



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5552

4. Treffen des AK
Werkzeuge für Simulation
und Modellbildung in
Umweltanwendungen
23.06. - 24.06. 1994 Halle/Saale

H. B. Keller, R. Grützner, A. Angelus (Hrsg.)

Institut für Angewandte Informatik
Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren

April 1995

Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 5552

4. Treffen des AK

Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen

Hubert B. Keller, Rolf Grützner¹⁾, Armin Angelus²⁾(Hrsg.)

Institut für Angewandte Informatik

Projekt Schadstoff- und Abfallarme Verfahren

¹⁾ Universität Rostock

²⁾ Martin-Luther-Universität Halle/Saale

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

1995

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0947-8620

Zusammenfassung:

Dieser Bericht stellt die Beiträge des 4. Treffens des Arbeitskreises "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen" des Fachausschuß 4.6, "Informatik im Umweltschutz", der Gesellschaft für Informatik (GI) vom 23.06. - 24.06.1994 in Halle/Saale in schriftlicher Form dar.

4th Meeting of the WG Tools for Simulation and Modelling in Environmental Applications

Abstract:

This report contains the papers of the 4th 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 Halle/Saale on 23th - 24th of june in 1994.

Vorbemerkung

Die Modellbildung und Simulation ist eine wichtige Methode zur Behandlung von Problemen im Umweltbereich. Das ist durch die Komplexität und spezielle Eigenschaften der Umweltsysteme bedingt. Zu diesen Eigenschaften gehören u.a.

- unerforschte Wirkungszusammenhänge, fehlende Systemkenntnisse
- selten sind Experimente möglich, meist nur Beobachtungen
- es existieren sehr lange Reaktionszeiten, die oft mit kurzen Zeiten verknüpft sind
- die Systeme sind stochastisch, selbstorganisierend und adaptiv
- unscharfe und sehr große Datenmengen sind anzutreffen.

Die Problemlösungsmethode Simulation ist damit eine der wenigen, die unter diesen Umständen noch zu Aussagen über das Verhalten der Systeme führt. Die Vermittlung und Aktualisierung des Wissenstandes auf diesem Gebiet und der breite Erfahrungsaustausch sind die wesentlichsten Aufgaben des Arbeitskreises. Dieser Arbeitskreis 5 "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen" gehört zur Fachgruppe 4.6.1 der Gesellschaft für Informatik und kooperiert mit der ASIM (Arbeitsgemeinschaft für Simulation). Vom 23. bis zum 24. Juni fand in Halle/Saale das 4. Treffen dieses Arbeitskreises statt. In 13 Vorträgen wurden, verbunden mit ausführlichen Diskussionen, die Schwerpunktthemen Wasser (Grundwasserschutz, Ressourcennutzung, Reinigung und Modellbildung), Modellbildung und -management, Geruchsausbreitung und Methoden (Analyse von Umweltbelastungen, Technikfolgenabschätzung, Lernsoftware) behandelt. In einer ganzen Reihe von Beiträgen wurden der aktuelle Stand und die Probleme bei der Nutzung der Simulationsmodelle und -methoden umfassend dargelegt.

Abgerundet wurde das Programm durch die Demonstration der Simulationssoftware ARENA und eines objektorientierten Datenbanksystems mit Anwendungen aus dem Umweltbereich durch die vertreibenden bzw. entwickelnden Firmen. Bedeutsam war auch wieder für dieses Treffen, daß sich Teilnehmer zur künftig gemeinsamen Bearbeitung von Projekten und Fragestellungen gefunden haben. Das Treffen fand an der Martin-Luther-Universität in Halle/Saale statt. Die örtliche Organisation wurde von Herrn Armin Angelus in hervorragender Weise durchgeführt. Dafür sei ihm ganz herzlich gedankt.

Gedankt sei auch dem Kernforschungszentrum Karlsruhe und Herrn Dr. H. B. Keller für die Bereitschaft, die Beiträge des Treffens wieder in den KfK - Berichten zu veröffentlichen. Es ist vorgesehen, das nächste Treffen im Februar 1995 durchzuführen.

Prof. Dr. habil. Rolf Grützner
Leiter des Arbeitskreises

Inhaltsverzeichnis

1	Rechnergestützte Konfiguration hydrogeologischer Modelle	9
2	Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse Notwendigkeit - Informationsbedarf - Probleme	21
3	Der Einsatz des Konzepts halbgeordneter Mengen zur vergleichenden Analyse von Umweltbelastungen	33
4	Nutzung von Datenbankobjekten zur Kopplung von Datenbanken an objektorientierte Ökosystemmodelle	39
5	Systemanalyse und Modelaufbau bei wäßrigen Reinigungssystemen	45
6	Modellbildung - Ansätze und Anforderungen	51
7	Dynamische Simulation als Basis für Lernprogramme Ein Softwarekonzept	61
8	Maschinelle Modellierung komplexer dynamischer Systeme	69
9	Grundwassermodelle als Werkzeuge zur Qualitätssicherung des Grundwassers	79
10	A Graph-Theoretic Approach to Qualitative Simulation: Computer-Aided Technology Assesment Software	101
11	Simulationsstudien von Wasserversorgungssystemen	149
12	Teilnehmerliste	153
13	GI-Fachgruppe 4.6.1 Informatik im Umweltschutz	155
14	Arbeitskreis 'Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung'	156
15	Bisherige Veröffentlichungen	158

Rechnergestützte Konfigurierung hydrogeologischer Modelle

A. Angelus, Ch. Bohley, J.-P. Grell, A. Kathe, D. Lazik¹, I. Senf
Martin-Luther-Universität Halle, URZ
¹ Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle

1. Hydrogeologische Modellierungsaufgaben

Im Umweltbereich gibt es zahlreiche Untersuchungs- und Planungsaufgaben, die eine Anwendung hydrogeologischer Methoden erfordern. Dazu zählen z.B. die Rekultivierung von Bergbaufolgelandschaften, die Verhinderung von Gefahrstoffausbreitungen im Boden und im Grundwasser, sowie die Erschließung von Trinkwasserressourcen. Die Lösung derartig komplexer Problemstellungen erfordert intensive Forschungs- und Untersuchungsaktivitäten zur Aufklärung hydrogeologischer Gesetzmäßigkeiten wie auch eine schnelle Umsetzung neuer Erkenntnisse in ingenieurtechnische Verfahren und landschaftsplanerische Maßnahmen.

Eine wichtige Methode bei der Gestaltung dieses Prozesses besteht in der Entwicklung geeigneter Modellvorstellungen als Abbilder realer Gesetzmäßigkeiten, Zusammenhänge und Prozesse.

Im folgenden soll eine Konzeption für die Entwicklung eines wissensbasierten Systems zur Unterstützung hydrogeologischer Modellierungen vorgestellt werden. Dabei ist der Modellierungsprozeß in all seinen Phasen gemeint, so z.B.:

- Entwicklung von Modellen
- Auswahl und Modifikation von Modellen
- Anpassung von Modellen an reale Untersuchungsobjekte
- Optimierung, Bewertung und Vergleich von Modellen.

Neben herkömmlichen Aufgaben wie Simulation hydrogeologischer und hydrogeochemischer Vorgänge sollen beispielsweise auch Meßwerterhebungen, Laboruntersuchungen und Parameteridentifikationen einbezogen werden.

Für die überwiegende Mehrheit hydrogeologischer Prozesse lassen sich die folgenden zwei Grundaufgaben der Hydrogeologie angeben:

- Beschreibung von Strömungsproblemen im Untergrund (Geofiltration),
- Beschreibung von Stofftransport, -austausch und -umsetzung (Migration).

Die Lösung beider Aufgaben setzt die Kenntnis räumlicher, zeitlicher und stofflicher Eigenschaften des Untersuchungsraumes und der untersuchten Prozesse voraus. In Abhängigkeit von der Aufgabenstellung kommt eine große Zahl unterschiedlicher Methoden und Verfahren zum Einsatz, die auf Erkenntnissen aus sehr unterschiedlichen Wissenschaftsgebieten basieren.

Zur Unterstützung des Bearbeiters hydrogeologischer Untersuchungen soll eine Modellierungsumgebung entwickelt werden, die folgende Tätigkeiten effektiviert.

- Ableiten einer Modellspezifikation aus der gegebenen Aufgabenstellung und Einsatz dieser Spezifikation als Zielstellung der Modellierung,
- Abgrenzung des Untersuchungsgebietes, Charakterisierung dessen hydrogeologischer Eigenschaften und der im Untergrund ablaufenden Prozesse,
- Auswahl geeigneter Berechnungsverfahren und Computerprogramme, Überprüfung der Anwendungsbedingungen sowie Bereitstellung der notwendigen Daten und Parameter,
- kritische Einschätzung der vorhandenen Datenbasis hinsichtlich der angestrebten Zielstellung,
- Durchführung von Simulationsstudien, Vergleich von Lösungsvorschlägen und Verwaltung der erzeugten Modellvarianten.

Die zu entwickelnde Softwareumgebung soll auf vorhandene Programme zugreifen und evtl. deren Ergebnisse weiterverarbeiten. Neben der Unterstützung von Modellierungsarbeiten soll das System der Demonstration unterschiedlicher Modellierungsmethoden und Modellarten dienen. Es soll zunächst ein Prototyp entwickelt werden, der an geowissenschaftlichen und umweltorientierten Forschungs- und Lehrinrichtungen eingesetzt werden kann. Eine spätere Übertragung einzelner Teile des Systems auf ingenieurtechnische Arbeitsweisen wird angestrebt.

2. Darstellung von Modellkomponenten in einer Begriffshierarchie

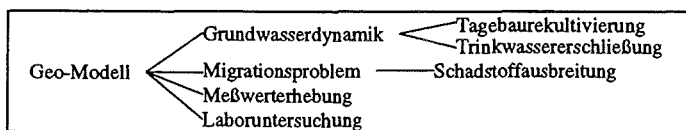
2.1. Die Hauptbestandteile hydrogeologischer Modelle

Der zentrale Ansatz für die Programmkonzeption besteht in der Annahme, daß ein Gesamtmodell aus einzelnen Modellbausteinen (bzw. Modellkomponenten) zusammengesetzt wird. Modellierung wird also als Konfigurationsaufgabe aufgefaßt. Ein solcher Ansatz gewährleistet eine hohe Flexibilität und eine beliebige Erweiterbarkeit des Systems.

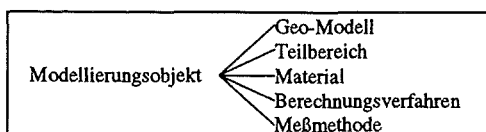
Die Projektkonzeption basiert auf der Anwendung objektorientierter und wissensbasierter Methoden und läßt sich folgendermaßen charakterisieren:

- Das zu erstellende Gesamtmodell für eine konkrete Anwendungsaufgabe wird aus den in geeigneter Weise spezifizierten Modellkomponenten zusammengesetzt. Neben einer möglichst exakten Beschreibung der Modellkomponenten sind vor allem die Beziehungen zwischen ihnen von entscheidender Bedeutung.
- Die Modellkomponenten werden in einer Begriffshierarchie angeordnet, so daß sowohl die Darstellung von Abstraktionen als auch eine schrittweise Verfeinerung von Konzepten möglich wird. In die Begriffshierarchie werden übliche Modellierungsaufgaben als mögliche Zielstellungen einbezogen.
- Für die Modellierung von Migrationsprozessen spielen neben der Beschreibung von Strömungsprozessen im Untergrund (Geofiltration) geochemische, geophysikalische und evtl. mikrobiologische Gesetzmäßigkeiten eine wichtige Rolle. Ausgehend von der Beschreibung des geologischen Untergrundes sind die Beratung bei der Auswahl von Berechnungsverfahren und die Unterstützung beim Einsatz von Computerprogrammen die Schwerpunkte des Systems.
- Zur rechentechnischen Unterstützung der Konfigurierung werden das System PLAKON [Cunis91] und das Folgesystem KONWERK [Günter93] eingesetzt. Diese Systeme wurden für technische Konfigurationsaufgaben entwickelt und ermöglichen eine flexible Steuerung sowie zahlreiche Interaktionsmöglichkeiten. Neben Formeln und Algorithmen können auch Constraints (verallgemeinerte Relationen) und Regeln verarbeitet werden.
- Für eine sachgerechte Modellierung wird eine Vielzahl von Daten benötigt, so z.B. Meßdaten (aus Probebohrungen und Aufschlüssen), Stoff- und Prozeßdaten (zur Beschreibung hydrogeologischer, physikalischer und chemischer Eigenschaften von Substanzen und deren Reaktionen), sowie gesetzliche Vorschriften und Grenzwerte. Demzufolge ist es für die Datenbehandlung notwendig, auf vorhandene geographische Informationssysteme und Datenbanken zuzugreifen. Darüberhinaus müssen verbale Fakten und Regeln, sowie heuristische Informationen verarbeitet werden.
- Im Rahmen des Systems PLAKON existiert eine Bibliothekslösungskomponente, die die Verwaltung von Modellen und ihre Einbeziehung in spätere Konfigurationen ermöglicht.

Hydrogeologische Modelle werden für sehr unterschiedliche und vielfältige Aufgabenstellungen verwendet. Dabei lassen sich ingenieurtechnische Planungen, wissenschaftlich-technische Untersuchungen und allgemeine Überwachungsaufgaben nennen. In der vorliegenden Konzeption sollen die einzelnen Modellierungsziele nach Aufgabenklassen unterteilt und als *Geo-Modell* in die Begriffshierarchie eingebunden werden.



Die Hauptbestandteile hydrogeologischer Modelle werden nun als Unterkonzepte von *Modellierungsobjekt* spezifiziert. Außer den Modellierungszielen sind das die Beschreibung geologischer Bereiche, die Charakterisierung von Materialeigenschaften, die Angabe von Meßmethoden und die Einbeziehung von Berechnungsverfahren.

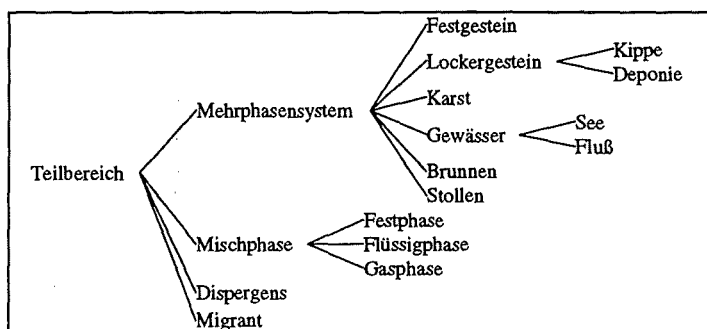


Die Bezeichnungen auf dieser Abstraktionsebene sollen den Charakter als *Modellierungsobjekt* unterstreichen. Im folgenden Abschnitt ist ein Beispiel für eine Verfeinerung der Begriffshierarchie angegeben. Diese Hierarchie ist in jeder Beziehung offen, so daß weitere Abstraktionen, Zerlegungen, Spezialisierungen, und Modifikationen vorgenommen werden können.

2.2. Charakterisierung von Teilbereichen

Ziel jeder hydrogeologischen Modellierung ist es, bestimmte hydrogeologische Sachverhalte oder Prozesse in ihrer räumlichen und zeitlichen Dynamik für ein spezielles Untersuchungsgebiet darzustellen. Dieses Gesamtgebiet gilt es in Subgebiete zu unterteilen, die in einem gewissen Sinne als homogen zu betrachten sind. Eine derartige räumliche Diskretisierung orientiert sich in der Regel stark an den im Gesamtgebiet vorkommenden Substraten, ihren Phasen sowie ihren hydrogeologisch relevanten Eigenschaften, insbesondere der Grundwasserleitfähigkeit. Je nach Untersuchungsziel werden daher Gebiete ausgewiesen, die ähnliche geochemische Prozesse (i.a. Transport-, Umwandlungs-, Austausch- oder Speicherprozesse) oder geohydraulische Kennwerte (z.B. Durchlässigkeitsbeiwert oder Transmissivität, Porosität oder Speicherkoeffizient) erwarten lassen.

Für die komplette nähere Charakterisierung der Subgebiete ist in der Modellhierarchie das Konzept *Teilbereich* vorgesehen. Ein Subgebiet soll als *Mehrphasensystem* verstanden werden. Die naturräumlich vorgegebene Trennung von Wasser und Gestein an der Erdoberfläche bedingt die weiterführende Unterteilung des *Mehrphasensystems*, wobei neben dem Unterkonzept *Gewässer* das Gestein entsprechend seinem Verhalten als potentieller Grundwasserleiter in *Festgestein* (Kluftgrundwasserleiter), *Lockergestein* (Porengrundwasserleiter) und den Spezialfall *Karst* (Karstgrundwasserleiter) unterteilt wird.



Über die Bereichskomponenten *Mischphase*, *Dispergens* und *Migrant* werden die *Mehrphasensysteme* bzw. Subgebiete näher spezifiziert, während der eigentliche Bezug zu konkret gemessenen bzw. ermittelten Meß- und Stoffdaten über das Konzept *Material* realisiert wird.

2.3. Migrationsprozesse

Migrationsprozesse charakterisieren Stoffausbreitungen im Boden und im Grundwasser. Sie werden bestimmt durch die Bewegung der strömenden fluiden Phasen im Untergrund und durch Speicher-, Umwandlungs- und Austauschprozesse, denen die transportierten Migranten unterworfen sind.

Strömungs- und Transportprozesse

Die quantitative Beschreibung der unterschiedlichen Strömungs- und Transportvorgänge wird im allgemeinen durch Systeme gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen realisiert. So werden z.B. Strömungsprozesse auf der Grundlage des *Darcy-Gesetzes* und des Massenerhaltungssatzes beschrieben. Die wichtigsten den Stofftransport im Untergrund bewirkenden Vorgänge sind Konvektion, Dispersion und Diffusion.

Für die Lösung der entsprechenden Differentialgleichungssysteme mit Hilfe numerischer Näherungsverfahren existieren eine ganze Reihe effektiver Computerprogramme. Mit dem Programm FEFLOW [WASY93] können auf der Basis der Finite-Elemente-Methode Strömungsprozesse und einfache stationäre Transportprozesse simuliert werden.

Eine Unterstützung der Modellierung mit FEFLOW bezieht sich unter anderem auf die Erstellung und Modifikation sachgerechter Eingabedateien durch heuristische und methodische Erfahrungen, die in Form von Fakten und Regeln abgelegt werden. Darüberhinaus soll versucht werden aus den Ergebnisdateien Strategien für die Entwicklung neuer Modelle und Planungsvarianten abzuleiten.

Geochemische Reaktionen

Die Migranten in der Boden- und Grundwasserzone sind vielfältigen chemischen Wechselwirkungen und Umsetzungen unterworfen.

Eine für die mathematische Modellierung nützliche Klassifikation chemischer Reaktionen wurde in [Rubin83] vorgestellt. Danach ist eine Reaktion entweder

- homogen bzw. heterogen und
- schnell und reversibel bzw. langsam und/oder irreversibel.

Bei homogenen Reaktionen befinden sich die Reaktionsteilnehmer innerhalb einer Phase. Heterogene Reaktionen berücksichtigen phasenübergreifende Wechselwirkungen zwischen den Reaktionspartnern.

Die Begriffe "schnell" und "langsam" stellen den Bezug des Zeitmaßstabes der Reaktion auf den Zeitmaßstab der Transportprozesse her. Zur Beschreibung von schnellen und reversiblen Reaktionen finden thermodynamische Gleichgewichtsmodelle Anwendung, deren Ansätze auf dem Massenwirkungsgesetz beruhen. Gleichgewichtsprozesse werden im allgemeinen als System algebraischer Gleichungen dargestellt. Langsame und/oder irreversible, also nicht an die Einstellung von chemischen Gleichgewichten gebundene Reaktionen, müssen über kinetische Ansätze erfaßt werden, beispielsweise mit Hilfe von Umsatzraten oder Halbwertszeiten. Typischerweise werden solche Prozesse durch Differentialgleichungen bezüglich der Zeit beschrieben.

Die traditionellen Transportmodelle umfassen die hydrologisch-physikalischen Prozesse, spiegeln jedoch chemische Wechselwirkungen gar nicht oder nur durch wenige, stark vereinfachte Beziehungen wider. Diese können beispielsweise als einfacher Abbauterm entsprechend einer Nichtgleichgewichtsreaktion 1.Ordnung oder durch einen Retardierungsfaktor direkt in die Transportgleichung eingefügt werden. Wechselwirkungen und Abhängigkeiten zwischen den Migranten untereinander finden dabei keinen Eingang in die Berechnung. Als Vertreter für eine solche Vorgehensweise sei hier das Computerprogramm FEFLOW [WASY93] genannt. Diesen Transportmodellen gegenüber stehen chemische Gleichgewichtsmodelle, mit denen sehr komplexe geochemische Zusammenhänge beschrieben werden können, wobei Transportprozesse nicht berücksichtigt werden. Gleichgewichtsansätze erfordern i.a. folgende Voraussetzungen:

- im betrachteten System herrscht (lokales) chemisches Gleichgewicht, d.h., die Verteilung gelöster Spezies und die Löslichkeit von Feststoffen bzw. Gasen können durch thermodynamische Gleichgewichtsbeziehungen beschrieben werden
- Massenerhalt (die Summe der Konzentrationen aller Spezies eines Ions ist gleich der molaren Gesamtkonzentration, welche i.a. als Meßwert eingegeben wird)
- alle Konstanten, die die Gleichgewichtsbeziehungen charakterisieren, sind bekannt.

WATEQ [Truesdell74], GEOCHEM [Sposito80], PHREEQE [Parkhurst80] und EQ3/6 [Wolery90] sind Beispiele für entsprechende Computerprogramme, wobei sich PHREEQE durch besondere Vielseitigkeit und Flexibilität, vor allem bedingt durch die freie Definierbarkeit von Spezies und Reaktionen, auszeichnet.

Zu einer weiteren Gruppe gehören Modelle, in denen hydrologisch-physikalischer Transport und komplexere geochemische Prozesse gekoppelt werden. Dabei ist die Berücksichtigung von Transportprozessen mit mehr als einer Dimension bisher eher selten. Es gibt jedoch Modellversionen, die einen aufwendigen physikalischen Stofftransport mit weitgehenden geochemischen Modellen koppeln. Beispiele sind HYDROGEOCHEM [Yeh91], der Mischungszellenansatz nach Schulz/Reardon [SchulzR83] oder das Programm CoTAM [HamerS93]. Eine häufige Herangehensweise besteht dabei in einer zeitlichen und räumlichen Diskretisierung (Zerlegung in Zeitschritte und Mischungszellen). Jeweils in einem Zeitschritt erfolgen sequentiell die Simulation des Transports und die Berechnung chemischer Umsetzungen.

2.4. Integration verschiedener Betrachtungsmaßstäbe

Die in den vorigen Abschnitten angegebene Charakterisierung von Strömungs- und Transportprozessen bildet den üblichen Rahmen für den Entwurf hydrogeologischer Modelle. Für den Entwurfsprozeß müssen also Tatsachen und Gesetzmäßigkeiten berücksichtigt werden, die hinsichtlich ihrer Größenordnungen sehr verschieden sind. Im allgemeinen werden folgende Betrachtungsmaßstäbe unterschieden:

- *molekulare Ebene:*
Beschreibung und Berücksichtigung von Molekülen und Atomen und deren Wechselwirkungen
- *mikroskopische Ebene:*
Betrachtungen von Volumenelementen auf der Basis des realen Korngerüsts und der vorhandenen Porenkanäle
- *lokale und globale Ebene:*
Betrachtungen realer Teilbereiche auf der Basis von Bilanzierungen und Mittelbildungen über eine Vielzahl von Volumenelementen.

Zur Integration der unterschiedlichen Zusammenhänge werden neben statistischen Verfahren vor allem Methoden aus der Theorie der Mehrkomponentenkontinua verwendet. Auf mikroskopischer oder lokaler Ebene wird versucht, die einzelnen Anteile einer Mischphase durch äquivalente Kontinua zu ersetzen. Bei der Volumenmittelungstechnik wird von einer disjunkten Zerlegung der Anteile ausgegangen. In [Luckner86] wird diese Vorgehensweise anhand einer vierstufigen Prozedur beschrieben:

- Zunächst wird für jeden Migranten ein Migrationsmodell auf lokaler Ebene erstellt. Ausgehend von den realen Verhältnissen im mikroskopischen Bereich wird für ein *repräsentatives Elementarvolumen* entsprechend den Anteilen an Gesteinspartikeln, Porenkanälen und fluiden Stoffen eine geeignete Einteilung in homogene Bereiche vorgenommen. Anschließend werden alle Prozesse innerhalb der Bereiche und die Wechselwirkungen zwischen diesen Bereichen beschrieben.
- Die Bilanzgleichungen der Migranten werden untereinander verkoppelt.
- Für die Migranten wird eine summarische Prozeßbeschreibung abgeleitet. Als Grundlage dient eine Bilanzgleichung, die neben den Strömungs- und Transportprozessen auch interne Reaktionen, Wechselwirkungen zwischen den Inhaltsstoffen und externe Austauschprozesse berücksichtigt.
- Es wird eine Gesamtprozeßbeschreibung über alle Mischphasen erstellt.

Da diese Verfahrensweise nur eine mögliche Variante zur Integration unterschiedlicher Betrachtungsmaßstäbe repräsentiert, sollte ein System zur Modellierungsunterstützung sehr flexible Möglichkeiten zur Ablaufsteuerung realisieren.

3. Eine Realisierung mit dem Konfigurierungssystem PLAKON

3.1. Struktur und Arbeitsweise von PLAKON

Hydrogeologische Modellierungen basieren traditionell auf der Anwendung von Simulationsmethoden. Für die zusätzliche Nutzung von Erfahrungen, allgemeinen Regeln und heuristischen Informationen gibt es folgende Ansätze:

- ein Simulationssystem wird um eine wissensbasierte Komponente erweitert, so daß Fakten und Regeln verarbeitet werden können (siehe z.B. [Abels93]),
- ein Simulationssystem wird um eine Modelldatenbank ergänzt, so daß Erfahrungen und Ergebnisse früherer Fälle in die Modellierung einfließen können (siehe z.B. [Wagner91] und [Lenz93]),
- die Modellierungsaufgabe wird als Konfigurierungsprozeß aufgefaßt, der durch ein wissensbasiertes System gesteuert wird (siehe z.B. [Strecker91]).

Im Unterschied zur Simulation wird bei der Konfigurierung stets von einer Zielspezifikation ausgegangen, die dann durch den Konfigurierungsprozeß erfüllt werden muß. In naturwissenschaftlichen Anwendungen kommen mitunter unvollständige und vage Informationen zum Einsatz, so daß die Zielstellung auch nur *näherungsweise* erfüllt werden kann. Eine ausführliche Untersuchung von solchen *schwach strukturierten Domänen* befindet sich in [Dörner91], deren Ergebnisse auch Grundlage der hier beschriebenen Konzeption sind.

Die Charakterisierung wissensbasierter Systeme hat in den letzten Jahren eine starke Entwicklung erfahren. Während anfangs nur die Anwendung deklarativer und regelbasierter Programmiermethoden typisch war, sind in letzter Zeit häufig Forderungen nach einer stärkeren Strukturierung der Wissensbasen und nach einer flexibleren Steuerung gestellt worden. Weiterhin sollte dem Nutzer eine breite Palette von Interaktionsmöglichkeiten angeboten werden, so daß auch die Arbeit von Experten mit solchen Systemen besser unterstützt wird. PLAKON ist ein Expertensystemkern für Planungs- und Konfigurierungsaufgaben in technischen Domänen, das diesen Forderungen weitgehend gerecht wird. Das Programm ist in die drei Teile *Wissensakquisition*, *Aufgaben-Definition* und *Konfigurieren* gegliedert. PLAKON selbst ist in der Programmiersprache LISP und dem objektorientierten Zusatz FRESKO realisiert.

Wissensakquisition

Dieser Teil stellt eine Reihe von Editoren zur Verfügung. Im Mittelpunkt steht der Aufbau einer Begriffshierarchie durch die Definition geeigneter Konzepte. Jedes Konzept ist durch eine Menge von Slots charakterisiert. Die einzelnen Konzepte sind in einer Spezialisierungshierarchie (*ist_ein - Relation*) angeordnet. Jedes Konzept ist ein Spezialfall seines übergeordneten Konzeptes und erbt dessen Slots. Daneben ist der Aufbau einer kompositionellen Hierarchie (*hat_Teile - Relation*) notwendig. Den Slots werden bei PLAKON Facetten zugeordnet, das sind Untereigenschaften wie Wert, Standardbelegung, Bearbeitungsverfahren und Berechnungsfunktion. Die Facetten *Bearbeitungsverfahren* und *Berechnungsfunktion* beziehen sich auf Slotwertbelegungen während des Konfigurationsprozesses.

Die Relationen *hat_Teile* und *Teil_von* sind zueinander inverse Relationen, wobei vom Programm überprüft wird, ob die Relationen stets paarweise auftreten. Sie stellen wiederum Slots dar, deren Werte typisierte Listen

sind. Typisierte Listen sind FRESKO-Datenstrukturen, die sich auf eine Klassenerweiterung der in LISP verwendeten Listen gründen. Dieses Prinzip erlaubt z.B. flexible Wertangaben für Slots. So bedeutet etwa der Eintrag

`(EINE MISCHPHASE) (HAT_TEILE #(#[(EIN MIGRANT) 0 99])),`

daß das Konzept *Mischphase* über die Relation *hat_Teile* mit einer Menge von bis zu 99 *Migranten* verbunden ist. Die im Laufe des Konfigurationsprozesses konstruierten Instanzen der *Mischphase* und der in ihr enthaltenen *Migranten* müssen diese Vorgaben erfüllen.

Die Belegung der oben genannten Facette *Bearbeitungsverfahren* entscheidet über die Art der Slotwertbehandlung eines Konzeptes. PLAKON bietet hier die Implementierung einer auf den Slotwert bezogenen Berechnungsfunktion an. Der Name dieser Funktion wird unter der Facette *Berechnungsfunktion*, die Funktion selbst als LISP-Ausdruck in einer der Domäne zugeordneten Funktionsdatei abgelegt. Wenn sich im Laufe des Konfigurationsprozesses die Notwendigkeit der Belegung bzw. Neubelegung eines Slots einer Instanz ergibt, wird die Berechnungsfunktion geladen und errechnet den Slotwert. PLAKON bietet die Möglichkeit des Editierens von Berechnungsfunktionen mit Hilfe der grafischen Benutzeroberfläche; in einem Fenster können Funktionen kompiliert und unter Angabe von Parametern getestet werden.

Weiterhin bietet die Wissensakquisitionskomponente Editoren zum Verwalten von Nebenbedingungen, Relationen, Strategien, Regeln und Maßeinheiten an.

Definition der Aufgabenstellung

Zunächst muß ein Zielobjekt für die Konfigurierung festgelegt werden. Das Zielobjekt ist eine Instanz eines beliebigen Konzeptes aus der Begriffshierarchie und kann nun weiter zerlegt werden:

Konfigurieren

Mit einer derartig spezifizierten Aufgabenstellung kann nun der Konfigurierungsprozeß gestartet werden. PLAKON ermöglicht die Formulierung eigener Strategien zur Konfigurationsreihenfolge. Auf diese Weise kann man z.B. festlegen, ob zuerst *zerlegt* oder *spezialisiert* werden soll, ob bestimmte Instanzen bevorzugt werden sollen und ob *Berechnungsfunktionen* vor *Nutzeranfragen* ausgeführt werden sollen.

Die *Agenda* enthält alle noch möglichen Konstruktionsschritte (Zerlegen, Spezialisieren, Parametrieren oder Integrieren) für diejenigen Instanzen, die noch spezifiziert werden müssen. Die Konfigurierung ist beendet, wenn keine Konstruktionsschritte mehr auszuführen sind oder die Konfigurierungsphase vom Nutzer abgebrochen wird.

