

KfK 5159
März 1993

2. Treffen des AK Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltanwendungen

**am 5.11. - 6.11.1992
in Karlsruhe**

**H.B. Keller, R. Grützner (Hrsg.)
Institut für Angewandte Informatik
Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren**

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Kernforschungszentrum Karlsruhe
Institut für Angewandte Informatik
Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren

KfK 5159

2. Treffen des AK
Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in
Umweltanwendungen

am 5.11. - 6.11.1992
in Karlsruhe

Hubert B. Keller, Rolf Grützner*
(Hrsg.)

* Universität Rostock, Fb Informatik

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

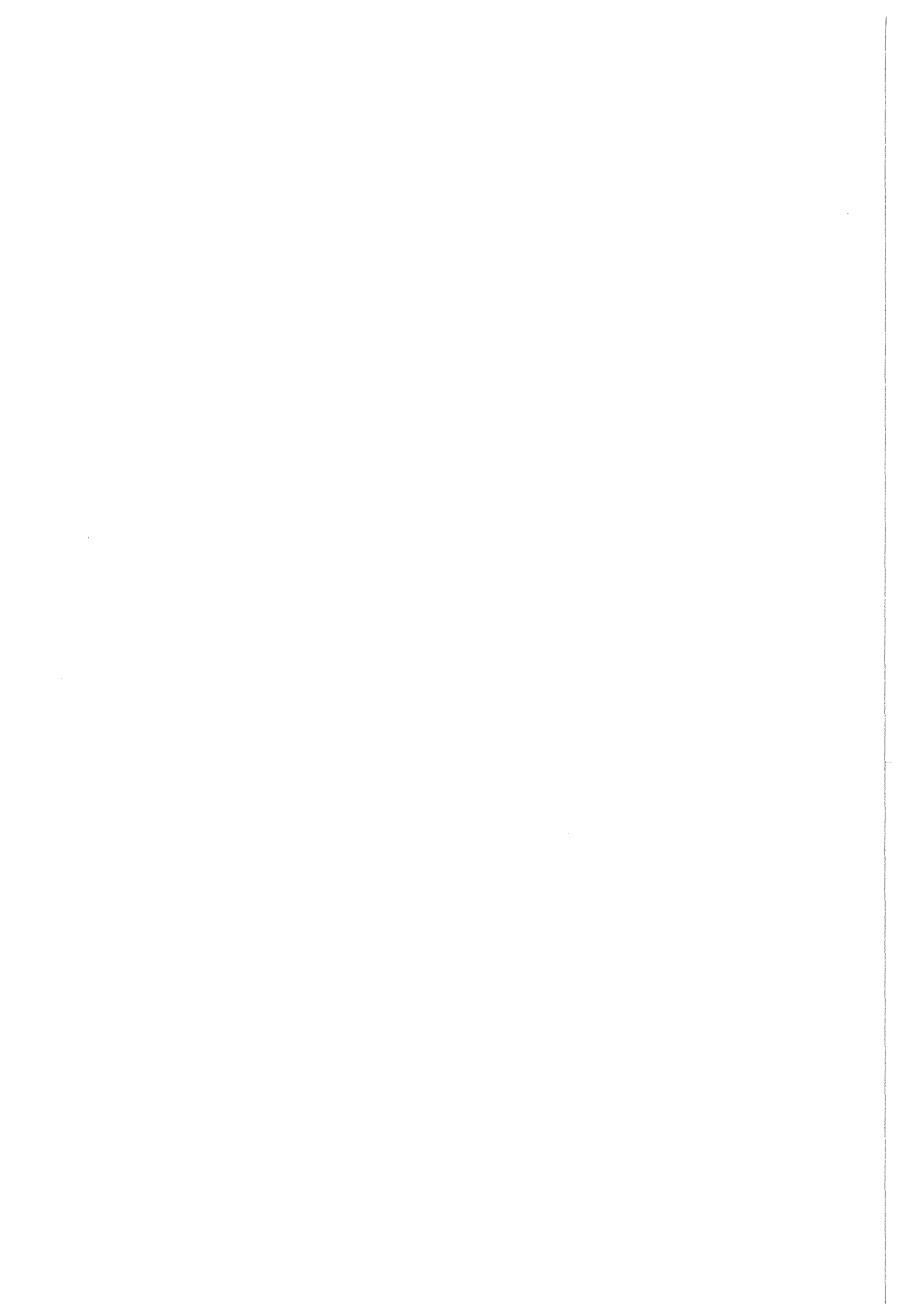
Zusammenfassung:

Dieser Bericht stellt die Beiträge des 2. Treffens des Arbeitskreises "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen" des Fachausschuß 4.6, "Informatik im Umweltschutz", der Gesellschaft für Informatik (GI) vom 5.11. - 6.11.1992 in Karlsruhe in schriftlicher Form dar.

2nd Meeting of the WG Tools for Simulation and Modelling in Environmental Applications

Abstract:

This report contains the papers of the 2nd meeting of the working group " Tools for Simulation and Modelling in Environmental Applications", of the section 4.6, "Computer Science for Environmental Protection", of the Society for Computer Science (GI), which took place at Karlsruhe on 5th - 6th of november in 1992.



Vorbemerkungen

Im März 1992 wurde innerhalb der GI-Fachgruppe 4.6.1 "Informatik im Umweltschutz" der Arbeitskreis 5 "Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen" gebildet. Das Ziel des Arbeitskreises besteht darin, alle auf dem Gebiet der Modellierung und Simulation im Umweltbereich, Ökologie und Biologie Tätigen mit Informatikern und Systemtheoretikern sowie Interessenten zu vereinen, um interdisziplinär einen Beitrag zur Ausgestaltung dieser Disziplin, zur Verbesserung der Problemlösungsmethode Simulation und der zugehörigen Werkzeuge zu liefern.

Darauf aufbauend hat sich der Arbeitskreis für den Anfang seiner Tätigkeit folgende Zielstellungen gesetzt:

- spezifische Anforderungen an die Modellierung/Simulation auf Grund der Eigenschaften des Umweltbereiches
- Anforderungen an Methoden und Werkzeuge der Modellierung/Simulation
- Erfassung von Methoden und Werkzeugen der Modellierung/ Simulation im Umweltbereich

Zur Realisierung dieser Zielstellungen wurden Vorträge und Diskussionen bereits auf zwei Arbeitskreistreffen geführt. Das erste am 24.6.1992 in Rostock und das zweite am 5.11./6.11.1992 in Karlsruhe.

In intensiven Diskussionen wurde bereits eine erfolgreiche Arbeit geleistet. Die Ergebnisse des Karlsruher Treffens sind in dieser Publikation dargestellt. Es sind Beiträge bzw. die den Vorträgen zugrunde liegenden Folien.

Als nächstes wird ein Anforderungskatalog an Softwarewerkzeuge für die Modellierung/Simulation zum Einsatz im Umweltbereich erarbeitet.

Die vollständige Zusammenfassung der Arbeitsergebnisse erfolgt auf dem 7. Symposium "Informatik für den Umweltschutz" (31.3. bis 2.4.1993) in Ulm.

Es hat sich gezeigt, daß es Anforderungen aus dem Umweltbereich an die Werkzeuge und Methoden sehr zahlreich gibt. Sie beziehen sich u.a. auf

- die Modellbeschreibung und -dokumentation
- die Methoden zur Simulation, Experimentdurchführung und Ergebnisrepräsentation
- die Benutzeroberflächen und damit auch eine adäquate Softwarestruktur
- der Datenbereitstellung und -speicherung
- die Leistungsfähigkeit von Hard- und Software.

Selbstverständlich werden diese Gebiete noch weiter geprägt durch das jeweilige Einsatzgebiet der Simulationssysteme im Umweltbereich.

Der Arbeitskreis steht allen Interessenten für eine aktive Mitarbeit offen. Informationen dazu sind beim Leiter des Arbeitskreises Universität Rostock, Fachbereich Informatik, AG Modellierung / Simulation, PSF 999, Albert-Einstein-Str. 21, 0-2500 Rostock, Tel. 0381/44424-123 zu erhalten.

Für die Unterstützung bei der Organisation und Durchführung des zweiten Arbeitstreffens möchte ich im Namen aller Mitglieder des AK 5 besonders Herrn Dr. H.B. Keller vom Kernforschungszentrum Karlsruhe danken. Dank gilt auch Herrn Prof. Exner vom Fachbereich Informatik der Fachhochschule Karlsruhe für die großzügige Bereitstellung eines anspruchsvollen Tagungsraumes. Erfreut und dankbar sind alle Arbeitskreismitglieder auch darüber, daß das Kernforschungszentrum Karlsruhe unter maßgeblicher Beteiligung von Herrn Dr. H.B. Keller die Beiträge zum 2. Arbeitstreffen in Ihrer Berichtsreihe publiziert.

Rolf Grützner
Universität Rostock

Inhaltsverzeichnis

1	Anforderungen an die Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse J. Benz, M. Knorrenschild	9
2	Anforderungen an Werkzeuge zur Modellbildung und Simulation R. Grützner	17
3	Das Werkzeug XM_View zur Erzeugung graphischer Oberflächen für die Simulation ökologischer Systeme H. B. Keller, B. große Osterhues	35
4	Bausteine zur Vorhersage des Verbleibs von Stoffen in Agrarökosystemen W. Paul	55
5	Integration der Simulation in Programmsysteme S. Schweizer, M. Tischendorf	73

Anforderungen an die Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse

Joachim Benz¹⁾
Michael Knorrenschild²⁾

1) Gesamthochschule Kassel · Universität
Fachbereich Landwirtschaft
Abteilung Pflanzenbau II
Nordbahnhofstr. 1a
D-3430 Witzenhausen
e-mail: benz@gsf.de

2) GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit
Projektgruppe Umweltgefährdungspotentiale von Chemikalien (PUC)
Ingolstädter Landstr. 1
D-8042 Neuherberg
e-mail: knorren@gsf.de

1. Motivation und Ziele

In den vergangenen Jahrzehnten wurde weltweit in erheblichem Umfang versucht, ökologische Prozesse mit Hilfe von mathematischen Modellen zu beschreiben. Die entwickelten Modellansätze stellen eine umfangreiche Ansammlung von Wissen über die Eigenschaften und Strukturen dieser Prozesse dar. Zudem gewinnt die Anwendung der mathematischen Simulation in Planung und Analyse zunehmend an Bedeutung.

Dieses Wissen kann aber nur dann genutzt werden, wenn es

- mit vertretbarem Aufwand verfügbar und
- vollständig dokumentiert ist.

Darüber hinaus ist es wünschenswert, daß unterschiedliche mathematische Beschreibungen ein und desselben Prozesses einem wertenden Vergleich zugänglich sind.

Diese Anforderungen führen auf eine vollständige Dokumentation, die

- die Beschreibung der verwendeten Gleichungen,
- die Beschreibung der Gültigkeitsgrenzen und Randbedingungen sowie
- die Beschreibung der Güte innerhalb der Gültigkeitsgrenzen

umfaßt.

Die gegenwärtige Situation entspricht nur in wenigen Fällen diesen Anforderungen. Die einzelnen Modellansätze unterscheiden sich z.T. bezüglich ihrer Frage- bzw. Aufgabenstellung, in den Zeit- und Raumskalen, dem Detaillierungsgrad sowie ihren Gültigkeitsgrenzen. Diese Unterschiede und/oder Einschränkungen der Aussagefähigkeit sind dem Außenstehenden nur in wenigen Fällen offensichtlich. Vielmehr ist meistens ein genaueres Studium der Modellansätze sowie der entsprechenden Einbettung der Entwicklungsarbeiten notwendig, um sich diese Information zu beschaffen. Darüberhinaus fehlen in der Dokumentation der mathemati-

schen Beschreibungen vielfach Angaben zu den Gültigkeitsgrenzen, den wichtigsten Annahmen und den Eigenschaften bezüglich der Prozessumgebung. Aufgrund der Unterschiede in den Modellansätzen ist die unmittelbare Vergleichbarkeit nur in einzelnen Fällen oder nur eingeschränkt möglich. Die Publikation der Modellansätze bzw. ihrer Anwendungen erfolgt überwiegend in Zeitschriften unterschiedlichster Fachrichtungen.

Dies bedeutet, daß das oben angesprochene Wissen in heterogener Weise, verteilt und zum Teil nur unvollständig vorliegt. Die Folge dieser eingeschränkten Verfügbarkeit ist, daß die Kenntnisse z. Zt. nicht optimal und umfassend genutzt werden können.

Ziel des Forschungsvorhabens ECOBAS ist es, die Verfügbarkeit dieses Wissens zu verbessern. Es soll eine Datenbank aufgebaut werden, in der Dokumentationen mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse nach bestimmten Gesichtspunkten gespeichert und abrufbar sind.

Um die Datenbankstruktur festlegen zu können, wurde zunächst ein Konzept erarbeitet, das eine vollständige Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse gewährleistet. Insbesondere wurde auch dem Aspekt Rechnung getragen, dem späteren Benutzer bei der Auswahl für ihn geeigneter Beschreibungen möglichst weitreichend Unterstützung zu bieten.

Im einzelnen wurden folgende Ziele bzw. Ansprüche der Konzepterstellung zugrunde gelegt.

- (1) leichte Verfügbarkeit der Information**
- (2) vollständige und eindeutige Dokumentation der mathematischen Formulierung**
- (3) möglichst vollständige Dokumentation der Gültigkeitsgrenzen**
- (4) Berücksichtigung der vernetzten Struktur ökologischer Prozesse**
 - a) Aggregationshierarchie**
 - b) horizontale Vernetzung**
- (5) Dokumentation durchgeführter Validierungen**
- (6) Spezifikation der Modellgüte innerhalb des Gültigkeitsbereiches**
- (7) Dokumentation von Systemeigenschaften innerhalb des Gültigkeitsbereiches**

Die zum jetzigen Zeitpunkt vorliegende Konzeption berücksichtigt die Ziele 1-4, die Ziele 5-7 sollen in der weiteren Entwicklungsarbeit integriert werden.

Die Entwicklung des Dokumentationsschemas wird in Kooperation bzw. Abstimmung mit dem Forschungsprojekt 'Umweltforschungsinformationssystem' (UFIS), das vom GSF - Forschungszentrum für Umwelt- und Gesundheit in München bearbeitet wird, und mit dem Projektzentrum Ökosystemforschung der Universität Kiel durchgeführt.

2. Erläuterungen zum Dokumentationsschema

Für einen bestimmten Prozesstyp (z.B. Primärproduktion, Photosynthese u.a.) können eine oder mehrere allgemeine mathematische Beschreibungen vorliegen.

Unter der Aggregationshierarchie der Prozesstypen wird hier folgender Sachverhalt verstanden: Viele ökologische Prozesse setzen sich wiederum aus einer Anzahl von Teilprozessen zusammen. Beispielhaft sei hier die Primärproduktion in aquatischen Systemen genannt, die sich aus den Teilprozessen Nettoassimilation, Sedimentation und Mortalität sowie dem 'grazing' zusammensetzt. Als weitere Detaillierung lassen sich z.B. für die Nettoassimilation die Teilprozesse Photosynthese und Respiration anführen. Die Abbildung der Aggregationshierarchie ökologischer Prozesse wird mit Hilfe des Konzepts von 'embedded processes' realisiert.

Unter horizontaler Vernetzung ist zu verstehen, daß die Ausgangs- bzw. Zustandsgrößen eines Prozesses Eingangsgrößen eines anderen Prozesses sein können.

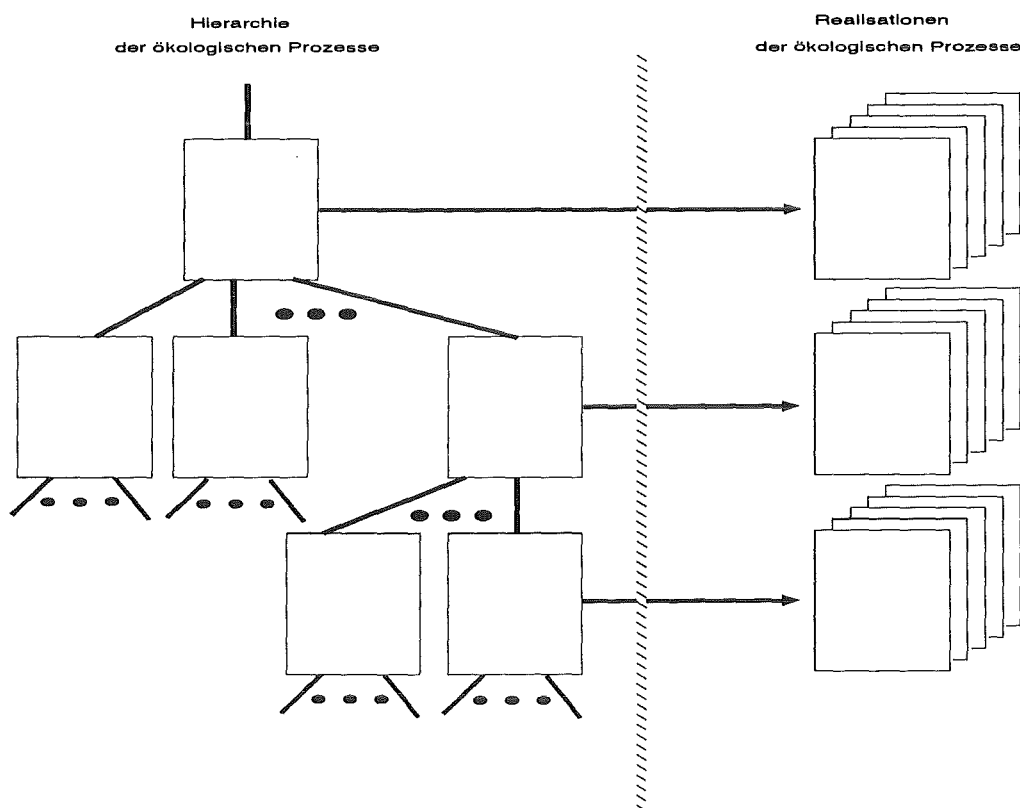


Abb. 1: Struktur der Dokumentation mathematischer Beschreibungen

Für jede allgemeine mathematische Beschreibung eines Prozesstyps existieren eine oder mehrere Realisationen. Hierunter sind die konkreten Verwirklichungen des Prozesstyps für bestimmte Ökosysteme, Organismen, Bodentypen u.a. zu verstehen. Dementsprechend muß die Dokumentation der Realisation die Angabe von Parameterwerten, die Zuordnung zu bestimmten Kategorien (Ökosystemtyp, Klimazone, Organismenspezifikation u.a.), die die Prozessumgebung charakterisieren, enthalten. Ferner sind spezifische Angaben der Umgebungseigenschaften und die zulässigen Wertebereiche des Anfangszustands, der Zustandsgrößen, der Ein- und Ausgangsgrößen, die den Gültigkeitsbereich der Realisation bestimmen, notwendig. Zusätzlich werden hier Informationen bezüglich der Modellentwickler, der zugehörigen Literatur sowie Diskussionsbeiträge gespeichert.

