreichen, wenn beispielsweise durch den Einbau grober Wasserbausteine die Rauheit erhöht wird ( $k_s$  in [m]). Besonders interessant ist der Einfluss des einzelnen Buhnenrückens (Perspektive zu 4) im Vergleich zu den benachbarten Buhnen. Diese liegen im Strömungsschatten und haben kaum Wirkung für den dargestellten Strömungszustand und das gewählte Untersuchungsziel.

## Beispiel 2: Einfluss von Felsriegeln auf die maximale Fließgeschwindigkeit



**Abbildung 2:** Innerstädtischer Gewässerabschnitt: Einzuhalten sind Freibord bei 400 m<sup>3</sup>/s (rechts, Hochwasserschutz) und maximale Fließgeschwindigkeit bei 50 m<sup>3</sup>/s (links, Durchgängigkeit). Die Gradientendarstellungen links zeigt sehr deutlich, wie einzelne Bühnen und Betonblöcke die Fließgeschwindigkeit in Zone A beeinflussen. Die Darstellung rechts zeigt welche Querriegel den stärksten Einfluss ausüben auf den Freibord.

Abbildung 2 zeigt einen kanalisierten Gewässerabschnitt. Sucht man den Grund für die gemäß Bauauflagen unzulässigen Geschwindigkeitsspitzen in Zone A, so erhält man in der linken Ansicht den Gradienten  $\partial V_{\text{Zone A}} / \partial \text{Topographie}$  sehr deutliche Aussagen über Effekte der einzelnen Steinriegel: Die blau eingefärbten erzeugen bei weiterem Anheben ein Abbremsen der Geschwindigkeit, die rot eingefärbten eine Beschleunigung in Zone A.

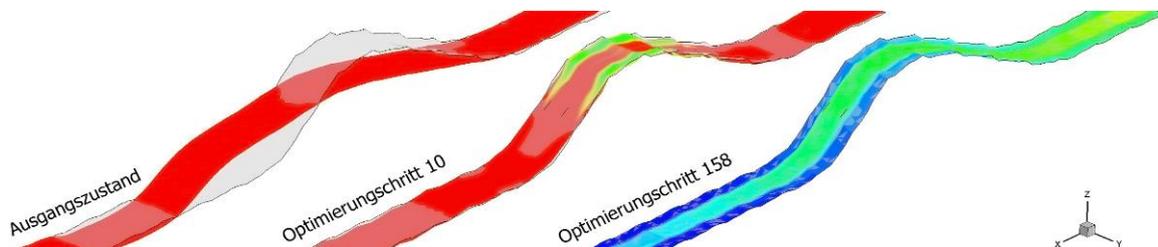
Bemerkenswert ist eine rote Zone auf der anderen Seite des Felsriegels neben Zone A: Wird also die Umgebung von Zone A angehoben, dann wird mehr Wasser durch Zone A geführt.

Weiterhin fällt auf, dass rund um die Steinriegel oft eine kontrastfarbene Kontur zu sehen ist: Wenn also der Fuß der Bühne angehoben und der Rücken abgesenkt wird, dann entspricht dies einer Veränderung des Böschungswinkels.

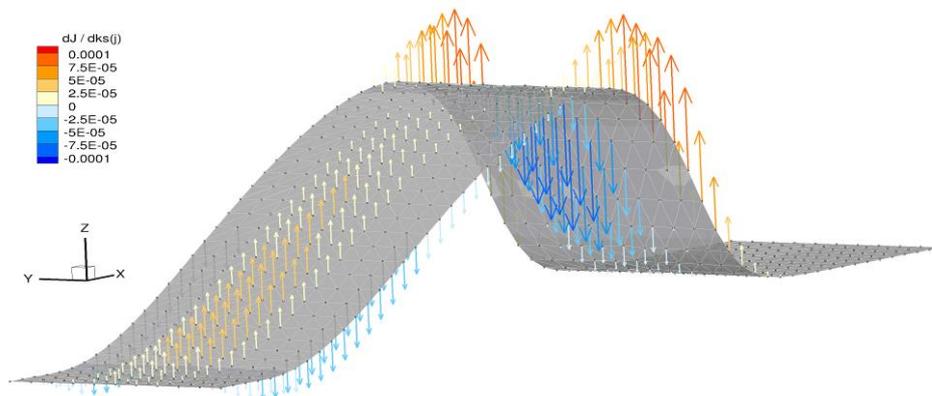
In der rechten Ansicht  $\partial \text{Freibord}_{\text{MIN}} / \partial \text{Topographie}$  ist der Einfluss der gesamten Topographie auf den Freibord geprüft worden. Es zeigt sich, dass einzelne Steinriegel stärkeren Einfluss ausüben als andere.