3.2. Charakterisierung eines Mehrphasensystems

Im nachfolgenden Beispiel wird ein Mehrphasensystem „Untergrund“ mit drei Mischphasen, einer Fest-, einer Flüssig- und einer Gasphase vorgestellt. Die Festphase sei ein halitisches Sediment, in dem als Migrant Ca^{2+} -Ionen betrachtet werden. In der Flüssig- und Gasphase, Dispergentien sind jeweils Wasser und Luft, wird als ökologisch relevanter Migrant Benzen betrachtet. Als zweiter in der Gasphase auftretender Migrant wird hier Tetrachlorkohlenstoff (CCl_4) aufgeführt.

Die folgende Grafik (Abb. 3.1) veranschaulicht die mögliche Struktur eines Mehrphasensystems; die räumliche Konstruktion entspricht der Sichtweise auf die Begriffshierarchie bezüglich des Slots *hat_Teile*.

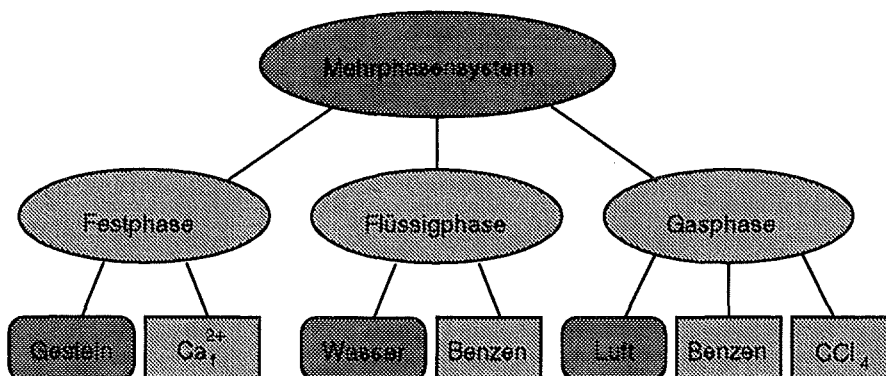


Abb. 3.1: Übersicht zur Zerlegung des Mehrphasensystems „Untergrund“

Die folgende Tabelle enthält einige Migranteneigenschaften, die für eine weitere Behandlung des instantiierten Migrants wesentlich sind. Die vollständige Belegung dieser Eigenschaften (Slots) gilt als Voraussetzung für die Konsistenz einer Konstruktion.

Migrant	Material	Mischphase	Stoffmengen-konzentration	Molare Masse
1	Ca ²⁺ _f	Festphase	42.5 mmol/m ³	40 g/mol
2	Benzen	Flüssigphase	0.7813 mmol/m ³	78 g/mol
3	Benzen	Gasphase	0.4615 mmol/m ³	78 g/mol
4	CCl ₄	Gasphase	39.36 mmol/m ³	154 g/mol

Abb. 3.2: Tabelle der Migranteneigenschaften (Beispielwerte aus: [SilverP93] (CHEM-BANK) und [Voigt89])

3.3. Steuerung der Konfigurierung eines Mehrphasensystems

Konstruktionsschritt und Teilkonstruktion

Das kleinste Element einer Konfigurierung ist der Konstruktionsschritt. Jeder Konstruktionsschritt ist ein Schritt in Richtung der beendeten Konfigurierung einer Aufgabenstellung. In PLAKON werden vier Typen von Konstruktionsschritten verwendet:

- Zerlegen* Erzeugung von Instanzen bezüglich der *hat_Teile*-Relation
- Spezialisieren* Verfeinerung von Instanzen innerhalb der Spezialisierungshierarchie
- Parametrieren* Belegung von Slotwerten einer Instanz unter Berücksichtigung von Randbedingungen (Vorgabewerte und Constraints)
- Integrieren* Zusammenfügen von Komponenten; Konstruktion ausgehend von einer Instanz, die die Vervollständigung von anderen Instanzen bezüglich der *hat_Teile*-Relation verlangt

Jeder vollzogene Konstruktionsschritt erzeugt eine Teilkonstruktion. Der gesamte Konfigurierungsvorgang beginnt mit einer initialen Teilkonstruktion, die lediglich aus dem instantiierten, zu konfigurierenden Konzept besteht. Eine Teilkonstruktion entspricht einem Zwischenzustand während der Konfigurierung.

Abb. 3.3 zeigt den Konstruktionsschritt *Zerlege das Mehrphasensystem-1* im PLAKON-eigenen Editor, während Abb. 3.4 die durch diesen Konstruktionsschritt erzeugte Teilkonstruktion darstellt.

Benutzer Eingabe

Anweisung: Auswahl von Elementen/Teilen

KS-Typ: ZERLEGE
Instanz: MEHRPHASENSYSTEM-1
Slot: HAS-PARTS

AZW: Bisherige Objekte:
FLUESSIGPHASE-1 GASPHERE-1

Wert:

<Komplett>
<Ende>
<Minimal Konstruktion>
FESTPHASE [0 5]
FLUESSIGPHASE [0 4]
GASPHERE [0 4]

Zurueckstellen

Okay
Hilfe
Lokale-Breitensuche
Nicht-Terminaler-Wert
Instanz

Abb. 3.3: Zerlegung eines Mehrphasensystems

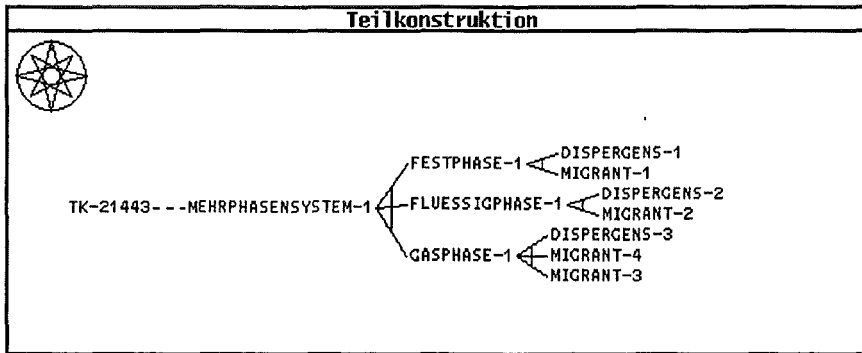


Abb. 3.4: Beispiel für PLAKON Teilkonstruktion eines Mehrphasensystems

Es sei hier noch ein Beispiel zur Parametrierung von Instanzen aufgeführt. Die in Abb. 3.2 vorgestellte Tabelle der Migranteneigenschaften enthält Daten, die während des Konfigurierungsprozesses in die entsprechenden Slots der Instanz *Migrant* eingetragen werden. Als Belegung von Slots sind Zahlen, dimensionierte Zahlen (d.h. Zahlen, denen eine Dimension zugeordnet ist; PLAKON unterstützt das Rechnen mit Dimensionen), Mengen und Intervalle von Zahlen, Zeichenketten sowie Konzepte selbst zugelassen. So besitzt zum Beispiel das Konzept *Migrant* einen Slot *Stoffmengenkonzentration*, dieser muß durch eine mit der Einheit $[\text{mol}/\text{m}^3]$ dimensionierte Zahl belegt werden. Der Slot *Material* wiederum wird durch eine Instanz belegt, die per Vorgabe eine *Materialkomponente* oder ein feineres Konzept darstellt. Es ist für konkrete Anwendungen vorgesehen, an dieser Stelle eine Anbindung an Stoffdatenbanken zu schaffen, so daß die Belegung von sich auf Stoffdaten beziehenden Slots während der Konfigurierung mit Hilfe solcher Datenbanken automatisiert werden kann.

Eine solche automatisierte Slotwertbelegung erfolgt über eine Berechnungsfunktion. Die Verwendung einer Berechnungsfunktion ist eines von verschiedenen sogenannten Bearbeitungsverfahren, die die Verfahrensweise zur Belegung eines Slots kennzeichnen. Andere gebräuchliche Verfahren sind etwa *Default* (Slotwert wird nach einer Standard-Vorgabe belegt) sowie *Nutzer-Fragen* (die Belegung des Slotwertes wird vom Nutzer gefordert; hierzu werden Editoren und Hilfen zur Verfügung gestellt).

Ein Beispiel zur Parametrisierung unter Anwendung des Bearbeitungsverfahrens *Nutzer-Fragen* für den Slot *Stoffmengenkonzentration* eines Migrants wird in Abb. 3.5 vorgestellt. PLAKON stellt hierfür den Editor „Benutzereingabe“ zur Verfügung.

Abb. 3.5: Parametrierung der Stoffmengenkonzentration eines Migrants

Strategien

Die Konfigurierung einer Aufgabe wird vom sogenannten Kontrollwissen gesteuert. Regeln und Constraints wirken direkt auf das Geschehen innerhalb des Konstruktionsschrittes ein, wogegen Strategien die Reihenfolge und Auswahl von Konstruktionsschritten festlegen. Eine Strategie wird innerhalb der Konfigurierung solange angewendet, bis alle die von ihr zugelassenen Konstruktionsschritte abgearbeitet sind. Der Ablauf vom Beginn der Wirkung einer Strategie bis zur Beendigung des letzten von dieser Strategie zugelassenen Konstruktionsschrittes wird als Phase bezeichnet. So kann eine Konfigurierung aus nur einer Phase bestehen (wenn nur eine mögliche Strategie zur Anwendung kommt, z.B. die vom System bereitgestellte Standard-Strategie, die sämtliche Konstruktionsschritte in zufälliger Reihenfolge zuläßt) oder aus mehreren (es werden mehrere Strategien angeboten, die auch zur Anwendung kommen). Nach Ablauf einer Phase entscheiden Kontrollregeln, welche

Strategie als nächste verwendet wird. Strategieabbruchregeln bestimmen den Abbruch einer Strategie unter bestimmten Voraussetzungen. Außerdem ist jeder Strategie eine Priorität, ein Konstruktionsschritt-Fokus sowie eine Menge von Auswahlkriterien zugeordnet. Auf diesem Wege werden die Typen der in der Strategie zugelassenen Konstruktionsschritte und deren Reihenfolge festgelegt. Strategien können während der Konfigurierung interaktiv ausgewählt werden, d.h., der Nutzer kann die Aufgabe der Kontrollregeln in geeigneten Abschnitten der Konstruktion selbst übernehmen.

In die Strategien fließt Expertenwissen insofern ein, als ihre Wirkung sich direkt auf die Struktur des Konfigurierungsablaufes bezieht. Im folgenden Beispiel wird vermöge der Prioritätensetzung für die Strategien 1, 2 und 3 bewirkt, daß das Mehrphasensystem in Mischphasen zerlegt wird, bevor die in diesen enthaltenen Migranten und Dispergentien näher spezifiziert, d.h. parametrisiert werden. Abb. 3.6 zeigt eine Übersicht der 3 in einem Beispiel für die Konfigurierung eines Mehrphasensystems „Untergrund“ verwendeten Strategien mit ihren Eigenschaften:

Strategie	Aktionen	Zugelassene Konstruktionsschritte	Priorität
1	Zerlegung des Mehrphasensystems in Mischphasen sowie der Mischphasen in Dispergens und Migranten	Zerlegung	20
2	Parametrierung der Volumenkonzentrationen und Abstandsgeschwindigkeiten der Mischphasen sowie Stoffmengenkonzentrationen der Migranten, außerdem Festlegung des Materials von Dispergentien und Migranten, Berechnung der lokalen Konvektionsstoffstromdichten	Parametrierung und Spezialisierung	15
3	Berechnung der globalen Konvektionsstoffstromdichten	Parametrierung	10

Abb. 3.6: Strategien und ihre Eigenschaften im Beispiel für Mehrphasensystem „Untergrund“

Die momentan innerhalb einer Phase noch ausstehenden Konstruktionsschritte werden in der Reihenfolge ihrer erwarteten Ausführung in der Agenda abgelegt. Jedem Konstruktionsschritt ist somit eine Agenda zugeordnet; Konstruktionsschritte können außerdem interaktiv aus der Agenda ausgewählt werden. Ein Beispiel für eine solche Agenda zeigt Abb. 3.7. Jede Zeile in der Agenda entspricht einem Konstruktionsschritt, links in der Zeile steht die zu bearbeitende Instanz, es folgen (evtl.) der zu behandelnde Slot und der Typ des Konstruktionsschrittes. Die folgende Agenda sagt aus, daß zuerst die Volumenkonzentration der Instanz *Gasphase-1* belegt wird, dann ihre Abstandsgeschwindigkeit, dann nacheinander die Stoffmengenkonzentrationen, lokalen Konvektionsstoffstromdichten und Materialien ihrer Migranten bzw. Dispergentien.

Agenda	
GASPHASE-1	Volumenkonzentration: Param.
GASPHASE-1	Abstandsgeschwindigkeit: Param.
MIGRANT-1	Stoffmengenkonzentration: Param.
MIGRANT-2	Stoffmengenkonzentration: Param.
MIGRANT-1	Lok-Konvstoffstromdichte: Param.
MIGRANT-2	Lok-Konvstoffstromdichte: Param.
DISPERGENS-1	Material: Param.
MIGRANT-1	Material: Param.
MIGRANT-2	Material: Param.

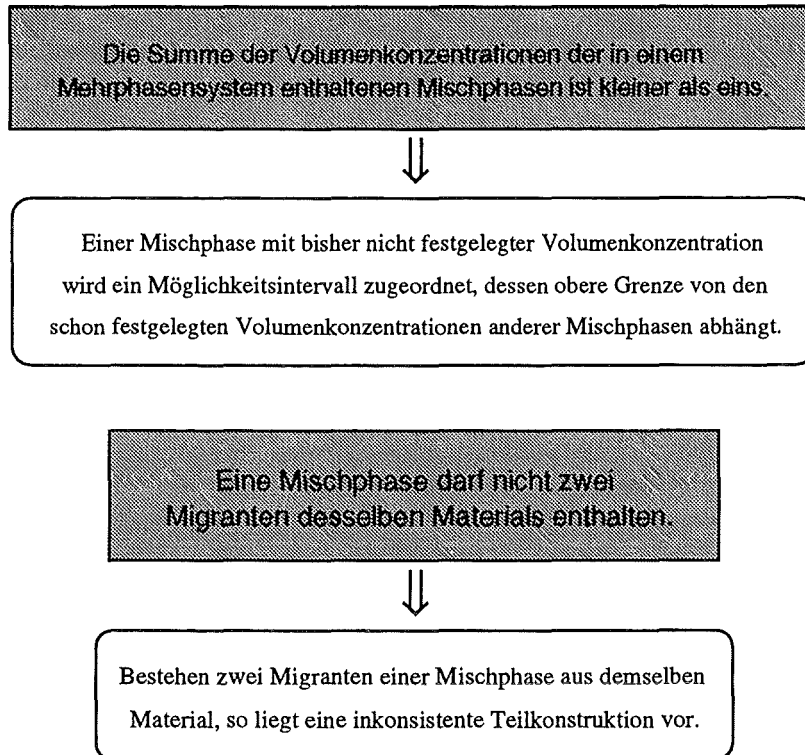
Abb. 3.7: Agenda für die Parametrierung einer Mischphase

Die Bearbeitung des Konstruktionsschrittes wird von PLAKON über ein Ausgabe-Fenster unterstützt. Der Nutzer erhält hier Informationen über die aktuelle Strategie, den aktuell ausgeführten Konstruktionsschritt sowie Hilfetexte zum anstehenden Konstruktionsschritt.

Constraints

Constraints demonstrieren Abhängigkeiten zwischen Konstruktionsobjekten. Die Voraussetzung für die Konsistenz einer Teilkonstruktion ist das Erfülltsein sämtlicher anwendbarer Constraints. Constraints werden, ähnlich der Vorgehensweise bei Konzepten, instantiiert und zwar jedes Mal dann, wenn mindestens eines der im Constraint beteiligten Objekte verändert wird. In diesem Sinne wird zwischen konzeptuellen (den der stati-

schen Wissensbasis angehörenden) und instantiierten Constraints unterschieden. Constraints bilden das sogenannte Constraintnetz, dieses kann optional auch erst dann neu generiert werden, wenn dies vom Nutzer erwünscht ist oder eine gewisse Anzahl von Konstruktionsschritten seit der letzten Generierung ausgeführt wurde. Constraints können die Existenz bestimmter Instanzen in gewissen Phasen der Konstruktion fordern oder verbieten. Für spätere Realisierungen sind auch relaxierte Constraints vorgesehen, das sind mit Prioritäten versehene Abhängigkeiten. Die Überprüfung der Konsistenz einer Teilkonstruktion wird dann entsprechend dieser Prioritäten „weich“ gestaltet. Es folgen zwei Beispiele für Constraints innerhalb der Konfigurierung eines Mehrphasensystems:



Die graphische Darstellung veranschaulicht zwei innerhalb der Wissensbasis für das Mehrphasensystem „Untergrund“ verwirklichte Constraints.

Das obere Constraint garantiert, sofern es für den gesamten Prozeß der Konfigurierung Gültigkeit hat, daß die Summe der Volumenkonzentrationen aller Mischphasen eines Mehrphasensystems den Wert eins nicht überschreitet. Dieses Constraint beeinflußt den Konfigurierungsablauf insofern direkt, als die Grenzen des Möglichkeitsintervalls für eine aktuell zu belegende Volumenkonzentration von der Größe der bisher schon festgelegten Volumenkonzentration anderer Mischphasen abhängen.

Das zweite, unten noch einmal abgebildete Constraint hat indirekten Einfluß auf die Konfigurierung. Seine Gültigkeit wird jeweils dann überprüft, wenn die Neubelegung des Materials eines Migranten erfolgt (soweit dies per Strategie nicht anders festgelegt ist). Ungültigkeit des instantiierten Constraints hat einen Konflikt zur Folge. Dieser Konflikt muß aufgelöst werden, bevor die Konfigurierung fortgesetzt werden kann. Das geschieht, indem der Stand der Konfigurierung auf einen früheren, konsistenten Punkt des Prozesses zurückgesetzt wird. Diese Vorgehensweise wird Backtracking genannt. Man unterscheidet zwischen chronologischem Backtracking (setze auf letzten oder noch früheren konsistenten Punkt), intelligentem Backtracking (mehrere Konstruktionsschritte können gleichzeitig zurückgenommen und Vorschläge zur Durchführung der Schritte vorgegeben werden) und intelligentem Backtracking mit Übernahme vom Konflikt nicht betroffener Entscheidungen.

Zum Constraint sind unten das PLAKON-Fenster der Konfliktbeschreibung eines möglichen Konflikts (Abb. 3.8) und das sogenannte Elaborationsnetz (Abb. 3.9) abgebildet. Wesentlicher Teil der Konfliktbeschreibung ist die Nennung des den Konflikt verursachenden Constraints. Das Elaborationsnetz verdeutlicht die Struktur der bisher durchlaufenen Teilkonstruktionen. Eine lineare Struktur von Teilkonstruktionen bedeutet einen konfliktlosen Verlauf der Konfigurierung, während Verzweigungen den Neubeginn an der Teilkonstruktion widerspiegeln, an der der neue Aufsetzpunkt gewählt wurde. So führte im Beispiel der Konstruktionsschritt KS-20950 zu einem Konflikt, es wurde zum Schritt KS-20942 zurückgesetzt, in dessen Folge es beim Schritt KS-20979 wieder zum Konflikt kam; KS-20998 ist der zur endgültigen konsistenten Teilkonstruktion führende Konstruktionsschritt.

Konfliktbeschreibung CD-21263	
TK:	TK-21263
Konfliktart:	:CONSTRAINT
Constraints:	((#<Conceptual-Constraint MIGRANT-EINDEUTIG>
Objekt/Slot:	((#<Dyn-Instance MIGRANT-1> MATERIAL) (#<Dyn-Instance MIGRANT-2> MATERIAL))
Bearbeitungsschritt:	:C-PROPAGATION
Konfliktursache:	:PROP-INCONS

Abb. 3.8: Anzeige eines durch das Constraint „Migrant-eindeutig“ erzeugten Konflikts

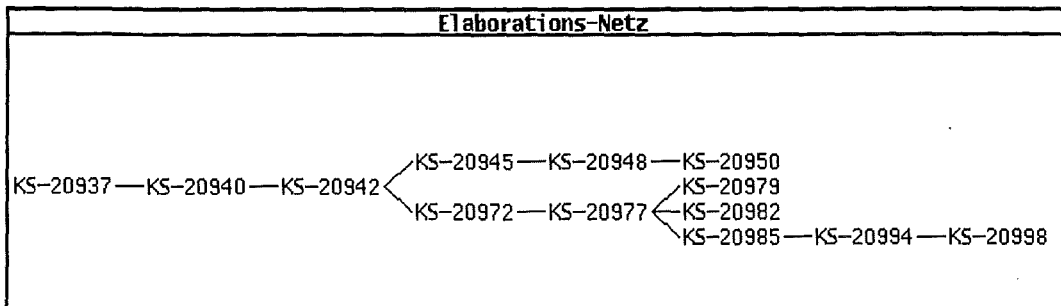


Abb. 3.9: Struktur der Teilkonstruktionen (Elaborationsnetz)

Regeln

Constraints repräsentieren ungerichtete Relationen zwischen (gleichberechtigten) Variablen. Die Variablen (in den Constraint-Beispielen *Volumenkonzentration* und *Material*) werden durch das Constraintnetz verwaltet und mit Werten belegt (instanziiert). Demgegenüber stellen Regeln gerichtete Beziehungen dar, die in analoger Weise zu Berechnungsformeln ausgewertet werden. Die Behandlung von Variablen geschieht ähnlich wie bei Constraints. Als Beispiel sei folgende Regel genannt:

Wenn ein Teilgebiet als Trinkwasserschutzgebiet ausgewiesen ist,

und Schwermetallverbindungen nachgewiesen werden

dann besteht Sanierungsbedarf.

Die Eigenschaft *Trinkwasserschutzgebiet* eines Teilbereiches wird als Wert des Slots *Restriktion* beim Konzept *Geo-Modell* aufgenommen. Falls dann als *Materialkomponente* eine Instanz von *Schwermetallverbindung* existiert, wird *Sanierungsbedarf* als Regel-Ergebnis in den Slot *Bewertung* des *Geo-Modells* eingetragen. Außer zur Darstellung von Beziehungen zwischen Konzepten werden Regeln in PLAKON zur Ablaufsteuerung, z.B. zur Auswahl und zum Abbruch von Strategien, eingesetzt.

4. Literatur

- [Abels93] S.Abels: Wissensbasierte Generierung neuer Simulationskomponenten. in : Simulationstechnik, 8.Symposium in Berlin, 1993
- [Cunis91] R.Cunis, A.Günter, H.Strecker (Hrsg.): Das PLAKON-Buch. Inf.Fachb. 266, Springer 1991
- [Dörner91] H.Dörner: Modelle für wissensbasiertes Konfigurieren, MLU Halle, Habilitationsschrift 1991
- [Günter93] A.Günter: Architekturkonzept für KONWERK, Univ. Hamburg, FB Informatik, 1993 [unveröff.]
- [HamerS93] K.Hamer, R.Sieger: Anwendung des Modells CoTAM zur Simulation von Stofftransport und geochemischen Reaktionen. Verlag Ernst & Sohn 1993
- [HyMo92] DVWK (Hrsg): Anwendung hydrogeochemischer Modelle. Parey 1992

- [Lenz93] R.Lenz, Ch.Herderich: Das Umweltinformationssystem UFIS - Ein integriertes Informationssystem über ökologische Vorhaben, Modelle und Daten. 1. Workshop Integration von Umweltdaten, Dagstuhl 1993
- [Luckner86] L.Luckner, W.M.Schestakow: Migrationsprozesse im Boden- und Grundwasserbereich. Verlag f. Grundstoffindustrie 1986
- [Parkhurst80] D.L.Parkhurst, D.C.Thorstenson, L.N.Plummer: PHREEQE - a computer program for geochemical calculations. U.S. Geol. Survey Water Resour. Invest. Rept. 210, 1980, S. 80-96
- [Rubin83] J.Rubin: Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions
Water Resources Research 19(5), 1983, S. 1213-1252
- [SchulzR83] H.D.Schulz, E.J.Reardon: A combined Mixing Cell / Analytical Model to Describe Two-Dimensional Reactive Solute Transport for Unidirectional Groundwater Flow
Water Resour. Res. 19(2), 1983, 493-502
- [SilverP93] CHEM-BANK CD-ROM
Silver Platter Information Inc. (Hrsg.), Norwood 1993
- [Sposito80] G.Sposito, S.V.Mattigod: GEOCHEM: A computer program for the calculation of chemical equilibria in soil solutions and other natural systems. U.C.R., Dept.Soil Environ. Sci.: 92; University of California, Riverside, CA. 1980
- [Strecker91] H.Strecker: Simulationsgestützte Systemkonfigurierung am Beispiel automatischer Röntgenprüfsysteme. Univ. Hamburg, Diss. 1991
- [Truesdell74] A.H.Truesdell, B.F.Jones: WATEQ, a computer program for calculating chemical equilibria of natural waters. J.Res.U.S.Geol.Surv. 2, 1974, S. 233-248
- [Voigt89] H.J.Voigt: Hydrogeochemie: eine Einführung in die Beschaffenheitsentwicklung des Grundwassers. Deutscher Verlag f. Grundstoffindustrie 1989
- [Wagner91] F.Wagner, J.Warschat: ODabAS Objektorientierte Datenbank zur Auswertung von Simulationsdaten. 4. Workshop Simulation und Künstliche Intelligenz, Berlin 1991
- [WASY93] FEFLOW-Simulationssystem für Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozesse
WASY Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung, 1993
- [Wolery90] T.J.Wolery et al.: Current Status of the EQ3/6 Software Package for Geochemical Modeling in : Chemical Modeling of Aqueous Systems II. ACS Symp. Series No.416, 1990, S.104-116
- [Yeh91] G.T.Yeh, V.S.Tripathi: A Model for Simulating Transport of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration. Water Resour.Res. 27(12),1991, S. 3075-3094

Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse Notwendigkeit - Informationsbedarf - Probleme

Joachim Benz *

1 Notwendigkeit

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.

Dieses Wissen kann aber nur dann genutzt werden, wenn es vollständig dokumentiert und mit vertretbarem Aufwand verfügbar ist. Darüber hinaus ist es wünschenswert, daß unterschiedliche mathematische Beschreibungen ein und desselben Prozesses einem Vergleich zugänglich sind. 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 mathematischen 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. [1] Darüberhinaus, wie später noch ersichtlich ist, würde der notwendige Umfang einer vollständigen Dokumentation auch weit über den üblichen Rahmen wissenschaftlicher Veröffentlichungen in Zeitschriften hinausgehen. Dies bedeutet, daß das oben angesprochene Wissen in heterogener Weise, verteilt und zum Teil nur unvollständig vorliegt. Die

*Universität - Gesamthochschule Kassel, FB Landwirtschaft, Internationale Agrarentwicklung und Ökologische Umweltsicherung, Abt. Futterbau und Grünlandökologie, Nordbahnhofstr. 1a, 37213 Witzenhausen, e-mail: benz@wiz.uni-kassel.de

Folge dieser eingeschränkten Verfügbarkeit ist, daß die Kenntnisse z. Zt. nicht optimal und umfassend genutzt werden können.

Zunächst kann ganz allgemein gefordert werden, daß im wissenschaftlichen Bereich die freie Verfügbarkeit des Wissens gewährleistet sein sollte. Nur falls dies der Fall ist, sind die Voraussetzungen für ein effektives Arbeiten gegeben. In diesem Zusammenhang ist es vor allem wichtig, den aktuellen Wissenstand und Forschungsbedarf mit vertretbarem Aufwand ermitteln zu können.

Für die Auswahl von Modellen oder Modellteilen für den praktischen Einsatz sowie als Grundlage für Neu- und Weiterentwicklungen ist es notwendig, sich schnell und umfassend einen Überblick verschaffen zu können, welche Modelle für den aktuellen Anwendungsbereich geeignet sein könnten. Kommen bei einer derartigen Auswahl mehrere Alternativen in Betracht, so muß die Vergleichbarkeit gegeben sein.

Die Güte eines Modells und dessen zulässiger Anwendungsbereich können letztlich nur durch den Vergleich zwischen Simulation und beobachtetem Systemverhalten belegt werden. Je größer die Zahl und das Spektrum derartiger Anwendungen ist, desto fundierter sind diesbezügliche Aussagen.

Neben diesen eher allgemeinen bzw. praktischen Aspekten kann aber auch ein *wissenschaftstheoretischer* bzw. grundsätzlicher Aspekt als Argument für die Notwendigkeit einer leichtverfügbaren und vollständigen Dokumentation von Modellen angeführt werden. Werden Modelle als Hypothesen bezüglich der Gesetzmäßigkeiten des Systemverhaltens von Ökosystemen bzw. Ökosystemausschnitten verstanden, so muß die Möglichkeit der Falsifikation dieser Hypothesen gegeben sein. Selten kann ein Modell in seiner Gesamtheit verworfen werden, wesentlich häufiger ist es der Fall, daß nur Teilbereiche verworfen, modifiziert oder weiterentwickelt werden müssen. Außerdem kann die Falsifikation nur unter Bezug auf eine Gültigkeitsumgebung durchgeführt werden. Dies ist aber nur dann der Fall, wenn die Modelle inklusive ihrer Gültigkeitsumgebung zugänglich und analysierbar sind.

Für die schnelle und umfassende Recherche nach aktuellen Informationen bzw. Daten für anstehende Fragestellungen und Arbeiten hat der Einsatz der Recherche in Datenbanken inzwischen große Bedeutung. So ist z.B. im Bereich der Literatursuche die Forderung nach einer optimalen Verfügbarkeit der Informationen inzwischen weitgehend befriedigend. Wünschenswert wäre es, im Bereich der mathematischen Modellierung ökologischer Systeme eine vergleichbare Situation zu erreichen. Allerdings können die Konzepte aus dem Bereich der Literaturrecherche nur bedingt übertragen werden, da der Gegenstand der Dokumentation grundsätzlich andere Anforderungen stellt.

Ziel des Forschungsvorhabens ECOBAS ist es, die Verfügbarkeit dieses Wissens zu verbessern. Es wird eine Datenbank aufgebaut, in der Dokumentationen mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse gespeichert und abrufbar sind. Insbesondere wird auch dem Aspekt Rechnung getragen, dem späteren Benutzer bei der Auswahl für ihn geeigneter Beschreibungen möglichst weitreichend Unterstützung zu bieten. Im einzelnen werden folgende Ziele verfolgt:

- leichte Verfügbarkeit der Information
- Vergleichbarkeit durch Vereinheitlichung der Darstellung
- vollständige und eindeutige Dokumentation der mathematischen Formulierung.

2 Daten- und Informationsbedarf

Um dem Ziel der vollständigen und eindeutigen Dokumentation gerecht zu werden, muß zunächst der diebezügliche Daten- und Informationsbedarf ermittelt werden. Dies soll im folgenden kurz skizziert werden.