Die sich daraus ergebende übergeordnete Struktur ist in Abbildung 1 dargestellt.

Das vollständige Dokumentationsschema ist im Anhang angegeben.

2.1 Erläuterungen zur Dokumentation eines Prozesstyps

Ein Prozesstyp wird zunächst durch die Bezeichnung, durch eine Liste von Schlagworten und durch eine kurze Beschreibung gekennzeichnet. Die eigentliche Dokumentation des Prozesstyps besteht aus vier Abschnitten. Im Deklarationsteil sind die Eingangsgrößen, die Zustandsgrößen sowie die Parameter anzugeben. Unter Zustandsgrößen werden hier alle Größen, die den Zustand eines Systems beschreiben, verstanden. Die hier benutzte Definition umfaßt sowohl Zustandsgrößen als auch Ausgangsgrößen im Sinne der klassischen Systemtheorie (Zustandsraumdarstellung).

Im 2. Abschnitt (equations) sind die Gleichungen anzugeben. Dieser Abschnitt des Dokumentationsschemas ist so konfiguriert, daß die wichtigsten Funktionsklassen erfaßt werden können. Unterschieden wird dabei zwischen partiellen Differentialgleichungen (PDE's), dynamischen Zustandsgleichungen und algebraischen Gleichungen. Dynamische Zustandsgleichungen werden darüberhinaus nach der Eigenschaft der Zeitskala (kontinuierlich, diskret), der Eigenschaft der Zustandsgröße (kontinuierlich, diskret) und ob es sich um einen deterministischen oder stochastischen Ansatz handelt, unterschieden. Für PDE's und die dynamischen Zustandsgleichungen müssen zusätzlich die Anfangs-/Randbedingungen bzw. der Anfangszustand angegeben werden.

Im 3. Abschnitt sind Pointer auf die Dokumentation der jeweiligen Teilprozesse, die in einer niedrigeren Stufe der Aggregationshierarchie stehen, aufgelistet. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die Konsistenz der Umgebungen der zusammengehörenden Realisationen in den verschiedenen Ebenen gewährleistet ist.

Der 4. Abschnitt enthält Pointer auf die zu diesem Prozesstyp gespeicherten Realisationen.

2.2 Dokumentation einer Prozess-Realisation

In der Dokumentation der Prozess-Realisationen sind zunächst die Werte der Parameter zu

spezifizieren sowie die Eigenschaften der Prozessumgebung zu charakterisieren. Zum einen ist vorgesehen diese Charakterisierung mit Hilfe von Schlagwörtern aus hierarchischen organisierten Thesauri zu ermöglichen (z.B. Typ des Ökosystems, Klimatyp u.a). Zum anderen ist aber auch die Möglichkeit gegeben spezifische Sachverhalte zu beschreiben, da unter Umständen mit vorgegebenen Thesauri eine ausreichende Charakterisierung der Prozessumgebung nicht möglich ist.

Zur Dokumentation der Prozess-Realisation gehört auch die Angabe der Definitions- und Wertebereiche der verwendeten Variablen.

Ferner sind der Name und Adresse des Modellentwicklers, das ursprüngliche Anwendungsziel sowie Literaturhinweise anzugeben.

Es besteht auch die Möglichkeit, Anwenderkommentare an dieser Stelle zu erfassen und dem Benutzer Hinweise auf andere Modelldokumentationsdatenbanken an die Hand zu geben.

Anhang:

Remark: two different formats are used for mathematical entries:

eq-format: (equation format)
string; (the equation)
one line with max. 80 chars
(brief description of the origin of the equation resp. of the initial/boundary condition)

quant-format: (quantity format)
string (name)
string (unit)
one line with max. 80 chars
(brief description of the quantity)

DESCRIPTION OF A PROCESS

**** #typ.tit **** # title
name of ecological process
Format: one line with max. 80 chars

**** #typ.key **** # list of keywords
list of keywords
Format: list of words; delimiter = TAB

**** #typ.abs **** # abstract
brief description
Format: free text

**** #typ.desc **** # documentation of the process
1. DECLARATION:

1.1 Input:
quant-format

1.2 State:
quant-format

1.3 Parameter:
quant-format

2. EQUATIONS

2.1.1 PDE's
eq-format

2.1.2 initial/boundary conditions for PDE's
eq-format

2.2. Dynamic state equations

2.2.1 type of equation
Format: type = [i,j,k]
i= 0 time continuous, i= 1 time discrete
j= 0 state continuous, j= 1 state discrete
k= 0 deterministic, k= 1 stochastic

2.2.2 equation

eq-format

2.2.3 initial conditions

eq-format

2.3 algebraic equations

eq-format

3. LIST OF EMBEDDED PROCESSES (SUBSYSTEMS)

$f_i: \#typ_i.\#obj_j \Rightarrow \#typ_k.\#obj_l, \dots$

$f_i: \#typ_i.\#obj_k \Rightarrow \#typ_o.\#obj_p, \dots$

f_i = name (symbol) for embedded process

$\#typ_i$ = pointer to the documentation of **this** process-typ

$\#typ_i.\#obj_{[j,k]}$ = pointer to the documentations of realizations of **this** process-typ

$\#typ_{[k,o]}\#obj_{[l,p]}$ = pointer to the documentations of realisations of **the embedded** process-typ

Format: string: pointer => list of pointers

4. LIST OF REALIZATIONS

$\#typ.\#obj, \#typ.\#obj \dots$

Format: list of pointers

DESCRIPTION OF A PROCESS-REALIZATION

**** $\#typ.\#obj.val$ **** # values

Parameter:

name value [or range]

Format: string number [- number]

**** $\#typ.\#obj.env$ **** # specific conditions of environment

1. Common classification of environment and system components:

Format:

Type of ecosystem : string

Geographic Location : string

Climatic type : string

Biological classification : string

Soil type : string

2. Specific conditions of environment:

e.g. temperature, pH, ... etc.

Format: free text

**** $\#typ.\#obj.cons$ **** # range of validity

1. Specification of the domain

1.1 Input:

name lower_limit upper_limit

Format: name number number

2. Specification of the range

2.1 States:

name lower_limit upper_limit
Format: name number number

3. Specification of valid time- resp. time-space-domain

tmax value [unit]
Format: tmax number [string]
xmin xmax xunit ymin ymax yunit
Format: number number string number number string

**** #typ.#obj.aut **** # author(s)

Format:

Name : string
first name : string
Institution/Company : string
Department : string
Postal address : string
Phone : string
Fax : string
E-mail : string

**** #typ.#obj.sour **** # references

Format:

Author(s) : string
Title : string
Source : string
Publication year : string
Page(s) : string

**** #typ.#obj.appl **** # original application

Format: free text

**** #typ.#obj.comm **** # collection of comments

(mail-)comment

Format: free text

**** #typ.#obj.point **** # pointer to UFIS and Kiel database

Format: list of pointers

Anforderungen an Werkzeuge zur Modellbildung und Simulation im Umweltbereich

Prof. Dr. Rolf Grützner, Universität Rostock

1. Zusammenfassung des Vortrages

Die Simulation als Problemlösungsmethode wird vorwiegend in zwei Bereichen eingesetzt. Das sind einerseits Anwendungen um Aussagen für Planungen, Entwürfe und Projekte zu erhalten und andererseits im Bereich der Forschung auf dem Gebiet der Umweltsysteme. Während im ersten Fall die Modelle im wesentlichen gültig (validiert) sind, d.h. die Systemstruktur und der Einsatzbereich der Modelle kann als bekannt angesehen werden, erfolgen im zweiten Fall mit Hilfe von Simulationsexperimenten erst Untersuchungen, ob hypothetisch angenommene Modelle die betrachteten Systeme mehr oder weniger gut beschreiben. Mit Hilfe der Simulation wird versucht, neben Messungen und theoretischen Betrachtungen Erkenntnisse über die Systeme (Struktur, Funktionalität, Verhaltensweisen) zu gewinnen. Das sind typische Anwendungen, wie sie in der Forschung auftreten.

Im Umweltbereich, dazu sollen der Umweltschutz, die Ökologie, Biologie und anverwandte Gebiete gehören, ergibt sich nun häufig die Notwendigkeit, Modelle für Simulationsexperimente zu nutzen, die noch nicht oder nur partiell validiert sind. Das ist notwendig, um überhaupt gewisse Aussagen über Systeme und ihr Verhalten zu gewinnen. Andere Möglichkeiten existieren oft nicht. In diesen Modellen sind die Systemstruktur vielfach noch unbekannt und Angaben über Parameter fehlen. Werden sie zur Lösung von Entwurfs- und Planungsaufgaben benutzt, so ist größte Sorgfalt im Umgang mit den Modellen und den Simulationssresultaten notwendig. Auf Grund vieler offener Fragen und Wirkbeziehungen im Umweltbereich ist das leider unumgänglich.

Zur Durchführung von Simulation existieren zwei wesentliche Werkzeugtypen:

- ein problemspezifischer - ein Modell ist programmiert und repräsentiert das Simulationsprogramm. Eingabe sind die System-, die Input- und Experimentierparameter.
Anwendungsbereiche: große bzw. sehr große Modelle durch ein System von Gleichungen beschrieben (Dgln. System): Windfeldberechnung über einem Oberflächenrelief, Lärmausbreitung von Straßen in unterschiedlichem Gelände.

- ein universeller - eine Menge von Modellen (einer bestimmten Klasse (z.B. auf der Basis gewöhnlicher Dgln. erster Ordnung) werden durch ein Simulationssystem verarbeitet. Anwendungsbereich: für alle Modelle der Klasse; breiter Einsatzbereich, multivalente Nutzung der Methoden, breites Spektrum möglicher Experimente ohne Programmieraufwand. Nach einem hohen Entwicklungsaufwand lassen sich Experimente mit modifizierten Modellen einfach durchführen.

Die Simulationssysteme gewinnen immer mehr an Bedeutung. Man spricht heute davon, daß die V. Generation der Simulationssysteme zum Einsatz drängt. Sie ist grob charakterisiert durch Interaktion, graphische Unterstützung in allen Phasen des Lebenszyklusses, objektorientierte Modellbeschreibung (d.h. systemtheoretische Konzepte), wissensbasierte Unterstützung und Banksysteme für Modelle, Methoden und Daten. Es existiert eine strikte Trennung von Modell- und Experimenten, so daß eine multivalente Modellnutzung möglich wird. Experimente werden durchgeführt, indem Methoden auf Modelle angewandt werden.

Heute ist zu fordern, daß der Nutzer während aller Phasen des Lebenszyklusses der Modelle durch Softwarewerkzeuge unterstützt wird. Das ist für Anwendungen im Umweltbereich von großem Interesse, da hier Nutzer in der Regel keine Informatiker sind und auch systemtheoretische Grundkenntnisse nicht immer vorliegen.

Von großer Bedeutung erweisen sich

- die Modellbeschreibung
 der Nutzer ist zu unterstützen durch möglichst freie Wahl seiner Beschreibungsmittel (graphisch, fachsprachlich, höhere Programmiersprache, wissensbasierte Beschreibungsformen - wenn klassische Modelle nicht einsetzbar sind). Alle Formen müssen in einem Modell bei unterschiedlichen Submodellen gemeinsam nutzbar sein. Hilfsmittel für eine automatische Plausibilitätsbetrachtung (zur Unterstützung der Validierung) sind nötig, dazu gehören die Angabe von Dimensionen und Wertebereichen für Systemgrößen (automatische Überprüfung).
 Hierarchische Modellbeschreibung: mit sauberer Trennung von Dynamik- und Strukturbeschreibungen. Basis dazu liefern objektorientierte Ansätze. Simulationssysteme im Bereich der Ökologie und Biologie sollten sowohl den kompartmentorientierten als auch den Individuenansatz unterstützen.

Unterstützung ist heute auch bei der Modellerstellung durch Beratungs- und Führungskonzepte möglich und zu fordern.

Der Informatik fällt damit die Aufgabe zu, die existierenden Methoden und Verfahren so aufzubereiten, daß sie zur Realisierung der Forderungen und Aufgaben im Umweltbereich eingesetzt werden. Auch neuartige Ansätze z.B. qualitative Simulation, neuronale Netze sind umgehend auf Eignung zu überprüfen.

2. Folien

Simulation ist eine Problemlösungsmethode

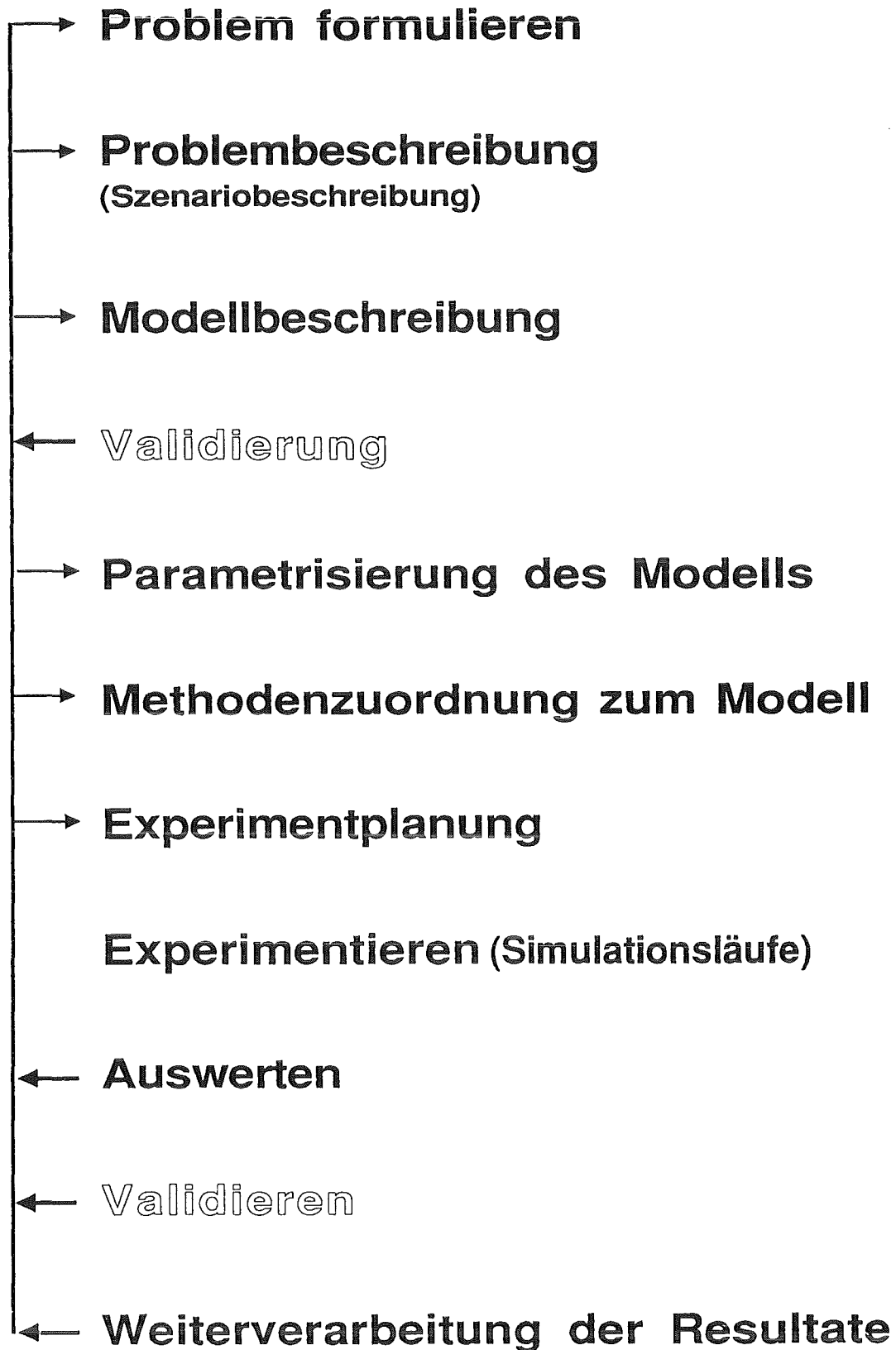
Simulation dient zur Untersuchung von Systemen, deren Berechnung auf Grund nicht existierender oder komplizierter mathematischer Systembeschreibungen nicht möglich ist.

Sie wird verwendet bei Systemuntersuchungen, die am realen System nicht möglich sind.