Der Berechnungsaufwand für die beiden Szenarien liegt bei 90 min CPU Zeit.

### Beispiel 3: Einfluss von Korngrößen auf die Form einer Düne (Automatische Kalibrierung)



**Abbildung 3:** Rinnenversuch zur Bewegung einer Düne. Automatische Kalibrierung des zugehörigen numerischen Modells in 158 Schritten, basierend auf adjungierter Modellierung. Grau schattiert: die Form der Düne, wie sie aus dem Experiment bekannt ist. Farbige: Die Düne, wie sie durch den aktuellen Parametersatz vom numerischen Modell erzeugt wird.



**Abbildung 4:** Darstellung des Gradienten für die Kalibrierung. In diesem Fall bedeutet der Gradient: „Summe der Fehler |Beobachtung – Rechnung| je Knoten“ in Abhängigkeit der Korngröße (die zusätzlich die Rauheit erzeugt).

Die 1-dimensionale Zielgröße kann zum Beispiel auch die Summe der Fehlerquadrate zwischen Soll und Ist-Zustand eines Modells beschreiben. In der Mathematik wird diese Hilfsgröße als *Kostenfunktion J* bezeichnet. Will man also die Summe der Abweichungen *J* minimieren, so kann potentiell jede Eingangsgröße des Modells der Grund sein. Beispielsweise die Korngröße, sie kann in jedem Punkt unterschiedlich sein und beeinträchtigt gleichermaßen die Oberflächenrauheit und damit das Strömungsfeld. Sie trägt also über verschiedene Wege zu den „Kosten“ = Abweichungen bei.

Abbildung 3 zeigt das iterative Kalibrieren eines Dünenmodells. Da die Prozesse in der wandernden Düne hochgradig nichtlinear sind, trifft nicht der erste lineare Optimierungsschritt das Ziel. Aber nach jedem Anpassen der Parameter

wird erneut per Telemac-AD der Gradient berechnet und somit ein verbesserter Parametersatz erzeugt.

Im abgebildeten Fall wird in 158 Schritten die Berechnung auf die Beobachtung angepasst, bis kein Punkt mehr weiter als  $10^{-6}$  mm vom Wunschzustand abweicht. Abbildung 4 zeigt mit Pfeilen die Richtung und Stärke an, wie die Kalibrierungsparametergruppe „Korndurchmesser“ verändert werden muss, um dem Ziel „minimale Abweichungen“ näher zu kommen. Dieser Anwendungsfall wird in *Merkel et al. (2013)* ausgiebig beschrieben.

### Weitere Anwendungsbeispiele

Über das algorithmisch differenzierte Telemac erschienen neben mathematischen Abhandlungen von Riehme und Naumann auch ein Zeitschriftenbeitrag und zwei Masterarbeiten mit wasserbaulichem Schwerpunkt:

- *Villaret et al. (2016)* beschreiben die Anwendung der First Order Second Moment (FOSM) Methode für Unsicherheitsanalysen an einem akademischen Experiment.
- *Mai (2015)* verwendet die Tangenten Lineare Version für eine First Order Second Moment (FOSM) basierte Unsicherheitsanalyse am Rhein und vergleicht die Ergebnisse mit Monte Carlo Simulationen.
- *Schäfer (2013)* nutzt die Adjungierten zum Test geeigneter linearer Optimierungsalgorithmen für die automatische Kalibrierung eines Sedimenttransportmodelles (ausführliche Beschreibung zu Beispiel 3).