Bei der Abstraktion eines realen Ökosystems bzw. Ökosystemausschnitts auf die Ebene der mathematischen Darstellung kann man sich zunächst vorstellen, daß das entsprechende Ökosystem bzw. der zu untersuchende Ökosystemausschnitt aus einer sehr großen Zahl *atomarer* Prozesse¹ besteht, die untereinander in Wechselwirkungen stehen. Dies ist schematisch in Abbildung 1 dargestellt. Bei der Beschreibung eines Prozesses eines realen Sy-

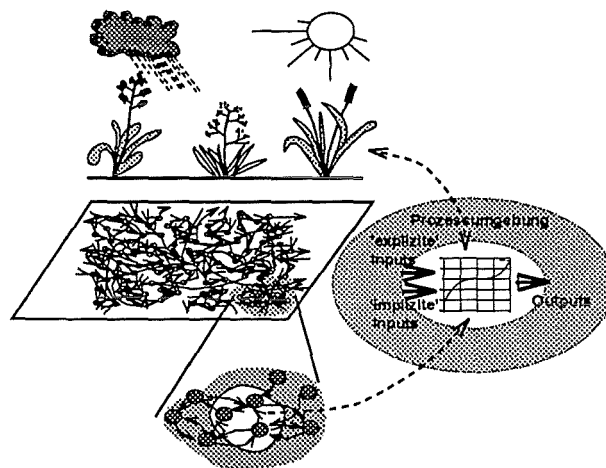


Abbildung 1: Schematische Darstellung der Abstraktion realer Prozesse auf die Ebene der mathematischen Beschreibung

stems werden nun mehrere dieser *atomaren* Prozesse, die sich einer funktionalen oder phänologischen Einheit dieses Systems zuordnen lassen, zusammengefaßt und von deren Umgebung abgegrenzt. Es können dann die, das Teilsystem beeinflussenden Inputgrößen und die vom Teilsystem nach außen (auf die Umgebung) wirkenden Outputgrößen festgelegt werden. Die mathematische Beschreibung des Prozesses hat das Ziel, die Eigenschaften des Systemverhaltens, beschrieben anhand der Outputgrößen, in Abhängigkeit der Inputgrößen (und des Anfangszustandes bzw. der Randbedingungen) zu beschreiben (siehe hierzu Abbildung 1).

¹Unterer *atomaren* Prozessen sind hier gedachte kleinste und *unteilbare* Teilprozesse zu verstehen.

Dabei darf aber nicht übersehen werden, daß in der Regel nicht alle Inputgrößen in der mathematischen Beschreibung explizit berücksichtigt werden. Vielmehr existiert vielfach eine mehr oder minder große Anzahl von *präterierten* Inputgrößen, die aber die Systemeigenschaften in seiner Einbettung in eine konkrete Prozessumgebung prägen. Als Beispiel sei hier nur erwähnt, daß sich z.B. zeitinvariante Umgebungsbedingungen in einer mathematischen Beschreibung oft in den Parametern einer Gleichung (bzw. Gleichungssystem) enthalten sind. Neben den expliziten Inputs existieren also auch implizite Inputs.

Daraus läßt sich für eine vollständige Dokumentation ableiten:

1. Für einen ökologischen Prozess existieren ein oder mehrere *Typen von mathematischen Beschreibungen* (Gleichung, Gleichungssystem).
2. Für einen Typ einer mathematischen Beschreibung existieren, in Abhängigkeit von der Einbettung in konkrete Prozessumgebungen, spezifische Ausprägungen dieses Typs (z.B. spezifische Parameterwerte, Gültigkeitsgrenzen). Diese Ausprägungen werden hier als *Realisationen* eines Typs einer mathematischen Beschreibung eines ökologischen Prozesses bezeichnet.
3. Jede Realisation steht im Zusammenhang mit der zugehörigen Einbettung in die konkrete Prozessumgebung. Da davon ausgegangen werden muß, daß die impliziten Inputs nicht im einzelnen beschrieben werden können, ist es notwendig, die Prozessumgebung zu dokumentieren und diese in Bezug zur jeweiligen Realisation zu setzen. Die Beschreibung der Prozessumgebung wird hier als *Gültigkeitsumgebung* bezeichnet.

Es existiert zum Beispiel für die Primärproduktion (B) die Gleichung

$$\frac{dB}{dt} = f(B, T, L, a, b)$$

mit den Eingangsgrößen Temperatur (T) und Strahlung (L) und den beiden Parametern a und b. Bei unterschiedlichen Pflanzenbeständen oder unterschiedlichen Standorten werden a und b unterschiedliche Werte annehmen. Die Gleichung selbst entspricht dem Prozesstyp, die Dokumentation der jeweiligen Parametersätze sowie der Bezug zur Beschreibung der jeweils zugehörigen Umwelt des konkreten Prozesses entspricht der Dokumentation der Realisierungen.

Die oben angesprochene Zusammenfassung von *atomaren* Prozessen ist nicht allgemein vorgegeben, sondern wird von der Fragestellung, vom Abstraktionsgrad des Modells und anderen Aspekten bestimmt (siehe hierzu u.a. [3, 7]). So kann z.B. in einem Fall die Nettprimärproduktion für das, in Abbildung 1 dargestellte Beispiel, jeweils für die Pflanzenarten getrennt als einzelne Prozesse formuliert werden. In einem anderen Fall wird nicht nach Arten differenziert, aber dafür die gesamte Nettprimärproduktion als zwei getrennte Prozesse (Bruttprimärproduktion und Respiration) beschrieben. Jedem Knoten in diesem Graphen sind ein oder mehrere Typen von mathematischen Beschreibungen zugeordnet. Das bedeutet für eine vollständige

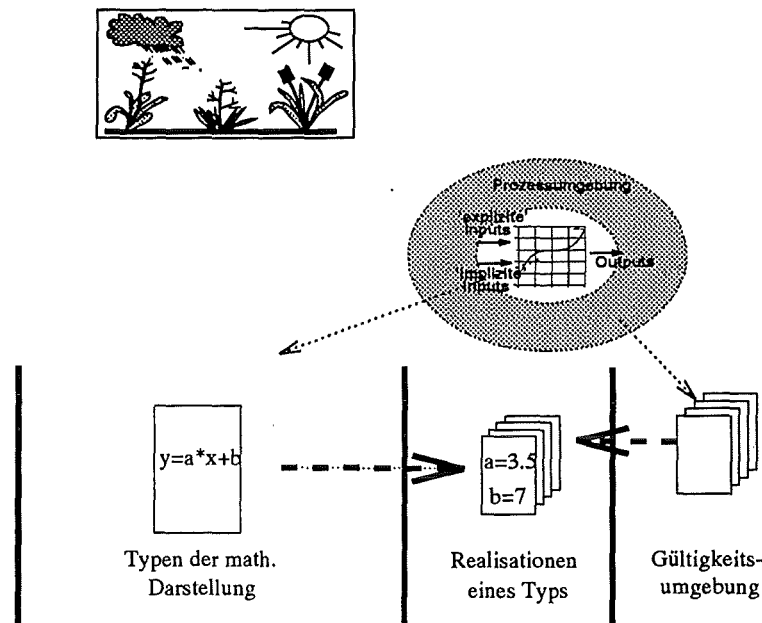


Abbildung 2: Zusammenhang zwischen Typ, Realisierung und Gültigkeitsumgebung

Dokumentation, daß jeder Typ einer mathematischen Beschreibung eines ökologischen Prozesses in diesen Aggregationsgraphen eingeordnet werden muß (siehe hier zu Abbildung 3, rechte Hälfte).

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die *horizontale Vernetzung* ökologischer Prozesse. Bestimmte Ausgangsgrößen eines Prozesses sind Eingangsgrößen anderer Prozesse. Aufgrund dieser Zusammenhänge lassen sich Ökosysteme bzw. Ökosystemausschnitte als *Netze* von Prozessen darstellen². Auch dieser Sachverhalt muß durch eine vollständige Dokumentation durch

1. die Beschreibung der Größen und
2. die Zuordnung der Größen als Input- bzw. Outputgrößen zu den einzelnen Typen der mathematischen Beschreibung

erfaßt werden. Dies ist in Abbildung 3 schematisch ergänzt.

Es ergeben sich folgende wichtige Gruppen des Daten- bzw. Informationsbedarfs, um dem Anspruch einer vollständigen Dokumentation gerecht zu werden.

- Dokumentation des Typs der mathematischen Darstellung
- Dokumentation der Realisation
- Dokumentation der Gültigkeitsumgebung
- Dokumentation der Größen

²Im graphentheoretischen Kontext entsprechen die Prozesse den Knoten, die verbindenden Größen (Aus-/Eingangsgrößen) den Kanten.

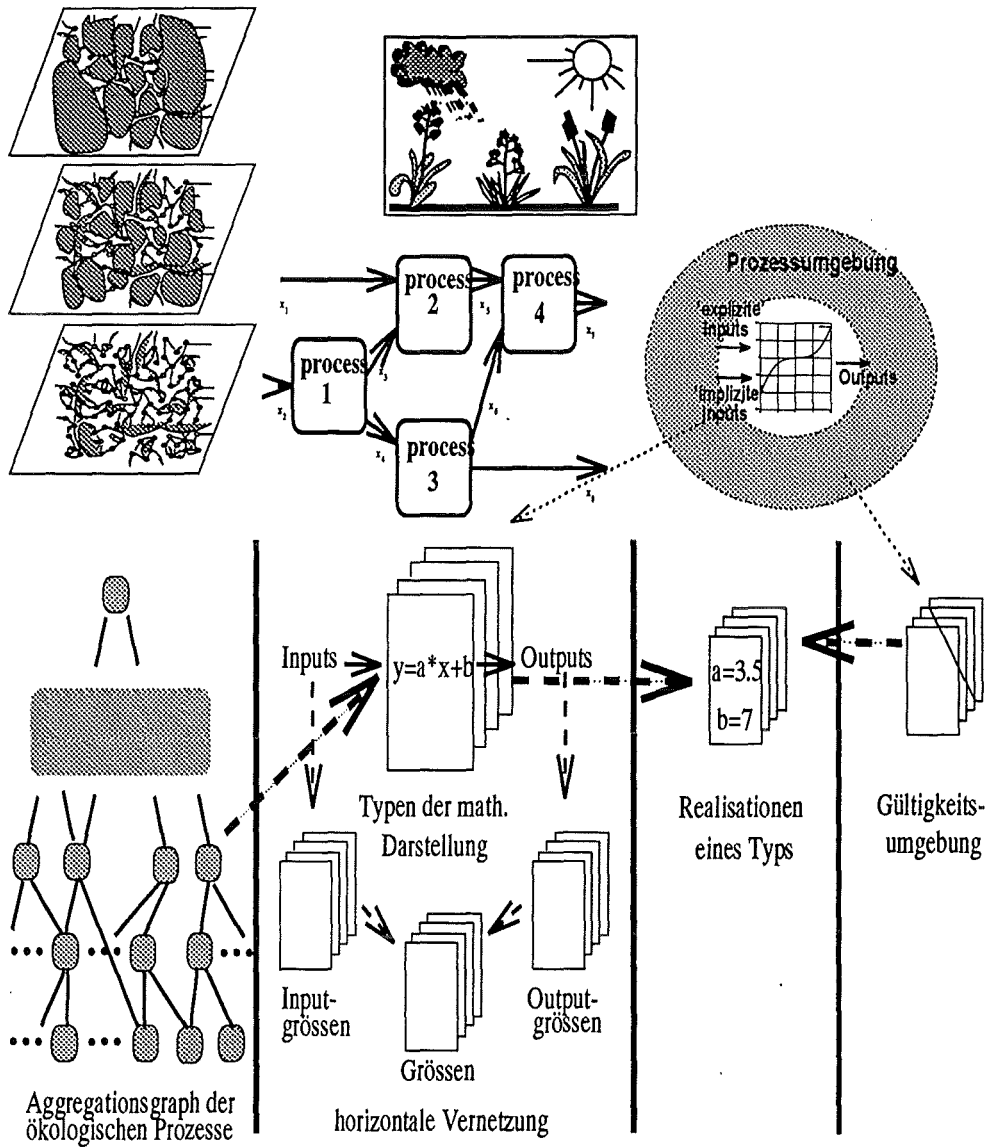


Abbildung 3: Aggregation und *horizontale* Vernetzung ökologischer Prozesse

- Einordnung in den Aggregationsgraphen der ökologischen Prozesse
- Dokumentation der Wechselwirkungen (Inputs, Outputs)

Der Informationsbedarf für diese Hauptgruppen ist detailliert in [1, 2] beschrieben.

3 Probleme

Im Verlauf der Arbeiten der ersten Phase des Projektes ECOBAS ergaben sich eine Reihe von Problemen. Drei dieser Probleme, die eine eher grundsätzliche Bedeutung haben, sollen im folgenden näher dargestellt werden.

3.1 Aufwand und Akzeptanz der Dokumentation

Ein nicht zu unterschätzender Aspekt der Dokumentation ist es, die Akzeptanz dafür bei den Modellentwicklern zu finden bzw. zu erhalten. Es ist langfristig anzustreben, daß die Modellentwickler ihre Modelle selbst dokumentieren. Sie sind für diese Aufgabe prädestiniert, da sie die Modelle am besten kennen.

Wie bereits in Kapitel 2 ersichtlich ist, ist der Umfang der zu dokumentierenden Informationen für eine vollständige Dokumentation erheblich. Je mehr man dem Anspruch einer vollständigen Dokumentation gerecht werden will, desto mehr läuft man Gefahr, die Akzeptanz derjenigen, die die Dokumentation durchführen sollen, zu verlieren. Jede weitere Entwicklung, die ein mehr an Informationsbedarf mit sich bringt, ist deshalb einer Aufwand-/Nutzen-Überlegung zu unterziehen. Letztlich wird man hier einen Kompromiß zwischen vollständiger Dokumentation und akzeptablem Umfang der Dokumentation anstreben müssen. Andererseits müssen auch Möglichkeiten berücksichtigt werden, mit der Dokumentation für die Modellentwickler bestimmte Anreize zu schaffen, diese durchzuführen. Es wird versucht, diesem Aspekt durch die Entwicklung eines PC-Programms, das neben der eigentlichen Dokumentation auch weitergehende Funktionen beinhaltet, Rechnung zu tragen. Als weitergehende Funktionen sind hier zunächst Möglichkeiten der Konsistenzprüfung sowie eine graphische Darstellung der Modellstruktur geplant.

Neben diesem Problem werden von den Modellentwicklern aber auch andere Argumente gegen eine Dokumentation in der vorgeschlagenen Weise vorgebracht.

Zum einen wird die Befürchtung gehegt, daß die Urheberrechte durch das Einbringen der Modelle in die Datenbank nicht mehr gewährleistet bleiben. Durch die Verknüpfung aller gespeicherter Realisationen mit einer Modellkurzbeschreibung, die auch die Name und die Adresse der Modellentwickler beinhaltet, wird diesem Aspekt in ECOBAS Rechnung getragen. Jeder Nutzer der Datenbank, der mathematische Formulierungen, die er in ECOBAS recherchiert hat, für seine eigenen Arbeiten einsetzt, ist in gleicher Weise,

wie bei der Verwendung von Literaturzitate verpflichtet, die Herkunft anzugeben.

Fragwürdig scheint die vereinzelt vorgebrachte Argumentation, Datenbanken dieser Art seien nicht notwendig, da der Experte sowieso alle Modelle seines Arbeitsbereiches kennen würde. Diesem Argument kann eigentlich nur entgegengehalten werden, daß die Bedeutung von Literatur- und Faktendatenbanken eine derartige Aussage eindeutig widerlegt. Auch für diesen Bereich könnte vorgebracht werden, der Experte kenne ja die einschlägige Literatur. Die Praxis belegt aber, daß auch für den Experten, der bemüht ist, sich immer umfassend über den aktuellen Stand der Forschung zu informieren, diese Datenbanken eine wertvolle Hilfe bieten.

3.2 Diskrepanz zwischen theoretischem mathematischen Ansatz und Implementierung des numerischen Lösungsverfahrens

Können Gleichungen oder Gleichungssysteme nicht analytisch gelöst werden, sondern müssen für die Lösung numerische Verfahren herangezogen werden, ergibt sich zwangsläufig eine Diskrepanz zwischen dem theoretischen, mathematischen Ansatz und der numerischen Implementation des Lösungsverfahrens. Solange das numerische Verfahren die exakte Lösung hinreichend genau approximiert kann diese Diskrepanz vernachlässigt werden.

Dies ist aber nicht immer der Fall. In besonderem Maß gilt das für die Lösungsverfahren von partiellen Differentialgleichungen, aber auch z.T. für die numerischen Lösungen von gewöhnlichen Differentialgleichungen. In diesen Fällen kann das gewählte Lösungsverfahren besondere Eigenschaften des Modells beinhalten und/oder die Gültigkeitsgrenzen mitbestimmen.

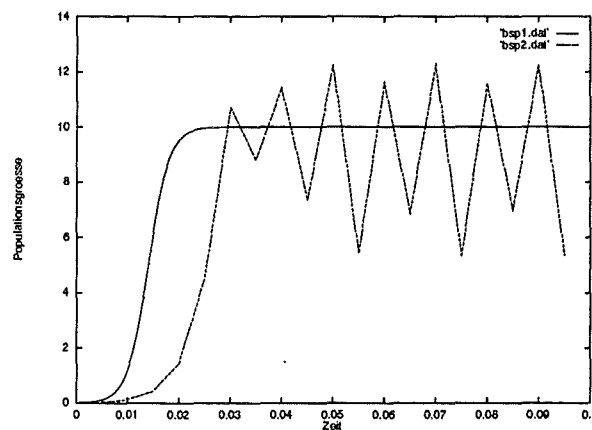


Abbildung 4: Populationswachstum bei begrenzten Ressourcen (Euler-Verfahren)

Durch ein sehr einfaches Beispiel kann dieser Sachverhalt verdeutlicht werden. Wird ein Populationswachstum bei begrenzten Ressourcen angenommen und die Differentialgleichung mit einem Verfahren mit fester Schrittwei-

te gelöst (z.B. Euler-Verfahren), so ergibt sich bei genügend kleiner Schrittweite die allgemein bekannte Lösung (durchgezogene Linie). Wird jedoch mit einer großen Schrittweite gearbeitet, kommt es zu einer Schwingung um den theoretischen, stationären Zustand. Hierbei kann es sich einerseits um ein *Artefakt* handeln, das mit dem realen System nichts zu tun hat. Andererseits ist es aber möglich, daß die Regulation der Populationsgröße mit einer gewissen Trägheit erfolgt. In diesem Fall käme der gewählten Schrittweite des Lösungsverfahrens sogar eine ökologische Bedeutung zu.

Ein anderes Beispiel sind steife Differentialgleichungssysteme. Hier kann die Güte bzw. der Gültigkeitsbereich nicht unabhängig vom Lösungsverfahren angegeben werden.

Ein weiteres Beispiel sind Modelle, die die Wasserbewegung im Bodenprofil beschreiben. Eine große Zahl dieser Modelle basieren auf dem theoretischen, mathematischen Ansatz der Richards-Gleichung. Die Vor- und Nachteile sowie die Gültigkeitsgrenzen der einzelnen Modelle werden aber ganz wesentlich durch das jeweilige Lösungsverfahren und die gewählte Diskretisierung bestimmt (siehe hierzu u.a. [5]).

Der dargestellte Sachverhalt legt es nahe, von einer vollständigen Dokumentation zu fordern, daß sowohl der theoretische, mathematische Ansatz, als auch das jeweils verwendete numerische Lösungsverfahren dokumentiert werden muß, zumindest dann, wenn zwischen diesen beiden eine nicht zu vernachlässigende Diskrepanz besteht.

3.3 Vollständige Beschreibung der Gültigkeitsgrenzen

In ECOBAS wird versucht, die Gültigkeitsgrenzen der mathematischen Formulierungen zum einen durch die Angabe von

- den Parameterwerten und
- den Gültigkeitsgrenzen für
 - die Eingangsgrößen,
 - die Ausgangsgrößen sowie
 - den Zeit bzw. Zeit-Raum-Bereich

für jede Realisation zu erfassen. Darüberhinaus wird die Gültigkeitsumgebung

- durch eine allgemeine Klassifikation mit
 - Typ des Ökosystems (nach Ellenberg, Springstube)
 - biologische Klassifikation
 - geographischer Ort
 - Klimatyp (nach Walter, Lieth)
 - Bodentyp (nach FAO soil classification system)
- und eine freie Beschreibung

charakterisiert. Die allgemeine Klassifikation ermöglicht es, die Gültigkeitsumgebung in wichtige ökologische Kategorien einzuordnen. Mit der freien Beschreibung können weitere, die Gültigkeitsumgebung charakterisierende Eigenschaften angegeben werden.

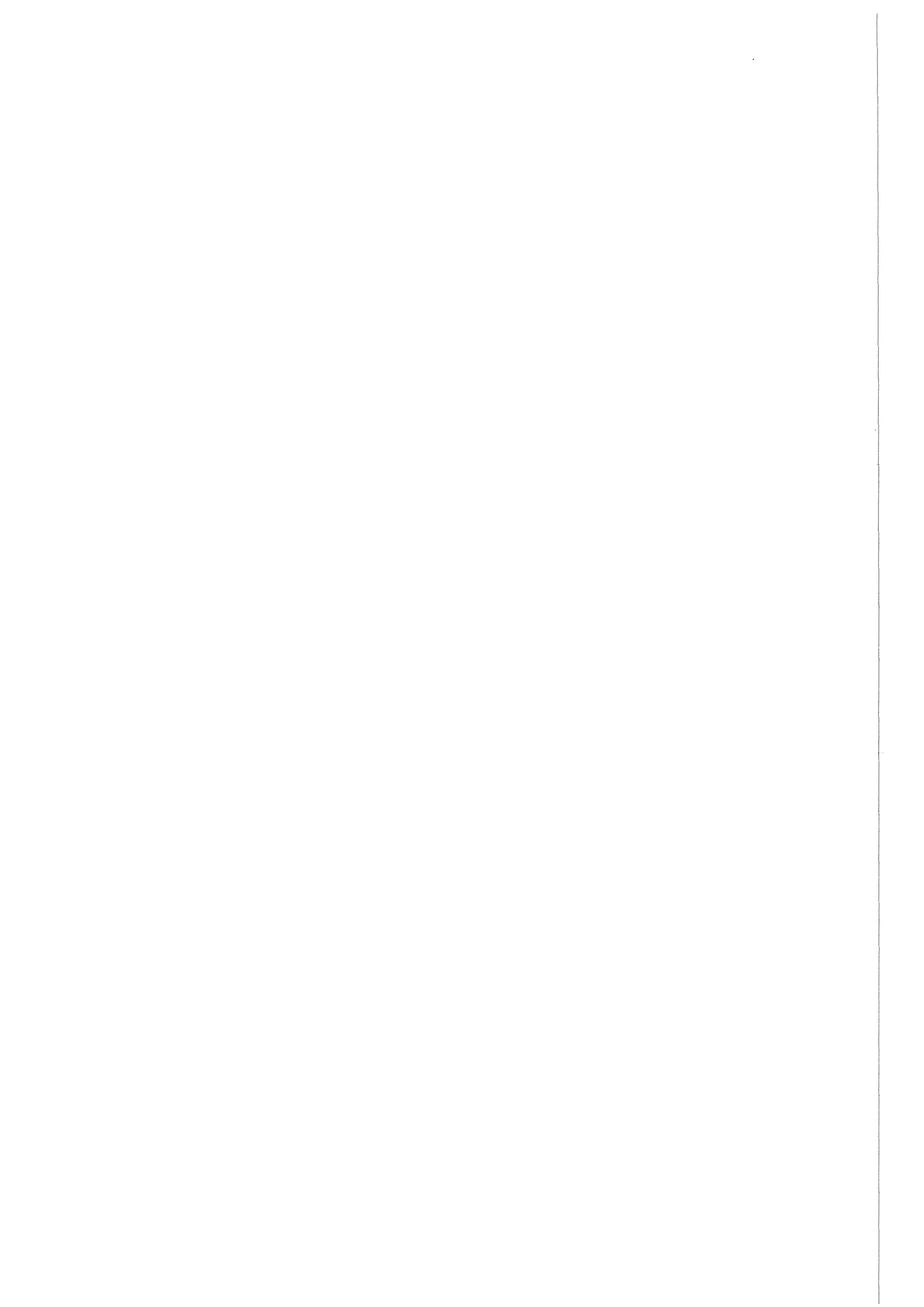
Es muß allerdings die Frage gestellt werden, ob diese Angaben ausreichen, um der Forderung einer vollständigen Dokumentation der Gültigkeitsgrenzen gerecht zu werden. Ferner wird bei der hier durchgeführten Art und Weise der Dokumentation unterstellt, daß die einzelnen Gültigkeitsgrenzen untereinander unabhängig sind. Dies gilt nicht allgemein.

Beim jetzigen Stand der Arbeiten muß davon ausgegangen werden, daß der Forderung der vollständigen Beschreibung der Gültigkeitsbedingungen nicht entsprochen werden kann, solange der Umfang der Dokumentation eine akzeptable Größe nicht überschreiten darf. Praktikabel ist es deshalb, unter Verzicht auf den Anspruch der Vollständigkeit zu fordern, daß die wichtigsten Gültigkeitsgrenzen in der Dokumentation erfaßt werden und soweit wie möglich bei der Recherche als Eingrenzungskriterien zugänglich sind. Dafür muß aber ergänzend die Möglichkeit geschaffen werden konkrete Kombinationen von mathematischen Formulierungen (recherchierte Modelle) mit geringem Aufwand Simulationsexperimenten zum Zweck der Gültigkeitsüberprüfung zuführen zu können (siehe hierzu z.B. [4]).

Literatur

- [1] Benz, J.; M. Knorrenschild: Anforderungen an die Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse.
in: Keller, H.B.; R. Grützner (Hrsg.): 2. Treffen des AK 5 "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen". 5.11-6.11.92 in Karlsruhe. Berichte des Kernforschungszentrums, KfK 5159, 1993.
- [2] Benz, J.: ECOBAS - Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse.
in: Keller, H.B.; R. Grützner; J. Benz (Hrsg.): 3. Treffen des AK 5 "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen". 28.10-29.10.93 in Kassel/Witzenhausen. Berichte des Kernforschungszentrums, KfK 5310, 1994.
- [3] Gardner, R.H.; W.G. Cale; R.V. O'Neill: Robust Analyses of Aggregation Error.
Ecology, 63(6), 1771-1779, 1982.
- [4] Grützner, R.: Modellbildung - Ansätze und Anforderungen.
4. Treffen des AK 5 "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umweltsanwendungen". 23.6-24.6.94 in Halle. Berichte des Kernforschungszentrums, (im Druck).

- [5] Hartmann, M.; A. Simon: SWATRER - Ein Modell des Bodenwasserhaushalts.
Studienarbeit, Universität Gesamthochschule Kassel, FB11/FB15, Kassel, 1994.
- [6] Weisemann, U.: Entwurf eines Datenbankschemas zur Dokumentation des Datenbedarfs und des Outputs von Simulationsmodellen in der Ökologie.
Studienarbeit, TU Berlin, Institut für Angewandte Informatik, Berlin, 1994.
- [7] Zeigler, B.P.: The Aggregation Problem. in: Patten, B.C. (Hrsg.): Systems Analysis and Simulation in Ecology.
4. Academic Press, New York, 299-311, 1976.



Der Einsatz des Konzepts halbgeordneter Mengen zur vergleichenden Analyse von Umweltbelastungen

R.Brüggemann

Projektgruppe Umweltgefährdungspotentiale von Chemikalien

GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, 85764 Oberschleißheim, Ingolstädter Landstr. 1

Abstract

Mit der Zunahme von detaillierten Messungen und der Verbesserung von deterministischen Modellen zur Berechnung des Umweltverhaltens von Chemikalien wird die Bewertung der Ergebnisse immer dringender. In vorliegender Arbeit wird über die Anwendung verbandstheoretischer Methoden berichtet, die hierfür Hilfestellung leisten kann. Ausgangspunkt ist, daß für viele Bewertungsfragen aus der Umweltmodellierung ein verallgemeinerter Ordnungsbegriff erforderlich ist. Dieser führt auf partiell geordnete Mengen. Ein Ergebnis der hier vorliegenden methodisch orientierten Studie ist, daß vier Klassen von Chemikalien identifiziert werden können, die höchste Priorität in bezug auf ihre Umweltgefährdung haben.

Einleitung

Am Main wurden Untersuchungen zur Belastungssituation durch organische Chemikalien durchgeführt, die von Berechnungen anhand des Simulationsmodells EXWAT [1] ergänzt wurden¹. Gerade bei Simulationsrechnungen mit ihrer Fülle an möglichen Ergebnissen ist es von besonderer Bedeutung, Ergebnisse kondensiert und in prägnanter Form entsprechend der Fragestellung darzustellen. In dieser Studie werden verschiedene Substanzen anhand der aus EXWAT erhaltenen Ergebnisse in einem HASSE-Diagramm dargestellt, um eine Visualisierung ihrer Rangordnung bezüglich der Umweltgefährlichkeit zu erhalten. (Eine ausführlichere Darstellung findet man in [2].)

¹ Dem BMFT wird für die Förderung gedankt (FK: 0339275A)

Die Substanzen und die Deskriptoren

Zur kausalen Verknüpfung von Umwelt- und Substanzdaten wird das stationäre Box-Modell EXWAT benutzt, das Ausbreitungsrechnungen für Substanzen in Flüssen erlaubt. Als charakteristische Modellergebnisse ("Deskriptoren") für die hier vorliegende Studie werden benutzt:

- Ausgasungsstrom
- Sedimentationsstrom
- Abbaustrom
- Advektionsstrom

Diese vier Deskriptoren werden von EXWAT in der Dimension [Masse/Zeiteinheit] erhalten.

Nach einer Transformation, schematisch in Abb. 1 dargestellt, erhält man die für die Bewertung grundlegende Tabelle 1 der sog. Scores. Diese geben in Zahlen 1-4 (Ausnahme Persistenz: dort 0-2) die zunehmende Umweltgefährlichkeit bezüglich des Expositionsverhaltens (Expositionspotentiale) wieder.

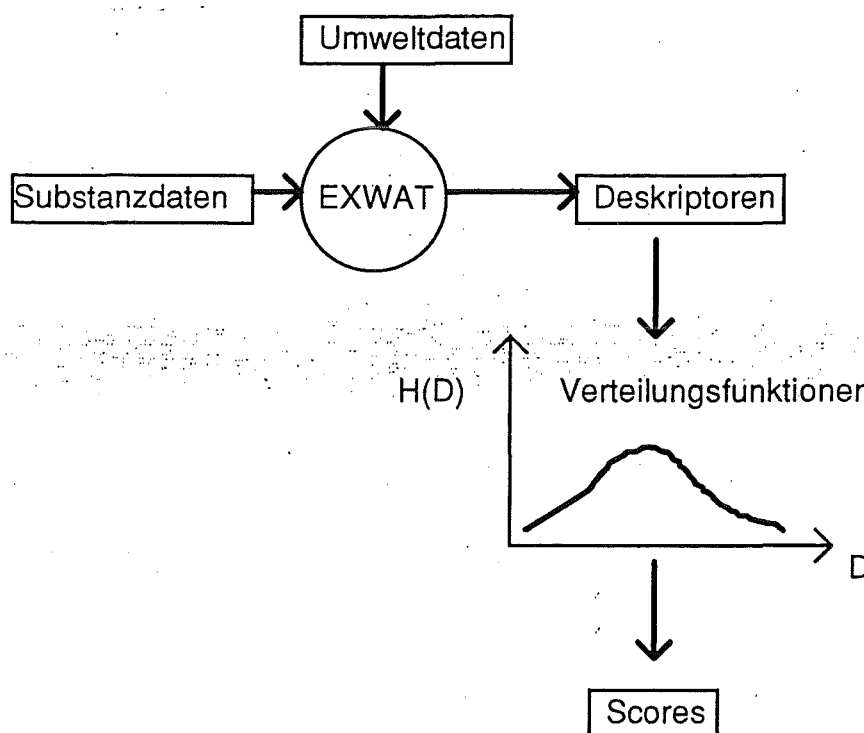


Abb.1: Von Substanz- und Umweltdaten über das kausale Modell EXWAT zu Deskriptoren und anhand ihrer Verteilung (genommen über 19 Substanzen, gefunden im Main, März 1990) zu Scores.