Anwendungsbereiche

Bestimmung des Systemverhaltens auf der Basis gültiger Modelle für Planung, Entwurfsentscheidungen
(z.B. Schadstoffausbreitung in einem Raum durch Diffusion)

Forschungen zur Untersuchung des Verhaltens von Systemen mit dem Ziel, Modelle zu entwickeln
(z.B. Erkenntnisgewinnung, z.B. ökologische Systeme im Flachwasserbereich der Ostsee)



Werkzeuge für die Simulation

problemspezifische

universelle

ein Modell



ein
Simulationsprogramm

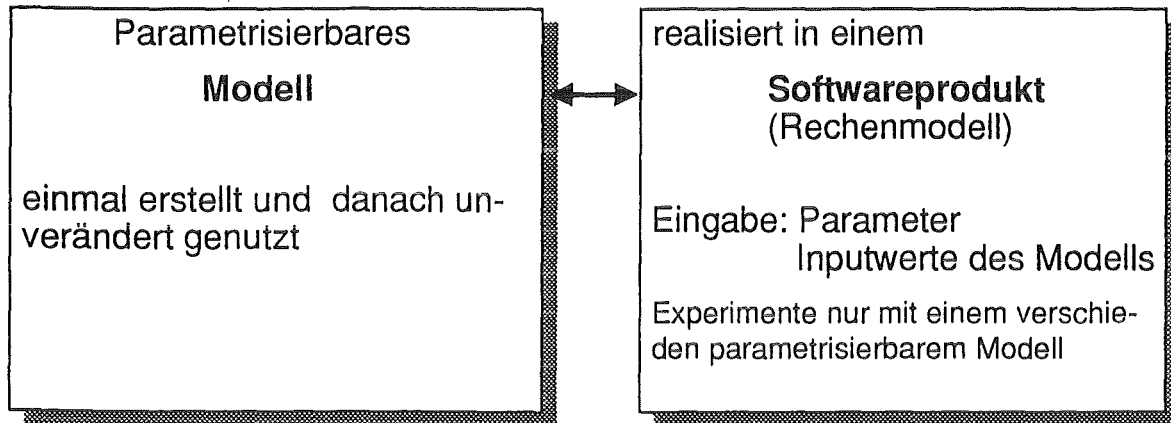
eine Menge von
Modellen



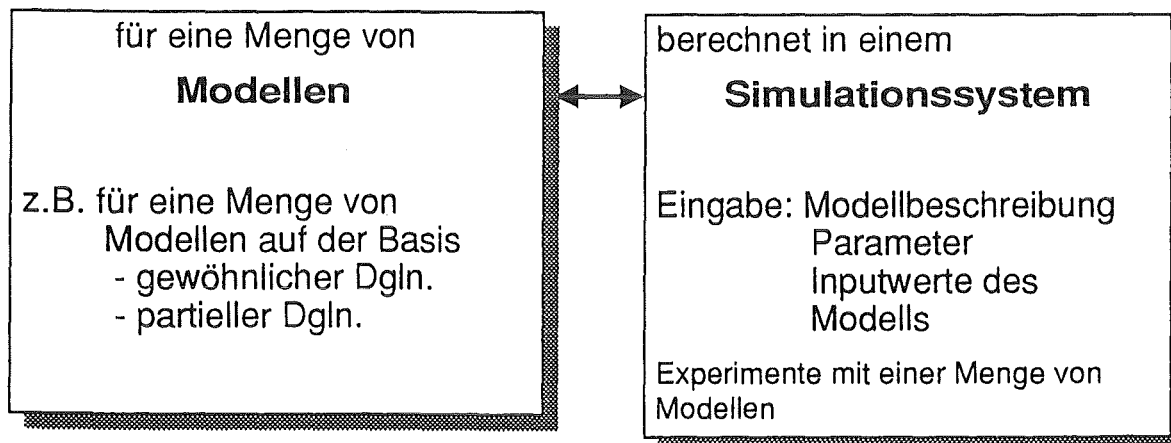
ein Simulationssystem

Werkzeuge für die Simulation

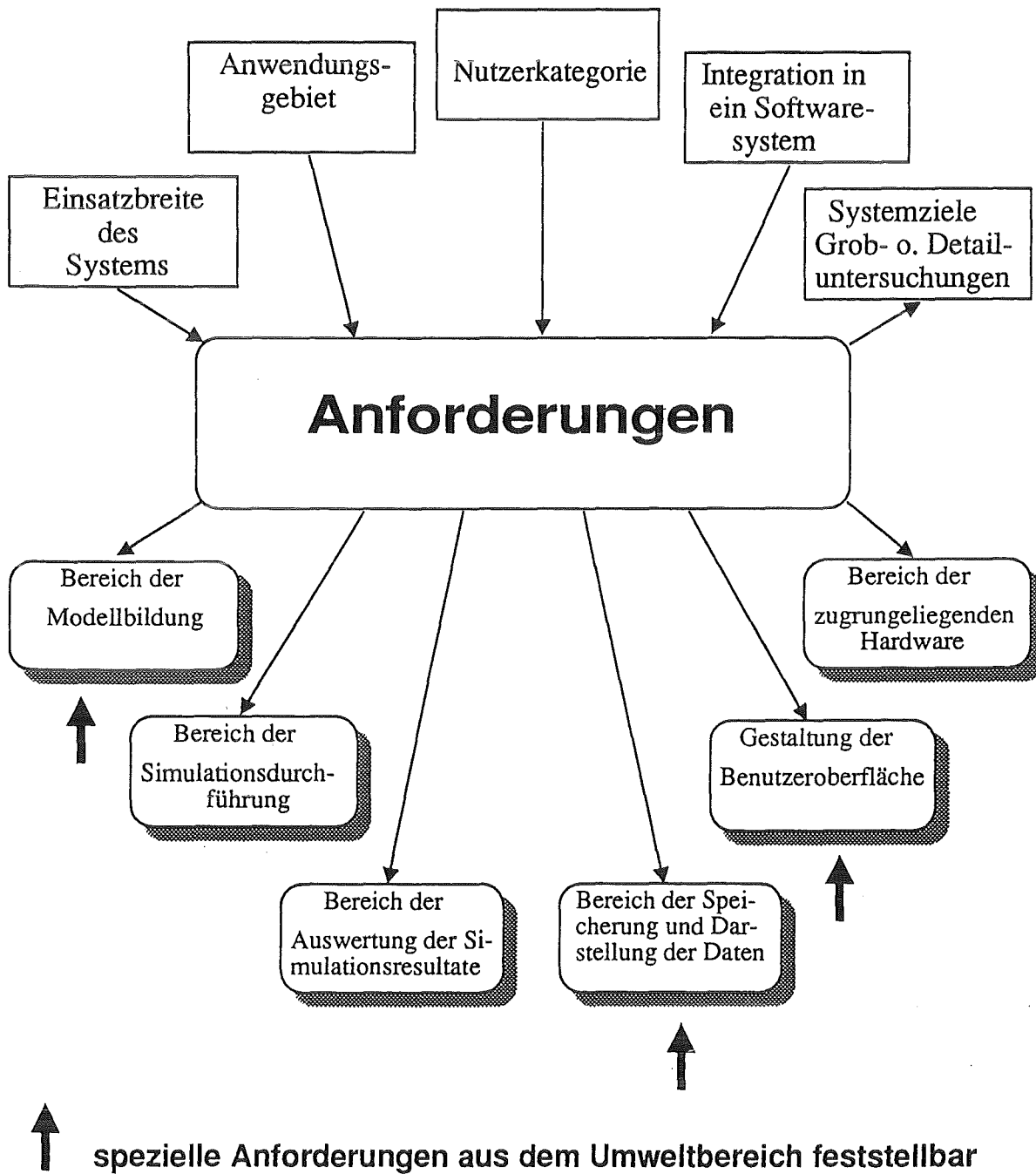
a) problemspezifische Werkzeuge (systemorientierte Simulationsprogramme)



b) universelle Werkzeuge (Simulationssysteme)



Anforderungen an Werkzeuge zur Modellbildung und Simulation



AG
Modellierung
Simulation

Anforderungen an Werkzeuge zur
Modellbildung und Simulation

**Diese Relationen finden wir auf allen Gebieten,
in denen Modellbildung und Simulation
genutzt wird!**

**Wie hat die Informatik
auf diese Anforderungen reagiert?**

Anforderung an Systeme der V. Generation:

- Interaktion** (in allen Phasen)

- graphische Unterstützung**
 - Modellbeschreibung
 - Ergebnisrepräsentation
 - Visualisierung der Resultate
(Datenwolken, Animation)

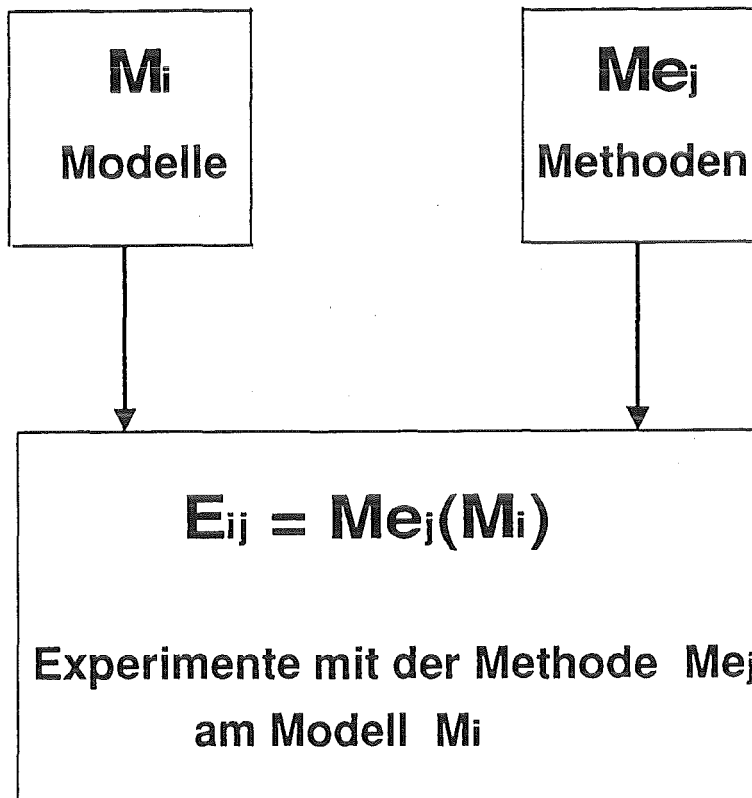
- objektorientierte Modellbeschreibung**

- wissensbasierte Unterstützung**
 - bei Modellerstellung
 - bei Modellbeschreibung
 - bei Simulationsdurchführung
 - bei Ergebnisauswertung

- Banksysteme**
 - Modellbanken
 - Methodenbanken
 - Datenbanken

Modell - Methode - Experiment

[Breitenecker, 1986]



**Eine Methode ist ein programmierter
Algorithmus**

Einsatzbereiche von Modellen

Forschung &
Entwicklung,
Erkenntnisgewinn
über Umwelt-
systeme

Planung,
Systemanalyse
Entscheidungs-
hilfe bei der Be-
wertung anthro-
pogener Eingriffe
in die Umwelt

Vorhersage von
Schäden,
Auswirkung von
Umweltschutz-
maßnahmen

Planung,
Analyse, Über-
wachung,
Steuerung
techn. Anlagen

Besondere Schwierigkeiten bei der Modellbildung und Simulation im Umweltbereich

s.a. Page,B.; Jaeschke, A.; Pillmann, W. Informatik Spektrum, H.2 (1990)

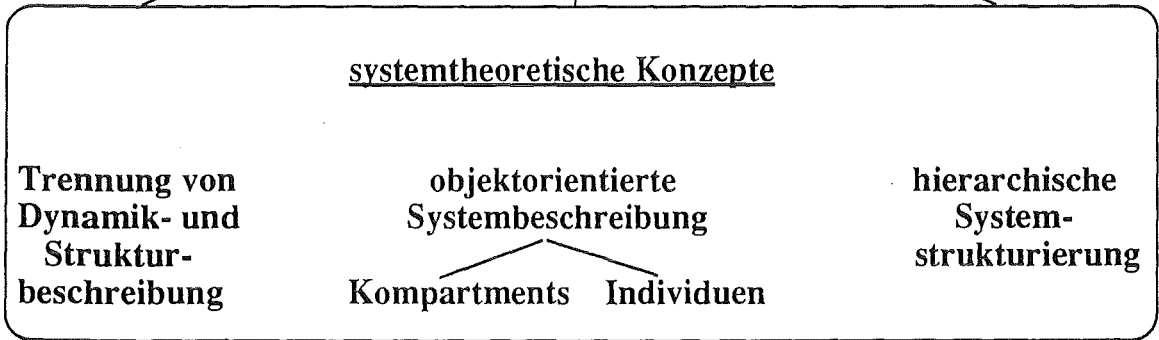
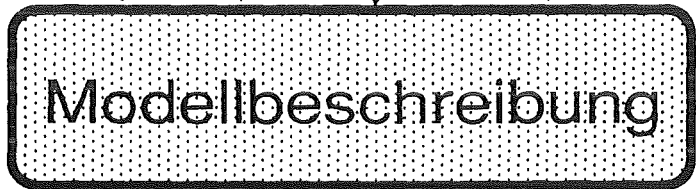
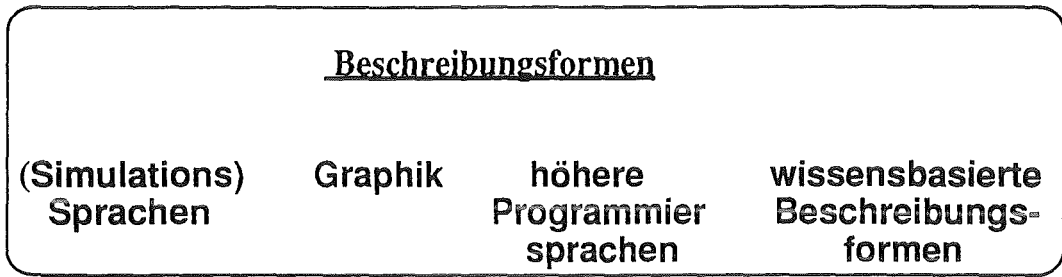
- Natur ist ein offenes, stark vernetztes und verkoppeltes System
- Ökosysteme gehören heute noch zu den "unvollständig definierten" Systemen
- umfassende theoretische Grundlagen in Ökologie und Umweltschutz fehlen heute noch.
Wirkungszusammenhänge sind unerforscht
- die Zahl der Modellparameter und simultanen Gleichungen ist sehr hoch
- die Natur kann nur beobachtet werden, gezielte Experimente sind kaum möglich
- sehr lange Reaktionszeiten liegen oft vor
- es existieren Schwell- und Pufferwerte
- Relationen zwischen ökologischen und ökonomischen sowie technischen Systemen sind heute noch sehr wenig erforscht

Das sind Probleme, die durch Einsatz von Methoden der modernen Informatik allein nicht lösbar sind. Es sind vorwiegend Probleme der Fachgebiete (z.B. Ökologie, Biologie)

**Die Informatik hat hier die Aufgabe,
Werkzeuge bereitzustellen,
die zu einer effektiven Lösung
der Probleme führen**

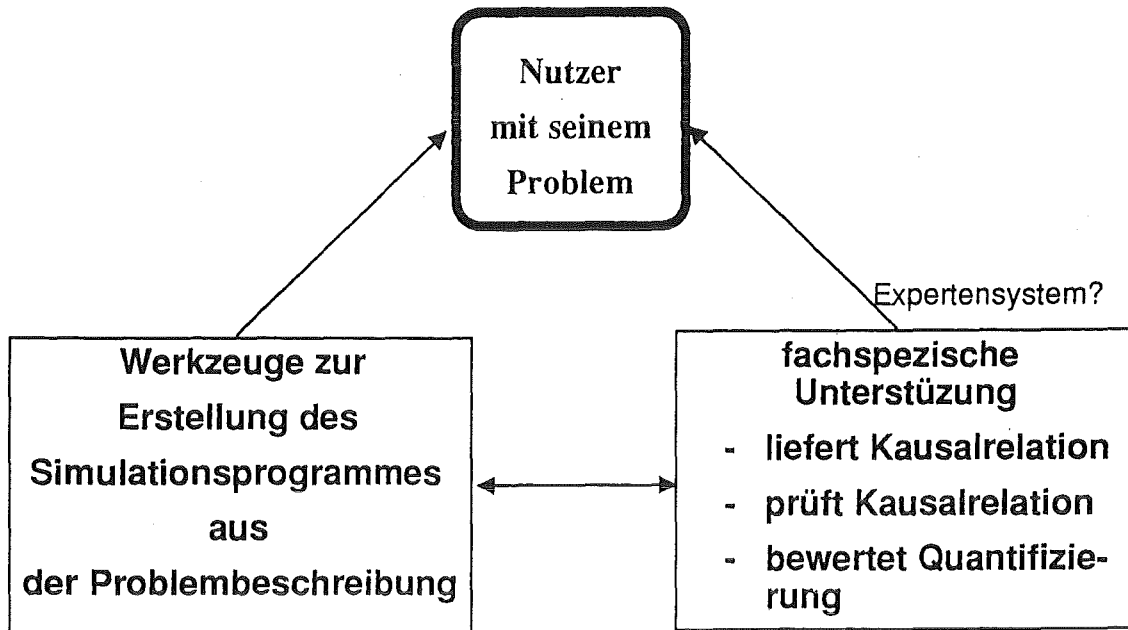
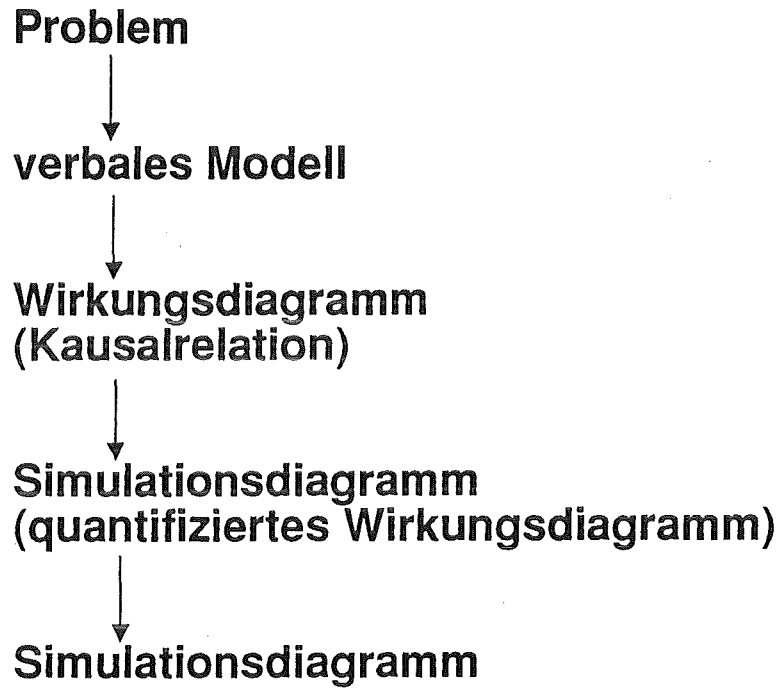
das bedeutet

**moderne Informatikkonzepte in die
Modellbildung und Simulation
für den Umweltbereich einzubringen**



notwendige Arbeiten:

Forschungen zur fachspezifischen Unterstützung des Nutzers bei der Modellaufstellung



Methoden
zur Simulationsdurchführung und Auswertung
(im Verbund mit Umweltinformationssystemen)

interaktive Beeinflussung der Simulation
Debugging
Trace

Verhaltensanalyse

Sensitivitätsanalyse

Monte - Carlo Methoden - stochastische Einflüsse

Parameteroptimierung

statistische Methoden zur Auswertung

Ergebnisdarstellung und Speicherung

Visualisierungsmethoden 2D / 3D

Vergleich großer Datenmengen

Ablagemöglichkeiten von und Zugriffsmöglichkeiten zu Experimentierergebnissen in Datenbank- bzw. Umweltinformationssystemen
(verteilt)

Einordnung der Ergebnisse in Karten und Bilder

Das Werkzeug XM_View zur Erzeugung graphischer Oberflächen für die Simulation ökologischer Systeme

Hubert B. Keller, Bernhard große Osterhues
Kernforschungszentrum Karlsruhe
Institut für Angewandte Informatik
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

Zusammenfassung

Modellbildung und Simulation unter Verwendung intelligenter, unterstützender Benutzerschnittstellen sind die wichtigsten Instrumentarien um Aussagen über das dynamische Verhalten und die Stabilitätsgrenzen komplexer vernetzter Ökosysteme zu erhalten. Die Modellierung und Simulation solcher komplexer Systeme mit der entsprechenden Visualisierung der Ergebnisse erfordert in allen Phasen eine optimale Unterstützung der Benutzer. Gerade ökologische Systeme bestehen aus vielen verschiedenartigen Komponenten mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad. Der Aufbau solcher komplexer Modelle sollte deshalb prinzipiell mit Hilfe graphischer Oberflächen erfolgen (z. B. graphisches Konfigurieren von Modellkomplexen).