## 2 Methodik

Alle Abbildungen dieses Beitrags visualisieren die Gradienten. Mathematisch formuliert exemplarisch für die Rauheit:

$$\nabla\tau = \left[ \frac{\partial\tau}{\partial ks(1)} \dots \frac{\partial\tau}{\partial ks(N)} \right]^T \approx \left[ \frac{\Delta\tau}{\Delta ks(1)} \dots \frac{\Delta\tau}{\Delta ks(N)} \right]^T \quad (1)$$

Zur Erstellung dieser Karte aus Abbildung 1 wären also 2 mal 47 500 Variantenrechnungen mit konventioneller Finiter Differenzen Methodik notwendig, um für 47 500 Netzknoten jeweils beide Parameter ( $\Delta z$  und  $\Delta ks$ ) zu prüfen.

Eine Berechnung mit der im Folgenden vorgestellten Methode der algorithmischen Differentiation schafft diesen Aufwand in einem Arbeitsgang.

Hierzu werden bereits während der gewöhnlichen numerischen Simulation mit Telemac für jeden einzelnen Rechenschritt pro Parameter die Sensitivitäten (=Ableitungen) aufgezeichnet. In einer anschließend zeitlich rückwärts gerichteten Auswertung wird dann für jeden einzelnen Netzpunkt  $\partial t / \partial z$  bzw.  $\partial t / \partial ks$  ermittelt. Werden diese Ableitungen bzw. Gradienten durch Rückwärtsinterpretation erzeugt, nennt man sie Adjungierte. Natürlich könnten auch alle weiteren numerisch quantifizierbaren Parameter in diese Untersuchung mit integriert werden: z. B. Tracer, Korndurchmesser, temporäre Effekte wie Baggerungen über eine räumlich und zeitlich begrenzte Zone oder soweit im Modell mathematisch quantifizierbar: biochemische Faktoren.

Das Adjungierte Modell ist in diesem Fall mit ~10 h gegenüber ~300 Tagen für die konventionelle Differenzen Methodik mehr als 700x schneller. Zukünftige Code Optimierungen bieten nochmals Potential für eine Geschwindigkeitssteigerung um ein Vielfaches.

Adjungierte Modelle numerischer Berechnungen können den kompletten Gradienten vom Typ Gleichung (1) mit nur einem Lauf auswerten. Dies geschieht bei einer an den Vorwärtslauf angehängten Rückwärtsinterpretation. Ein adjungiertes Modell der Telemac-Suite wurde mit Hilfe des Differenzierenden NAG Fortran Compilers erstellt.

Das adjungierte Modell arbeitet wie folgt: Der Compiler instrumentiert den originalen Quellcode der Telemac-Suite derart, dass jeder mathematisch relevante Befehl nicht nur ausgeführt, sondern auch aufgezeichnet wird. Die Aufzeichnung wird als „Tape“ bezeichnet. Am Ende des sogenannten Vorwärtslaufes sind die Werte der Zielparameter berechnet und der gesamte Berechnungsablauf im Tape gespeichert.

Bei der jetzt anschließenden Rückwärtsinterpretation des Modells werden Adjungierte (Ableitungen) von den Zielparametern (am Ende des Tapes) zu Adjungierten der Eingabeparameter (am Anfang des Tapes) propagiert. Dabei werden alle im Tape gespeicherten Befehle in umgekehrter Reihenfolge (also rückwärts) durch ihre adjungierte Version interpretiert. Am Ende der Interpretation des Tapes kann der gesuchte Gradient direkt aus den Adjungierten der entsprechenden Eingabeparameter ausgelesen werden.

Diese Fähigkeiten der algorithmischen Differentiation führten in der Meteorologie, der Automobil-, sowie der Luft- & Raumfahrt bereits seit einigen Jahren zu einem signifikanten Sprung in Präzision und ökonomischer Effizienz.