Tabelle 1: Scores für die 19 Substanzen²

Substanz (Identifizier) /Scores	S ₁	S ₂	S ₃	S ₄
Naphthalin "na"	3	2	2	3
Phenanthren "ph"	3	2	2	4
Pyren "py"	3	3	2	4
Fluoranthren "fl"	2	3	2	4
NTA "nt"	1	1	0	1
EDTA "ed"	1	1	1	3
Chloroform "ch"	4	1	2	2
Tetrachlormethan "tt"	4	1	2	3
Trichlorethan "tn"	4	1	2	3
Trichlorethen "tr"	4	2	2	2
Tetrachlorethen "pe"	3	2	2	3
PCB 28 "12"	3	3	2	2
PCB 52 "13"	2	3	2	2
PCB 101 "14"	2	4	2	1
PCB 138 "15"	2	4	2	1
PCB 153 "16"	1	4	2	1
PCB 180 "17"	1	4	2	1
Atrazin "at"	1	2	2	4
Nonylphenol "no"	2	3	2	2

HASSE-Diagramm

Die Technik der HASSE-Diagramme wird bereits in verschiedenen Zweigen ökologischer Forschung angewendet [3-9]. Hier wird sie zur Einstufung der 19 Chemikalien nach ihrem Expositionspotential, gegeben durch die Scores der Tabelle 1 herangezogen: Faßt man dazu die 19 Substanzen zu einer

² S₁: Score für die Sedimentation, S₂: Score für die Ausgasung, S₃: Score für die Persistenz, S₄: Score für die Advektion

Menge "Π" zusammen und fragt man nach einem \leq -Vergleich wie es für ein Ranking erforderlich ist, so liegt eine partiell geordnete Menge (Π, \leq) vor. Ihre graphische Darstellung nach bestimmten Regeln [4] führt zu einem sog. HASSE-Diagramm (vergl. z.B. Abb. 2)³: In den Kreisen stehen die Identifier für die Substanzen, bzw. die Identifier der Elemente einer ganzen Äquivalenzklasse. Die dazugehörige Äquivalenzrelation ist die Gleichheit bezüglich der vier Scores. Beispielsweise sind die Substanzen "tn" und "tt" in Bezug auf ihre vier Scores einander gleich, gehören also in eine Äquivalenzklasse.

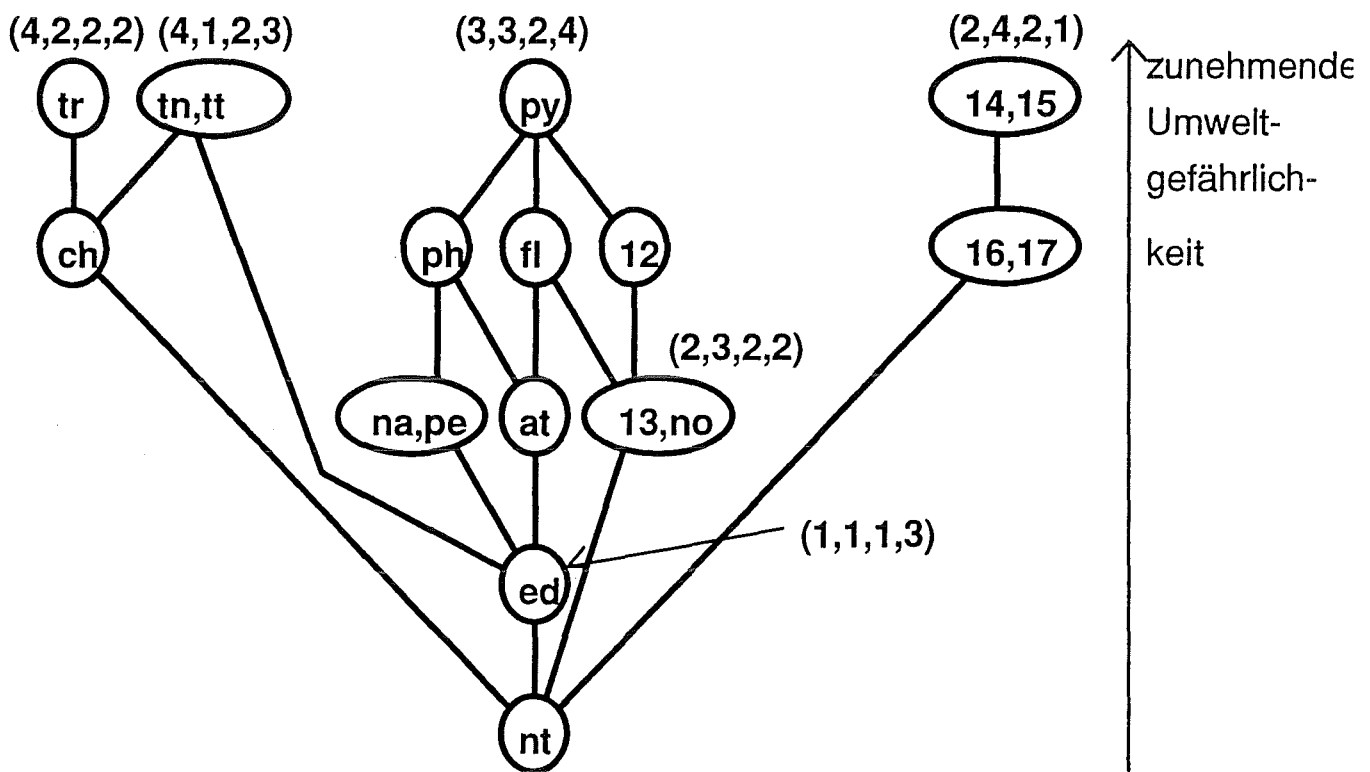


Abbildung 2: HASSE-Diagramm der 19 Substanzen im Main (Szenario 1990) unter dem Quadrupel der Bewertungsscores. Zum besseren Verständnis sind einige Quadrupel (entnommen aus Tab. 1) in das Diagramm miteingezeichnet.

Manche Kreise sind miteinander durch Linien verbunden. Für die Nutzung des HASSE-Diagramms ist wichtig zu wissen, daß die Linien nur von unten nach oben oder (exklusiv) nur von oben nach unten

³ Die Erstellung von HASSE-Diagrammen von Hand wird selbst für sehr wenige Objekte mühsam. Es ist hierfür ein PC-Programm (DOS 3.0 aufwärts) entwickelt worden. Anfragen beim Autor

verfolgt werden dürfen⁴. So gibt es zwar Linienzüge zwischen "ph" und "fl", aber zwischen diesen beiden Substanzen besteht im Sinne der HASSE-Diagramme keine Verbindung, sie sind unvergleichbar miteinander unter der \leq -Relation.

Das HASSE-Diagramm erlaubt somit u.a., einerseits unvergleichbare Objekte zu identifizieren und andererseits Teilmengen von Objekten herauszulesen, die "vergleichbar schlechtere"⁵ Einzelbewertungen aufweisen.

Lesebeispiele

1. Die Substanzen "ph", "fl", "12" sind in allen vier Scores günstiger beurteilt als die Substanz "py". Innerhalb des HASSE-Diagramms kann man nämlich von "py" aus diese (und noch andere) auf Linienzügen erreichen, ohne den Orientierungssinn (von oben nach unten) zu ändern. Diese drei Substanzen sind aber unvergleichbar miteinander, denn sie sind nach den oben genannten Regeln nicht miteinander verbunden.
2. In der Abbildung 2 sind vier Äquivalenzklassen dargestellt, die hohe Werte in ihren Scores haben und für die es keine Substanzen mit noch höheren Werten in gleichzeitig allen vier Scores gibt. Diese sog. maximalen Elemente sind daher von besonderem Interesse, sie sind die prioritären Objekte, die herauszufinden die Aufgabe jedes Einstufungsverfahrens ist. Sie sind daher zusätzlich noch mit dem Quadrupel ihrer Scores gekennzeichnet.

Diskussion zur Technik der HASSE-Diagramme

HASSE-Diagramme ermöglichen eine Visualisierung der Vergleichbarkeiten und Nichtvergleichbarkeiten zwischen Objekten, die durch mehrkomponentige Tupel bewertet werden. Sehr oft sind gerade die unvergleichbaren Objekte⁶ interessant, da sie beispielsweise aus qualitativ verschiedenen Belastungsmustern resultieren und zu entsprechenden gezielten Handlungsstrategien motivieren. Anhand tieferer Ergebnisse der Verbandstheorie können auf phänomenologischer Basis

⁴ HASSE-Diagramme sind graphentheoretisch dreieckslose Digraphen

⁵ Mit der Bezeichnung "vergleichbar schlechter" wird betont, daß ein Objekt in allen seinen Eigenschaften schlechter ist als ein anderes. "Unvergleichbare Objekte" können sehr wohl in bezug auf einzelne Komponenten des charakterisierenden Tupels vergleichbar sein.

⁶ Bei der Bildung eines Rangfolgenindex sind gerade solche Objekte nicht evident.

auch Regeln abgeleitet werden. Diese geben Anlaß zu gezielten Simulationsstudien zur kausalen Nachprüfung, ergänzen daher die mathematische Modellierung. In diesem Sinne ist die HASSE-Diagrammtechnik ein Werkzeug der Modellbildung.

Literaturverzeichnis:

- [1] Trapp S., Brüggemann R., Münzer B.: **Estimation of Releases into Rivers with the Steady-State Surface Water Model EXWAT using Dichloromethane** :Ecotox. Env. Saf. 19, 72-80 (1989)
- [2] Brüggemann R., H.Behrendt, K.P. Seiler, S.Trapp, K.Voigt : **Zur vergleichenden Bewertung von Chemikalien im Main auf der Fließstrecke Bamberg-Aschaffenburg.** In: Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen, eingereicht April 94
- [3] Halfon E., Reggiani M.G.: **On Ranking Chemicals for Environmental Hazard:** Environ. Science Technol. 20,1173-1179 (1986)
- [4] Brüggemann R., Münzer B.: **A Graph-Theoretical Tool for Priority Setting of Chemicals** : Chemosphere 27,1729-1736 (1993)
- [5] Halfon E. : **Comparison of an Index Function and a Vectorial Approach Method for Ranking Waste Disposal Sites:** Environ. Science Technol. 23,600-609 (1989)
- [6] Halfon E. : **Is there a best model structure? Comparing the model structures of different fate models** :Ecological Modelling 20,153-163 (1983)
- [7] Brüggemann R., Münzer B., Halfon E. : **An Algebraic/Graphical Tool to Compare Ecosystems with Respect to their Pollution - The German River "Elbe" as an Example - I: Hasse-Diagrams:** Chemosphere 28,863-872 ,1994
- [8] Münzer B., Brüggemann R., Halfon E. :**An Algebraic/Graphical Tool to Compare Ecosystems with Respect to their Pollution II: Comparative Regional Analysis** : Chemosphere 28, 873-879 ,1994
- [9] Voigt K., Brüggemann R.:**Metadatabases of data-sources for environmental chemicals:** Online Information 93; Proceedings 17th International Information Meeting, 495-505 (1993)

Nutzung von Datenbankobjekten zur Kopplung von Datenbanken an objektorientierte Ökosystemmodelle

Gerolf Dubsky; Stephan Claus; Peter Wernecke
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Agro-Ökosystemforschung Quedlinburg
Neuer Weg 22
06484 Quedlinburg

Im Komplex der ökosystemaren Untersuchungen sich verändernder Agrarlandschaften stellen Fruchtfolgen landwirtschaftlich genutzter Kulturarten als spezielle agrarische Ökosysteme ein wesentliches Element dar. Diese durch agrotechnische Maßnahmen beeinflusst- und steuerbaren Ökosysteme (Abb. 1) erstrecken sich zeitlich über viele Vegetationsperioden.

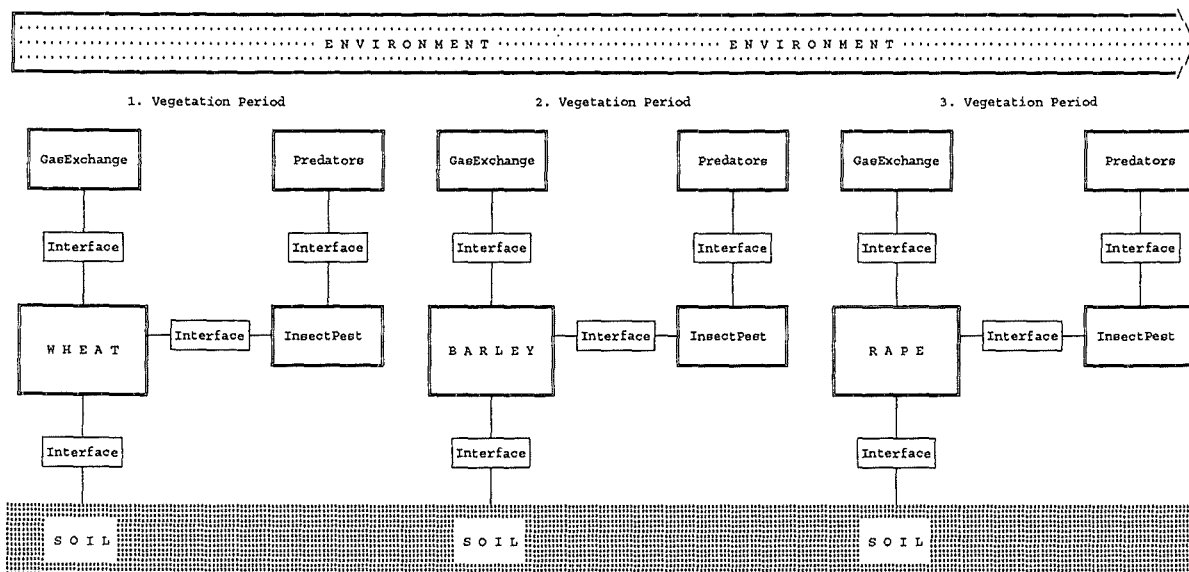


Abb. 1: Schematische Darstellung einer Fruchtfolge

Die mit agrarischen Ökosystemen verbundene Dynamik des Energie- und Stoffaustausches sowie die Entwicklungsdynamik ihrer organischen Komponenten gilt es mit geeigneten dynamischen Modellen zu erfassen. Zur mathematischen Abbildung werden die Pflanzen in miteinander gekoppelte Kompartimente gegliedert, die jeweils über ein Interface die erforderlichen Daten mit den externen Teilmodellen, dem Bodenmodell, dem Canopymodell für den Gaswechsel und den Schädlingsmodellen austauschen (Abb. 2). Die Abkürzung "Ess" weist auf Objekte der Quedlinburger Modelle hin und die Abkürzung "Cdy" auf Objekte des Bodenmodells "Candy" der Sektion Bodenforschung Bad Lauchstädt des Umweltforschungszentrums Leipzig-Halle GmbH.

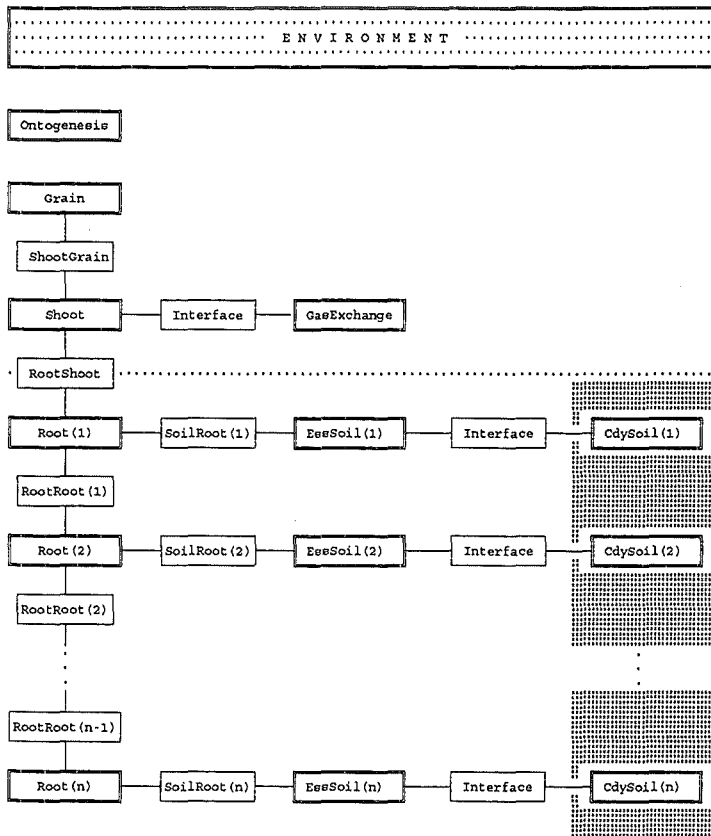


Abb. 2: Schematische Darstellung eines Weizen / Gerste - Pflanzenmodells

Die Konzepte der objektorientierten Programmierung sind denen der biologischen Wissenschaften ähnlich und die Techniken für den Umgang mit internen Strukturen von Objekten sind zur Lösung von Problemen hierarchischer Strukturen in ökologischen und anderen komplexen Systemen geeignet (Baveco 1992, Kolström 1991, Lal u.a. 1991, Silvert 1993). Da Ökosysteme aus miteinander wechselwirkenden Elementen komplexer interner Dynamik bestehen, sollten die ein Ökosystem beschreibenden Modelle konsequenterweise objektorientiert aus interagierenden Objekten aufgebaut werden, die die komplexe interne Dynamik abzubilden gestatten.

Als Programmiersprachen erweisen sich vor allem C++, SmallTalk, Prolog und Borland Pascal als geeignet. Die hier dargestellten Ansätze wurden in Borland Pascal realisiert.

Die zur Handhabung der Modelle benötigten Eingangs- (Umweltgrößen, Parameter) und Ausgabedaten (Resultate) werden in Tabellen des relationalen Datenbanksystems Paradox gehalten. Über die Paradox Engine ist eine direkte Handhabung solcher Tabellen aus Borland Pascal Programmen möglich. Eine objektorientierte Einbindung kann über Pascal Database Framework erfolgen, einer optionalen "Objekt-Schale" um die Paradox Engine (Borland 1992). Damit lassen sich die Möglichkeiten der Kapselung, der Polymorphie durch virtuelle Funktionen, der Erweiterbarkeit durch Vererbung und abgeleitete Objekttypen sowie die Wiederverwendbarkeit des Codes auch für den Zugriff auf Datenbanken nutzen.

Die Datenbankarbeit wird mit dem Aufruf der Initialisierungsmethode `Init` des Objektes `TESSEngine` gestartet, das vom Database-Framework-Objekt `TENGINE` abgeleitet wurde (List 1). Mit dem Destructor `Close` aus `TENGINE` wird die Datenbankarbeit beendet; alle offenen Datenbankobjekte werden geschlossen.

```

type    PEssEngine      = ^TEssEngine;
        TEssEngine      = object (TEngine)
            constructor  Init;
            end; {TEssEngine}

```

List 1: Definition des Objekttyps TEssEngine für die Paradox-Engine

Für den Umgang mit Datenbanktabellen wurde aus Elementen von Database Framework das Basis-Tabellenobjekt TEssTable entworfen (List 2). Es enthält grundlegende Daten der Tabelle, wie den Tabellennamen, Beschreibung der Tabellenstruktur, Anzahl der Records, Nummer des aktuellen Records, Anzahl der Felder, Nummer des aktuellen Feldes, Fehlercode u.a. und einen Satz Methoden zum Anlegen, Öffnen und Schließen von Tabellen, zum Lesen, Bearbeiten und Einfügen von Datensätzen. Die Methoden dieses Objektes sind als Funktionen definiert, die einen Fehlercode zurückgeben. Da es virtuelle Methoden sind, können sie von abgeleiteten Objekten überschrieben (Polymorphie) und so den Erfordernissen angepaßt werden.

```

type    PEssTable       = ^TEssTable;
        TEssTable       = object (TObject)
            TableNumber  : integer;
            TableName     : String;      { Name of Paradox table }
            IsOpen       : Boolean;      { Flag to identify if the table }
                                     { is open }
            nRecord      : LongInt;      { Number of records in the table }
            iRecord      : LongInt;      { Number of current record }
            nField       : Word;         { Number of fields in the table }
            iField       : Word;         { Number of current field }
            TableDesc    : PTableDesc;   { A collection of TFieldDesc }
                                     { objects to define the table's }
                                     { record structure }
            Cursor       : PCursor;      { Pointer to the table's TCursor }
                                     { class instance }
            LastError    : Retcode;      { Last error that methods returned }

            constructor  Init;
            destructor   Done;           virtual;
            function     CreateAndOpen (TblName : string)
                                     : RetCode;virtual;
            function     Create       (TblName : string)
                                     : RetCode;virtual;
            function     Open         (TblName : string)
                                     : RetCode;virtual;
            function     Close        : Retcode;virtual;

            { procedure to insert a new field in the table structure: }
            procedure    InsertField (FieldName : NameString;
                                     FieldType  : PxFieldType;
                                     FieldLength : integer);    virtual;

            { Basic navigation methods: }
            function     GotoRec (RecNum : RecordNumber) : Retcode;virtual;
            function     NextRec : Retcode;virtual;
            function     PrevRec : Retcode;virtual;
            function     HomeRec : Retcode;virtual;
            function     LastRec : Retcode;virtual;

            { Methods to fill the values of TCursor's generic record }
            { buffer: }
            function     PutDouble (FldNmbr : FieldNumber;
                                   Value   : Double) : RetCode;virtual;
            function     PutInteger (FldNmbr : FieldNumber;
                                   Value   : Integer) : RetCode;virtual;
            function     PutLongint (FldNmbr : FieldNumber;
                                   Value   : Longint) : RetCode;virtual;
            function     PutString  (FldNmbr : FieldNumber;
                                   Value   : String) : RetCode;virtual;
            function     PutDate    (FldNmbr : FieldNumber;
                                   Value   : DateRec) : RetCode;virtual;

```

```

{ Methods to get values from TCursor's generic record buffer:}
function      GetDouble (FldNmbr      : FieldNumber;
                      var Value      : Double)
                      : RetCode;virtual;
function      GetInteger(FldNmbr      : FieldNumber;
                      var Value      : Integer)
                      : RetCode;virtual;
function      GetLongint(FldNmbr     : FieldNumber;
                      var Value      : Longint)
                      : RetCode;virtual;
function      GetString (FldNmbr     : FieldNumber;
                      var Value      : String)
                      : RetCode;virtual;
function      GetDate   (FldNmbr     : FieldNumber;
                      var Value      : DateRec)
                      : RetCode;virtual;

{ Method to append the TCursor's generic record at the end }
of table:
function      AppendRecord              : RetCode;virtual;

{ Method to update the TCursor's generic record in the table}
function      UpdateRecord              : RetCode;virtual;

{ This method gets the current record out of the database }
and assigns the field values to the TCursor's generic
record buffer:
function      GetRecord                  : Retcode;virtual;

end; {TEssTable}

```

List_2: Definition eines Basis-Objektyps für Datenbank-Tabellen

Zur Beschreibung der Tabellenstruktur wird eine Collection PTableDesc mit einem vom Database-Framework-Objekt TFieldDesc zur Feldbeschreibung abgeleiteten Objekt (List 3) benutzt.

```

type      PEssFieldDesc      = ^TEssFieldDesc;
TEssFieldDesc = object (TFieldDesc)
  constructor Init (FieldNmbr : FieldNumber;
                  FieldName  : string;
                  FieldType  : PxFieldType;
                  FieldLength : integer);
end; {TEssFieldDesc}

```

List_3: Definition des Objektyps für die Feldbeschreibung zur Festlegung einer Tabellenstruktur

Vom Basis-Tabellenobjekt TEssTable werden die Objekte für die Umwelt TEnvtTable und für Resultate TResultTable abgeleitet (List 4).

```

type      PEnvtTable      = ^TEnvtTable;
TEnvtTable = object (TEssTable)
  OpenCounter : integer;
  destructor Done;
  function Open (TblName :string) : RetCode;virtual;
  function Close : Retcode;virtual;
  function ReadRecord (var eRcrd :TEssEnvtData)
                  : Retcode;virtual;
end; {TEnvtTable}

```

```

PEssEnvironment      = ^TEssEnvironment;
TEssEnvironment      = object (TEssBaseObj)
    ...
    EnvntTable        : array(.TEssEnvntIndex.) of PEnvntTable;
    ...
end; {TEssEnviron}
type
PResultTable         = ^TResultTable;
TResultTable         = object (TEssTable)
    ControlNumber     : integer;
    constructor       Init;
    function           CreateAndOpen (TblName : string)
                        : RetCode;virtual;
    function           Close
                        : RetCode;virtual;
    procedure          NewField (FieldName : NameString); virtual;
    function           PutDouble (FldNmbr : FieldNumber;
                                Value : Double) : RetCode;virtual;
    function           AppendRsltRecord
                        (Time : Double) : RetCode;virtual;
end; {TResultTable}

```

List.4: Definition der Objekttypen für die Umwelt und die Resultate

Alle für das agrarische Ökosystem zu modellierenden Kompartimente - einschließlich der sie untereinander verbindenden Objekte - werden im System Ess von dem Objekttyp TEssBaseObj abgeleitet (List 5).

```

type
PEssBaseObj          = ^TEssBaseObj;
TEssBaseObj          = object (TView)
    Name              : string;
    Kind              : TKind;
    Sort              : TSort;
    Nmbr              : integer;
    ...
    cEnvnt            : pointer;          { Pointer für Environment }
    Parm              : PStringCollection;
    RsltTable         : PResultTable;
    Wndw              : PEssWindow;
    constructor       Init (aRect :TRect; aKind :TKind;
                            aSort :TSort;
                            aNmbr, pLimit, pDelta :integer;
                            oCmpt, eCmpt :pointer);
    destructor        Done; virtual;
    constructor       Load (var Stm :TDosStream);
    procedure         Store (var Stm :TDosStream);
    ...
    function          MakeResultTable : integer; virtual;
    function          FillResultTable (Time : extended) : integer;
                                                virtual;
    ...
    procedure         HandleEvent (var Event:TEvent); virtual;
end; {TEssBaseObj}

function TEssBaseObj.MakeResultTable : integer;
begin
    MakeResultTable := 0;
    { Herstellen der Struktur der Resultat-Tabelle:
      -mit RsltTable^.NewField('FieldName') die Struktur herstellen
      -mit RsltTable^.CreateAndOpen('TableName') die Tabelle erstellen }
end; {MakeResultTable}

function TEssBaseObj.FillResultTable (Time : extended) : integer;
begin
    FillResultTable := 0;
    { (1) Füllen der Struktur der Resultat-Tabelle:
      for FldNmbr:=1 to ResultTable^.nField-1
        ResultTable^.PutDouble( FldNmbr, Value )
      (2) mit RsltTable^.AppendRsltRecord( Time )
        Datensatz in Tabelle schreiben }
end; {FillResultTable}

```

List.5: Definition des Basis-Objekttypes für Kompartimente und Interface

Das Objekt `TESSBaseObj` enthält einen Pointer `cEnvvt` auf das Environment-Objekt mit den Umweltdaten und das Objekt `RsltTable` zur Handhabung von Resultattabellen.

Die beiden Dummy-Prozeduren `MakeResultTable` und `FillResultTable` werden von Objekten, die von `TESSBaseObj` abgeleitet werden, überschrieben, wenn Resultate in Tabellen aufgehoben werden sollen. So verfügen alle diese Objekte über die prinzipielle Möglichkeit zum Anlegen und Beschreiben von Resultattabellen. Die von `TESSBaseObj` abgeleiteten Objekte werden bei ihrer Initialisierung in eine Collection eingefügt. Durch die Anwendung der Methode `ForEach` kann das Anlegen und Füllen der Resultattabellen auf eine für den Programmierer sehr einfache Weise für alle Objekte abgearbeitet werden.

Literatur

Baveco, J.M.; Lingeman, R. (1992): An Object-Oriented Tool for Individual-Oriented Simulation - Host Parasitoid System Application. *Ecol. Model.* **61** (3-4): 267-286

Borland (1992): Borland Paradox Engine - Database Framework Reference. Borland International Inc. Scotts Valley, CA USA

Kolström, T. (1991): Modelling Early Development of a Planted Pine Stand - An Application of Object-Oriented Programming. *Forest Ecol. and Manage.* **42** (1-2): 63-77

Lal, H.; Peart, R.M.; Jones, J.W.; Shoup, W.D. (1991): An Object-Oriented Field Operations Simulator in PROLOG. *Trans. of the ASAE* **34** (3): 1031-1039

Sequeira, R.A.; Sharpe, P.J.H.; Stone, N.D.; Elzik, K.M.; Makela, M.E. (1993): Object-Oriented Simulation - Plant Growth and Discrete Organ to Organ Interactions. *Ecol. Model.* **68** (1-4): 55-89

Silvert, W. (1993): Object-Oriented Ecosystem Modelling. *Ecol. Model* **68** (1-2): 91-118

Systemanalyse und Modellaufbau bei wäßrigen Reinigungssystemen

N. Grebe, J. Chr. Scholtz

Universität Passau

Lehrstuhl für Operations Research und Systemtheorie

94030 Passau

1 Motivation

Gesetzliche Auflagen und ein gestiegenes Umweltbewußtsein zwingen die Unternehmen, in Zukunft umweltfreundlicher vorzugehen. So stehen heute auch die für die industrielle Bauteilreinigung eingesetzten Chlorierten Kohlenwasserstoffe (CKW) aufgrund ihrer umweltbelastenden und gesundheitlichen Auswirkungen im Mittelpunkt öffentlicher Diskussionen. Mit dem Inkrafttreten der „Zweiten Verordnung des Bundesimmissionsschutzgesetzes“ gelten generelle Grenzwerte für die Lösemittlemission. Die Verordnung beschränkt den Verbrauch des Lösemittels sowohl bei Teiledurchsatz als auch beim Stillstand der Reinigungsanlage. Die Einhaltung der Grenzwerte ist mit hohem technischen und finanziellem Aufwand verbunden.

Als umweltfreundliche und letztlich kostengünstigere Alternative zur Reinigung mit organischen Lösemitteln bietet sich die Reinigung in wäßrigen Medien an. Dabei werden bevorzugt Reiniger auf Tensidbasis eingesetzt. **Ziel bei der Konzeption einer CKW-freien Reinigungsanlage ist es, die Anlage durch geeignete Maßnahmen so zu gestalten, daß bei weitgehender Recyclingführung möglichst wenig Wasser und Reiniger verbraucht werden und damit nur minimale Abfälle zur Entsorgung anfallen.** Neben den wirtschaftlichen Aspekten werden zum Teil sehr hohe Anforderungen an die Reinigungsqualität gestellt.

Zur Unterstützung der Planung projektierter und der Optimierung bereits bestehender CKW-freier Reinigungsanlagen kann die Simulation ein leistungsfähiges Werkzeug zur Verfügung stellen. Voraussetzung für die Anwendung der Simulation ist die Existenz eines Simulationsmodells. Ein solches Modell zur Simulation von CKW-freien Reinigungsanlagen wird im folgenden vorgestellt.

2 Modellbeschreibung

Eine Anlage zur Reinigung von Bauteilen besteht aus mehreren Reinigungsstufen. Abhängig von den zu reinigenden Bauteilen, der Art und Umfang der Verschmutzung und dem geforderten Waschergebnis unterscheiden sich die Anlagen in der Anzahl der Bäder und der eingesetzten Wirkchemie. Vielfach kann das erforderliche Waschergebnis bereits mit zwei Reinigungsstufen erreicht werden. In der ersten Stufe wird unter Einsatz von Reinigungsmitteln und mit mechanischer Unterstützung der größte Teil der von vorhergehenden Bearbeitungsprozessen stam-

menden Verschmutzung abgewaschen. Der anschließende Spülvorgang in der zweiten Stufe dient der Entfernung der restlichen Verschmutzung und des Reinigungsmittels der ersten Stufe.

Die zu reinigenden Bauteile werden je nach Größe zu Chargen zusammengefaßt und mit Warenträgern der Reihe nach durch die Bäder geführt. Dabei wird beim Ein- und Austausch der Charge jedesmal etwas Waschflüssigkeit verschleppt. Zur Deckung von Verschleppungs- und Verdunstungsverlusten sind die Bäder deshalb untereinander durch Kaskadenführungen verbunden. Das letzte Bad, zumeist ein Spülbad, wird direkt mit Frischwasser versorgt.