Grundsätzliche Operationen mit graphischer Unterstützung sind dabei:

- Eingabe der mathematischen Beschreibung von elementaren Prozessen (Komponenten),
- Definition des graphischen Aussehens mit möglichen Verbindungsstellen,
- Kombination elementarer Prozesse zum Aufbau von Modellkomplexen über hierarchische Verknüpfungen (graphisches Konfigurieren),
- Modellanalyse und Initialisierung von Bausteinen,
- Steuerung der Simulation über Kontrollschnittstellen,
- Ausgabe von spezifischer Information während der Simulation,
- Daten- / Modellanalyse nach der Simulation mit evtl. Änderung, sowie
- Zeitreihendarstellung mit interaktiver Filterung usw..

Elementare Prozesse (z. B. Transportvorgänge) sind als Schablonen zu definieren. Komplexe Modelle können dann aus Bausteinen konfiguriert werden. Modellwerte sind über einen Dialogprozeß per Mausklick als Zeitreihe (Ausschnitt) darstellbar und mit Filteralgorithmen analysierbar. Modellparameter können ebenfalls mit der Maus ausgewählt werden, ihre Änderung zeigt sich sofort in der parallel dargestellten Kurve. Für diese problemorientierte Arbeit des Menschen (Analyse von Ökosystemen) sollten sinnvolle, graphisch auslösbare Operationen zur Verfügung stehen. Hierzu werden hochflexible, graphische und interaktive Oberflächen benötigt. Objektorientierte Oberflächen bieten ein Höchstmaß an Flexibilität und Unterstützung.

Analog den Entwicklungen im Softwaretechnikbereich wurde in [Keller 1988] der Begriff der *Modellentwicklungsumgebung* mit den verschiedenen Benutzeranforderungen definiert und ein Prototyp einer Benutzeroberfläche implementiert. Im Rahmen der Weiterentwicklung dieses Entwurfs als funktionelle graphische Schnittstelle wurde ein objektorientiertes Konzept eines graphischen Laufzeitsystems zur Darstellung graphischer Attribute von abstrakten Objekten mit Interaktionselementen entworfen. Objekte kommunizieren mit dem Benutzer über zugeordnete Fenster. Die Fenster werden nicht als Variable in einem Programm vereinbart, sondern während der Ausführung des Anwendungsprogramms als Objekte dynamisch erzeugt. Die Kommunikation mit den Fenstern kann synchron oder auch asynchron erfolgen. Zur Definition von graphischen Objekten wird dem Benutzer ein Editor zur Verfügung gestellt, der die Definition beliebiger farbgraphischer Elemente und Texte erlaubt. Diese können dann innerhalb der erzeugbaren Fenster weiter verarbeitet werden.

Das hier beschriebene Programmsystem wurde mit X Windows / OSF Motif und der Sprache Ada realisiert.

Literatur

[Keller 1988]: Echtzeitsimulation zur Prozeßführung komplexer Systeme. Berlin: Springer 1988.

XM_View

-

**ein Werkzeug zur Erzeugung graphischer
Oberflächen für die Simulation
ökologischer Systeme**

**Hubert B. Keller, Bernhard große Osterhues
KfK-Institut für Angewandte Informatik
7500 Karlsruhe 1, Postfach 3640**

- ökologische oder ökologisch relevante Systeme
- Schritte im Simulationskontext
- Interaktionsmuster und Modellformen
- Philosophie von X
- Philosophie von *XM_View*
- Ausblick
- Beispiele von *XM_View* -Schnittstellen

Ökologische oder ökologisch relevante Systeme

- reine ökologische Systeme
- technische Systeme mit
 - ökologisch verträglichen Stoffen
 - ökologisch unverträglichen Stoffen

im Sinne der Wechselwirkungen

Computergestützte theoretische Ökologie soll Aussagen über

- dynamisches Verhalten und
- Stabilitätsgrenzen

komplexer, vernetzter Ökosysteme (Waldsterben, Klimaveränderungen, Artenabhängigkeiten) liefern.

=> **Modellierung / Simulation sind unverzichtbare Basismethoden**

Grundsätzliche Schritte im Simulationskontext

- **Modellierung von elementaren Prozessen /
Komponenten**
 - **Eingabe mathematischer Beschreibungen**
 - **graphische Repräsentation**
- **Konstruktion von Gesamtmodellen**
 - **Baustein-orientiert**
 - **hierarchische Modelle**
 - **graphisches Konfigurieren (symbolorientiert)**

- **Analyse von Systemeigenschaften**
 - **Strukturparameter wie Eigenwerte usw.**
- **Initialisierung und Steuerung der Simulation**
 - **Interaktionsmöglichkeiten (Dialogprozeß)**
- **Visualisierung**
 - **on-line Zugriff auf Daten**
 - **on-line Modifikation**
- **Ergebnisanalysen / Modifikation**
 - **Daten**
 - **Modelle**

- **Zeitreihenanalyse**
 - **Filterung**
 - **Korrelation**
- **Archivierung**
 - **Modellbibliotheken**
 - **Zeitreihenverwaltung**

Interaktionsmuster

- **Ein- / Ausgabe textueller Information**
- **Ausgabe graphischer Information**
- **Aufbau graphischer Elemente**
- **Konfiguration graphischer Komplexe**
- **Selektion von Elementen**
- **Statusmeldungen**
- **Auswahl von Aktionsfelder**
- **Interaktionssequenzen**

Modellkonstruktion

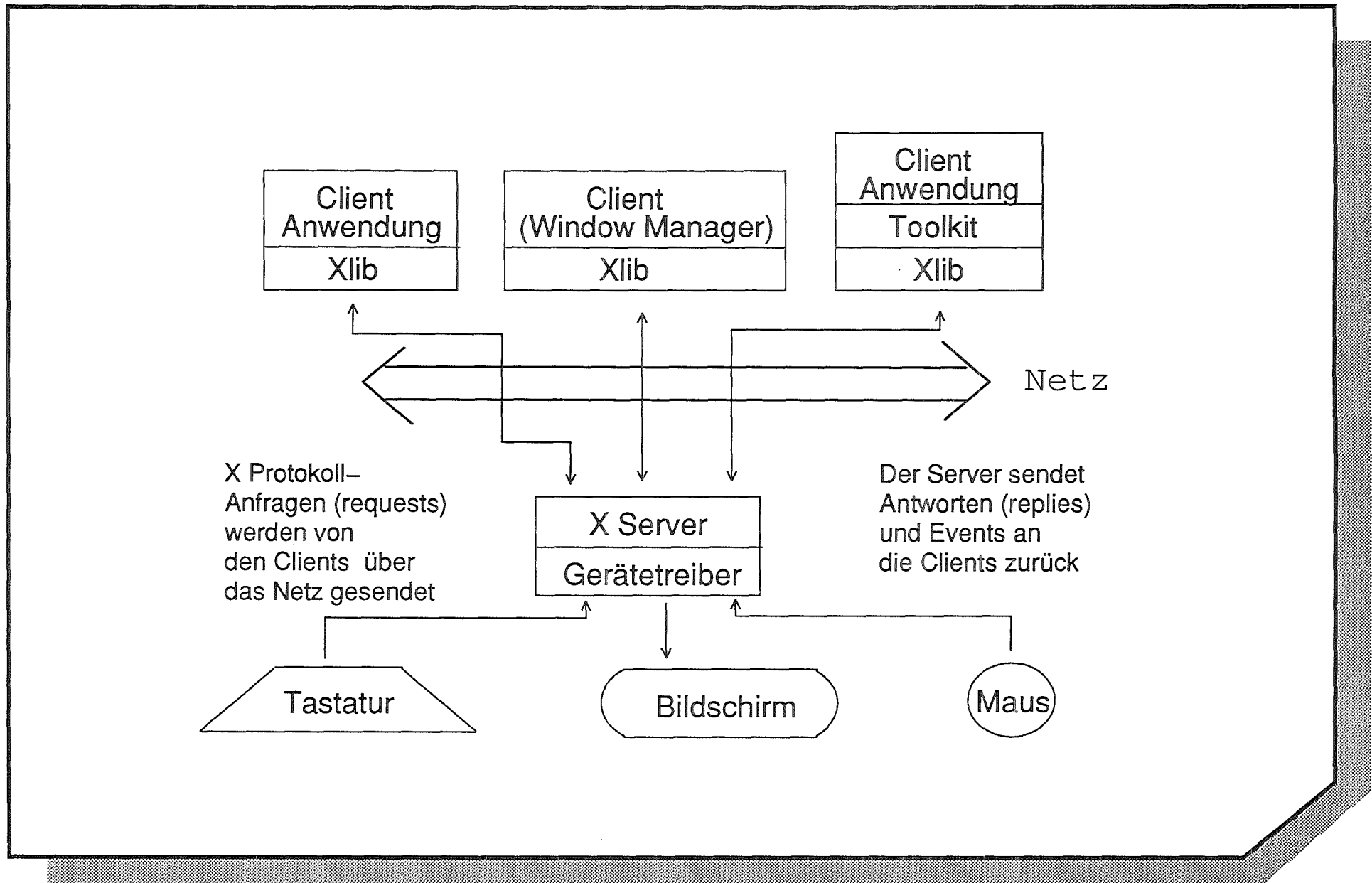
erfolgt

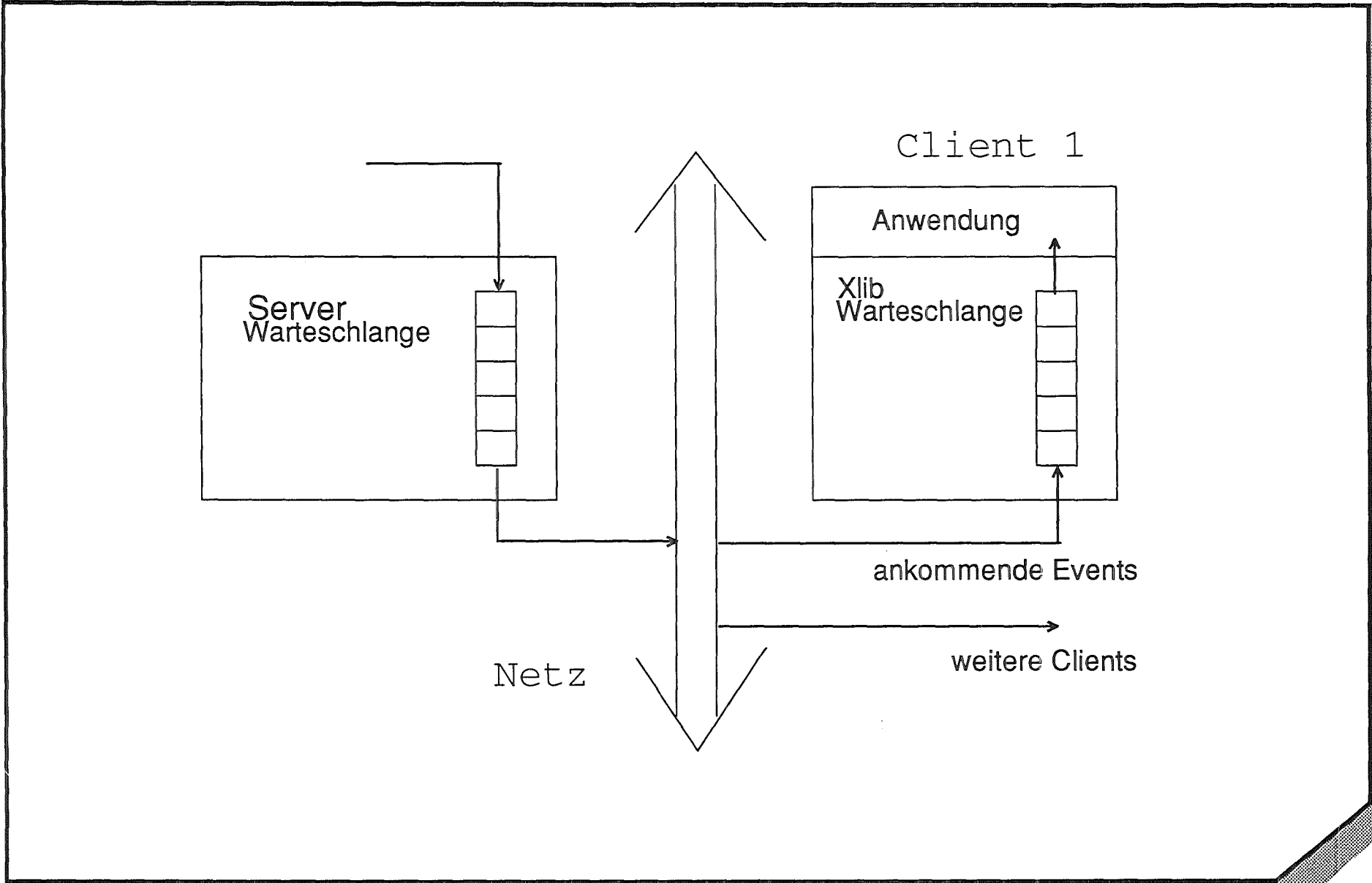
- **elementar**
 - **semantisch:**
AR-orientiert, Bond-Graphen, Gleichungen
 - oder
 - **syntaktisch:**
**z. B. Anweisungsfolgen mit Fallabbildung und
Prüfung auf Verlassen von Bereichen**

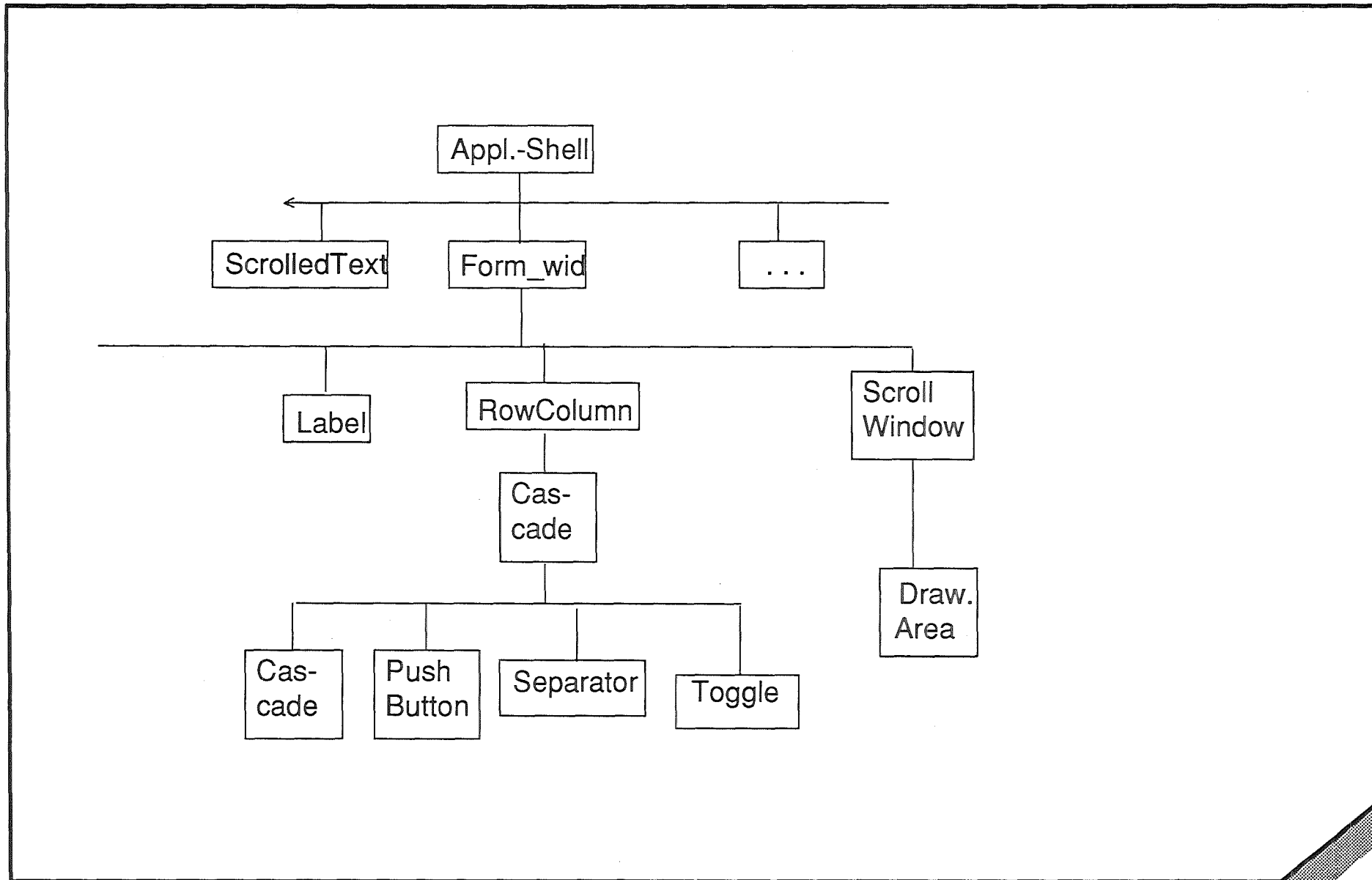
- **global**
 - **semantisch:**
graphische Bausteine und Verbindungen,
hierarchische Aggregation
 - **syntaktisch:**
Definition von Unterprogrammen und Anordnung
der Aufruffolgen mit Integrationsroutine
- ==> flexible graphische Oberflächen für eine
maximale Unterstützung**

X-Philosophie

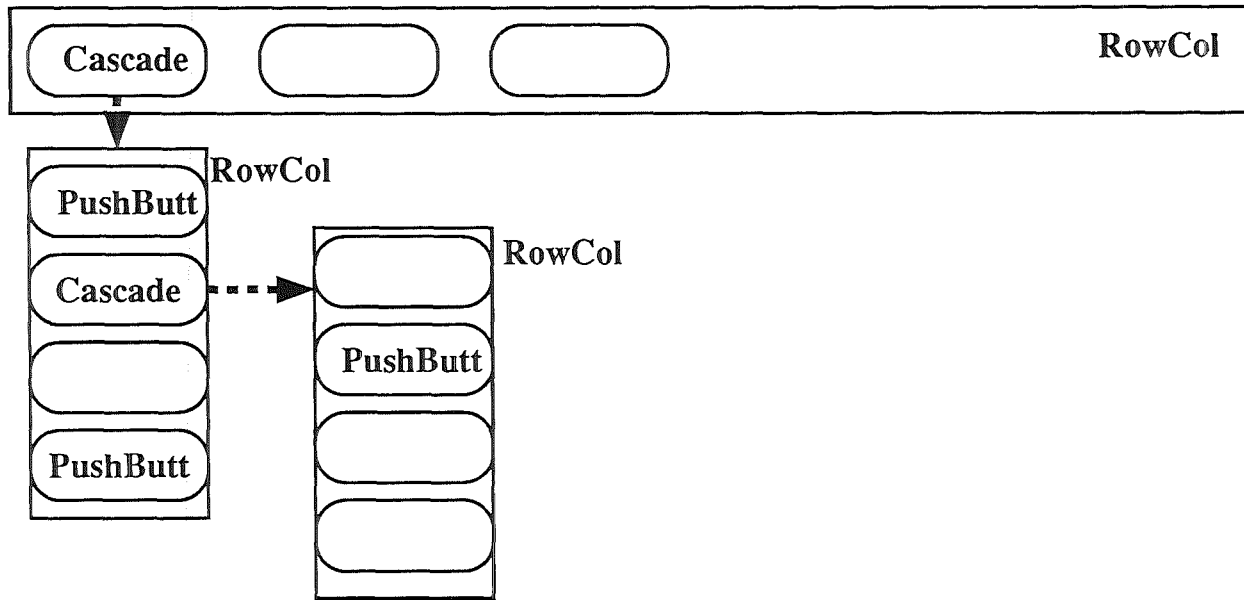
- **client- / server- Beziehung**
- **callback-Mechanismen**
- **objektorientierte Struktur (Eigenschaftenvererbung)**
- **event-Verarbeitung**
- **verteiltes Konzept**