### 3 Software Telemac-AD

Das erste allgemein einsetzbare Programm, das explizit adjungierte Gradienten für Fließgewässeranalysen erzeugt, ist Telemac-AD. Die Anfänge von Telemac-AD gehen auf ein von der Bundesanstalt für Wasserbau finanziertes F&E Projekt zurück. Mittlerweile wird Telemac-AD auch von HR Wallingford (GB) und dem Laboratoire National d'Hydraulique et Environnement (LNHE, F) genutzt und unterstützt. Eine neue Version mit Parallelisierung und Speicheroptimierung für den Einsatz an größeren und langlaufenden Modellen wird den Geschwindigkeitsvorteil weiter vervielfachen.

Lauffähige Beispielmolelle und mehr Textmaterial stehen für interessierte Endanwender zur Verfügung unter:

[www.uwe-merkel.com/telemac-ad](http://www.uwe-merkel.com/telemac-ad)

### 4 Hintergrundinformation: Algorithmisches Differenzieren

Algorithmisches Differenzieren ist eine mathematische Methode, um numerische Programme so zu erweitern, dass Ableitungen (Abhängigkeiten) berechneter Zielparame-ter bzgl. bestimmter Eingabeparameter effizient berechnet werden können (*Griewank, 2008*). AD arbeitet dabei auf einem bestehenden Quellcode und modifiziert nicht das der Implementierung zu Grunde liegende mathematischen Modell. Die so mit AD differenzierten Programme erlauben die Berechnung von Ableitungen mit Maschinengenauigkeit, an der durch die Werte der Eingabeparameter spezifizierten Auswertestelle.

Dem Algorithmischen Differenzieren liegt folgendes Prinzip zu Grunde: Jedes Programm wird als Folge einzelner atomarer Operationen (+, -, \*, /, exp, sin,...) betrachtet, für die Ableitungsregeln bekannt sind. Die Ableitungen aufeinanderfolgender Operationen werden durch die Kettenregel miteinander verknüpft.

Für Ableitungen erster Ordnung unterscheidet man zwei Basis-Modi:

1. Tangenten-lineare Modelle berechnen Ableitungen (sog. Tangenten) simultan zu den Werten des Ausgangsmodells. In diesem sog. Vorwärtsmodus von AD werden Projektionen der Jacobimatrix berechnet, wie sie auch Finite Differenzen (FD) liefern. Im Gegensatz zu FD allerdings mit Maschinengenauigkeit, also ohne Rundungsfehler.
2. Adjungierte Modelle berechnen Projektionen der transponierten Jacobimatrix, in dem Adjungierte von den Programmausgaben zu den Eingaben rückwärts durch das Programm propagiert werden. Für diesen Rückwärtslauf müssen im

vorgeschalteten Vorwärtslauf alle benötigten Informationen gespeichert werden. Adjungierte Modelle sind insbesondere für die Optimierung von Funktionen interessant, die einen einzelnen Ausgabewert aus vielen Eingaben berechnen (z. B. Summe der Fehlerquadrate bei der Kalibrierung von Modellen). In diesen Fall ist die Jacobimatrix nur ein Vektor (Gradient), der unabhängig von der Anzahl der Eingaben mit einer einzigen Auswertung des adjungierten Modells berechnet werden kann.

Modelle für Ableitungen zweiter und höherer Ordnung können durch Kombinationen der Basis-Modi erhalten werden und erlauben damit die Anwendung effizienterer Optimierungsalgorithmen.

Der AD-enabled NAG Fortran Compiler, eine am Institut Software and Tools for Computational Engineering (STCE) der RWTH Aachen entwickelte AD - Erweiterung des kommerzielles NAG Fortran Compilers der Numerical Algorithm Group, Oxford, UK, verfolgt einen hybriden Ansatz: Quellcodetransformationen werden mit einer effizienten überladungs-basierten Laufzeitbibliothek gekoppelt. Damit können differenzierte Modelle auch komplexer Softwarepakete wie der Telemac-Suite mit überschaubarem Aufwand erzeugt werden. In *Naumann & Riehme* (2005) wird die Anwendung des AD-Compilers detaillierter diskutiert. Grundlagen finden sich in *Naumann* (2012).