Beim Betrieb der Anlage ändern sich die Konzentrationen von Reiniger und Verschmutzung ständig. Mit zunehmender Belastung der Bäder - hauptsächlich durch Bearbeitungsöle - ist früher oder später der Zeitpunkt erreicht, zu dem die eingetragene Verschmutzungsmenge eine ordnungsgemäße Reinigung unmöglich macht. Die Standzeit der Waschflüssigkeit ist dann erreicht und das Bad muß ausgetauscht werden. Der Austausch der Reinigungsbäder verursacht hohe Kosten und führt zur Unterbrechung des normalen Produktionsbetriebs. Es muß daher eine kontinuierliche Badpflege betrieben werden. Dies geschieht mit Hilfe von Recyclingmodulen. Die Aufgabe eines solchen Moduls besteht in erster Linie darin, Öl und Wasser zu trennen und nach Möglichkeit den Wertstoff Reiniger wieder zurückzugewinnen. Diese Aufgabe können verschiedene Recyclingmodule übernehmen.

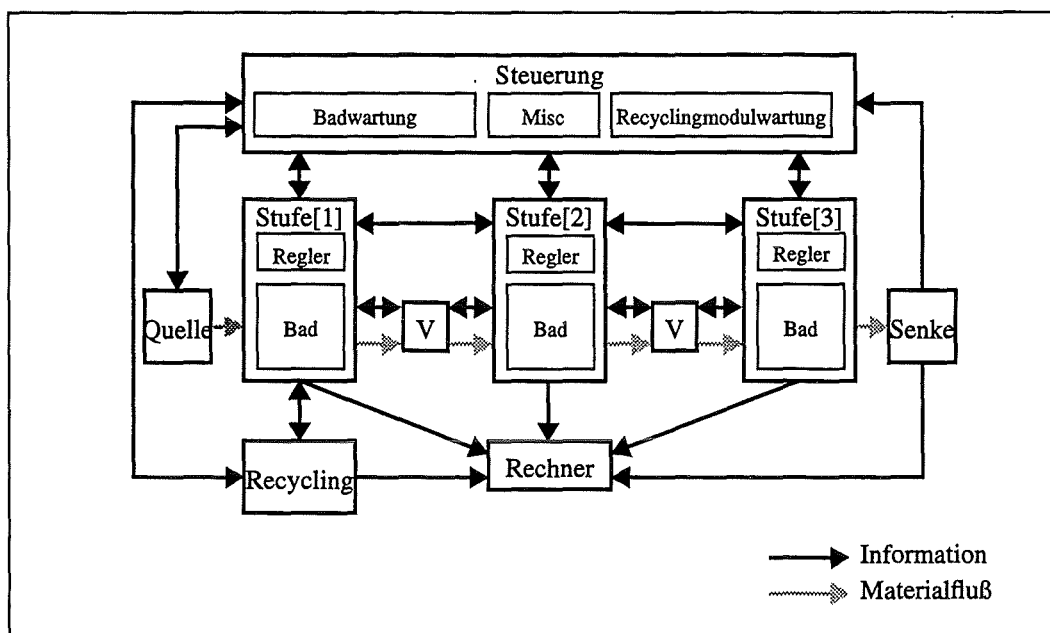


Bild 1: Die Modellstruktur der Reinigungsanlage

Der Aufbau des Simulationsmodells erfolgt mit Hilfe des Simulationssystems SIMPLEX II. Die Modellbeschreibungssprache SIMPLEX-MDL ermöglicht den Aufbau komplexer hierarchischer Modelle aus elementaren Einheiten, den sog. Basiskomponenten. Das Modell der Reinigungsanlage besteht aus den Reinigungsstufen, dem Recyclingmodul, den Verbindungsstück-

ken, der Steuerung, der Rechnerkomponente, der Quelle, der Senke und den zu behandelnden Chargen.

Bild 1 zeigt exemplarisch die Modellstruktur einer dreistufigen Reinigungsanlage mit einem Recyclingmodul.

Bei der Beschreibung der Komponenten wird von der Möglichkeit des hierarchischen Modellaufbaus und des Klassenkonzepts Gebrauch gemacht. So ist beispielsweise die Reinigungsstufe weiter unterteilt in das Bad und einen Reglerbaustein. Um eine Reinigungsanlage im Modell abzubilden, werden mehrere derartige Reinigungsstufen benötigt.

- Komponente **Reinigungsstufe**

Sie setzt sich aus einem Reglerbaustein und dem Bad selbst zusammen. Während der Reglerbaustein für die Nachdosierung des Reinigers und die Regelung des Wasserstands zuständig ist, sind in der Komponente **Bad** alle Vorgänge implementiert, die zu einer Änderung des Wasser-, Öl- und Reinigerbestands und somit zu einer Änderung der Konzentrationsverhältnisse im Bad führen. Der wichtigste Faktor für die Zunahme der Ölkonzentration in der Reinigungsstufe ist der Waschvorgang selbst. Dabei wurden zwei Modellierungsvarianten implementiert. Die erste Variante legt eine exponentielle Abnahme des Ölbestands der zu reinigenden Charge zu Grunde. Der zeitliche Verlauf der Abreinigungskurve und damit die Zunahme der Ölkonzentration im Bad wird im wesentlichen durch die Halbwertszeit bestimmt. Die zweite Variante basiert direkt auf einer empirisch ermittelten Abreinigungskurve. Dazu müssen die Restölbestände zu bestimmten Zeitpunkten des Waschvorgangs bekannt sein, wobei die Zwischenwerte interpoliert werden. Die Verunreinigung der Spülstufen durch Öl resultiert aus der ölbelasteten Flüssigkeitsmenge, die mit der Charge und dem Warenträger beim Überheben von Bad zu Bad verschleppt wird. Voraussetzung für beide Modellierungsvarianten der Ölabbreinigung ist die Kenntnis der Anfangverschmutzung und der Behandlungszeit.

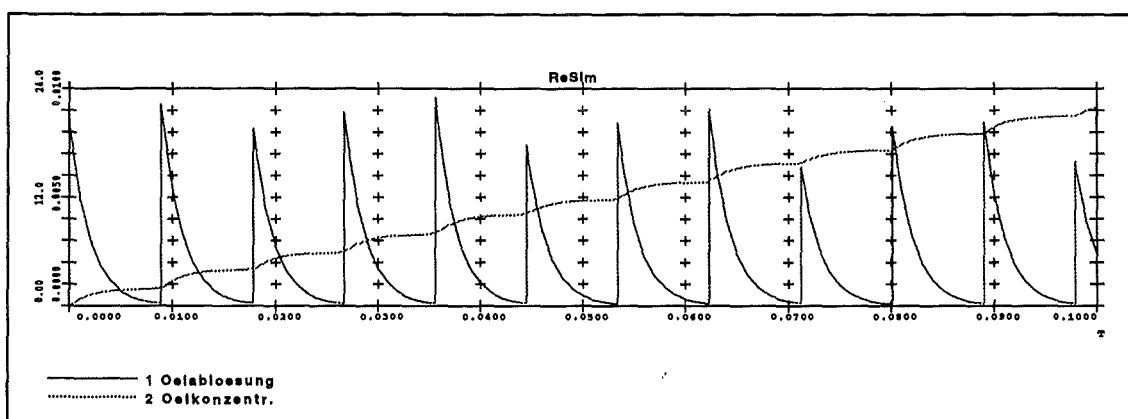


Bild 2: Öleintrag und Verunreinigung im Reinigungsbad

- **Komponente Recycling**

Diese Komponente berücksichtigt die Wirkung des Aufbereitungsverfahrens auf die Öl- und Reinigerkonzentration im angeschlossenen Bad. Dazu werden aus den Konzentrationen der eingehenden Volumenströme die Konzentrationen der ausgehenden Volumenströme berechnet. Über die Modellparameter läßt sich das Verhalten verschiedener Recyclingverfahren nachspielen. Die Module unterscheiden sich in der Durchsatzleistung und dem Rückhaltevermögen gegenüber Öl und auch Reinigerbestandteilen. Ein Recyclingmodul kann mit bis zu zwei Stufen verschaltet werden.

- **Komponente Steuerung**

Die Komponente Steuerung enthält Bausteine, die organisatorische Aufgaben für die gesamte Anlage wahrnehmen. Diese Aufgaben umfassen Wartungsabläufe, die beim Verwerfen und Neuansetzen der Bäder sowie bei der Entsorgung des Sondermülls stattfinden.

- **Komponente Rechner**

Sie sammelt Verbrauchswerte und Abfälle aus Reinigungsstufen und Recyclingmodulen auf, die beim Betrieb der Anlage anfallen und ermittelt daraus einen Teil der Betriebskosten.

- **Komponente Verbindung**

Diese Komponente modelliert die im realen System stattfindenden Transportvorgänge der Chargen. Dabei wird die Transportzeit berücksichtigt.

- **Komponente Quelle**

Die Komponente Quelle hat die Aufgabe, Bauteile bzw. Chargen zu erzeugen und, mit einer definierten Anfangverschmutzung versehen, in das System einzubringen. Dabei kann der Benutzer entweder eine konstante Anfangverschmutzung vorgeben oder bestimmen, daß die Anfangverschmutzung einer Gaussverteilung oder einer beliebigen empirischen Verteilung genügen soll.

- **Komponente Senke**

Sie hat die Aufgabe, die gewaschenen Chargen aus dem System zu entfernen, und ermöglicht für jede Charge die Aufzeichnung der Restschmutzmenge.

Aus den genannten Bausteinen lassen sich mit Hilfe des Klassenkonzepts der Modellbeschreibungssprache SIMPLEX-MDL die unterschiedlichsten Anlagen modellieren. In jedem Simulationslauf können beliebige Parameter der nachgebildeten Anlage variiert werden, wie beispielsweise die Anzahl der Reinigungsstufen, die Anfangverschmutzung, das Verschleppungsvolumen, die Behandlungszeit, die Leistung der Recyclingmodule etc. Alle verwendeten Modellgrößen können als Beobachtungsgrößen ausgewählt und mit Methoden der Busineßgrafik dargestellt werden.

3 Beispiel einer Modelluntersuchung

Zur Durchführung einer Modelluntersuchung müssen zunächst die Parameter des Modells mit den entsprechenden Werten vorbelegt werden, wie z.B. mit der Anfangsvermischung, dem Verschleppungsvolumen, der Halbwertszeit für die Abreinigung, der Anzahl der Reinigungsstufen und den Badvolumina, den Behandlungszeiten in den einzelnen Stufen etc.

Ausgehend von der Vorbesetzung können jetzt mit dem Modell der Reinigungsanlage Experimente durchgeführt werden, um z.B. das Standzeitverhalten des Reinigungssystems bei verschiedenen Anlagenkonzepten zu untersuchen. Bild 3 zeigt das Verhalten einer zweistufigen Reinigungsanlage, die über ein Recyclingmodul am ersten Bad verfügt. Als Beobachtungsgrößen werden die Wasserstände und die Ölkonzentrationen in den Bädern ausgewählt.

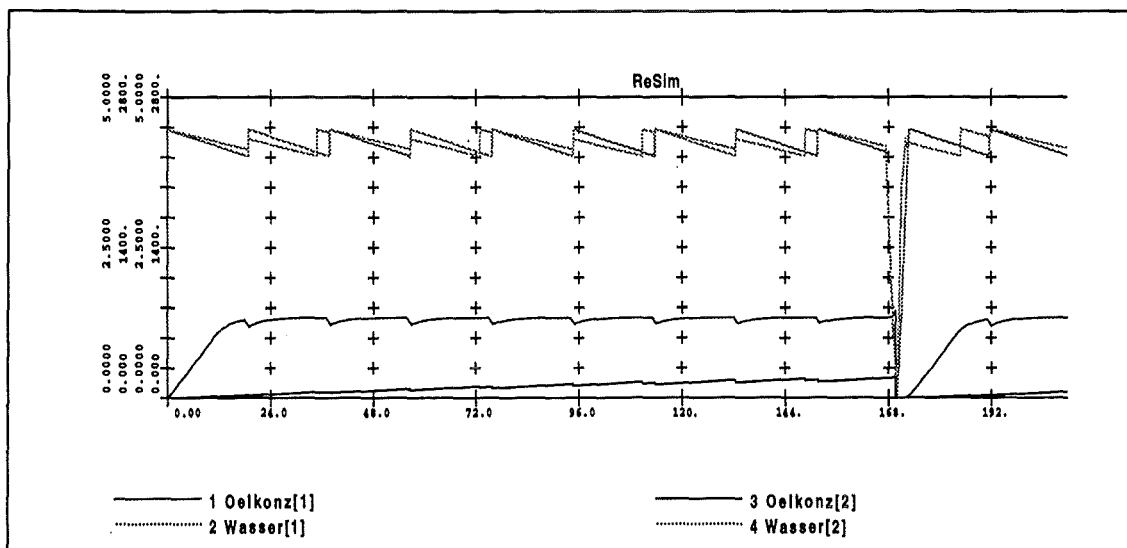


Bild 3: Lauf mit Recyclingmodul an Bad 1

Es ist zu erkennen, daß die Ölkonzentration im ersten Bad zunächst bis auf etwa 1,3 % ansteigt, dann aber durch das Recyclingmodul konstant gehalten wird. In Bad 2 ist erwartungsgemäß der Anstieg des Ölgehalts geringer, da hier der Öleintrag nur aus der Verschleppung der Chargen aus dem ersten Bad resultiert. Jedoch wird nach ca. 168 Betriebsstunden in Bad 2 die zuvor festgelegte maximal zulässige Ölkonzentration erreicht - die Reinigungsbäder müssen verworfen werden. Man sieht hier, wie die Wasserbestände auf Null gehen. Die Zacken im Verlauf des Wasserbestands und auch der Ölkonzentration stammen von der Wasserstandsregelung, die beim Erreichen des minimalen Wasserstands dafür sorgt, daß den Bädern wieder Frischwasser zugeführt wird.

Durch systematische Experimente mit dem Modell der Reinigungsanlage kann das Standzeitverhalten weiter verbessert werden, bis schließlich ein optimales Anlagenkonzept gefunden ist.

4 Ausblick

Erweiterungen und Verfeinerungen des bestehenden Simulationsmodells sind dank des modularen Modellaufbaus mit Hilfe der Modellbeschreibungssprache leicht durchführbar. So ist eine Erweiterung des Modells, vor allem auch um betriebswirtschaftliche Gesichtspunkte denkbar. Dazu kann der Rechnerbaustein um eine umfassendere Kostenbetrachtung unter Einbeziehung von Personalkosten, Energiekosten, Kosten des Anlagenstillstands etc. ergänzt werden.

Um das Arbeiten mit dem Modell zu erleichtern, kann es in einem weiteren Schritt mit einer benutzerfreundlichen graphischen Oberfläche versehen werden, wie es schon für andere Simulationsmodelle geschehen ist. Die Bedienoberfläche stellt Eingabemasken für die Modellparameter zur Verfügung und unterstützt den Anwender bei der Auswahl der aufzuzeichnenden Modellgrößen sowie bei der Ergebnispräsentation. Auf diese Weise kann dem in der Simulationstechnik weniger erfahrenen Anwender ein Funktionsumfang geboten werden, der seiner gewohnten Arbeitsumgebung entspricht.

5 Literatur

Eberle, A.; Kohler, H.:

Recyclingsystem für wäßrige Reinigungsanlagen

Metalloberfläche 44 (1990) 12, S. 481-484, Carl Hanser Verlag, München 1990

Eberle, A.; Lachenmayer, U.; Kohler, H.:

Wäßrige Reinigungssysteme ersetzen CKWs

Metalloberfläche 43 (1989) 12, S. 541-546, Carl Hanser Verlag, München 1989

Richtlinien vom DGO-Arbeitskreis „Reinigen“:

Planung, Beschaffung und Betrieb von Oberflächenbehandlungsanlagen

Galvanotechnik, Band 80 (1989) 7/8, Eugen G. Leuze Verlag, Saulgau 1989

Scholtz, Jens Christian:

Systemanalyse und Modellaufbau für CKW-freie Reinigungssysteme in der Verfahrenstechnik

Diplomarbeit am Lehrstuhl für Operations Research und Systemtheorie

Universität Passau 1994

■

Modellbildung - Ansätze und Anforderungen

Prof. Dr. habil Rolf Grützner

AG Modellierung/Simulation

Fachbereich Informatik

Universität Rostock

PSF 18051

E-Mail: gruet@informatik.uni-rostock.de

1 Vorbemerkung

Simulation ist eine Problemlösungsmethode, bei der durch Experimente mit Modellen Aussagen über das Verhalten der durch die Modelle dargestellten Systeme gewonnen werden können. Simulation dient zur Untersuchung von Systemen, deren Berechnung aufgrund nicht existierender oder sehr komplizierter mathematischer Systembeschreibungen nicht oder nur sehr schwer möglich ist. Sie wird insbesondere auch bei der Untersuchung von Systemen verwendet, an denen in der Realität keine Experimente durchführbar sind. Das trifft besonders auf den Umwelt- und ökologischen Bereich zu. Unmittelbare Voraussetzung zur Durchführung von Simulationsexperimenten ist die Verfügbarkeit von mathematischen Modellen, die auf dem Computer ausführbar sind oder in eine solche ausführbare Form transformiert werden können. Modelle sollen das Verhalten des zu untersuchenden Systems möglichst adäquat widerspiegeln. Im folgenden werden solche Modelle betrachtet, die entweder selbst in computergestützten Simulationsexperimenten genutzt werden können bzw. aus denen solche Modelldarstellungen generiert werden können. Das Einsatzgebiet sei der Umweltbereich sowie die Ökologie.

Infolge der Vergrößerungen des Erkenntnisstandes in diesen Fachgebieten werden die Modelle immer komplexer und schwieriger handhabbar. Andererseits bietet die moderne Informatik Methoden und teilweise auch Werkzeuge an, die wesentlich zur Beherrschung der Komplexität beitragen können. Verbunden damit ist auch eine Weiterentwicklung der Simulationstechnik.

2 Modelle für die Simulation

2.1 Komponenten eines Simulationsmodells

Für die folgenden Betrachtungen sind drei Komponenten einer Modellbeschreibung empfehlenswert: Dazu gehören:

- die Beschreibung des Systemverhaltens vom systemtheoretischen Standpunkt
- die Modellstruktur
- die Angabe von zusätzlichen Bedingungen zur Modellnutzung

Grundsätzlich gilt das Konzept der Trennung von Modell- und Experimentbeschreibung. Ein Modell beschreibt damit eine Klasse von Systemen, erst durch die Experimentbeschreibung (Angabe von Parameterwerten, Inputgrößen und -funktionen, Simulationsziel: Resultatgrößen, Experimentiermethoden u.a.) wird ein konkretes System aus der Klasse von Systemen definiert und für die Problemlösung vorbereitet. Die Experimentbeschreibung definiert auch das Umgebungssystem des Gesamtmodells. Sie bettet das Systemmodell in das Modell der Umgebung des Systems ein. Erst dieses Konzept erlaubt die Mehrfachnutzung von Modellen und den effektiven Aufbau von Modellbanken.

a) Beschreibung des Systemverhaltens

Modelle im Umweltbereich und in der Ökologie sind überwiegend kontinuierliche oder kombinierte Modelle mit Diskontinuitäten in den Zustandstrajektorien (bedingt durch Zeit- und Zustandsereignisse).

Die Modelle werden in der Regel durch gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen beschrieben. Zeitdiskrete Abläufe bzw. Diskretisierungen im Zeitbereich führen bei ökologischen Anwendungen oft zu Differenzgleichungen. Diese Beschreibungsansätze erfordern umfassende Systemkenntnisse. Liegen diese nicht bzw. nur teilweise vor, dann rücken andere Beschreibungen, wie z.B. regelbasierte Ansätze, zellulare Automaten (WUNS77) in den Mittelpunkt der Betrachtungen.

Bei der Beschreibung komplexer Systeme, die aus verschiedenen Systemkomponenten bestehen, kann es erforderlich werden, Komponenten unterschiedlich zu beschreiben. Ein Modell eines komplexen Systems enthält dann unterschiedliche Beschreibungen. Derartige Modelle werden heterogene Modelle genannt. Darauf müssen moderne Simulationssysteme vorbereitet werden. Ansätze dazu werden in SAMOS untersucht (DGPP93), sie können in einer PROLOG-Umgebung durch den Ansatz von KONZ88 realisiert werden.

b) Modellstruktur

Die Modellstruktur kennzeichnet den Aufbau und die Gliederung eines Modells. Ältere Modelle einfacherer Systeme sind meist monolithisch gestaltet, d.h. sie sind nicht in kleinere Modellteile, die Subsysteme beschreiben, zerlegbar. Komplexe Systeme sind effektiv nur durch Zerlegung in Subsysteme beherrschbar. Subsysteme können ihrerseits erneut in weitere Subsysteme zerlegt werden. Dieser Vorgang sollte soweit erfolgen, bis aus Gründen der Problemstellung eine weitere Zerlegung nicht mehr sinnvoll ist. Damit beeinflusst das Untersuchungsziel das Modell (seine Struktur), es bestimmt das Modellziel (s. dazu SCHW90, GRHP94, BOSS89).

Nicht weiter zerlegbare Systemkomponenten heißen Basissysteme, die zugehörigen Modelle Basisobjekte. Durch Zusammenfügen von Basisobjekten entstehen Submodelle, die miteinander verknüpft wieder Submodelle bzw. das angestrebte Systemmodell ergeben. Jedes Systemmodell kann wieder als Submodell in einem komplexeren Systemmodell eingebunden werden. Die Systemdynamik wird nur durch die Basisobjekte beschrieben, d.h. hier stehen die Differentialgleichungen, Regeln oder

anderen mathematischen Ansätze.

Dieser Strukturansatz heißt modular-hierarchisch, ZEIG87. Da es sinnvoll erscheint, durch Basisobjekte und Submodelle vollständige Systemobjekte zu beschreiben, kann mit dem modular-hierarchischem Modellierkonzept objektorientiertes Modellieren realisiert werden. Umwelt-, ökologische- und biologische Systeme können ihre Struktur zeit- und zustandsabhängig verändern (BOSS89), deshalb muß der Ansatz durch "Strukturvariabilität" ergänzt werden. Untersuchungen dazu wurden im SAME-Projekt durch DIMI94 durchgeführt.

c) Bedingungen für die Modellnutzung

Modelle können nur im Rahmen bestimmter Voraussetzungen, den Einsatz - oder Nutzungsbedingungen (Gültigkeitsgrenzen), korrekt genutzt werden. Diese Bedingungen gehören zum festen Bestandteil einer Modellbeschreibung, s. BENZ93. Nutzungsbedingungen müssen formal beschrieben werden, um ihre Einhaltung während des Modellierprozesses und in der Modellnutzungsphase automatisch überprüfen zu können. Zur Realisierung dieser Forderungen sind noch erhebliche Forschungsarbeiten notwendig. Insbesondere bei modular - hierarchischen Modellen, wo u.a. jedes Submodell solchen Bedingungen unterworfen ist und auf die Nutzungsbedingungen des Gesamtmodells zu schließen ist.

Zu den Nutzungsbedingungen gehören die Definitionen von:

- den Gültigkeitsgrenzen des Modells (Wertebereiche der Systemgrößen, der Input- und Outputgrößen in Abhängigkeit von der Systemumgebung)
- den Eigenschaftn des Umgebungssystems des Modells bzw. der Submodelle und Basismodelle (der Prozeßumgebung)
- der Genauigkeit des Modells
- dem Abstraktionsgrad des Modells.

Zu diesen drei Komponenten müssen im Modellbildungsprozeß Angaben erfolgen und in einer Modellbank abgespeichert werden. Sie bilden dann ein Systemmodell. Im Rahmen der Forschung im Umweltbereich und der Ökologie werden aber die unterschiedlichsten Sichtweisen (Ausprägungen) von Systemkomponenten zu untersuchen sein. Eine Vielzahl von unterschiedlichen Modellen ein und derselben Systemkomponente entsteht. Die Modelle unterscheiden sich durch den Abstraktionsgrad, die Einsatzbedingungen, die Genauigkeit, die Zahl von Systemgrößen u.a.. Da in den Modellausprägungen wertvolles Wissen enthalten ist, sollten diese zusammengehörig abgespeichert werden.

3 Modelle komplexer Systeme

Die Zielstellung besteht darin, alle Modelle für eine reale Systemkomponente in einer Modellbank abzuspeichern, um sie oder ihre Submodelle zum Aufbau anderer modular-hierarchischer Modelle zu nutzen. Die Abspeicherung erfolgt in ihrer vollständigen hierarchischen Struktur und für alle Modellvariationen. Auch für die Submodelle in dieser Struktur sind alle

Variationen abzuspeichern.

Zur Lösung einiger damit verbundener Aufgaben, wurde von Zeigler das Schema "system entity structure" - SES - vorgeschlagen, KIM91. Mit SES werden die *Dekomposition*, die *Variation* und die *Kopplung* eines Modelles beschrieben. Die Dekomposition beschreibt, wie das Modell in Submodelle und Basisobjekte zerlegt wird. Die Variation definiert die Menge von unterschiedlichen Beschreibungen (Ausprägungen) jeweils der einzelnen Systemkomponenten (d.h. die Vielzahl von möglichen Submodellen und Basisobjekten für die Systemkomponenten, die sich durch Abstraktion, Präzisierung, unterschiedliche Modellziele u.a. ergeben). Die Kopplung legt Bedingungen fest, wie die einzelnen durch Dekomposition entstandenen Komponenten des Modells zusammengefügt werden können. Auswahlbedingungen beschränken dabei die Koppelmöglichkeiten von den Submodellen, die in der Variation enthalten sind.

Im folgenden werden Aspekte dieses Ansatzes auch unter dem Gesichtspunkt von Erweiterungen zur Lösung der anstehenden Aufgaben näher betrachtet.

3.1 Komplexe Modellschemata

Für eine umfassende Nutzung von Modellen

- zur Dokumentation
- zur Kommunikation zwischen Fachexperten
- bei Modellexperimenten

genügt dieser Ansatz nicht. Dazu sind neben Ergänzungen nach BENZ93 (System ECOBAS) solche zur Prüfung der Konsistenz der Modellkomponenten und zur Modellsynthese notwendig.

Die Erweiterungen des Ansatzes umfassen im einzelnen:

- Bildung komplexer modular-hierarchischer Strukturen; alle Variationen einer Modellkomponente und des Modells werden zusammengefaßt dargestellt, s. Abb. 1.
- dynamische Strukturvariabilität
- Dokumentation; vollständige Dokumentation des Modells und seiner Komponenten
- Benutzungseigenschaften; Definition der Eigenschaften des Umgebungssystems für das Modell und seine Subsysteme
- Konsistenzbedingungen zur Modellsynthese und der Gültigkeitsüberprüfung

Durch Erweiterung von SES ergibt sich die "erweiterte Systemmodellstruktur" ESS nach Abb. 1. Sie bildet die Grundlage der Modellspeicherung in der Modellbank.

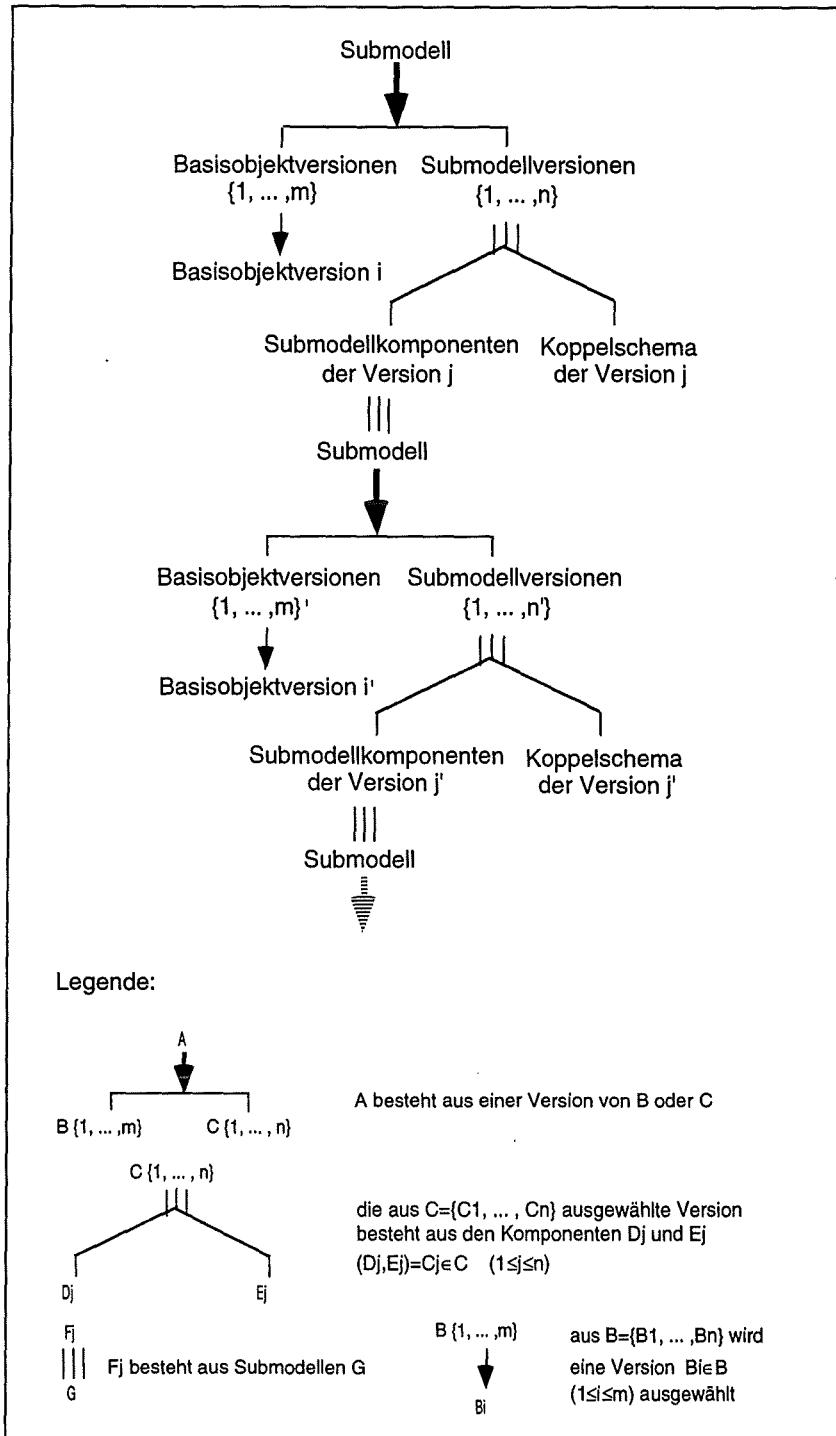


Abb.1 Die erweiterte Systemmodellstruktur ESS

3.2 Generierung von Simulationsmodellen

Ausgehend von einem Modell, nach ESS in der Modellbank gespeichert, werden durch geeignete Operationen die problembezogenen Simulationsmodelle generiert. Die Autoren von SES bezeichnen diesen Vorgang als "Pruning". Das bedeutet, alle für eine

Problemlösung nicht benötigten Modellkomponenten werden entfernt (weggeschnitten), übrig bleiben die für eine Aufgabe relevanten Komponenten.

Im Prozeß der Modellbildung für eine Systemkomponente, muß aber auch das Einbinden von neu entwickelten Submodellen bzw. die Übernahme aus völlig anderen Modellen möglich sein. So entstehen neue Submodelversionen. Im folgenden soll dieser Modellbildungsprozeß als Modellgenerierung bzw. nur als Generierung bezeichnet werden. Die Generierung der Modelle erfolgt mit geeigneten interaktiven Werkzeugen, den Modelleditoren. Während der Generierung sind eine ganze Reihe von Konsistenz- und Gültigkeitsbedingungen zu beachten, um möglichst Modellierfehler auszuschließen. Konsistenzbedingungen sind

- Schnittstellenverträglichkeit zwischen den Modellkomponenten Übereinstimmung von Anzahl und Datentypen der Inputparameter (A,B von Submodell 2; Abb. 2) mit den Outputparametern (X,Y von Submodell 1; Abb. 2).