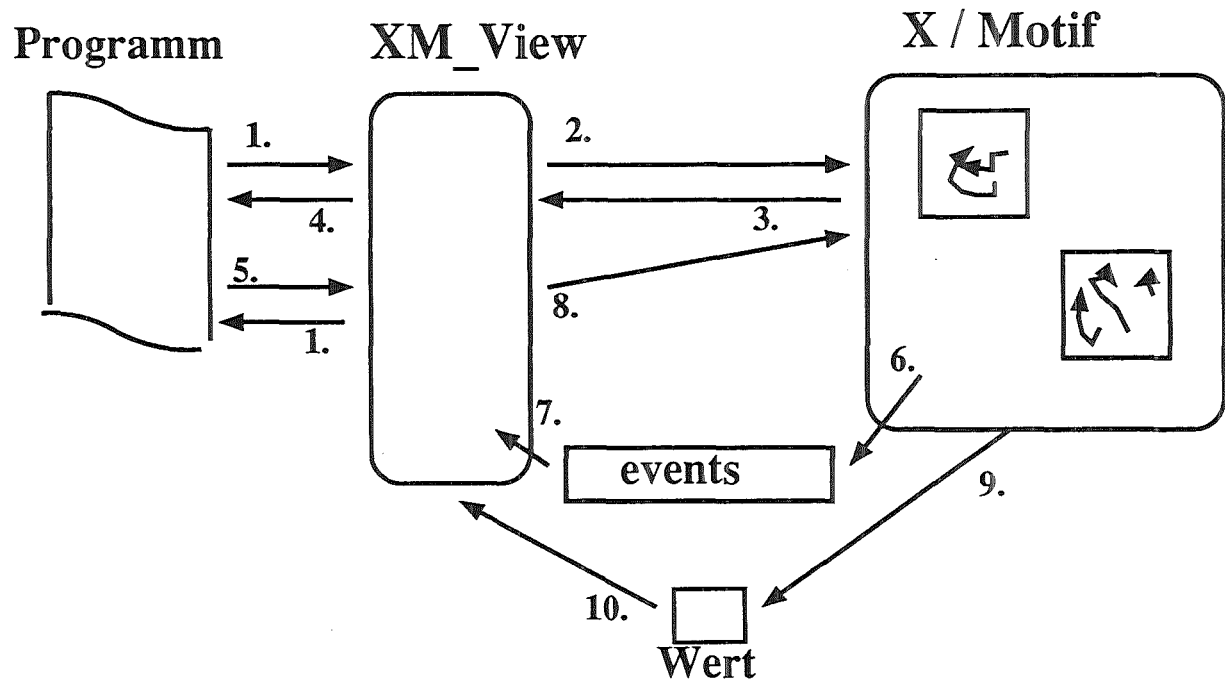


Menüleiste Aufbau



Philosophie von XM_View

- **Anwenderprogramm steuert den Ablauf**
- **direkte Benutzerschnittstelle für Anwenderprogramm oder Laufzeitsystemkomponente**
- **ereignisorientierte Verarbeitung (klassenspezifische events für Fenster mit / ohne Vorgabe)**
- **synchrone / asynchrone Kommunikation (direkte Schnittstelle)**



Ausblick

- Implementierung auf Workstations unter Motif (Anfang 1993 verfügbar)
- Portierbarkeit auf PC's anhand Window-Programmen (nach Bedarf)
- Einsatz zur Modellierung mit neuronalen Netzen
- Einsatz als Oberfläche für lernendes System mit heuristischen Verfahren
- allgemeiner, offener Einsatz

Bausteine zur Vorhersage des Verbleibs von Stoffen in Agrarökosystemen

W. Paul, Institut für Biosystemtechnik
der Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft
Bundesallee 50, W-3300 Braunschweig

1. Einleitung

Landwirtschaft und Umwelt stehen in besonders engen Wechselbeziehungen, weil die Kompartimente der Umwelt zugleich auch Produktionsmittel der Landwirtschaft sind. Bei unerläßlichen Stoffeinträgen in die Landwirtschaft muß man deshalb sicher sein, daß kein unerwünschter Stofftransfer in die benachbarten Kompartimente der Umwelt stattfindet. Der Verbleib von Stoffen in Agrarökosystemen unterliegt aber den vielfältigsten, sehr komplexen Prozessen (D 6789). Als Ansatz zur Analyse und Vorhersage dieser Vorgänge wurde im experimentellen Bereich ein gut geregeltes Modellökosystem gewählt, in dem über Probenahme der zeitliche Verlauf der Konzentration eines Stoffes in den einzelnen Kompartimenten verfolgt werden kann (D 7471). Im theoretischen Teil wird ein Kompartimentansatz zu Modellbildung und zur Analyse des Risikos eines in ein Agrarökosystem eingebrachten Stoffes gewählt.

2. Modellbildung

Bei genauerer Betrachtung des Verbleibs eines Stoffes in Agrarökosystemen kann man das komplexe Wirkungsgefüge in eine Reihe von Grundprozessen zerlegen. Diese Grundprozesse der Stoffdynamik lassen sich in Transfer- und Abbauprozesse gliedern (D 7837). Über eine Vielzahl dieser Grundprozesse existieren, sofern man örtliche Variabilitäten durch entsprechend klein gewählte Volumina zunächst außer acht läßt, klare Modellvorstellungen. Eine Auswahl von Beschreibungen solcher Grundprozesse ist in D 6939 gegeben, wobei

insbesondere bei den Transferprozessen in die Pflanze noch Forschungsbedarf besteht. Entscheidend ist dabei, daß die Raten der Prozesse sowohl durch (theoretisch) exakt bekannte Stoffparameter wie z.B. Wasserlöslichkeit, Dampfdruck, Oktanol-Wasser-Trennungskoeffizient, Henry-Konstante etc. als auch durch in weiten Spannen variable Ökosystemparameter wie Regenmenge, Wind, Temperatur, Bodeneigenschaft, Bewuchs etc. bestimmt werden.

Durch Bilanzierung eines Stoffes (Zusammenfassung aller Transfer- und Abbauprozesse in allen betrachteten Kompartimenten des Ökosystems) gewinnt man eine Vektor-Differentialgleichung für den Gesamtkomplex aller Prozesse (D 6796 und D 8191). Die Behandlung dieser Gleichungen bietet rechentechnische Vorteile. Insbesondere im linearen Fall (eine Linearisierung ist bei kleinen Stoffmengen oftmals gut möglich) reduziert sich die Berechnung des zeitlichen Verlaufs der Konzentrationen mit dem aus der Regelungstechnik bekannten Ansatz der Übertragungsmatrix auf einfache Matrizen-Multiplikationen (D 8192). Aber auch bei nichtlinearen oder zeitlich variablen Ansätzen für die Transfer- und Abbauraten ist dieser relativ einfache Ansatz gut verwendbar (D 8193).

Entscheidend für eine gültige Vorhersage des Verhaltens von Stoffen in Agrarökosystemen sind nicht die letzten Genauigkeiten im Rechenverfahren oder die weitestgehende Detaillierung bei der Modellierung der Transfer- und Abbauprozesse, sondern die richtige Strukturierung des Systems (D 6944) und das richtige Szenario für die in großen Grenzen schwankenden Ökosystemdaten. Auch so betrachtet, bietet der Kompartimentansatz Vorteile, da in diesem Rahmen leicht worst-case Berechnungen mit extremen Annahmen über Parameter und Szenarien integriert werden können. Worst-case-Szenarien tragen mehr zur Abschätzung des eventuellen Risikos eines Stoffes in Agrarökosystemen bei als ausgefeilte Modellannahmen für den Normalfall.

An den Beispielen 'Lindan im Gewächshaus', 'Eindringen eines Stoffes in den Boden' und 'Geruchsausbreitung' läßt sich die Anwendbarkeit der Methode zeigen. Während es sich beim Lindan (D 6798 und D 6788) um ein einfaches Beispiel handelt, bei dem im wesentlichen nur die Stoffparameter das Verhalten bestimmen, sind bei

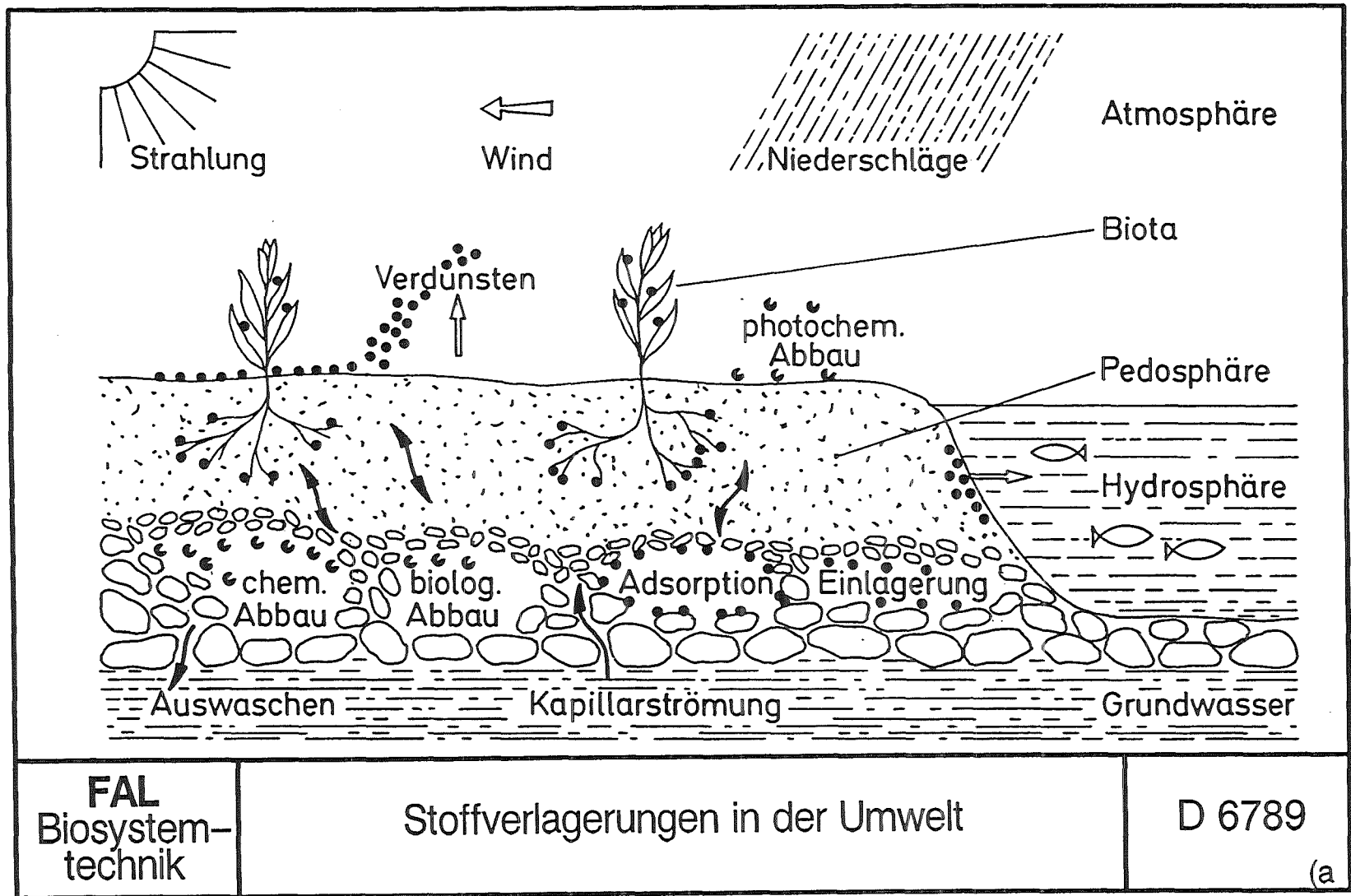
der Migration im Boden (D 6774 und D 6945) und der Geruchsausbreitung (D 8195) die Szenarien für die Transportmedien Wasser und Luft entscheidend für das Simulationsergebnis.

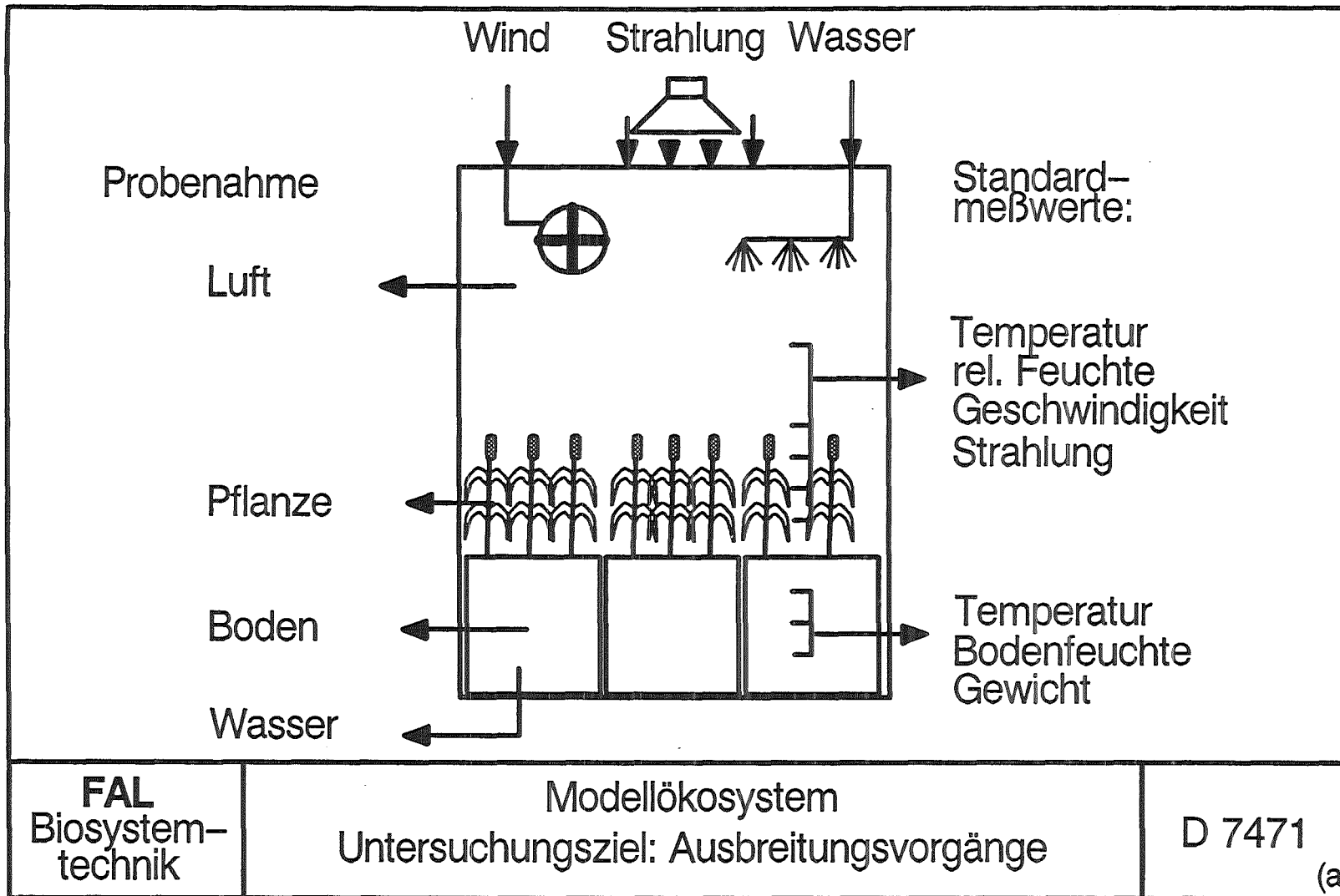
3. Risikoanalyse

Bei einer Risikoanalyse ist nicht der Normalfall, sondern das ungünstigste Zusammentreffen der Ökosystemparameter entscheidend für die Bewertung eines Stoffes. Die Bewertung 'ungünstig' unterliegt dabei verschiedenen Kriterien, die üblicherweise unter den Überschriften 'Mobilität', 'Persistenz' und 'Elastizität' zusammengefaßt werden. 'Mobilität' bezeichnet neben der Verweilzeit eines Stoffes im Kompartiment und dem Zeit-Dosis-Integral auch die systemische Wirkungsdauer eines Stoffes im Kompartiment j, wenn es zu Beginn im Kompartiment i eingebracht wurde, sowie die Auswaschung als Verschwinden des Stoffes aus dem Gesamtsystem. Unter der Überschrift 'Persistenz' sind nicht nur die systembestimmenden Eigenwerte und deren Variationen bei sich ändernden Parametern gemeint, sondern auch Anhaltswerte für eine mögliche Akkumulation bei dauernden oder in vorgegebenen Wiederholzeiträumen auftretenden Applikationen. 'Elastizität' schließlich kennzeichnet die Änderungen der Konzentrationen in den einzelnen Kompartimenten bei Änderung eines Parameterwertes oder das Berechnen von Parameterkombinationen, die Extremwerte im zeitlichen Verlauf der Konzentrationen bewirken.

Maßzahlen für die Auswirkungen auf die Konzentrationsverläufe bei bestimmten Annahmen in bezug auf Stoffparameter und Ökosystemdaten sind daher von großem Interesse. Für Fragen der Mobilität eines Stoffes, der Persistenz und der Elastizität bieten die einfachen Kompartimentmodelle aufgrund der gut ausgebauten Theorie nicht zu übersehende Vorteile in der schnellen Berechnung charakteristischer Werte für den Verbleib (D 8196, D 8197 und D 8198), die am Beispiel 'Lindan' ansatzweise durchgerechnet wurden (D 6946).