Für praxisrelevante Fragestellungen passt nicht der gesamte Berechnungsablauf in das „Tape“. Für das eingangs gezeigte Donaumodell mit z. B. 1000 Zeitschritten wären ca. 10 TB Hauptspeicher nötig. Diese nicht realisierbare Speicheranforderung wird durch Checkpointing dramatisch reduziert: Ein Checkpoint speichert während des Vorwärtslaufs den aktuellen Zustand der Simulation, so dass nach Wiederherstellung des Checkpoints die Simulation exakt an der Stelle der Speicherung wiederholt werden kann. Wird z. B. am Anfang jedes Zeitschrittes der Vorwärtsrechnung jeweils ein Checkpoint geschrieben, können aufeinanderfolgende Zeitschritte (in umgekehrter Reihenfolge) nacheinander adjungiert werden. Damit reduziert sich der Gesamtspeicherbedarf von 10 TB auf 10 GB für das Tape und ca. 300 MB für 1000 Checkpoints}. Diese Speicherreduktion erkaufte man sich mit etwas erhöhtem Rechenaufwand: Jeder Zeitschritt wird nun zweimal berechnet, einmal im Vorwärtslauf und einmal beim Adjungieren. Verbesserte Checkpointing-Strategien reduzieren die Anzahl benötigter Checkpoints durch erhöhten Rechenaufwand.

## 5 Literatur

- Griewank, A., Walther, A. Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation. 2d ed. SIAM. Philadelphia (2008).
- Kopmann, R. Merkel, U. Drei Jahre Telemac Open Source. In: Wasserwirtschaft (12 / 2013).
- Kopmann, R. Merkel, U. Riehme, J. Using Reliability Analysis in Morphodynamic Simulation with Telemac2D / Sisyph. Proceedings: Telemac Users Club 2012, Oxford (2012).
- Mai, Trung Hieu. Application of reliability methods to a numerical model of river Rhine, Master Thesis, University of Stuttgart (2015).
- Merkel, U. Naumann, U. Riehme, J. Rückrechnung von Rand- und Anfangsbedingungen mit Telemac und Algorithmischer Differentiation. In: Wasserwirtschaft (2013), Heft 12.
- Naumann, U. The Art of Differentiating Computer Programs. An Introduction to Algorithmic Differentiation. Software, Environments and Tools, SIAM (2012).
- Naumann, U. Riehme, J. A differentiation-enabled Fortran 95 compiler. ACM Transactions on Mathematical Software, 31(4):458–474 (2005).
- Nocedal, J. Wright, S. Numerical Optimization. 2nd ed. Springer (2006).
- Rausser, F. Riehme, J. Leppkes, K. Korn, P., Naumann, U. On the use of discrete adjoints in goal error estimation for shallow water equations. Procedia Computer Science, 1, 107–115 (2010).
- Schäfer, M. Optimierungsalgorithmen für LSQR Optimierungsprobleme mit dem algorithmisch differenzierten Telemac-2D AD. Diplomarbeit (2013).
- Villaret, C., Hervouet, J.M., Kopmann, R., Merkel, U. Morphodynamics modelling using the Telemac finite-element System. Computers and Geosciences. Heft 53 (2013).
- Villaret, C., Kopmann, R., Wyncoll, D., Riehme, J., Merkel, U., Naumann, U. First-order Uncertainty Analysis using Algorithmic Differentiation of the Telemac-2D/Sisyph Morphodynamic Model. Computers and Geosciences, Elsevir (2016). In print.

Autoren:

Dr. Uwe H. Merkel

UHM River Engineering, Karlsruhe  
www.uwe-merkel.com

E-Mail: [info@uwe-merkel.com](mailto:info@uwe-merkel.com)

Jan Riehme, M.Sc.,  
Prof. Dr. Uwe Naumann

STCE  
RWTH Aachen

E-Mail: [riehme@stce.rwth-aachen.de](mailto:riehme@stce.rwth-aachen.de)  
[naumann@stce.rwth-aachen.de](mailto:naumann@stce.rwth-aachen.de)