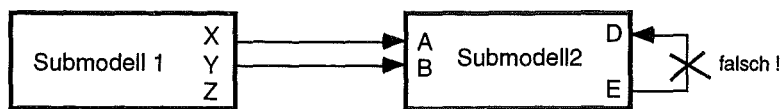


Abb.2 Schnittstellenverträglichkeit (Z wird als Input nicht genutzt; kann fehlerhaft sein)

- Verknüpfung aller für das Modell notwendigen Input- und Outputparameterverbindungen (z.B. Z wird als Inputwert nicht benötigt, Abb. 2)
- logisch-semantische Verträglichkeit
 - sind inhaltlich verknüpfbare Modellkomponenten miteinander verknüpft? (z.B. kann Submodell 1 mit Submodell 2 verknüpft werden - Abb. 2; das ist möglich, wenn die Umgebungsspezifikation für Submodell 2 mit der Funktionalität von Submodell 1 verträglich ist).
- verträgliche Änderungszeitpunkte der Modellkomponenten in der Hierarchie

Gültigkeitsbedingungen sind

- statische Übereinstimmung des Gültigkeitsbereiches von Input- und Outputparametern mit den in den Modellkomponenten spezifizierten (während der Simulationsexperimente muß die Prüfung außerdem dynamisch erfolgen)
- statische Übereinstimmung der Gültigkeitsbereiche der verknüpften Submodellkomponenten - (erfordert eine formale Gültigkeitsbereichsdefinition für Submodelle)

Bei der Generierung eines Modells erfolgt nur die Überprüfung statischer Bedingungen. Im folgenden sollen kurz noch einige Gedanken zur dynamischen Prüfung vor, während und nach den Simulationsexperimenten geäußert werden. Sie erfordern die Generierung von Anweisungsfolgen aus Bedingungen, Definitionen und Modellhypothesen, die in der Modellbeschreibung angegeben sind, um damit spezielle Simulationsexperimente durchzuführen, z.B. zur Überprüfung des Einsatzbereiches eines Modells aus

Modellhypothesen und von Nutzungsbedingungen. In dem Zusammenhang steht auch die Frage nach der Analyse der Eingabedaten, um festzustellen, ob die Anforderungen des Modells und der Simulationsziele erfüllt werden, s.a. FOX89. Das sind Einsatzgebiete innovativer Methoden aus dem KI-Bereich.

4 Werkzeuge zur Arbeit mit Modellen

Die Modellbildung und Generierung (nach Abschn. 3) erfolgt mit einem interaktiven graphischen Modelleditor.

```

basicobject SUN(out:S);
  constants float PI=3.14;
  var double S=0.0;
  equations
    S = 95.9 * (1 + 0.635 * sin(2*PI*TIME));
end.
basicobject LAKE(inp:S; out:P,H,C);
  states float P=0.0,          /*Pflanzen*/
           H=0.0,             /*Pflanzenfresser*/
           C=0.0;             /*Fleischfresser*/
  var double S=95.9;
  equations
    P' = S - 4.03 * P;
    H' = 0.48 * P - 17.87 * H;
    C' = 4.85 * H - 4.65 * C;
end.
basicobject ORGANIK(inp: P, H, C);
  states float O=0.0;          /*Ablagerung Boden*/
  var float P, H, C;
  equations
    O' = 2.55 * P + 6.12 * H + 1.95 * C;
end.
basicobject ENVIRON(inp: P, H, C);
  states float E=0.0;          /*Abgabe an Umwelt*/
  var float P, H, C;
  equations
    E' = 1.00 * P + 6.90 * H + 2.70 * C;
end.

```

```

submodel NATUR(out: O1, O2, O3);
  components
    SUN(out: S);
    LAKE(inp: S; out: P, H, C);
  connections
    SUN.S -> LAKE.S;
    LAKE.P -> O1;
    LAKE.H -> O2;
    LAKE.C -> O3;
end.
submodel UMWELT(inp: I1, I2, I3);
  components
    ORGANIK(inp: P, H, C);
    ENVIRON(inp: P, H, C);
  connections
    I1 -> (ORGANIC.P, ENVIRON.P);
    I2 -> (ORGANIC.H, ENVIRON.H);
    I3 -> (ORGANIC.C, ENVIRON.C);
end.
submodel CEDARBOG;
  components
    NATUR(out: O1, O2, O3);
    UMWELT(inp: I1, I2, I3);
  connections
    NATUR.O1 -> UMWELT.I1;
    NATUR.O2 -> UMWELT.I2;
    NATUR.O3 -> UMWELT.I3;
end.

```

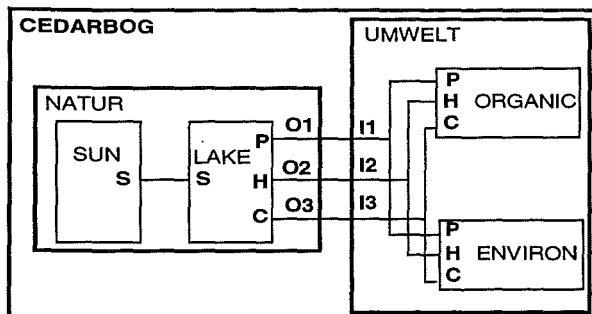


Abb.3 Modular-hierarchisches Modell in SAME-MDL

Im SAME-Projekt wurde das Grundkonzept eines Modelleditors entworfen und realisiert, um einen Teil der Anforderungen zu realisieren, BECK93. Er enthält die wesentlichen Editfunktionen, um graphisch modular-hierarchische Modelle zu entwickeln und zu editieren sowie um Basisobjekte graphisch und sprachlich zu beschreiben. Abb. 3 zeigt ein entsprechendes modular-hierarchisches Modell.

Die Erweiterung der Funktionsbreite in diesem Modelleditor auf die oben geforderten Modellier-, Generier- und Prüffunktionen ist einfach möglich, ebenso wie die Anpassung an andere Modellbanken.

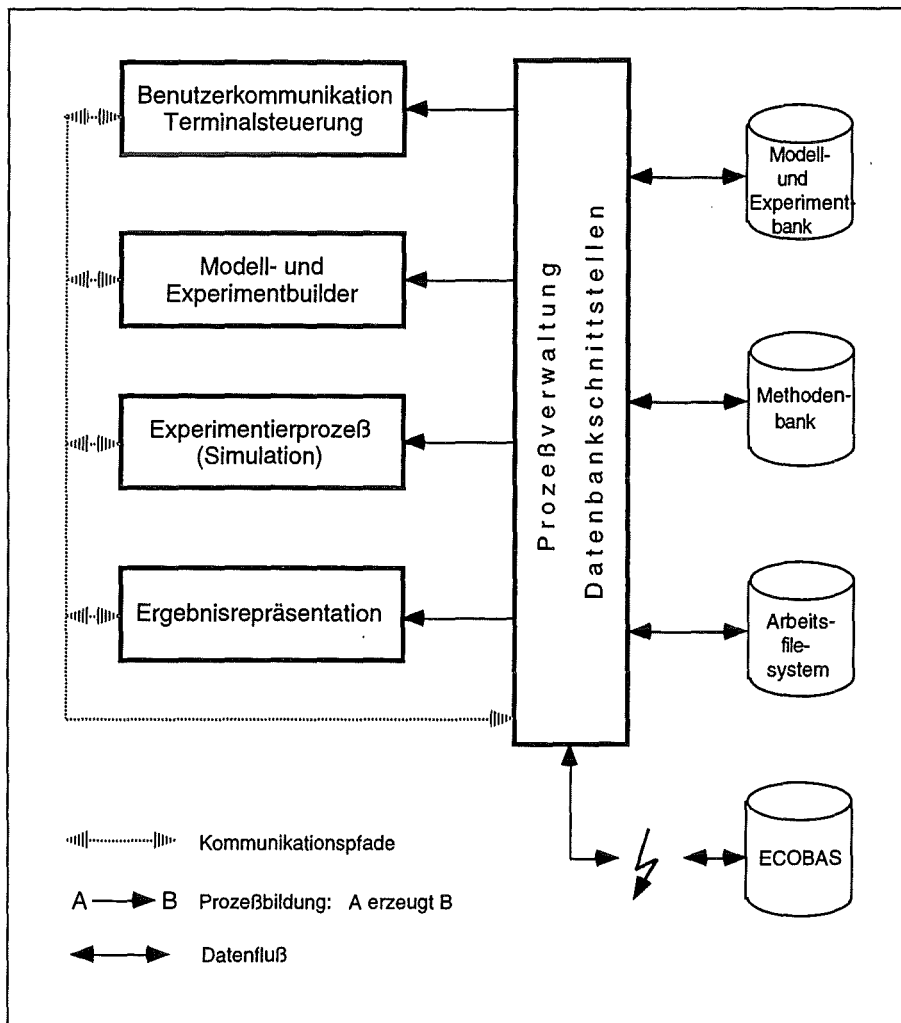


Abb.4 Systemstruktur SAMOS - stark vereinfacht.

Die Einordnung des Modell- und Experimentbuilders in das System SAMOS zeigt Abb. 4.

Rechenmodelle werden schrittweise erzeugt:

1. Modellbeschreibung

- a) neues Modell sprachlich oder graphische Eingabe
- b) existierendes Modell editieren-modifizieren

2. Transformation

Modellbeschreibung ---> C++

3. Compilation

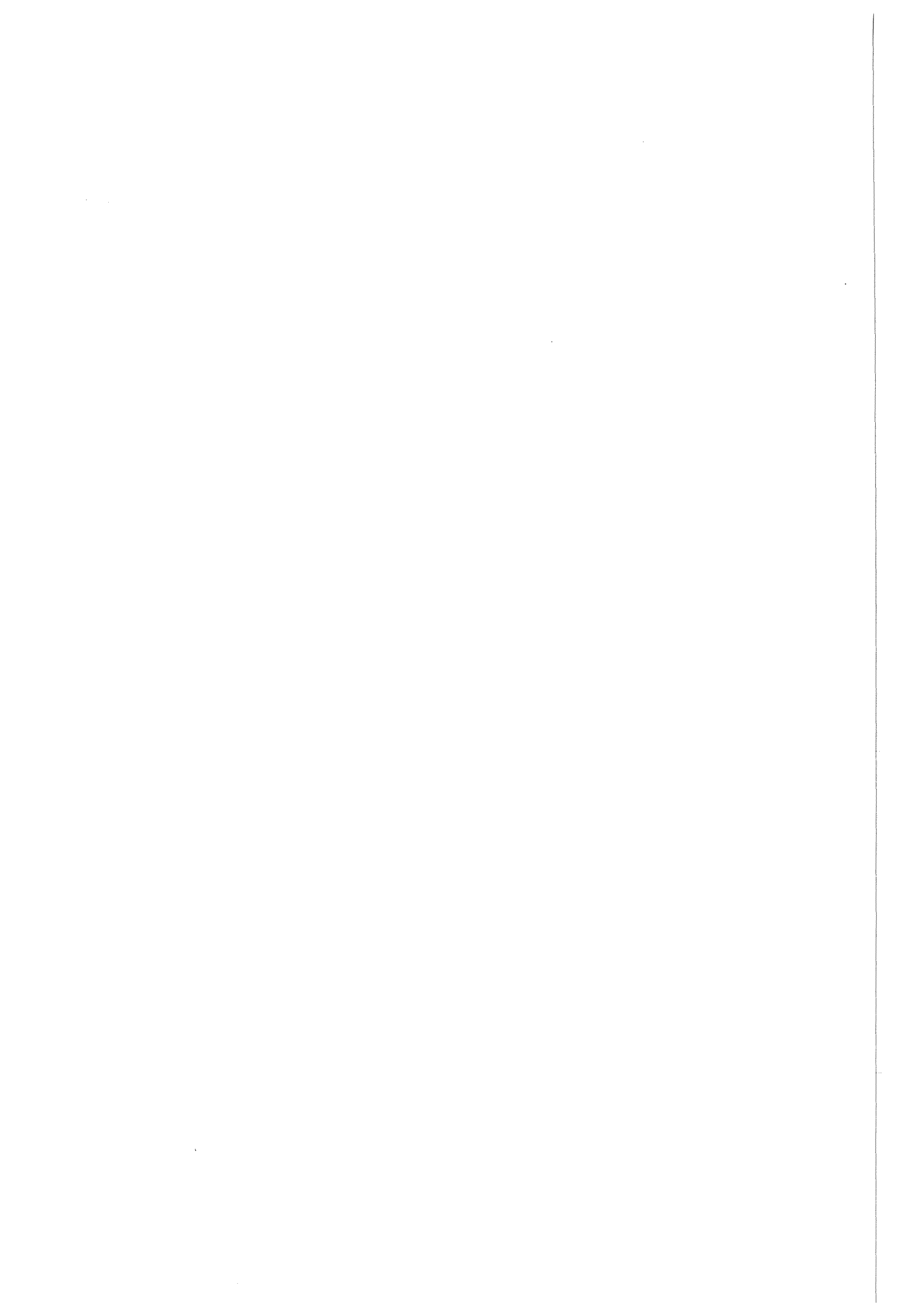
C++ ---> ausführbares Programm, d.i. das Rechenmodell

Routinen zur Konsistenz- und statischen Gültigkeitsprüfung werden im Schritt 1 einzufügen sein.

Die in den Schritten 1., 2. und 3. auf Grund von Eingabe und Transformation entstehenden Modelldarstellungen werden ebenfalls in der Modellbank gespeichert. Sie stehen bis zur expliziten Löschung zur Verfügung.

Literatur

- BECK93 Becker, Michael: Die Realisierung des Submodellkonzeptes in SAMOS. Universität Rostock, FB Informatik, Diplomarbeit: Prof. R. Grützner. 17. September 1993. S. 1 - 94; Anhänge. 1993
- BENZ93 Benz, Joachim: ECOBAS Dokumentation mathematischer Beschreibungen ökologischer Prozesse. 3. Treffen des AK "Werkzeuge für Modellbildung in Umwelthanwendungen", Kassel /Witzenhausen, 1993. Kernforschungszentrum Karlsruhe, S. 55-63.
- BOSS89 Bossel, Hartmut: Simulation dynamischer Systeme - Grundwissen, Methoden, Programme. Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg Verlag, 1989.
- DIMI94 Dimitrov, E.: Modell- und Experimentbeschreibungen für Umweltproblemstellungen und ihre Implementation. Universität Rostock, FB Informatik, AG Modellierung/Simulation; Preprint CS-01-94, 1994, S.1-47.
- DGPP93 Dimitrov, E. et al.: Arbeitsbericht zum Projekt SAME. Universität Rostock, FB Informatik, AG Modellierung /Simulation. 1993.
- FOX89 Fox, Mark S. et al.: Knowledge-Based Simulation: An Artificial Intelligence Approach to System Modeling and Automating the Simulation Life Cycle. in: Artificial Intelligence, Simulation, And Modeling. Eds. Lawrence E. Widman, Kenneth A. Loparo and Norman R. Nielsen. New York: John Wiley & Sons, 1989, S. 447 - 486.
- GRHP94 Grützner, R.; A. Häuslein und B. Page: Softwarewerkzeuge für die Umweltmodellierung und -simulation. in: Umweltinformatik. B. Page and L.M. Hilty. ed. Handbuch der Informatik, Bd. 113 München, Wien: Oldenbourg Verlag, 1994, S. 157-182.
- KIM91 Kim, Tag Gon: Hierarchical System Concepts for Simulation of High Autonomy Systems. Int. J. General Systems (19), 1991, S. 195 -216.
- KONZ88 Konzack, U.: Werkzeuge einer Programmierumgebung für die Modellierung und Simulation in PROLOG. Diss. A. Humboldt Universität zu Berlin, 1988.
- SCHW90 Schwarze, G.: Digitale Simulation. Berlin: Akademie Verlag, 1990.
- WUNS77 Wunsch, Gerhard: Zellulare Systeme. Wiss.Techn. Bibliothek. Berlin: Akademie Verlag, 1977.
- ZEIG87 Zeigler, B.P.: Hierarchical Modular Discrete-Event Modelling in Object-Oriented Environment. Simulation (50), No.5, 1987, S. 219-230



Dynamische Simulation als Basis für Lernprogramme

Ein Softwarekonzept

Klaus-F. Kaal

TIMOlogic GmbH

Fuchsweg 18b

78351 Bodman-Ludwigshafen

Einleitung

In der Umweltinformatik kommt es mehr als in anderen Bereichen darauf an, daß die Ergebnisse der wissenschaftlichen Tätigkeiten, und hier insbesondere die Ergebnisse von Simulationen, Außenstehenden optimal vermittelt wird. Die Resultate sollen andere Menschen zum Nachdenken bringen und möglicherweise zu eigenverantwortlichen Verhaltensänderungen anregen. Wegen der Wichtigkeit des Themengebietes kann man sich nicht nur zurückziehen, seine Ergebnisse publizieren und darauf vertrauen, daß diese schon auf die eine oder andere Art an die richtigen Adressaten gelangen wird. Die Informatik hat didaktische Mittel in der Hand, die hervorragend dazu geeignet sind, das eigene Wissen den anderen Menschen zu präsentieren. Nachfolgen wird am Beispiel der Kombination von zwei Softwarepaketen ein Beispiel gegeben.

Simulation und Didaktik

Simulation und Didaktik (Die Wissenschaft vom Lehren und Lernen) sind sich ergänzende und sich bedingende Funktionen. Jede Simulation hat didaktische Elemente und jede gute Didaktik im naturwissenschaftlichen Bereich kann hohen Nutzen aus der Simulation ziehen.

Bedeutung der Simulation in der Didaktik

Das Lernen wird aus theoretischer Sicht in zwei Arten unterteilt:

- Das verhaltensorientierte (klassisches konditionierendes) Lernen
- Das erkenntnisorientierte (kognitive) Lernen

Beim von PAWLOW erarbeiteten konditionierenden Lernvorgang wird von der Wechselbeziehung von Reiz und Reaktion ausgegangen. Es wurde ver- und untersucht, welche Beeinflussungsmöglichkeiten für Mensch und Tier bestehen, die als Lernvorgang bezeichnet werden kann. Solche Erklärungsversuche bewegen sich hauptsächlich auf archaischer Ebene. Obwohl diese Vorgänge bei starker Abstraktion in jedem Lernvorgang vorhanden sind, spielt diese Betrachtungsweise für die didaktische Anwendung der Computersimulation nur eine untergeordnete Rolle.

Das kognitive Lernen betrachtet die Lernvorgänge aus erkenntnistheoretischer Sicht. Es werden die Bedingungen erfaßt, unter denen der Lerner den Wissensstoff aufnimmt und in seine Wissenswelt einbaut. In den Bereich der kognitiven Psychologie gehören auch die informationstheoretischen Betrachtungen zum Lernvorgang.

Besonders wichtig für die Beurteilung des didaktischen Nutzens der Computersimulation ist die Betrachtungsweise, daß der Mensch den aufgenommenen Wissensstoff in seine eigene Bilderwelt (mentale Objekte oder Vorstellungsbilder) übersetzen muß. Obwohl diese Vorstellungsbilder abstrakt und nicht an visuelle Eigenschaften gebunden sind, kann bei den meisten Menschen die Übersetzung recht gut durch reale Grafiken und Bilder unterstützt werden. Trotzdem muß die

individuelle Übersetzungsarbeit vom Lerner geleistet werden. Besonders schwierig wird es für den Menschen, vernetzte Zusammenhänge in seine Bilderwelt zu übersetzen. Hier versagt die normalerweise linear angelegte Vorstellung des Menschen. Besonders interessant ist, daß in dieser Vorstellungswelt auch über den Tastsinn gewonnene Informationen gespeichert werden können. Vorstellungsbilder sind hierarchisch angelegt und speichern weniger konkrete Details, und mehr Bedeutungen.

Allen vorgenannten Eigenschaften der menschlichen Kognition kommt die Computersimulation entgegen. Sie sorgt dafür, daß Informationen sich direkt in die Vorstellungswelt einfügen. Durch das Anbieten taktil / haptischer und visueller Information wird der internen Bilderwelt eine Fülle von Umsetzungsmöglichkeiten angeboten. Jeder Lerner reagiert mit einem unterschiedlichen Lernprofil auf die angebotenen Informationen, das heißt, jeder Lerner nutzt die angebotene Information mit unterschiedlicher Gewichtung.

Der Lerner hat bei der Verwendung von dynamischen Computersimulationen, je nach didaktischer Tiefe, mehrfachen Nutzen:

- Im Vorbereitungsprozeß entstehen durch Beschäftigung mit dem realen Vorbild, Vorstellungsbilder der Realität.
- Im Modellierungsprozeß setzt der Lerner das Wissensobjekt in mehrere Bilder um: sprachliche, funktionale und grafische Bilder. Im Verlauf dieses Prozesses entstehen sozusagen als „Nebeneffekt“ ein Strauß von Bedeutungsbildern.

Während Simulationsexperimente entstehen flexible Bedeutungsbilder, die sich durch „Try and Error“ zu Bedeutungskarten zusammensetzen. Allgemeinsprachlich spricht man hier von „Erfahrungen“. Werden die Erfahrungen in der mentalen Bilderwelt verdichtet und sozusagen abstrahiert, so entsteht „Intuition“. Man fühlt sich in der Lage, Zusammenhänge zu beurteilen, ohne sie konkret analysiert zu haben.

Anwendung der didaktischen Simulation

Die Verwendung von dynamischen Simulationen in Ausbildungssituationen bietet sich für zwei Nutzergruppen besonders an:

- Lerner, die Simulationen in explorierender Weise nutzen, um die Reaktionsweisen von Systemen kennenzulernen und zu trainieren. Hierzu zählen fertige Modelle über chemische Reaktionen, Steuerung von technischen Prozessen u. ä.
- Lerner, die neben den Reaktionsweisen eines Systems auch das System selber besser verstehen lernen wollen. Diese Gruppe nutzt die Simulation am besten, indem sie den vollständigen Weg der Modellierung geht. Dieser Weg kann ebenfalls auf freie, explorative Weise begangen werden, aus didaktischen Gründen sollte aber möglichst der vom Experten begleitete Weg gewählt werden.

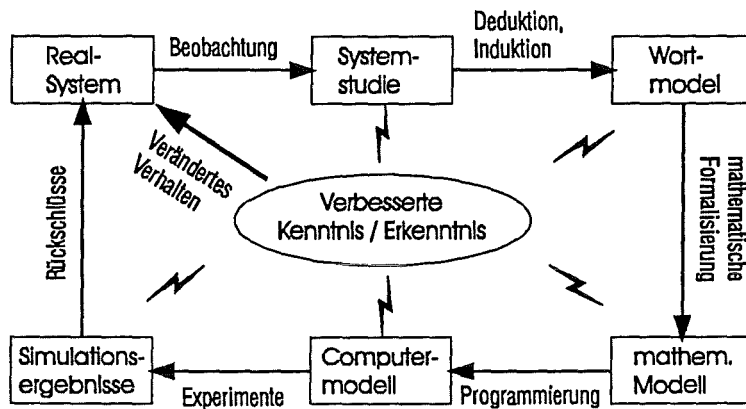
Die letztere Gruppe stellt natürlich die höheren Ansprüche. Da ihre Ansprüche auch die Exploration einschließen, wollen wir uns mit dieser beschäftigen.

Wie bereits erwähnt, geht es bei didaktischen Simulationen darum, in einzelnen oder allen Phasen der Modellierung die Konvertierung des Wissensstoff in die eigene Bilderwelt zu unterstützen. Da dieser Umsetzungsprozeß individuell verschieden ist, sollte diese Unterstützung auf verschiedenen Ebenen ablaufen:

- Beim Vorbereitungsprozeß
- Beim Modellierungsprozeß
- Bei der Simulation
- In der Nachbearbeitung

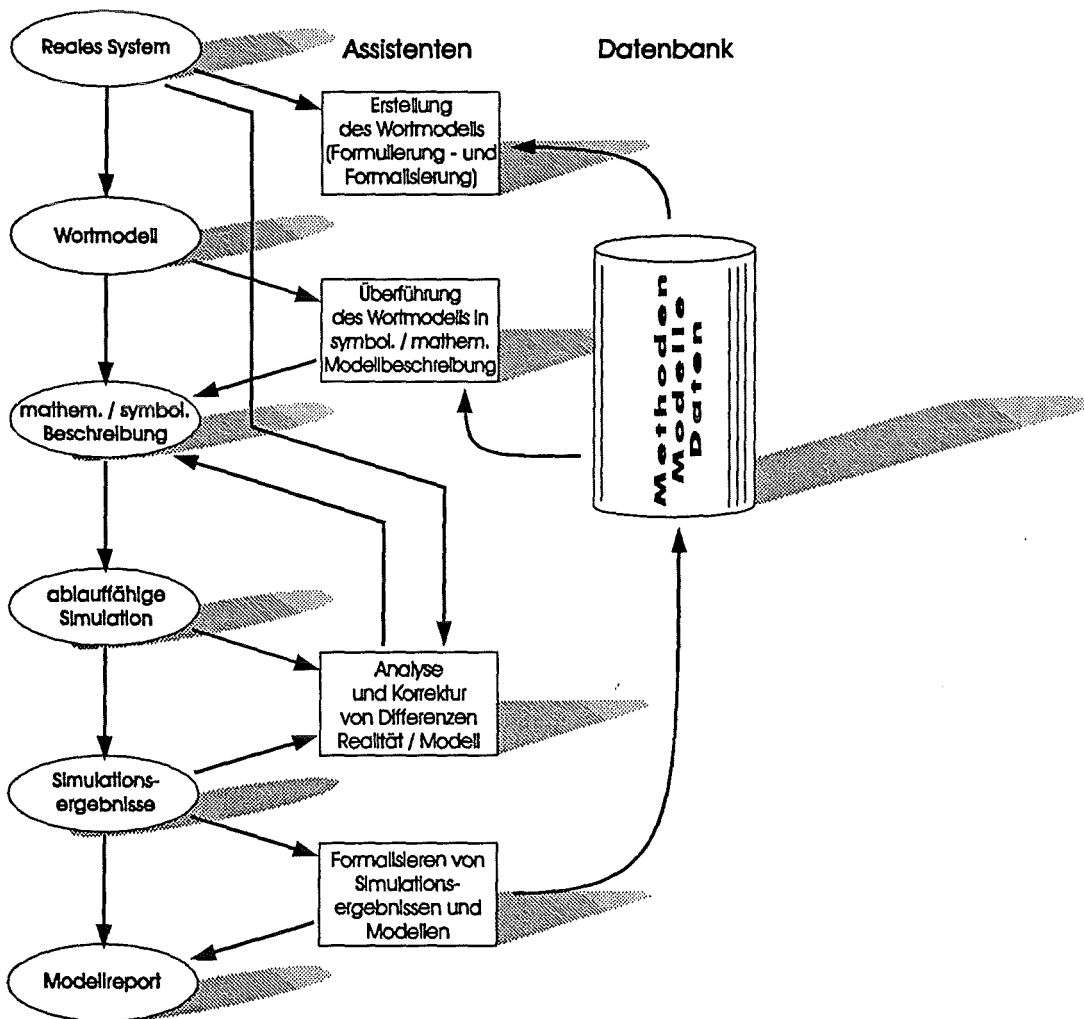
In dem hier diskutierten Zusammenhang heißt Unterstützung zunächst Hilfen im Verfahren (wissensbasierte Hilfen zur Erstellung einer Simulation), dann aber auch Unterstützung der eigenen Erkenntnis Hilfen bei der Auswertung.

Der Zyklus einer Simulation (vgl. GRÜTZNER, BOSSEL, PAGE) soll hier aus dem speziellen Blickwinkel modifiziert werden:



Ein didaktisches Hilfe- und Lernsystem müßte jeden dieser Schritte mit einem eigenen Tool, das wahlweise reines Kenntnisswissen oder / und Hilfestellungen am Realsystem / Modell selber bietet. Ein guter Ansatz sind die derzeit gebräuchlichen Assistenten (engl. wizards).

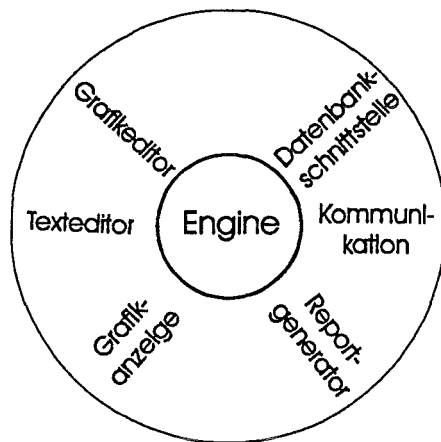
Ein didaktisch unterstützendes System könnte folgendermaßen aussehen:



TIMOSim

TIMOSim ist ein Entwicklungssystem für dynamische Simulationen, das von seiner Zielsetzung her zunächst in möglichst vielen Bereichen für didaktische Aufgaben der Simulation eingesetzt werden soll. Da aber die Komponenten der Wissensvermittlung und der Forschung und Lehre sich stark überschneiden, wird sich dieses Werkzeug auch mehr und mehr im wissenschaftlichen Bereich einsetzen lassen.

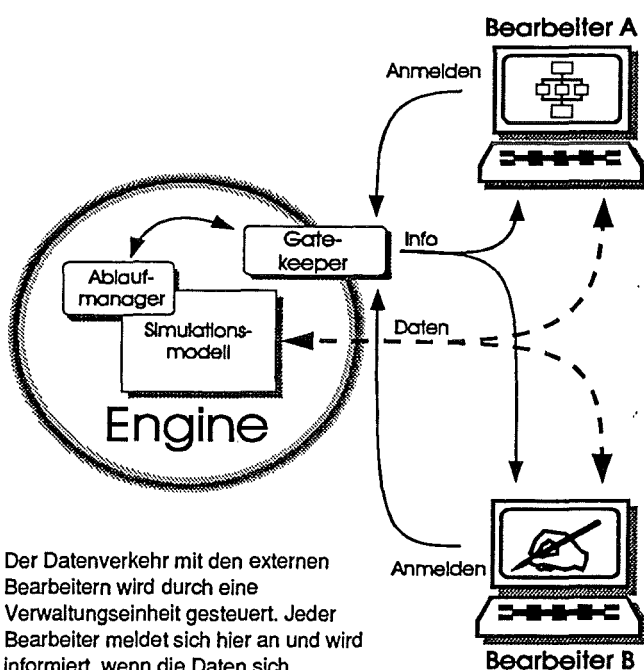
Um die Verbindung von TIMOSim mit Toolbook zu verstehen, sollen hier kurz die beiden Programme vorgestellt werden. Derzeit ist TIMOSim in der Version 1.2 erhältlich. Die nachfolgend beschriebene Verbindung von TIMOSim mit anderen Programmen ist allerdings erst mit der Version 2.0 möglich.



Durch Trennung des Datenkerns (Rechenkern) von der Oberfläche können die verschiedensten Bearbeiter auf die Daten der Simulation zugreifen und bei Bedarf und Freigabe auch manipulieren..

Trennung von Simulationsmodell und Oberfläche

Um möglichst vielfältig mit einer Simulation umgehen zu können, wurde das Datenmodell und die



Der Datenverkehr mit den externen Bearbeitern wird durch eine Verwaltungseinheit gesteuert. Jeder Bearbeiter meldet sich hier an und wird informiert, wenn die Daten sich verändert haben oder wann er Daten manipulieren darf.

Oberfläche konsequent getrennt. Dadurch ist es möglich, auf das Datenmodell mit verschiedenen Programmen und -teilen zuzugreifen. Die Oberfläche kann frei nach ergonomischen Gesichtspunkten ohne Rücksicht auf die Rechenfunktionalität eingerichtet werden.