Insgesamt ergibt sich innerhalb des vorgestellten Rahmens (D 8199) die Möglichkeit, mit vorgegebenen Stoffdaten und anzunehmenden Ökosystemscenarien relativ leicht erste Risikoabschätzungen für den Verbleib von Stoffen in Agrarökosystemen vorzunehmen. Der Ansatz folgt dabei der auch in anderen Ingenieurbereichen angewandten Philosophie, wonach durch gute Strukturierung und Rückführung auf Grundprozesse (viele kleine Elemente mit bekannten Wechselbeziehungen) auf Kosten hoher Rechenleistung eine Vorhersage angestrebt wird.





TRANSFER		ABBAU
Verdampfen	Diffusion	Photolyse
Ausregnen	Deposition	Hydrolyse
Abfließen	Adsorption	mikrobielle
Auswaschen	Aufnahme Wurzel	Degradation
.	.	.
.	.	.
.	.	.

FAL Biosystem- technik	Grundprozesse der Stoffdynamik	D 7837 (b)
------------------------------	--------------------------------	---------------

Prozeß	Bilanzgleichung	Parameter
Strömung	$\frac{dc}{dt} = \frac{q}{v} (c^{ein} - c)$	q = Volumendurchfluß v = Kompartimentvolumen
Ausregnen	$\frac{dc}{dt} = -k I c$	I = Regenintensität k = Auswaschkoeffizient
Verdampfen	$\frac{dc}{dt} = K_G (C_W H - P)/RT$	$K_G \approx 0,029 U^{-0,78} \cdot Z^{-0,11} \cdot Sc^{-0,67}$ U = Windgeschwindigkeit Z = Schichtdicke Sc = Schmidt-Zahl H = Henry-Konstante
Sorption	$\frac{dc}{dt} = K_1 c_{Sorp}^n - K_2 c$	K ₂ = Desorptionskonstante K ₁ = Freundlich-Konstante $\approx K_{OC} \cdot \% \text{ org. Kohlenstoff}$ $K_{OC} \approx 0,411 K_{OW}$
Degradation	$\frac{dc}{dt} = -\frac{\mu B}{Y K_S} c$	$T_{1/2} = \ln 2 Y K_S / \mu B$

FAL Biosystem- technik	Stoffbilanzen einiger Grundprozesse	D 6939 (a)
------------------------------	-------------------------------------	---------------

Bilanz im Einzelkompartiment:								
Änderung der Masse eines Stoffes	=	Zuwachs durch Transfer	- Verlust durch Abbau	+ Zuwachs durch Eintrag				
$\frac{dc}{dt}$	=	t_c	- λc	+ u				
Matrix-Schreibweise bei n Kompartimenten:								
$\begin{bmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \vdots \\ \dot{c}_n \end{bmatrix}$	=	$\begin{bmatrix} -\sum t & \dots & t_{1n} \\ t_{21} & \dots & t_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ t_{n1} & \dots & -\sum t \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$	-	$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$	+	$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$
$\dot{\underline{c}} = A\underline{c} + \underline{u}$								
FAL Biosystem- technik	Aufbau der Grundgleichungen für einen Stoff			D 6796 (b)				

Die Zusammenfassung aller Transfer- und Abbauprozesse ergibt eine Vektor-Differentialgleichung für die Mengen \underline{c} des betrachteten Stoffes in den beteiligten Kompartimenten			
$\dot{\underline{c}} = A(c, t) + \underline{u}$			
mit den Einträgen \underline{u} und der Systemmatrix			
$A =$	$\begin{bmatrix} -\sum T - \text{Abbau 1} & \text{Transfer 1/2} & \dots & \text{Transfer 1/N} \\ \text{Transfer 2/1} & -\sum T - \text{Abbau 2} & \dots & \text{Transfer 2/N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \text{Transfer N/1} & \text{Transfer N/2} & \dots & -\sum T - \text{Abbau N} \end{bmatrix}$		
Innerhalb der einzelnen Kompartimente treten keine örtlichen Konzentrationsunterschiede auf.			
FAL Biosystem- technik	Aufbau der Systemmatrix		D 8191

Im linearen Fall hat das System

$$\dot{\underline{c}} = A\underline{c} + \underline{u}$$

die Lösung

$$\underline{c}(t) = \exp(At) \underline{c}_0 + \int_0^t \exp A(t-\tau) \underline{u} d\tau$$

Die Übertragungsmatrix $\exp(At)$ berechnet sich aus der Reihenentwicklung

$$\exp(At) = 1 + At/1! + (At)^2/2! + \dots$$

mit definierten Konvergenzkriterien.

FAL Biosystem- technik	Lösung der Vektordifferentialgleichung	D 8192
------------------------------	--	--------

Sind die Transfer- und Abbauraten nichtlinear oder zeitvariabel, so muß bei geeignet kleinen Zeitschritten zu jedem Zeitpunkt die Systemmatrix neu berechnet werden. Dies geschieht über eine Matrix der Wirkungsmechanismen:

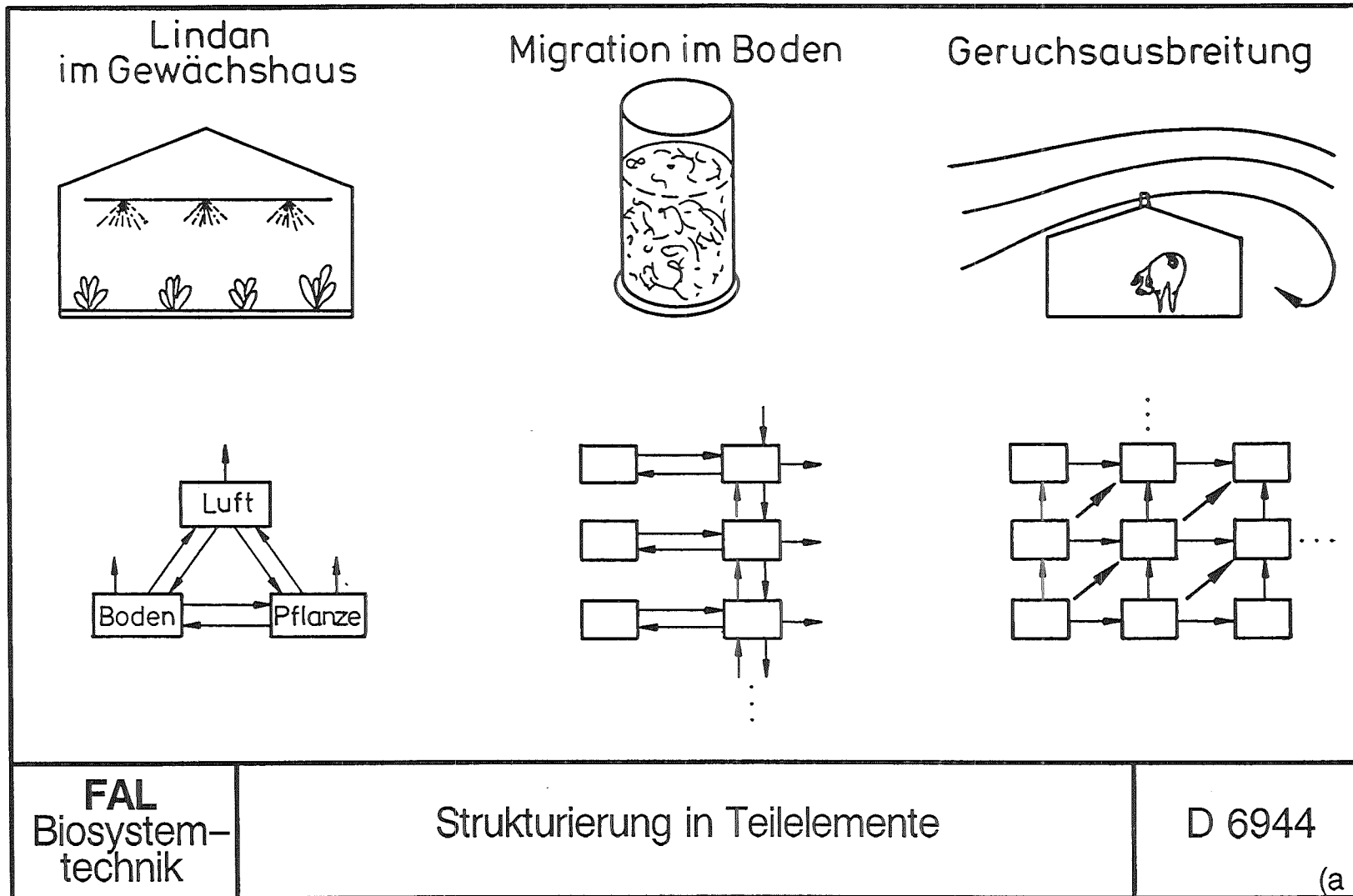
$$M = \begin{bmatrix} 0 & 4 & 0 & 0 & \dots \\ 3 & 1 & 0 & 2 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 1 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

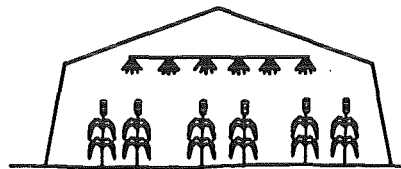
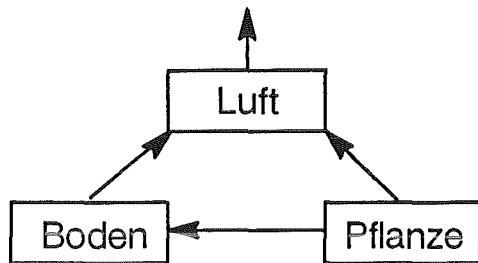
Bsp: Boden

- 1 = mikrobieller Abbau
- 2 = Einwaschen
- 3 = Adsorption
- 4 = Desorption

Die entsprechenden Raten werden aus einer numerierten Bibliothek von Standardprozessen bestimmt.

FAL Biosystem- technik	Berechnung der Systemmatrix im allgemeinen Fall	D 8193
------------------------------	--	--------



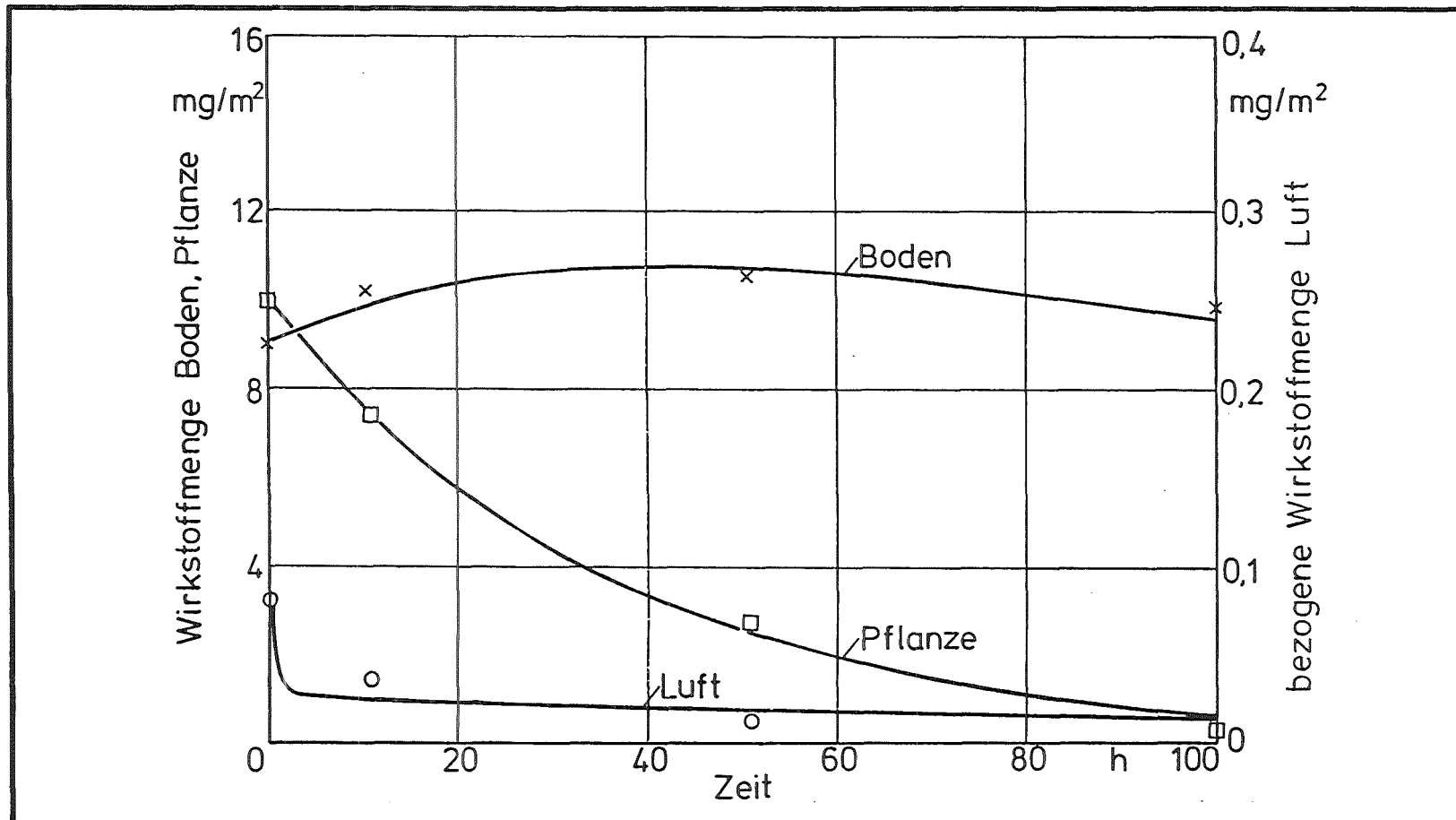


$$A = \begin{bmatrix} 0,005 & 0 & -0,01 \\ -0,005 & 1,0 & -0,005 \\ 0 & 0,0 & 0,015 \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{Boden} \\ \text{Luft} \\ \text{Pflanze} \end{matrix}$$

FAL
Biosystem-
technik

Systemmatrix für den Verbleib von Lindan
im Gewächshaus

D 6798
(a)



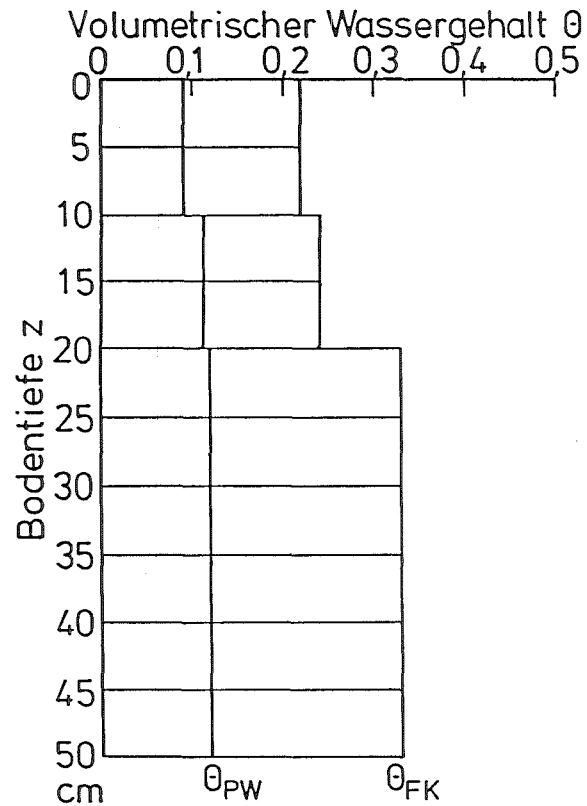
FAL
Biosystem-
technik

Konzentrationsverläufe unter Normalbedingungen

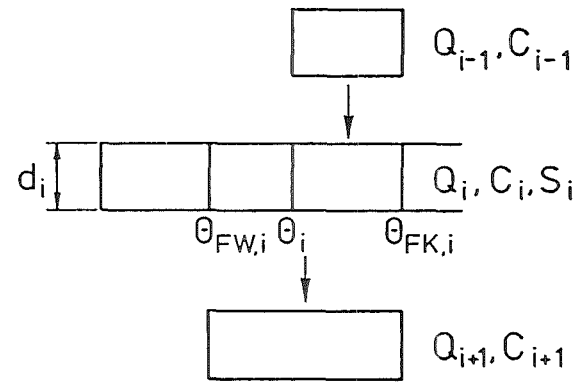
D 6788

(b)

Schichtenmodell



Cell-mixing-Modell



$$C_i = \frac{Q_i C_i + Q_{i-1} C_{i-1}}{Q_i + Q_{i-1}} \quad \theta_i = \frac{Q_i + Q_{i-1}}{\rho_i d_i}$$

$$C_{ges} = [S_i + \theta_i C_i] \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{t}{t_{1/2}}}$$

neue Gleichgewichtskonzentration:

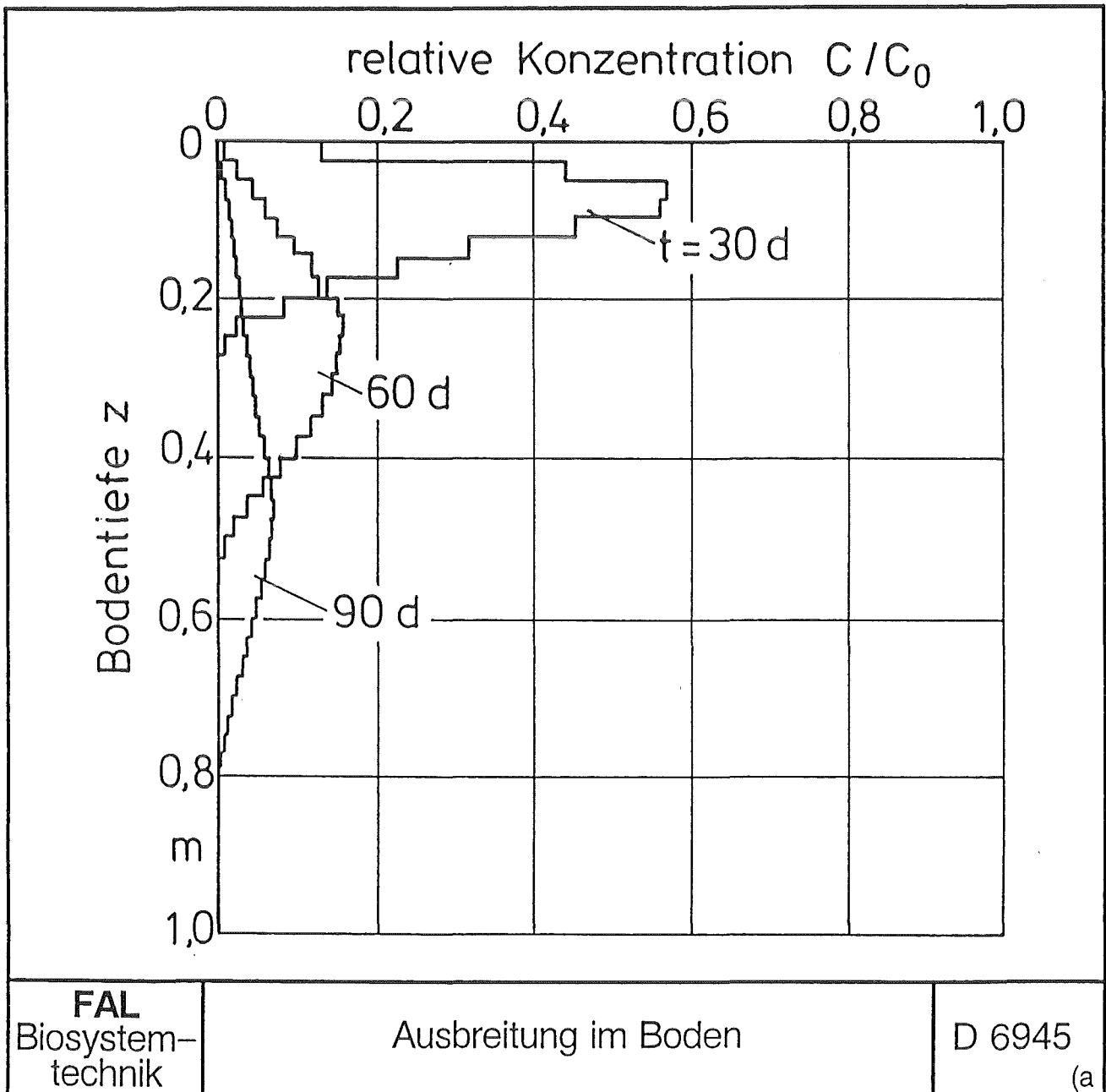
$$C_i = \frac{C_{ges}}{K_D + \theta_i} \quad S_i = K_D C_i$$