Der Datenteil wird als „Engine“ bezeichnet, während alle zugreifenden Programme unabhängig davon, ob sie bestimmend oder lesend zugreifen, als „Bearbeiter“ angesehen werden.

Die Engine (Das Simulationsbetriebssystem)

In der Engine werden Datenobjekte gehalten, die von außen manipuliert werden können. Sie können aus einer oder mehreren Variablen bestehen, und beliebige berechnende Beziehungen enthalten. Von den Bearbeitern können zur Vereinfachung Datenobjekte vorkonfiguriert werden. Eine zentrale Eigenschaft dieser Objekte ist es, daß sie sich selbst und andere Objekte planen, d.h. aktualisieren können. Dies geschieht innerhalb der objekt-eigenen Planungsroutine, und ist vom Benutzer frei konfigurierbar. Dadurch ist die Engine in der Lage, ereignisgesteuerte Simulationen und natürlich auch zeitdiskrete Simulationen durchzuführen.

Die Engine hat einen sehr robusten Aufbau, der unter anderem aktiv den Kontakt zu den Bearbeitern registriert und verwaltet.

Bearbeiter(die Simulationsoberfläche)

Als Bearbeiter werden alle Programme oder Programmteile geführt, die in einer manipulierenden oder auf darstellende Weise auf den Datenbestand der Engine zugreifen. Aus Sicht der Engine ist es dabei unwichtig, ob dieses Programmteil ein Userinterface (grafische Benutzerschnittstelle) oder eine Kommunikationsschnittstelle zu anderen Programmen darstellt. Während der Simulation wird jede Änderung des Datenbestandes von der Engine registriert und die Aktualisierung aller Bearbeiter veranlaßt.

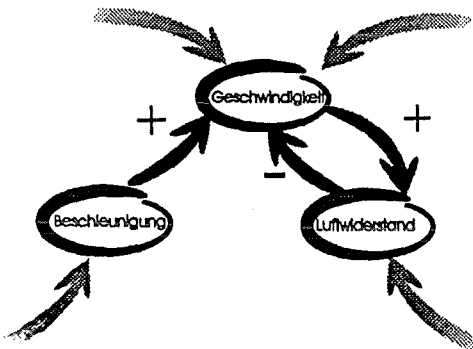
Bearbeiter Designwindow

Das Designwindow ist eine grafisch - symbolische Editiereinrichtung für Simulationsmodelle. Es lassen sich auf recht einfache Art Symbole anlegen und editieren, die den mathematischen Zusammenhängen des Modells entsprechen. Derzeit stellt das Designfenster drei vordefinierte

Datenobjekte zur Verfügung: Fakt, Input und Relation.

Fakte sind Objekte mit einer Zustandsvariablen. Diese Variable wird von einigen notwendigen Variablen, wie Grenzwerte und Startwert flankiert. Ein Fakt bekommt Werte von außen über Relationen, die über eine editierbare Formel verknüpft werden können. Fakte werden auf der Oberfläche als ovale Symbole dargestellt.

Inputs sind spezialisierte Fakte, die auf Bedarf zur Simulationszeit Dialogboxen



erzeugen können, die vom Anwender Werteingaben abfordern. Das Symbol für Inputs sind verschieden und zeigen deren Eigenschaften an.

Relationen sind Objekte, die als Übertragungsfunktionen zwischen Fakten und / oder Inputs dienen. Sie übertragen einen Eingangswert (Quellwert) in einen Ausgangswert (Zielwert). Die Übertragungsfunktion kann eine Formel oder eine Tabelle (Kennlinie) sein. Relationen werden auf der Oberfläche als Pfeile dargestellt. Jeder Pfeil verbindet zwei Fakte oder einen Input mit einem Fakt. Sie beschreibt die Auswirkung einer Größe auf eine anderen.

In der Zukunft sind wiederverwendbare Spezialmodule, hierarchische Gruppierungen, komfortabel konfigurierbare Zufallsgeneratoren und userspezifische Module vorgesehen.

Bearbeiter Texteditor

Der Texteditor erlaubt das Editieren des Modells auf sprachlicher Ebene. Er gleicht einer Programmiersprache. Es ist vorgesehen, dem Texteditor die Möglichkeit zu geben, C++ Code zu erzeugen.

Bearbeiter Eingangsdaten

Dieser Bearbeiter sammelt Daten über verschieden Wege, bereitet sie auf und stellt sie dem Modell als Eingangsvariable zur Verfügung. Dies könne Daten aus Datenbanken, von Hardware- oder Softwareschnittstellen oder Module mit komplexen Zufallszahl - Generatoren sein.

Bearbeiter Ergebnisaufbereitung

Die Ergebnisaufbereitung greift nichtmanipulierend auf die Daten zu. Sie stellt die Werte auf verschiedene Arten dar.

Bearbeiter Datenbankschnittstelle

Über die Datenbankschnittstelle lassen sich die Daten und komplette Modelle in einer Datenbank speichern und von dort wieder abrufen.

Bearbeiter Dokumentation

Der Dokumentation kommt eine sehr wichtige Bedeutung zu. Sie hat Zugriff auf das gesamte Modell und auch auf Daten, die in Bearbeitern erzeugt wurden. Dadurch können in einem Report alle Grafiken der Bearbeiter und die sprachliche Beschreibung des Modells und dessen Wirkungsweise zusammengefaßt werden.

Bearbeiter Datenkommunikation

Dieser Bearbeiter ist zur Kommunikation über Software und vorgesehen.

Bearbeiter andere Programme

Diese Schnittstelle wird von beliebigen anderen Programmen genutzt. In vielen Fällen ist dies auch die Schnittstelle, die benutzt wird, wenn die Engine als dynamische Linkbibliothek von anderen Programmen verwendet wird. Die hier beschriebene Kombination mit Toolbook verwendet diesen Bearbeitermodus.

Toolbook

Toolbook ist ein Werkzeug, das sich sehr an das weit verbreitete Programm „Hypercard“ für den Apple Macintosh anlehnt. Sehr viele Eigenschaften sind mit diesem Programm direkt vergleichbar oder sind lediglich anders benannt. Der Vorteil von Toolbook liegt in der grafisch guten Oberfläche, der intuitiv angelegten Objektorientierung und dem guten Messagekonzept. Desweiteren kann das Programm mit einer sehr mächtigen und gleichzeitig einfachen Skriptsprache programmiert und mit Multimediaeigenschaften versehen werden.

Alle diese Eigenschaften machen das Programm zu einem hervorragenden Mittel für CBT (Computerbased Training).

Das Buchkonzept

Man hat versucht, Toolbook auch im Bereich der Begriffe intuitiv zu gestalten. So wird eine Datei als „Buch“ bezeichnet. Genauso wie in einem Buch besteht das Toolbook Buch aus beliebig vielen Seiten. Diese erscheinen auf dem Bildschirm als Fenster. Jedes Blatt gehört zu einem Hintergrund. Sowohl auf dem Hintergrund, als auch auf der Seite können Grafiken, Textfelder oder Buttons, kurz Objekte, angelegt werden. Das Anlegen der Objekte ist sehr einfach und auch von Anfängern leicht zu tun. Wie in einem Buch können die Seiten durchgeblättert werden. Dabei erscheinen auf allen Seiten mit gleichem Hintergrund die auf diesem angelegten Objekte an derselben Stelle. Objekte, die auf der Seitenebene angelegt sind, sind auch nur auf dieser Seite zu sehen.

Objektorientierung in Toolbook

Toolbook, Hintergründe Seiten und Grafik / Buttonelemente sind miteinander verwandte Objekte. Alle haben über Dialogboxen oder die Skriptsprache veränderbaren Eigenschaften, wie Größe, Position, Farbe, Inhalt etc. Darüber hinaus hat jedes der Elemente eine Programmier Ebene für Skriptprogramme.

Messages

Maus.- Tastaturaktionen und sonstige Ereignisse wandern als Message durch die hierarchische Ebenenstruktur der Objekte: Grafisches Objekt / Button, Seite, Hintergrund, Toolbook. Auf jeder

dieser Ebenen kann die Message mit Handlern der Skriptsprache abgefangen und darauf reagiert werden. Auch von der Skriptsprache selber lassen sich Messages verschicken.

Programmieren

ein Nutzer kann Toolbook auf verschiedene Art nutzen: als Grafische Oberflächensammlung, durch die nur geblättert wird, als einfache Datenbank (aufwendigere Lösungen sind mit einer dBase Schnittstelle zu realisieren), als komplexe interaktive Oberfläche.

Möchte man in Toolbook programmieren, so wird in der Regel zunächst die Oberfläche mit grafischen Werkzeugen gestaltet. Dies geschieht nach den üblichen Regeln der Windows Oberfläche. Es werden Buttons und Grafiken, Eingabefelder und Listen angelegt. Im einfachsten Fall erzeugt der Nutzer außer seinen Oberflächenelementen noch einen oder zwei Buttons, die ohne Programmieraufwand zur nächsten oder vorhergehenden Seite führen.

Anschließend werden in jedes Objekt mit der Skriptsprache die Reaktionen auf Ereignisse festgelegt.

Die Skriptsprache

Wie bereits erwähnt, antwortet ein Objekt mithilfe der Skriptsprache auf eine Message. Die Sprache selber ist sehr umfangreich, aber einfacher und intuitiver gestaltet, als Basic oder Pascal. Alle wesentlichen Systemmeldungen sind zugänglich. Es können alle Objekte adressiert werden. Dadurch lassen sich alle Eigenschaften der Objekte manipulieren.

Toolbook als Autorenwerkzeug

Sicher kann ein Nutzer, der keinerlei Vorkenntnisse im Programmieren hat, kaum mit einem Werkzeug wie Toolbook ein Lernprogramm erzeugen. Allerdings kann jeder, der sich in einigen Stunden mit diesem Werkzeug vertraut gemacht hat, eine einfache Navigation zustande bringen. Trotzdem sollten noch einige Werkzeuge zur Erstellung von Lernprogrammen zu dieser Basissoftware hinzukommen. Besonders interessant in diesem Zusammenhang ist, daß Toolbook eine vollständige Schnittstelle zu Multimediasystemen hat. Dadurch können Videosequenzen oder Sound problemlos in Toolbook eingebunden werden.

In einer gerade erscheinenden neuen Version kann man eine Toolbook - Applikation ohne zusätzliche Software zu einem „Stand - Alone“ Programm machen, also eine EXE Datei erzeugen.

Didaktische Simulationen

Die Verbindung von Toolbook und TIMOsim

Die Verbindung von TIMOsim und Toolbook kann auf vielfältige Art vorteilhaft sein:

- Als grafische Oberfläche für TIMOsim zur Simulationszeit. Auf ihr können Aktionselemente (Wertevorgaben) und vielfältige Werteanzeigen ein User - Interface bilden. Die Engine von TIMOsim und Toolbook haben das Verhältnis von Uhrwerk und Zifferblatt.
- Als Multimedia Autorensystem, das durch TIMOsim in bestimmten Sequenzen Simulationscharakter erhält. Es können verzweigte Lernprogramme u.a. auch mit Hypertextfunktionen gebildet werden. Dadurch wird reiner Wissensstoff mit kognitiven Lehrmethoden verbunden.
- Als schnell programmierbare Link zu Datenbanken, Tabellenwerkzeugen u.a.
- Als Basis für Assistenten - Bearbeiter.
- Als flexibles Visualisierungswerkzeug.
- Bei der Erstellung neuer Bearbeiter als Tool für rapid prototyping.

Die Besonderheit von Toolbook, einfachste Programmierung und Anwendung auch von Multimediatechniken, gibt in der Kombination mit TIMOsim dem spezialisierten Wissensträger ein hervorragendes Werkzeug in die Hand, um sein Fachwissen an andere weiterzugeben.

Toolbook als Bearbeiter von TIMOsim

Die Engine kann von Toolbook als Windows -DLL ins Programm eingebunden werden. Zur komfortablen Programmierung steht in Kürze ein Treiber zur Verfügung, der besonders einfach Bildschirm - Einstellelemente und Anzeigeelemente verwenden läßt stellt.

Zusammenfassung

Die Verwendung von dynamischen Simulationstechniken ist hervorragend geeignet, den kognitiven Prozeß eines Menschen in Gang zu setzen. Allerdings muß die Modellierung für Menschen, die keine Experten auf diesem Gebiet sind, durchschaubarer gemacht und mit mehr Hilfen ausgestattet werden.

Mit TIMOsim wurde ein offenes Entwicklungstool für diskrete Simulationen geschaffen. Ziel dieser Entwicklung ist es, sowohl die allgemeinen Forderungen nach vielfältigen Schnittstellen zu befriedigen, als auch die Integration von Simulationen in didaktische Spezialsoftware zu fördern.

Literatur

- Anderson JR; Kognitive Psychologie; 1988; Spektrum der Wissenschaft; Heidelberg
Bossel H; Umweltwissen; 1990; Springer; Berlin
Bossel H; Modellbildung und Simulation; 1992; Vieweg; Braunschweig
Edelmann W; Lernpsychologie; 1986; Urban & Schwarzenberg; München
Flehsig KH, Gronau-Müller M; Kleines Handbuch didaktischer Modelle; 1988; Zentrum für Didaktische Studien; Nörten
Grützner R; Simulationsumgebung für den Umweltbereich; 1994; Kernforschungszentrum (3. AK Umweltinformatik) ; Karlsruhe
Grützner R; Anforderungen an Werkzeuge zur Modellbildung und Simulation im Umweltbereich; 1993; Kernforschungszentrum (2. AK); Karlsruhe
Häuslein A; Konzeption eines wissensbasierten Simulationssystems zur Unterstützung der Modellbildung und Simulation im Umweltbereich; 1993; Springer; Berlin
Janotta H; CBT; 1990; Moderne Industrie; Landsberg
Kaiser H; Wissensaustausch im Dialog; 1987; Huber; Bern
Keller HB, große Osterhus B; Das Werkzeug XM_View zur Erzeugung graphischer Oberflächen für die Simulation ökologischer Systeme; 1993; Kernforschungszentrum (2. AK); Karlsruhe
Memmert W; Didaktik in Grafiken und Tabellen; 1983; Klinkhardt; Bad Heilbrunn
Page B (Hrsg); Informatik im Umweltschutz; 1986; Oldenbourg; München
Page B, Hilty LM (Hrsg); Umweltinformatik; 1994; Oldenbourg; München
Schweizer S, Tischendorf M; Integration der Simulationen in Programmsysteme; 1993; Kernforschungszentrum (2. AK); Karlsruhe
Steppi H; CBT Computer Based Training; 1989; Klett; Stuttgart
Weinert FE, Graumann CF et al; Pädagogische Psychologie 1 & 2; 1987; Fischer; Frankfurt

Maschinelle Modellierung komplexer dynamischer Systeme

- der C^3R -Ansatz und Ergebnisse -

Dr. Hubert B. Keller, Thomas Weinberger

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Institut für Angewandte Informatik
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe
Bundesrepublik Deutschland

Kurzfassung:

Mentale Modelle menschlicher Experten können in sprachlicher Form zur Systemnachbildung oder -kontrolle eingesetzt werden. Aufgrund der Probleme bei der Akquisition und bei der Übertragung des Wissens, sind maschinell/automatische Verfahren vorzuziehen. Gerade bei ökologischen oder umweltrelevanten technischen Systemen mit hoher Komplexität ist dies ein dringendes Problem. Hierzu wird das C^3R -System kurz beschrieben und Ergebnisse in seiner Anwendung auf ein kognitionspsychologisch interessantes Zielsystem vorgestellt.

1 Einleitung

In diesem Beitrag wird ein Ansatz zur maschinellen Modellierung dynamischer Systeme vorgestellt. Das realisierte System dient zur Akquisition von Wissen zur Steuerung und Kontrolle komplexer dynamischer Systeme (wie z. B. Müllverbrennungsanlagen).

Der Hintergrund für die Konzeption dieses Systems besteht darin, daß eine ganze Reihe komplexer, dynamischer Systeme existieren, die mit den konventionellen Methoden (theoretische/experimentelle Modellierung) nicht modellier- und damit steuerbar sind. Der menschliche Bediener hingegen kann solche technische Systeme prinzipiell oder aber besser als konventionelle Steuerungs- und Regelungssysteme überwachen und regeln. Er bedient sich hierfür eines mentalen Modells.

Dieses interne, mentale Modell des beobachtbaren Systemverhaltens oder der Art und Weise wie der menschliche Experte Regelungsvorgänge durchführt, kann in einer sprachlichen, aber vagen Beschreibung formuliert und zur Systemnachbildung und -kontrolle eingesetzt werden. Die Fuzzy Logic eignet sich zur Verarbeitung von solchen sprachlichen Beschreibungen (Fuzzy Control). Durch den Einsatz eines Fuzzy Controllers konnte die Prozeßsteuerung von Müllverbrennungsanlagen deutlich verbessert werden. Die anlagenspezifische Auslegung eines solchen Fuzzy Controllers führt allerdings zu Schwierigkeiten bei der Portierung auf eine andere Anlage. Bei der Extraktion des zugrundeliegenden Expertenwissens

tritt das Problem der Ableitung intuitivem, implizitem, unvollständigem und vagem Wissen auf.

Das Optimierungspotential einer Prozeßführung kann deshalb nur durch Verfahren ausgeschöpft werden, welche neue Zusammenhänge selbsttätig ableiten und dem Benutzer in geeigneter Weise zur Verfügung stellen können. Hierzu wird ein System (C³R-System, Children's Cognitive learning Behavior for Causal Reasoning about dynamic Systems) vorgestellt, das durch die Umsetzung einer heuristischen, am menschlichen Bediener orientierten, Vorgehensweise in der Lage ist, die Struktur und das Transformationsverhalten (Zustandsübergänge) komplexer, dynamischer Systeme, allein aufgrund des beobachtbaren Systemverhaltens (Messungen), automatisch abzuleiten. In Abhängigkeit von der Auswahl der Input-Größen kann mit diesem System entweder die Systemdynamik oder das Bedienerverhalten (induktiv nach der Strategie des Lernens durch Beobachtung) gelernt werden.

2 Konzept des C³R-Systems

Das in diesem Abschnitt vorgestellte heuristische Konzept des C³R-Systems /Weinberger, Keller 4/ zur Ableitung der Struktur und des Transformationsverhaltens dynamischer Systeme, vereint die kognitionspsychologisch motivierten Überlegungen im Rahmen des Prinzips der heuristischen Modellierung /Keller, Weinberger 2/ mit den praktischen Anforderungen aus dem Bereich der Prozeßführung. Zur Umsetzung dieser Überlegungen/Prinzipien wurde die in Abbildung 1 dargestellte (funktionale) Systemarchitektur entworfen.

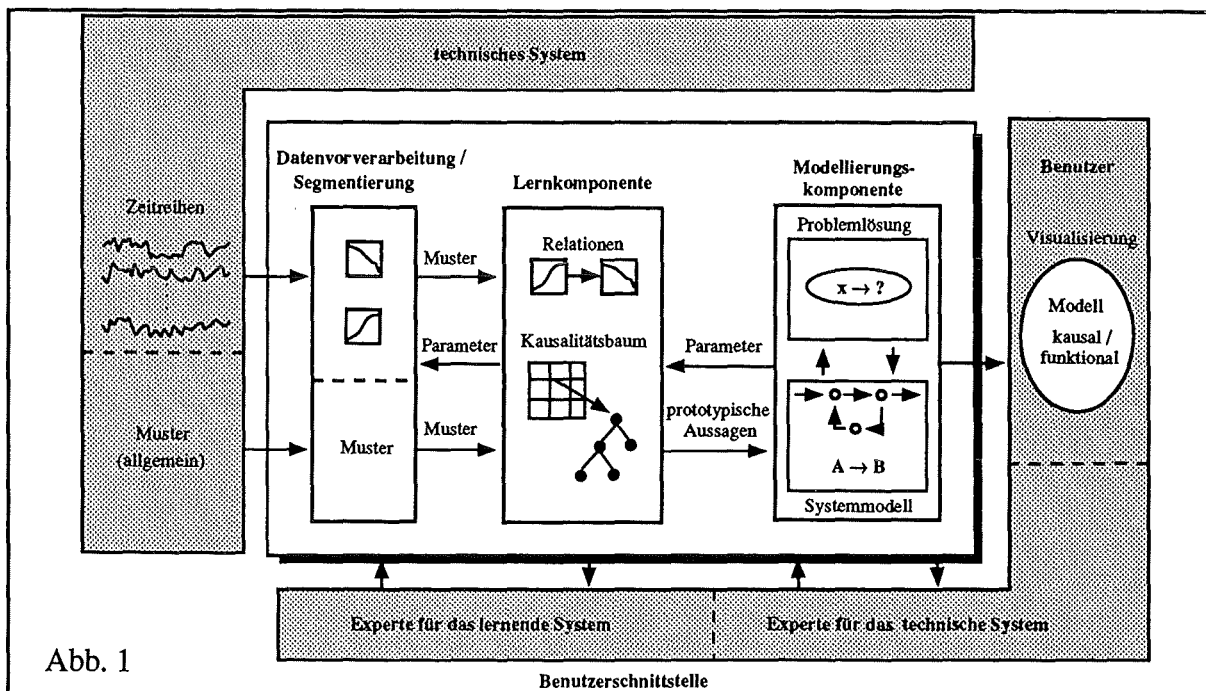
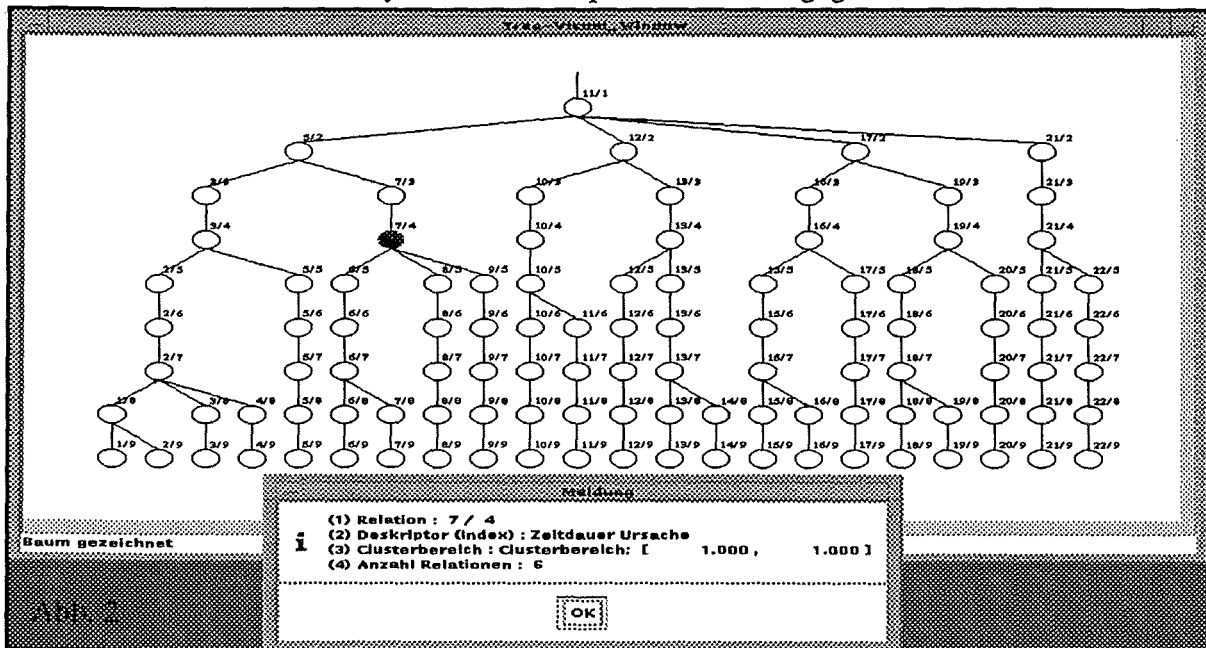


Abb. 1

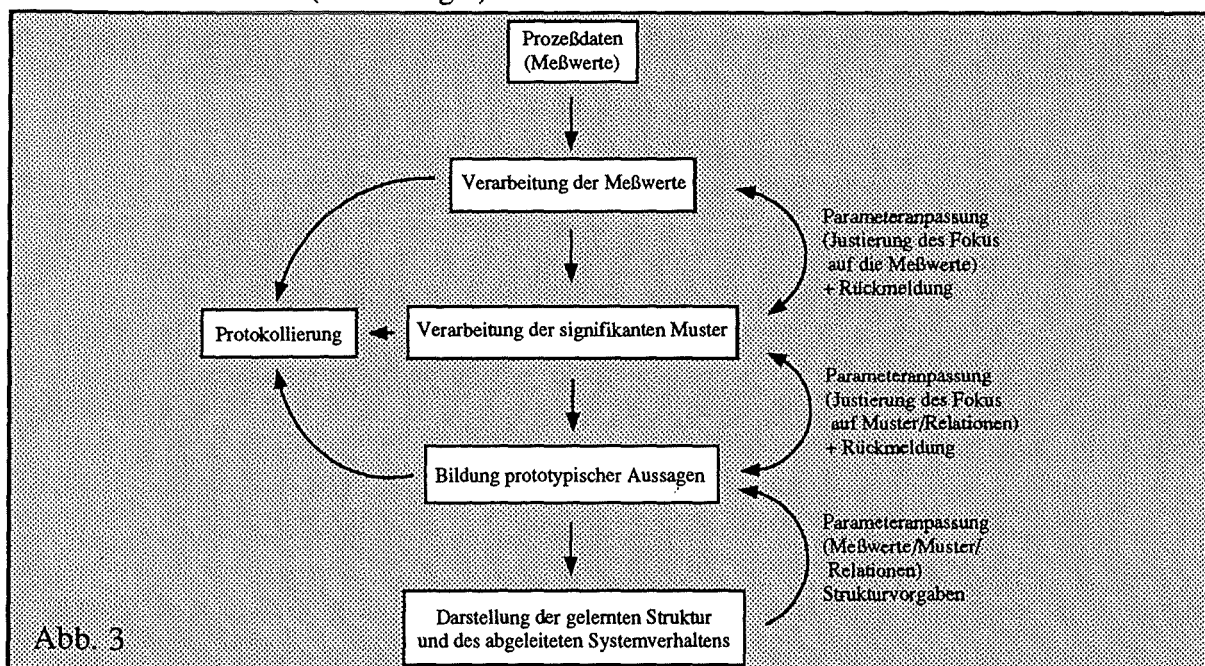
Als **Eingabe** in das C³R-System dienen Zeitreihen oder direkt Muster von beobachtbaren Größen aus dem (technischen) System. Initialisierungswerte für die adaptiven dynamischen Systemparameter des C³R-Systems oder auch Vorwissen kann eingegeben werden.

Die **Ausgabe** des C³R-Systems besteht aus einer Visualisierung der erkannten kausalen Abhängigkeitsbeziehungen in Form eines (gerichteten) Kausalitätsgraphen und der funktionalen Abhängigkeitsbeziehungen durch eine Menge (bereichsweiser) Transformationsregeln.

Im Rahmen der inkrementellen **Datenvorverarbeitung/Segmentierung** werden die Zeitreihen geglättet und die signifikanten Muster erzeugt. Diese Ebene bildet den Übergang von einer numerischen zu einer symbolischen Repräsentation der gegebenen Informationen.



Die **Lernkomponente** bildet Relationen (Ursache-Wirkungs-Beziehungen zwischen jeweils zwei Systemgrößen) auf der Basis der erkannten Muster, der aktuellen Systemparameter, bereits abgeleiteter Kausalbeziehungen und des a priori Wissens der Bedienvorgaben. Diese Relationen werden durch die Ableitung prototypischer Aussagen im Sinne erster Kausalitätshypothesen verdichtet. Hierzu werden die Relationen mit jeweils gemeinsamen Ursache- und Wirkungsmeßgrößen inkrementell unter Berücksichtigung des systemdynamischen Stellenwertes und der aktuellen Wertebelegungen ihrer Attribute interpretativ im C³R-Kausalitätsbaum (Abbildung 2) verarbeitet.



Die primäre Aufgabe der **Modellierungskomponente** ist die Verdichtung der prototypischen Kausalitätsaussagen der Lernkomponente. Auf der Grundlage der verdichteten proto-

typischen Kausalitätsaussagen kann von der Modellierungskomponente das aktuelle funktionale und des kausale Systemmodell (Transformationsregeln und Kausalitätsgraph) abgeleitet und visualisiert werden. Der zweite Bereich der Modellierungskomponente betrifft die Simulation von Problemlösungsvorgängen, im Sinne von Interpolationsproblemen, auf einzelnen Teilbereichen (Fokus) des abgeleiteten Systemmodells. Die verschiedenen Ebenen greifen im Ablauf ineinander (Abb. 3).

3 Beispiel «Kühlhausexperiment»

3.1 Problemstellung

Das C³R-System wurde an einem kognitionspsychologisch interessanten Beispiel /Reichert, Dörner 3/ eines einfachen Systems mit Verzögerungszeit angewandt. Ziel der kognitionspsychologischen Experimente war, das Verhalten bzw. die Vorgehensweise von Versuchspersonen beim Umgang mit «einfachen» dynamischen Systemen zu ergründen. Die Versuchspersonen wurden vor die Aufgabe gestellt die Temperatur in einem mit verderblichen Waren bestückten Kühlhaus und defekter automatischer Temperaturregelung in einem vorgegebenen Zeitraum auf einen ebenfalls vorgegebenen Wert einzustellen.

Zur Simulation der Kühlanlage wurde der zeitverzögerte Regelkreis aus /Reichert, Dörner 3/ eingesetzt. Das System Kühlanlage kann somit durch die folgenden beiden Gleichungen und geeignet gewählte Anfangswerte vollständig beschrieben werden:

$$(1) \quad \text{regel}_i = \text{regel}_{i-1} + (\text{stör}_i - \text{regel}_{i-1}) * \text{tempo} - \text{steuer}_{i-1},$$

$$(2) \quad \text{steuer}_i = (\text{regel}_{i-v} - \text{stell}_i) * \text{regelfaktor}.$$

Hierbei ist «regel» die Regelgröße; in diesem Fall die Kühlhaustemperatur. «stör» ist die Störgröße, hier die Außentemperatur. «stell» ist die Stellgröße, die für die Versuchspersonen manipulierbar ist. **Gleichung (1)** besagt mithin, daß die Innentemperatur (regel) zum Zeitpunkt i abhängig ist von der vorher gegebenen Innentemperatur, der Außentemperatur (stör) und der «Steuergröße», die man sich als die Geschwindigkeit, mit der Kühlmittel durch das System gepumpt wird, vorstellen kann. Bleibt «steuer» = 0, so nähert sich die Innentemperatur mit der Zeit immer mehr der Außentemperatur an. «tempo» bzw. dessen Kehrwert, kann man interpretieren als die Dicke der Isolierschicht des Kühlhauses oder als ihre Qualität. Je geringer der Wert für «tempo», desto besser die Isolierung. **Gleichung (2)** besagt, daß die Steuergröße «steuer» von der Differenz von Stellgröße «stell» und Regelgröße im Verhältnis «regelfaktor» abhängig ist. Diese Abhängigkeit ist allerdings zeitlich verzögert; es geht in die Gleichung der Wert von «regel» v Takte vorher ein. Dies entspricht Verhältnissen, die auch häufig in der Realität anzutreffen sind. Eine Meldung benötigt eine gewisse Zeit (Verzögerungszeit), bis sie ihren Empfänger erreicht und wird erst dann verhaltenswirksam. Eine Verzögerungszeit > 0 bewirkt, daß das System "ins Schwingen" gerät. Für eine detailliertere Darstellung des Systems, sowie eine Analyse des Systemverhaltens sei auf /Reichert, Dörner 3/ und /Hübner <Hübner, ad Kühlhausexperiment>/ verwiesen.