FAL
Biosystem-
technik

Beschreibende Gleichungen für den Stofftransport
im Boden

D 6774

(a)



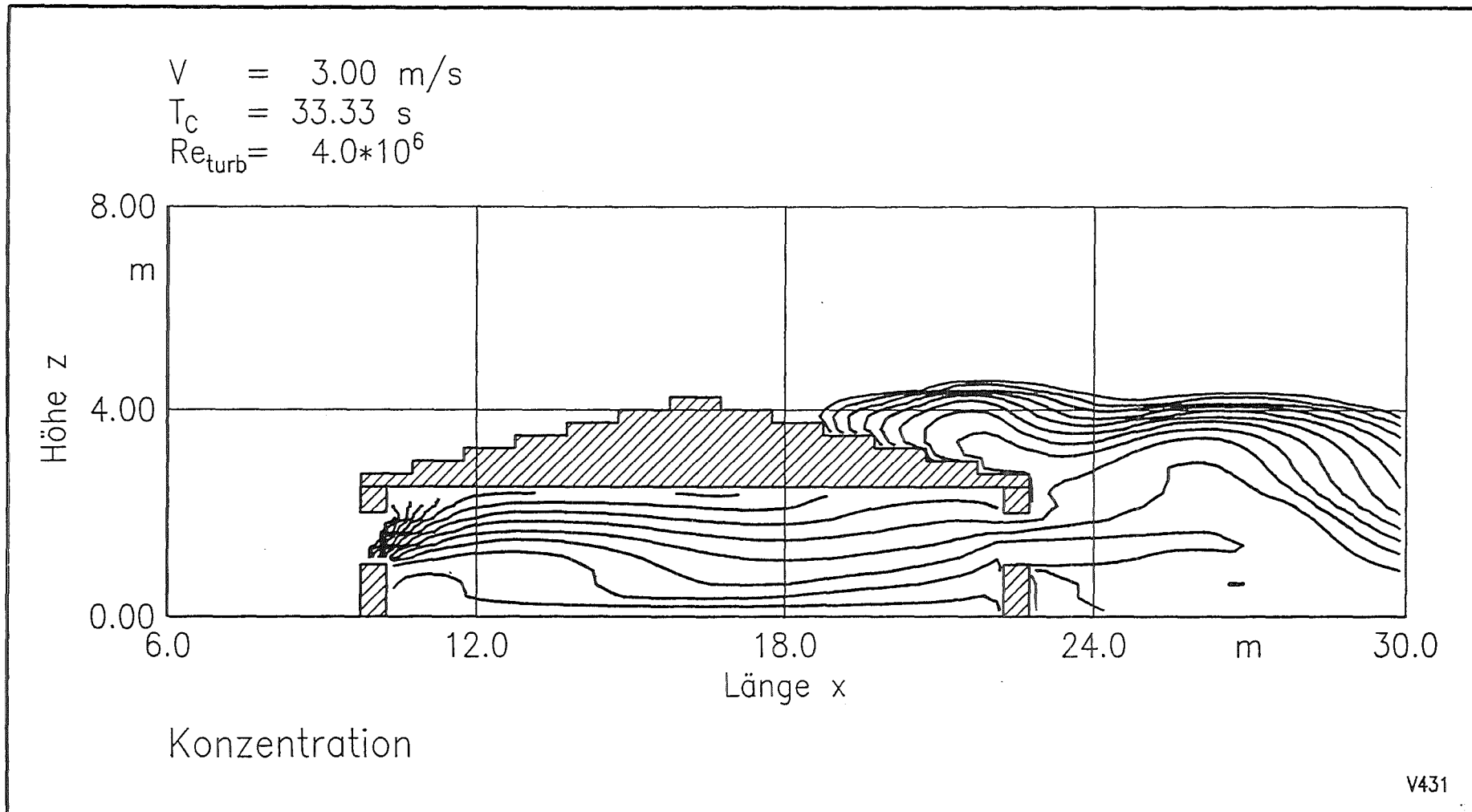
FAL
Biosystem-
technik

Ausbreitung im Boden

D 6945

(a)

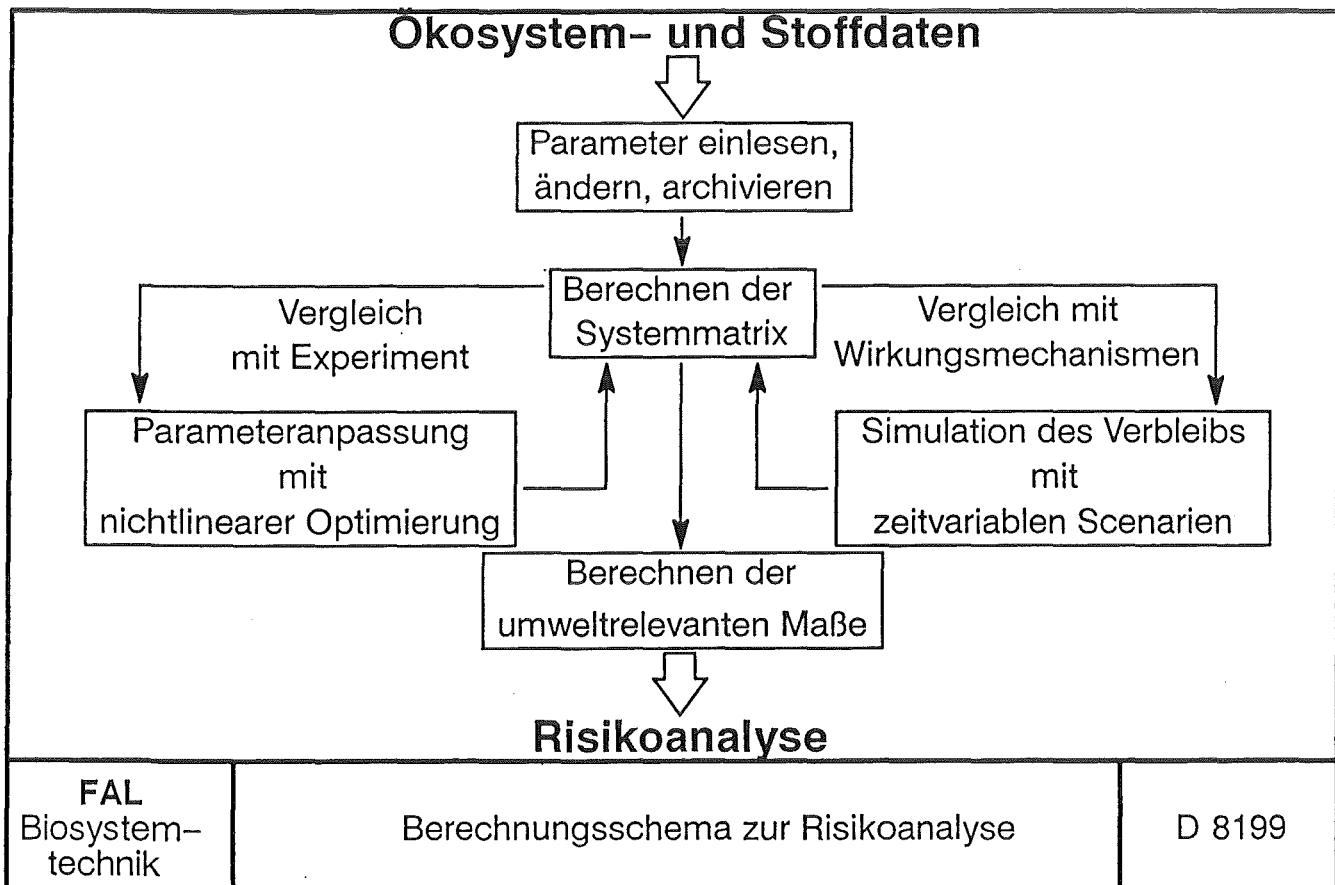
431-446

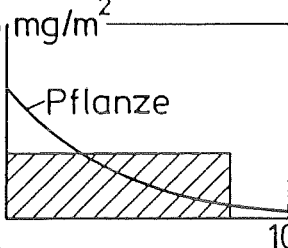
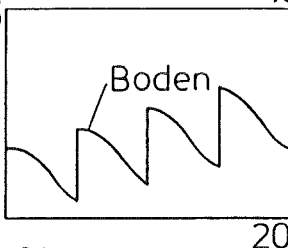
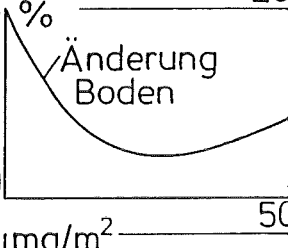
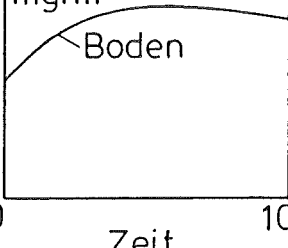


Zeit-Dosis-Integral	$\underline{w} = \int_0^{\infty} e^{At} \underline{x}^0 dt = A^{-1} \underline{x}^0$	
systemische Wirkungsdauer	$\tau_j = \sum_i (A^{-1})_{ij}$	
mittlere Verweilzeit	$\bar{t}_i = \frac{[A^{-2} \underline{x}^0]_i}{\tau_i}$	
Auswaschung	$g(t) = \sum e^{At} \underline{x}^0$	
FAL Biosystem- technik	Formeln zur Abschätzung der Mobilität	D 8196

Eigenwerte	$ A - \lambda I = 0$	
relative Stabilität	$d\lambda_i = \frac{adj(\lambda_i I - A) * \Delta A}{adj(\lambda_i I - A) * I}$	
Akkumulation	$\underline{x}(\infty) = A^{-1} \underline{u}$	
Wiederholungszeitraum	$x^{grenz} = \frac{T \lambda_{max}}{(1 - e^{T\lambda_{max}})}$	
FAL Biosystem- technik	Formeln zur Abschätzung der Persistenz	D 8197

Empfindlichkeit	$\Delta x = v \Delta a$ $\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ \frac{\partial A}{\partial a_{ij}} & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}$	
ungünstigste Grenzwerte	$\underline{p}^T = -\underline{p}^T A^*$ $a_{ij}^* = \begin{cases} a_{ij}^{\max} & \text{für } p_i(t) - p_j(t) \geq 0 \\ a_{ij}^{\min} & \text{für } p_i(t) - p_j(t) < 0 \end{cases}$ $\dot{x} = A^* x$	
FAL Biosystem- technik	Formeln zur Abschätzung der Elastizität	D 8198



Umweltrelevante Fragestellung	Systemanalytisches Werkzeug	Beispielhafte Ergebnisse
Mobilität	Analyse der Verweilzeiten, Wirkungszeiten etc.	
Persistenz Akkumulation	Stabilitätsanalyse	
Elastizität	Empfindlichkeitsanalyse	
Ungünstige Kombination	Optimierungsstrategien	
FAL Biosystem- technik	Risikoanalyse am Beispiel Lindan	D 6946 (a)

Durchführung und Probleme der Integration der Simulation in Programmsysteme

Beitrag zum 2. Arbeitstreffen des Arbeitskreises 5 *Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen* der GI Fachgruppe 4.6.1 "Informatik im Umweltschutz" am 5. und 6.11.1992 in Karlsruhe.

S. Schweizer, M. Tischendorf
 IKE - Universität Stuttgart
 Pfaffenwaldring 31, 7000 Stuttgart 80
 Tel.: 0711 - 6852131, Fax.: 0711 - 6852010

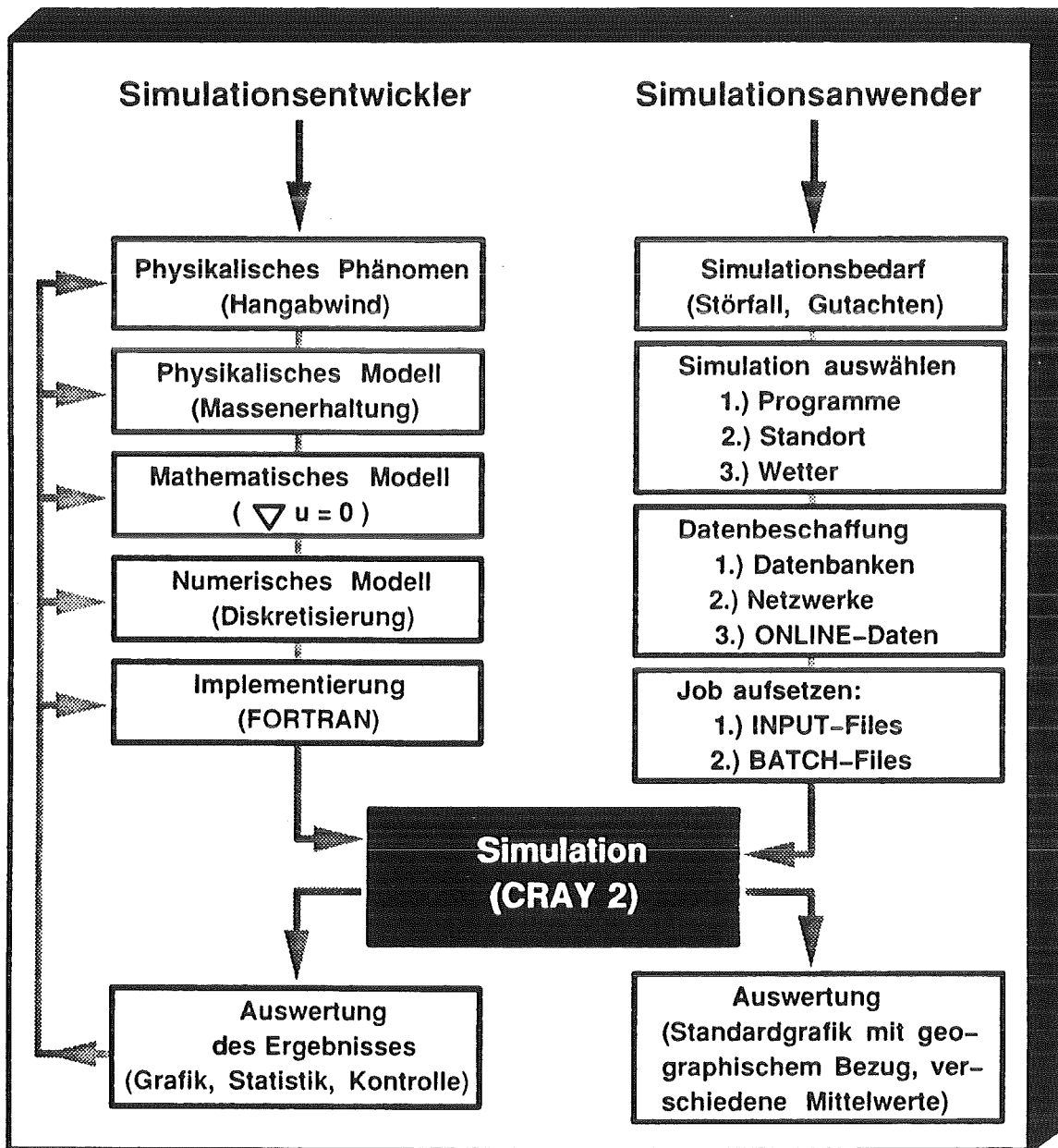
1 Einführung

Zwischen der Entwicklung von Simulationsmodellen und ihrem Einsatz besteht in vielen Anwendungsgebieten eine Diskrepanz. Die Techniken der Simulation sind schon relativ weit fortgeschritten, die Anwendung dieser Erkenntnisse setzt sich aber nur sehr langsam durch. So verlangt beispielsweise die TA Luft immer noch, daß Simulationen mit dem Gauß-Modell durchgeführt werden. Abbildung 1 zeigt den Unterschied in der Vorgehensweise zwischen den Forschern, die Simulationsprogramme entwickeln bzw. verbessern und reinen Simulationsanwendern wie Behörden oder Spezialisten aus anderen Forschungsbereichen. Tabelle 1 zeigt eine Gegenüberstellung der unterschiedlichen Anforderungen von Entwicklern und von Anwendern von Simulationsmodellen.

Tabelle 1: Gegenüberstellung der verschiedenen Anforderungen an Simulationen

Simulationsentwickler	Simulationsanwender
Verbesserung der Methoden in der Simulation	Verbesserung der Methoden zur Simulation
z. Bsp. Verbesserung von: Depositionsmodellen Turbulenzen im mikroskalischen Bereich Chemie Wärmekataster	Echtzeit Online Standardgrafik wenig Eingabe Folgemodelle (z.Bsp. Wassermodell)
Simulation selbst als Forschungsobjekt	Simulation als Blackbox

Dabei ist es ein wichtiges Ziel, möglichst viel von den Neuerungen der Entwicklerseite in die Anwendungen zu integrieren.



S. Schweizer, IKE, Uni Stuttgart

Abbildung 1: Einbindung der Simulation in verschiedene Umgebungen: Unterschied Simulationsentwickler ⇔ Simulationsanwender

2 Schadstoffausbreitung in der Luft

Hier soll kurz die Problematik der Ausbreitung von Schadstoffen in Luft angesprochen werden. Betrachtet wird der mesoskalige Bereich (ca 5 - 200 km), da dieser im Rahmen von Störfallbetrachtungen und Genehmigungsverfahren relevant ist.

Schadstofftransport = Transport mit dem Wind + Diffusion durch Turbulenz

Ausbreitungsrelevante Einzelaspekte:

- Geostrophische Wetterverhältnisse (Wind, Temperatur, Feuchte)
- Anpassung des Windes an lokale Topographie
- Lokale meteorologische Effekte (Thermik, Turbulenz, Lokale Windsysteme)
- Emissionsbedingungen (Quellstärke, Emissionshöhe)
- Chemische Umwandlung
- Depositionsmechanismen

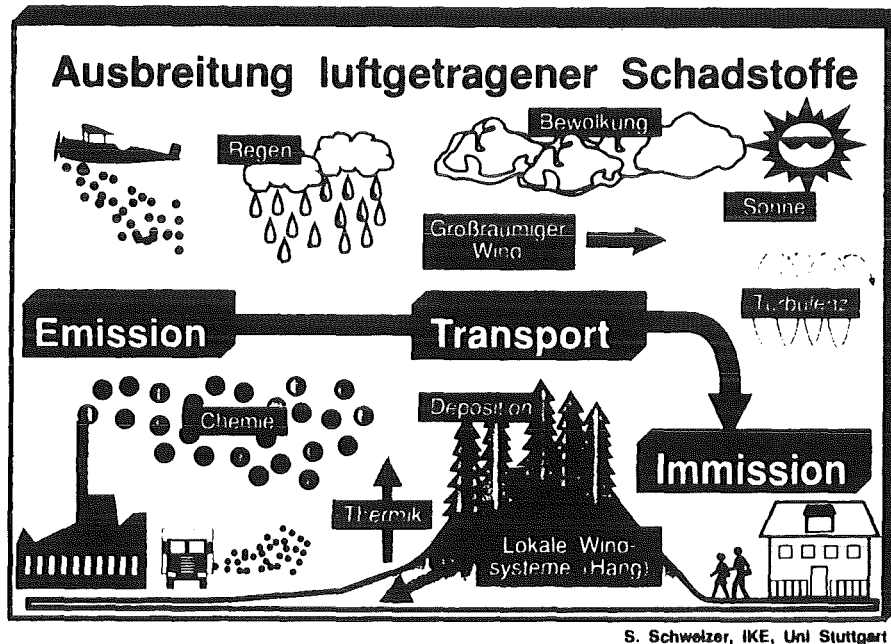


Abbildung 2: Die Ausbreitung luftgetragener Schadstoffe: Transportmechanismen und Einzeleffekte

3 Simulation im Rahmen luftgetragener Schadstoffe

Die numerische Simulation der Schadstoffausbreitung läßt sich in zwei Komponenten unterteilen:

- Windfeldberechnung (Bestimmung der meteorologischen Größen)
- Ausbreitungsrechnung (Bestimmung des eigentlichen Schadstofftransportes)

Die Windfeldberechnung läuft dabei vollständig entkoppelt von der Ausbreitungsrechnung ab, so daß die beiden Modelle unabhängig voneinander berechnet werden können. Beide Module können ausgetauscht werden. Für die Bestimmung der meteorologischen Größen gibt es drei verschiedene Modelle mit steigendem Berechnungsaufwand:

- Konstantes Windfeld
- Diagnostische Modelle
- Prognostische Modelle

Bekannte Modelle der Schadstoffausbreitung sind:

- Gaußmodelle (Einfache, analytische Lösung)
- Puff-Modelle
- Particle-In-Cell-Modelle (PIC)
- Box-Modelle
- Lagrange-Modelle (Monte-Carlo-Verfahren)

4 Daten bei der Simulation

Bei der Simulation von Schadstoffausbreitungen fallen eine Menge von Daten an, deren typische Merkmale kurz genannt werden:

1. Datentypen
 - Einzelwerte (z.Bsp. Datum, Zeit, Emissionsstärke)
 - 1D-Matrizen (z.Bsp. Zeitreihen)
 - 2D-Matrizen (z.Bsp. Geländemodell)
 - 3D-Matrizen (z.Bsp. Meteorologische Größen)
2. Semantik: Ort- und Zeitsemantik, Bezug auf andere Umweltdaten
3. Datenvolumen: Erzeugen von Matrizen aus wenigen Daten → Informationsvervielfachung
4. Datenhaltung: Abspeichern ⇔ neu berechnen ?

5 Methoden und Werkzeuge

Eine Simulationsrechnung umfaßt neben der eigentlichen Simulation noch eine Reihe von Aktionen, die im Preprocessing und im Postprocessing durchgeführt werden müssen.

Dabei beinhaltet das Preprocessing:

- die Geländeauswahl
- die Auswahl der Wetterdaten
- die Modellauswahl
- die Standortauswahl
- die Auswahl realer oder angenommener Emissionen

Die Daten können über eine Datenbankanfrage oder interaktiv erfaßt werden. Dies variiert mit dem Grad der Einbindung der Simulation in Systeme.

Das Postprocessing umfaßt die folgenden Punkte:

- Grafik
- Verifizierung
- Statistik
- Werkzeuge zum Vergleich verschiedener Simulationen

Aufgrund der Ergebnisse des Postprocessings kann eine Rückkopplung zum Preprocessing notwendig werden. Dadurch kann die Simulationsgüte durch Variation der Eingangsparameter gesteigert werden. Auch beim Nesting, dem Schachteln von Simulationen verschiedener Feinheit ineinander, muß das Modul *Simulation* mehrfach durchlaufen werden.

Methoden, die Simulation selbst zu beschleunigen, sind die Vektorisierung oder die Berechnung auf einem Parallelrechner. Beide Methoden werden an unserem Institut untersucht bzw. eingesetzt und bewirken entscheidende Verbesserungen in Richtung ONLINE-Simulation.

Die Abbildungen 3 und 4 zeigen die Ergebnisse einer Simulation von SO_2 -Ausbreitung. Das Windfeld wurde mit einem prognostischen Modell berechnet. Man erkennt die lokale Anpassung des Windfeldes an orografische Gegebenheiten (Kanalisationen in Tätern, Überströmungen von Höhen) und die Drehung des Windes mit der Höhe (Ekman-Spirale). Der Schadstofftransport wird mit einem Lagrange-Modell berechnet. Dem berechneten Windfeld wird die Diffusion überlagert, indem den simulierten Teilchen über Zufallszahlen eine Streuung auferlegt wird.

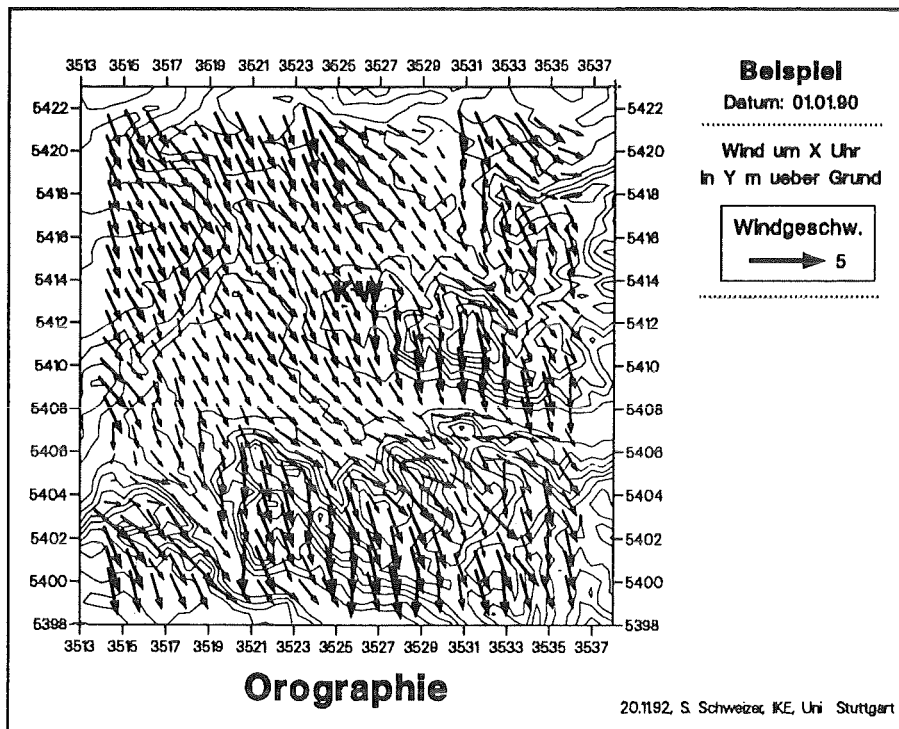


Abbildung 3: Berechnetes Bodenwindfeld in 5 m über Grund

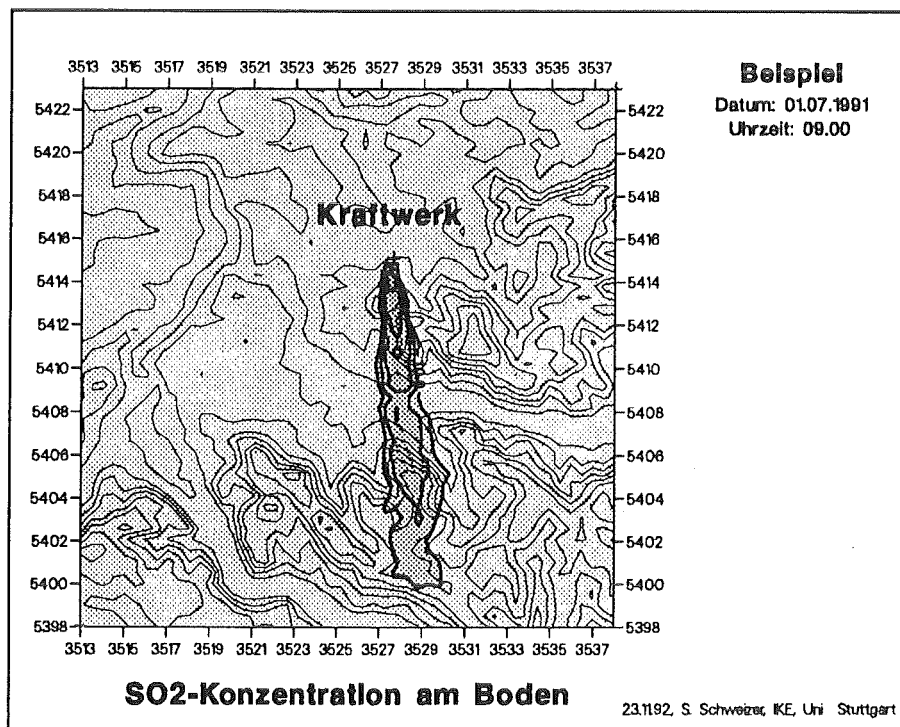


Abbildung 4: Berechnete Schadstoffkonzentration am Boden

6 Auftretende Probleme

Die Realisierung eines Systems, in dem Simulationen vom oben angesprochenen Umfang möglich sind, stoßen bei den verfügbaren Tools auf Probleme.

1.) Die Datenverwaltung bereitet besondere Probleme, da die Modellierung nicht mit den traditionellen Datentypen auskommt. Ferner können keine einheitlichen Datenmodelle verwendet werden, da die Modellierung sehr stark von der Simulation abhängt.

Dies soll kurz am Beispiel des im Simulationsprogramm gewählten Koordinatensystems gezeigt werden (Siehe Abbildung 5):

- Kartesisches System \Leftrightarrow geländefolgendes System
- Äquidistantes Gitter \Leftrightarrow nicht äquidistantes Gitter
- Weltkoordinaten \Leftrightarrow lokales Koordinatensystem

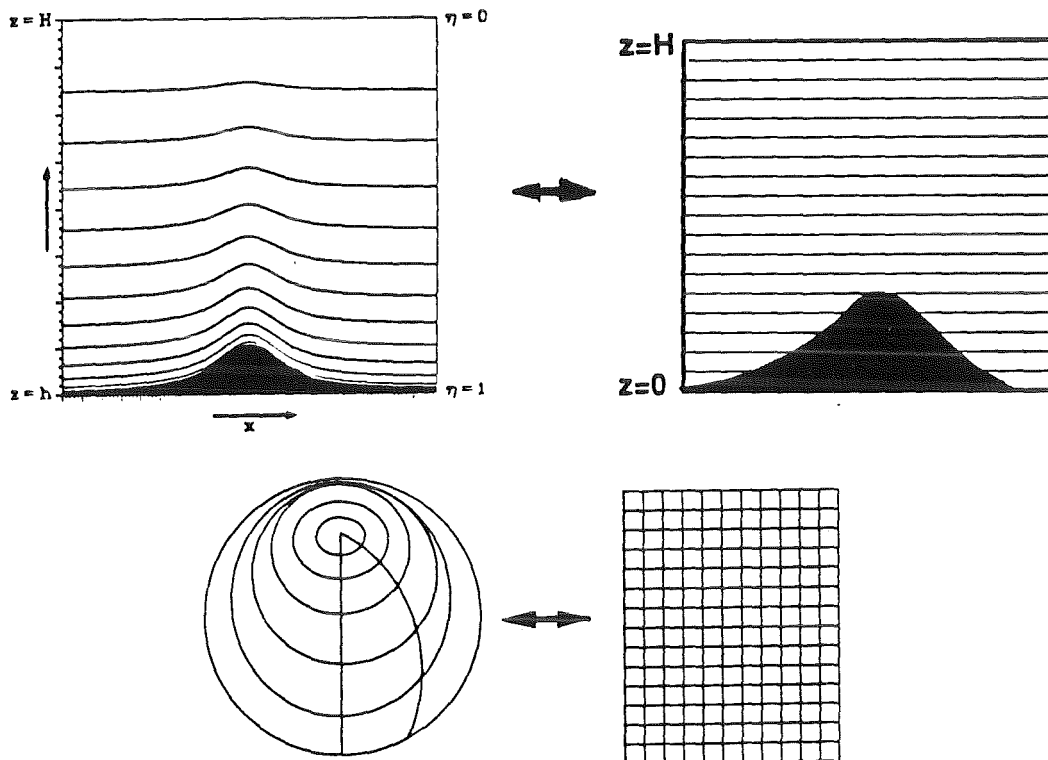


Abbildung 5: Unterschiedliche Koordinatensysteme

Durch Konvertierungen von Daten von einem Simulationsmodell in ein anderes gehen teilweise Daten verloren, andererseits müssen fehlende Daten hinzuinterpoliert werden. Dies hat zur Folge, daß es keine einheitliche Form gibt, alle Simulationsdaten unter der gleichen oder zumindest ähnlichen Form zu verwalten.

2.) Die Ablage von Zeitreihen (Vektoren, Matrizen) sowie die Modellierung zeitlicher und räumlicher Zusammenhänge macht bei herkömmlichen Datenbanken (relationaler Ansatz) Schwierigkeiten. Hierarchische Datenbanken, bei denen Matrizen jeweils als ganzes Objekt abgespeichert werden können, haben die Nachteile, daß die Matrizen in der Regel ohne Zusatzinformation gespeichert sind (Lösungsansatz: Klassenkonzept) und daß kaum kommerzielle Systeme bekannt sind. Unsere Lösung heißt deshalb RSYST, eine hierarchische Datenbank, die an der Universität Stuttgart entwickelt wurde.

3.) Ein weiterer Problempunkt ist die nach oben unbeschränkte mögliche Komplexität des Simulationsmodells. Je komplexer das Modell ist, umso aufwendiger und damit auch unsicherer wird das Preprocessing. Die Input-Daten für komplexe meteorologische Simulationen erfordern zum Beispiel die Eingabe eines genauen Temperatur- und Windprofils. Solch detaillierten Daten können i.d.R. nicht operationell zur Verfügung gestellt werden.

4.) Für Anwendungen in zeitkritischen Situationen muß das System besonders sicher und schnell sein. Kritische Punkte hierbei sind:

- Bedienung
- Rechnernetz
- Rechner
- Datenbanken
- Datentransfer

7 Zusammenfassung

Aus Sicht der Methoden und Werkzeuge erweisen sich zwei Aspekte bei der Simulation von Schadstoffen in der Luft als problematisch: Erstens gibt es kaum Tools, die das gesamte Datenhandling unterstützen und die das erforderliche Fachwissen eines Meteorologen künstlich abbilden können.

Zweitens sind der Einsatz und die erforderlichen Methoden bei der Simulation sehr stark vom jeweiligen Anwender eines Systems abhängig. Tabelle 2 zeigt die unterschiedlichen Anforderungen der verschiedenen Benutzer an ein Simulationssystem. Dies soll zeigen, daß je nach Anwender sehr unterschiedliche Methoden und Werkzeuge für die Simulation notwendig sind. Je geringer das Wissen eines Anwenders um die Modelle ist, umso besser und ausgefeilter müssen die Werkzeuge um die Simulation herum sein. Insbesondere das Preprocessing bedarf einer gewissen Art von Intelligenz, um die Simulation in die richtigen Wege zu leiten. Eine einheitliche Betrachtung der Methoden scheint ausgeschlossen.

Tabelle 2: Anwenderszenario

Anwender	Meteorologischer Fachmann	Behördlicher Sachbearbeiter (nicht vom Fach)
Beispiel	Forscher beim DWD ¹	UFIS ² - Bediener
Systeme	Stand-Alone-Simulation	Größere Umweltsysteme z.Bsp. UIS
Met. Fachwissen	groß	gering
Zweck	Verbesserung der Modelle Untersuchung von meteorol. Phänomenen	Gutachten Störfälle
Preprocessing	von Hand	operationell
Verifikation	wichtig	entfällt
Interpretation	wichtig	Ergebnis per Def. richtig → Entscheidung
Daten	große Datenmengen	hoher Datenverlust
Visualisierung	komplexe Methoden	Standard-Grafik
Anteil der Simulation an der Gesamtzeit	ca. 95 %	ca. 5 %
Zeitaspekt	wenig relevant	Online
Ansatz	traditionell	neu: integriert
Modelle	hohe Komplexität	einfachere Modelle

¹ UFIS = Umwelt-Führungs- und InformationsSystem des Landes Baden-Württemberg

² DWD = Deutscher Wetterdienst

Wir versuchen den Transfer von der rein wissenschaftlich durchgeführten Schadstoffausbreitungssimulation zu der wissenschaftlich anspruchsvollen, aber operationell durchgeführten Simulation, die dann von einem meteorologischen Laien durchgeführt werden kann. Hierzu bedarf es moderner Methoden der Informatik, um die Komplexität des Problem zu bewältigen. Allgemeine und offene Schnittstellen (intern und nach aussen) müssen definiert werden, die Verteilung von Aufgabenstellungen auf verschiedene Rechner muß erfolgen und ein sauberes Datenmodell muß gefunden werden.