Die wesentlichen Ergebnisse dieses Versuches bestanden darin, daß die Versuchspersonen nur schlecht in der Lage waren, den zeitverzögerten Regelkreis zu steuern. Besondere Schwierigkeiten hatten die Versuchspersonen damit, die Verlaufsgestalt des Systems (gedämpfte - sinusförmige Schwingung) ausfindig zu machen und mit der verzögerten Wirkung von Eingriffen zurechtzukommen. Die Gründe für diese Schwierigkeiten sind wohl darin zu suchen, daß zeitlich verteilt gegebene Information dem Wahrnehmenden nicht in dem Maße

zur Verfügung steht, wie räumliche Information, die über längere Zeit hinweg unverändert bleibt und damit wieder und wieder betrachtet werden kann /Reichert, Dörner 3/.

3.2 Experimentelle Ergebnisse des C³R-Systems

Zur experimentellen Validierung des C³R-Systemkonzeptes wurde das System «Kühlhaus» mit einer Verzögerung von drei Zeitschritten auf einem Rechner implementiert. Die Anfangswerte wurden wie in /Reichert, Dörner 3/ vorgeschlagen übernommen. Die Eingriffe der Versuchspersonen wurden sowohl in ihren zeitlichen Abständen, als auch in ihrer Richtung und Intensität durch einen Zufallszahlengenerator simuliert. Insgesamt wurden jeweils 100.000 "Meßwerte" für die Stell- und die Regelgröße, mit einer ganzzahligen Schrittweite, generiert.

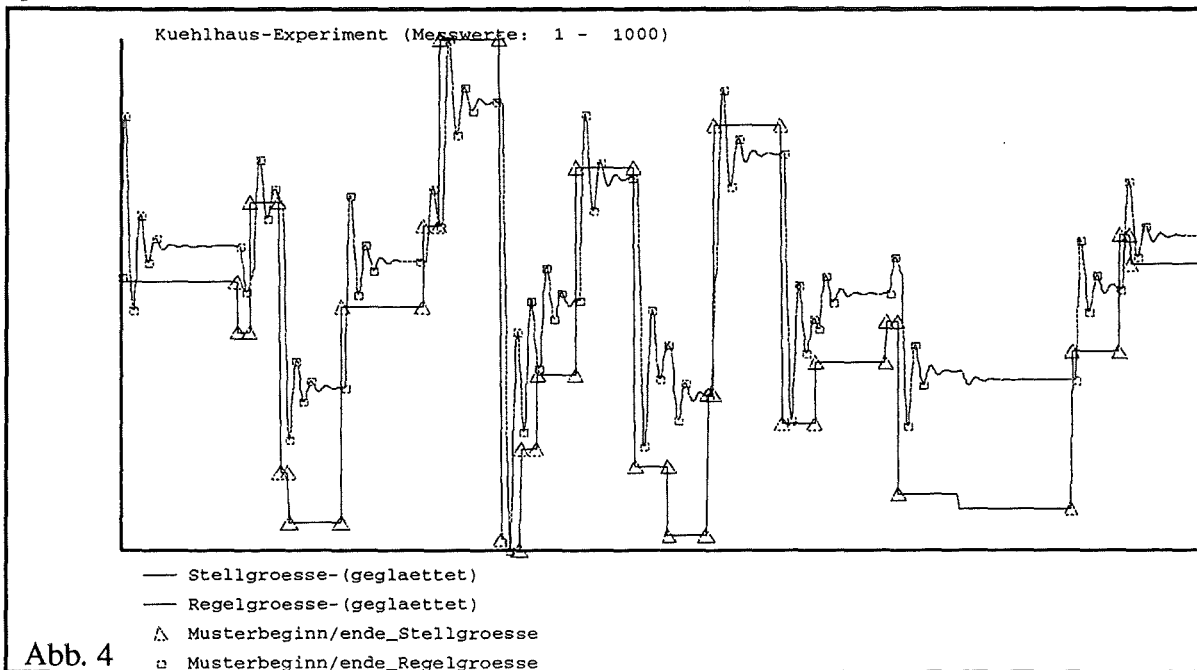


Abb. 4

In der Tabelle 1 (Anhang) wird die Anzahl der erzeugten Muster auf der Basis unterschiedlicher Veränderungsparameter (VP) gegenübergestellt.

Den Ergebnissen der Mustererzeugung aus Tabelle 1 (Anhang) liegen jeweils identische Werte des Glättungsparameters (GP = 1) zugrunde. Da es sich bei den simulierten Meßwerten bereits um glatte Kurvenverläufe handelt, erscheint es wenig sinnvoll, die Kurven mit einem größeren Glättungsparameter zu glätten.

Aus den in der Tabelle 1 (Anhang) enthaltenen Werten wird einwandfrei ersichtlich, in welchem Maß die Anzahl der gebildeten Muster von der Wahl des Veränderungsparameters abhängig ist. Die Tatsache, daß bei einem Veränderungsparameter von 0,9 bei der Regelgröße kein Muster mehr erkannt wurde, ist darauf zurückzuführen, daß der zeitliche Abstand zwischen Musterbeginn und Musterende einen kompletten Tag überschreitet und diese Möglichkeit bei der Realisierung ausgeschlossen wurde. Auf der Grundlage dieser signifikanten Muster wurden in einem nächsten Schritt unter Berücksichtigung eines vorgegebenen Zeithorizontes Relationen gebildet. Die Anzahl der erzeugten Relationen, bei unterschiedlichen Zeithorizonten (ZH), werden in Tabelle 2 (Anhang) einander gegenübergestellt. Diese Darstellung basiert auf der Verarbeitung von 5.644 Mustern (VP = 0,05) bei jeweils gleichem Zeithorizont für die (beiden) kombinatorisch möglichen Ursache-Wirkungs-Beziehungen.

Tabelle 2 (Anhang) zeigt deutlich eine nahezu lineare Abhängigkeit der Anzahl der gebildeten Relationen vom zugrundeliegenden Zeithorizont, d. h. je größer der Zeithorizont gewählt wird, desto mehr (gleichartige) Relationen werden gebildet. Diese Beobachtung dürfte auf die zeitlich annähernd gleichverteilten Muster der Stell- und Regelgröße zurückzuführen sein. Zur weiteren Verarbeitung wurden die jeweils hundert ersten, gleichartigen Relationen in einem Schritt («Initialisierung»), alle weiteren inkrementell, in den C^3R -Kausalitätsbaum aufgenommen. Die Clusterparameter wurden so gewählt, daß die Standardabweichung in den einzelnen Knoten (Cluster) des C^3R -Kausalitätsbaumes kleiner als 3 % des zugrundeliegenden Wertebereiches blieb.

Für die Interpretation des C^3R -Kausalitätsbaumes und der damit verbundenen Bildung prototypischer Aussagen wurde für den Vertrauensgrad ein Schwellenwert von 0.8 vorgegeben. Die Anzahl der jeweils gebildeten prototypischen Aussagen bzgl. der vorgegebenen Zeithorizonte werden in Tabelle 3 (Anhang) gegenübergestellt. Als Grundlage für diese Darstellung wurden die gleichen Zeithorizonte wie in Tabelle 2 (Anhang) und eine konstante Belegung Clusterparameter (Standardabweichung der Cluster des C^3R -Kausalitätsbaumes kleiner als 3 % des zugrundeliegenden Wertebereiches) gewählt. Aus den Werten in Tabelle 3 kann die These abgeleitet werden, daß das C^3R -System gegen eine konstante Anzahl prototypischer Aussagen konvergiert. Diese These wird durch die nahezu konstante Anzahl der gebildeten prototypischen Aussagen und den annähernd konstanten durchschnittlichen Vertrauensgrad bestärkt. Die Tatsache, daß auch prototypische Aussagen gebildet wurden, die für eine, wenn auch nur marginale, Beeinflussung der Stellgröße durch die Regelgröße sprechen, kann auf ein "zu wenig" stochastisches Verhalten des verwendeten Zufallsszahlengenerators zurückgeführt werden.

Die deutliche Differenz der Anzahl prototypischer Aussagen zwischen den beiden, zumindest theoretisch möglichen, Ursache-Wirkungs-Beziehungen legt die Vermutung nahe, daß die Stellgröße die Regelgröße beeinflusst und nicht umgekehrt, d. h. das Erkennen der Beeinflussungsrichtung ist in diesem Beispiel bereits aufgrund der Anzahl der erzeugten prototypischen Aussagen möglich.

Die 136 gebildeten prototypischen Aussagen können zunächst, aufgrund gemeinsamer (identischer) "Ursachen-Muster" zu 72 Gruppen zusammengefaßt werden. Jede dieser Gruppen ist dadurch gekennzeichnet, daß die darin enthaltenen prototypischen Aussagen auf der gleichen Veränderung als Ursache basieren. Bei der Analyse dieser Gruppen wurde festgestellt, daß dieser ursächlichen Veränderung bis zu vier mögliche, ausgelöste Veränderungen (Wirkungen) zugeordnet wurden und daß bei mehr als der Hälfte der prototypischen Aussagen mehrere Veränderungen einer einzigen Ursache zugeschrieben wurden. Somit wurde vom C^3R -System nicht nur die Kausalbeziehung zwischen der Stell- und der Regelgröße, sondern auch das Einschwingen ("Nachschwingen") des Systemes «Kühlhaus» in einen neuen (stationären) Zustand erkannt.

Detailliertere (bereichsweise) Rückschlüsse über die Kausalzusammenhänge im System «Kühlanlage» erfolgen auf der Basis der zu Gruppen zusammengefaßten prototypischen Aussagen. Hierzu wird im folgenden eine vom C^3R -System gebildete prototypische Aussage, in Form einer speziellen, einfachen Regel, exemplarisch dargestellt:

WENN Stellgröße in [172,073; 178,185]

UND Veränderung=Abnahme nach [22,481; 28,219] innerhalb von 1 Zeitschritt

UND Regelgröße in [19,042; 20,006]

DANN Veränderung=Abnahme nach $[-4,255; -3,233]$
 mit Verzögerung von $3,571 \pm 1,05$ Zeitschritten
 innerhalb von $5,429 \pm 1,05$ Zeitschritten,
 UND DANN Veränderung=Zunahme nach $[7,956; 8,384]$
 mit Verzögerung von insgesamt $10,0$ Zeitschritte
 innerhalb von $6,0$ Zeitschritten,
 UND DANN Veränderung=Abnahme nach $[1,916; 2,552]$
 mit Verzögerung von insgesamt $17,0$ Zeitschritte
 innerhalb von $6,0$ Zeitschritten,
 UND DANN Veränderung=Zunahme nach $[4,966; 5,480]$
 mit Verzögerung von insgesamt $24,0$ Zeitschritte
 innerhalb von $6,0$ Zeitschritten.

Vertrauensgrad: 0,857.

Diese Regel erfasst neben der ursächlichen Veränderung der Stellgröße vier Folgeveränderungen (Wirkungen) der Regelgröße. Durch die abnehmende Amplitude können die letzten beiden Folgeveränderungen als Einschwingen in einen Folgezustand interpretiert werden. Der hier beschriebene dynamischen Übergang wird in Abbildung 6 dargestellt. Zur besseren Übersicht wurden sämtliche Veränderungen in einen gemeinsamen Wertebereich transformiert und die einzelnen Punkte durch Geradenstücke miteinander verbunden (linear interpoliert).

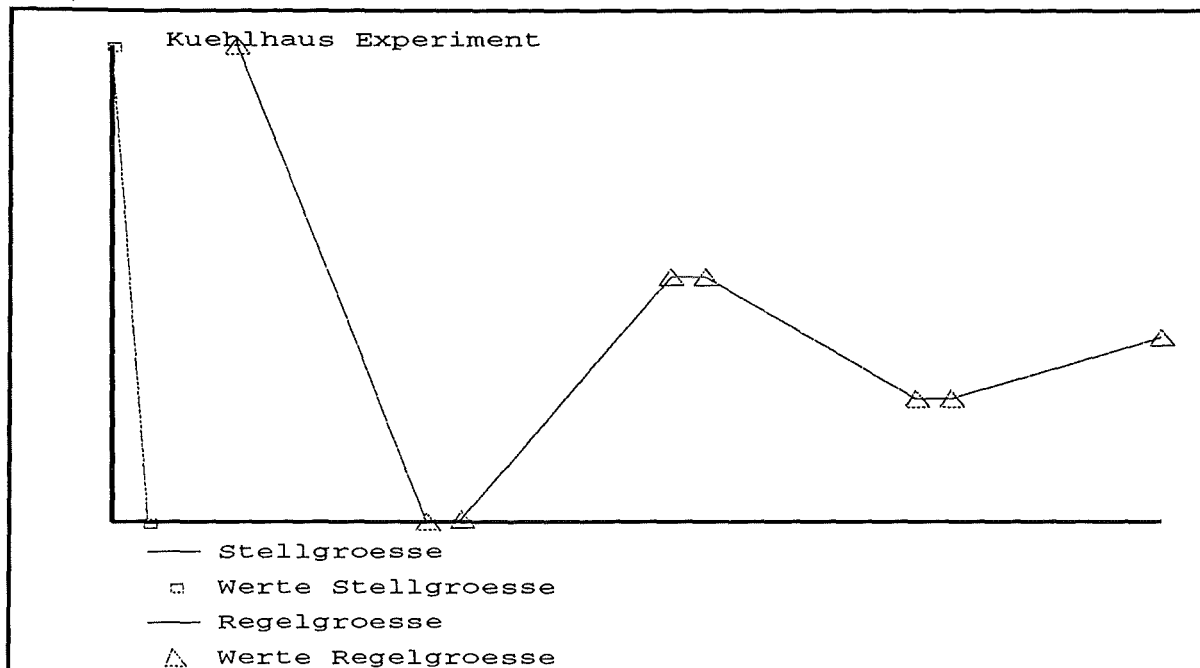


Abb.5

Zwischen der ursächlichen Veränderung und der ersten Wirkung wurde eine Verzögerung von $3,571 \pm 1,05$ Zeitschritten erkannt. Aufgrund der ganzzahligen Abtastrate kann hieraus auf eine tatsächliche Verzögerungszeit von drei oder vier Zeittakten geschlossen werden.

4 Zusammenfassung

Aus der Durchführung und Auswertung des «Kühlhausexperimentes» können die folgenden Ergebnisse abgeleitet werden:

- Bei einer zeitlich annähernden Gleichverteilung der Muster wächst die Anzahl der Relationen in etwa linear mit dem Zeithorizont.
- Bei steigendem Zeithorizont und konstanter Musteranzahl konvergieren sowohl die Anzahl, als auch der Vertrauensgrad der vom C³R-System erzeugten prototypischen Aussagen gegen einen festen Wert.
- Die Gruppierung der abgeleiteten prototypischen Aussagen bzgl. der ursächlichen Veränderung, führte zu der Beobachtung, daß bei mehr als der Hälfte dieser Gruppen nicht nur eine "initiale" Wirkung, sondern auch "Folgewirkungen" erkannt wurden. Das statistisch signifikante Auftreten von Nachschwingen wird insbesondere aus einem Vergleich der Verzögerungszeiten der prototypischen Aussagen klar ersichtlich.
- Als Folgerung aus diesen Erkenntnissen wurden auch die Verzögerungszeiten richtig erkannt.

Das C³R-System liefert im Gegensatz zu den menschlichen Probanden /Reichert, Dörner 3/ beim Erkennen des Einschwingens und der Verzögerungszeit bessere und damit vielversprechende Ergebnisse. Vor diesem Hintergrund wurde es auf Daten einer Pilot-Müllverbrennungsanlage angewandt und bestätigte die experimentell/theoretisch abgeleiteten Beziehungen zwischen bestimmten relevanten Systemgrößen (Müllmasse, Temperatur, O₂-, CO₂-Konzentrationen). Ergebnisse hierzu werden noch publiziert.

Referenzen

- /1/ Hübner, Ronald,
Methoden zur Analyse und Konstruktion von Aufgaben zur
kognitiven Steuerung dynamischer Systeme,
Zeitschrift für experimentelle und angewandte Psychologie, Band XXXVI,
Heft 2, S. 221 - 238, 1989.
- /2/ Keller, Hubert B.; Weinberger, Thomas,
Heuristische Modellierung - ein Arbeiten mit Hypothesen?,
Modellierung und Simulation im Umweltbereich, Beiträge zum Workshop
Rostock, 25 & 26. Juni 1992,
Rostock, Universität Rostock, Fachbereich Informatik, S. 23-32, 1992.
- /3/ Reichert, Ute; Dörner, Dietrich,
Heuristiken beim Umgang mit einem "einfachen" dynamischen System,
Projekt Mikroanalyse, Bericht 55, Lehrstuhl Psychologie 2,
Universität Bamberg, S. 12-24.
- /4/ Weinberger, Thomas; Keller, Hubert B.,
Ein Ansatz zur heuristischen Modellierung komplexer dynamischer Systeme,
6. Arbeitstreffen der GI-Fachgruppe Intelligente (Tutorielle) Lernsysteme,
Interne Berichte, Fachbereich Informatik, Universität Oldenburg, S. 46-57, 1993.

Anhang

VP	0,05	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
Muster Regelgröße	3.894	2.551	1.255	680	283	107	67	36	7	0
Muster Stellgröße	1.750	1.487	1.090	729	357	118	79	52	28	9
Summe Muster	5.644	4.038	2.340	1.409	640	225	146	88	35	9

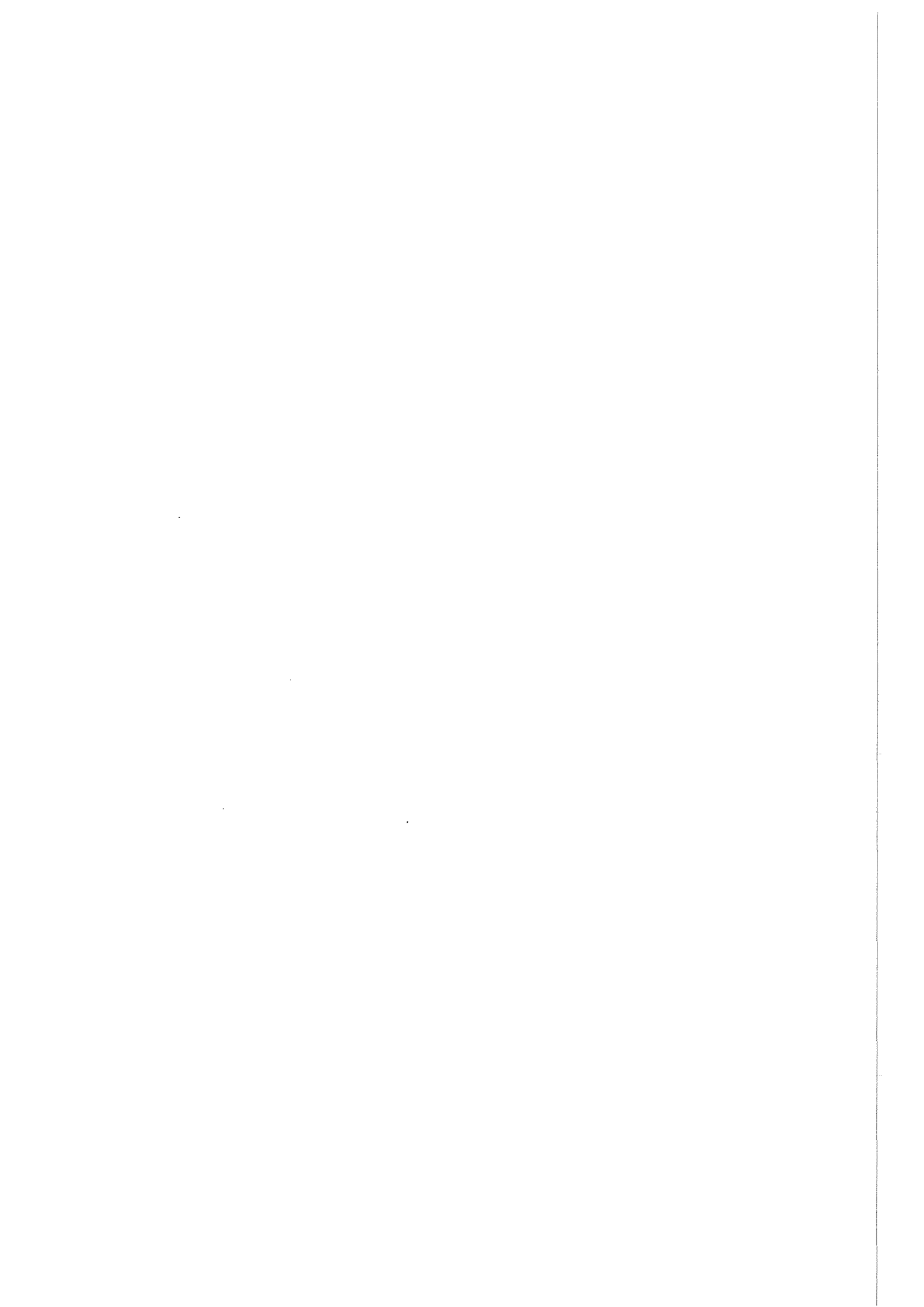
Tabelle 1: Anzahl gebildeter Muster in Abhängigkeit vom Veränderungsparameter (VP)

ZH (Zeitschritte)	5	10	25	50	75	100	125	150	200
Relationen: Regelgröße → Stellgröße	547	843	1.838	3.526	5.215	6.845	8.591	10.274	13.762
Relationen: Stellgröße → Regelgröße	1.360	2.624	4.573	6.243	7.925	9.661	11.363	13.040	16.551
Summe Relationen	1.907	3.467	6.411	9.769	13.140	16.506	19.954	23.314	30.313

Tabelle 2: Gebildete Relationen in Abhängigkeit vom Zeithorizont (ZH)

ZH (Zeitschritte)	5	10	25	50	75	100	125	150	200
prototypische Aussagen: Regelgröße → Stellgröße	0	0	1	1	1	0	1	1	2
Durchschnittlicher Vertrauensgrad	0,0	0,0	0,833	0,833	0,833	0,0	0,833	0,833	0,833
prototypische Aussagen: Stellgröße → Regelgröße	10	58	112	125	135	136	124	124	124
Durchschnittlicher Vertrauensgrad	0,866	0,862	0,862	0,862	0,864	0,865	0,867	0,867	0,867
Summe prototypischer Aussagen	10	58	113	126	136	136	125	125	126

Tabelle 3: Anzahl prototypischer Aussagen (Vertrauensgrad) bzgl. dem Zeithorizont



PFAFF

Consulting Software Umweltschutz

PFAFF & CO GmbH Heinrich-Kley-Str. 2 D-80807 München

Tel.: 089/356127-0 Fax: 089/356127-11

GRUNDWASSERMODELLE ALS WERKZEUGE ZUR QUALITÄTSSICHERUNG DES GRUNDWASSERS

DR. THOMAS PFAFF

GRUNDWASSERMODELLE ALS WERKZEUGE ZUR QUALITÄTSSICHERUNG DES GRUNDWASSERS

ALLGEMEINES

Numerische Grundwassermodelle zur Berechnung der Grundwasserströmungen und der Ausbreitung von Stoffen stellen den Stand der Technik bei der Qualitätssicherung des Grundwassers dar. Bei Grundwassermodellen unterscheidet man zwischen

- **Strömungsmodellen**, die das Potentialfeld des Grundwasserleiters und damit die Grundwasserströmung berechnen, und
- **Transportmodellen**, die auf einem Strömungsmodell basieren und die Ausbreitung von Stoffen im Untergrund simulieren.

Die **Grundwasserströmungsmodelle** sind zum derzeitigen Zeitpunkt nur Werkzeuge in der Hand des damit vertrauten Hydrogeologen und stellen keine eigenständige Anwendung dar. Deswegen sollen Strömungsmodelle auch nur als Werkzeug behandelt und eingesetzt werden. Die Ergebnisse der Strömungsmodelle bedürfen daher immer einer kritischen, fachkundigen Beurteilung durch den damit vertrauten Hydrogeologen.

Dahingegen bedürfen die Ergebnisse von **Transportmodellen** keiner weiteren Interpretation und können heutzutage bereits in der Praxis von darin geschulten "Laien" (z.B. bei der gewässertechnischen Aufsicht) eingesetzt werden, wenn das zugrunde liegende Strömungsmodell vorliegt. Sie stellen eine verlässliche und sofort verfügbare Entscheidungshilfe zur Beurteilung des Handlungsbedarfs dar.

METHODISCHE MÖGLICHKEITEN VON GRUNDWASSERMODELLEN

Numerische Grundwassermodelle, die Strömungs- und Transportvorgänge auf Computern wirklichkeitsnah simulieren können, werden heutzutage insbesondere für umfassende Standort- und Situationsbeurteilungen eingesetzt. Erst der Einsatz solcher Methoden erlaubt eine vollquantitative Betrachtung der Fließvorgänge im Grundwasser und auch prognostische Aussagen z.B. über die Ausbreitung von Schadstoffen.

An dieser Stelle soll beispielhaft aufgezeigt werden, was ein Hydrogeologe mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden ohne Modelle nicht leisten kann, bzw. welche Vorteile er durch den Einsatz des "Werkzeuges" Computermodell hat.

BEISPIEL 1: ERSTELLUNG EINES ISOHYPSENPLANES

Bei hydrogeologischen Fragestellungen liegen meist nur punktförmige Informationen über das zu beurteilende Gebiet vor (Bohraufschlüsse, Quellen etc.). Trotzdem muß der Hydrogeologe eine flächendeckende Aussage machen, d.h. er ist gezwungen, zu interpolieren und zu extrapolieren. Nur mit Hilfe von Grundwassermodellen können diese Interpolationen voll datenkonsistent erfolgen.

Der Hydrogeologe interpoliert mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden zwischen bekannten Grundwasseraufschlüssen nur linear. Wenn eine Grundwasseroberfläche gewölbt ist, ist eine lineare Interpolation aber fehlerbehaftet. Auch ein mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden erstellter Grundwasserisohypsenplan ist oft nicht konsistent und für Betrachtungen des Stofftransportes nur bedingt geeignet. Mit Hilfe eines in sich konsistenten Computermodelles können diese Fehler vermieden werden (siehe Abb. 1).

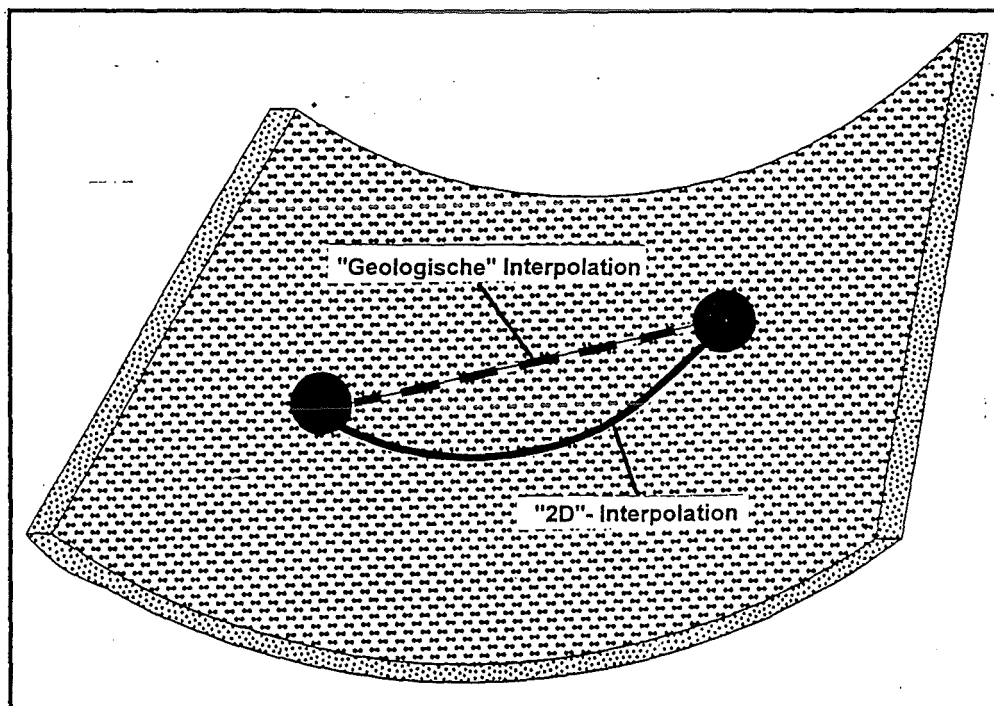


Abb. 1: Unterschied zwischen linearer Interpolation mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden und der Interpolation eines Grundwassermodells

BEISPIEL 2: PROGNOSE DER STOFFAUSBREITUNG IM GRUNDWASSER

Der Hydrogeologe kann mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden nur den konvektiven Stofftransport betrachten, was bei den in der Regel in natürlichen Grundwasserleitern vorliegenden nichtlinearen Strömungsverhältnissen zu großen Ungenauigkeiten führt. Eine realistische Prognose der Stoffausbreitung unter Berücksichtigung auch der dispersiven Komponente kann dann nur von einem Computermodell angegeben werden. (siehe Abb. 2)

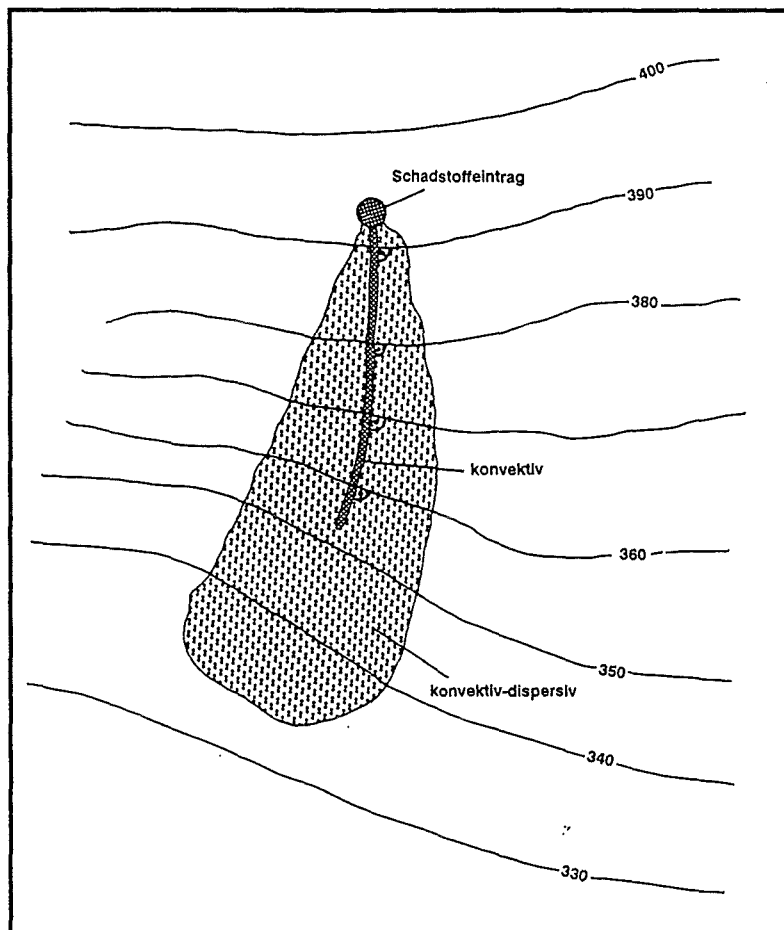


Abb. 2: Unterschied zwischen rein konvektivem und konvektiv-dispersivem Stofftransport im Grundwasser

BEISPIEL 3: WORST-CASE-BETRACHTUNG

Der Hydrogeologe kann im Rahmen einer geroderten Stoffausbreitungs-Prognose mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden in der Regel nur den wahrscheinlichsten Ausbreitungsfall angeben. Das Computermodell ist dahingegen aufgrund seiner Prognosefähigkeit in der Lage, alle möglichen Fälle aufzuzeigen. Der praktische Nutzen solcher worst-case-Betrachtungen ist sehr groß, da dadurch oft erhebliche Kosten durch sonst benötigte Geländeuntersuchungen eingespart werden können. (siehe Abb. 3)

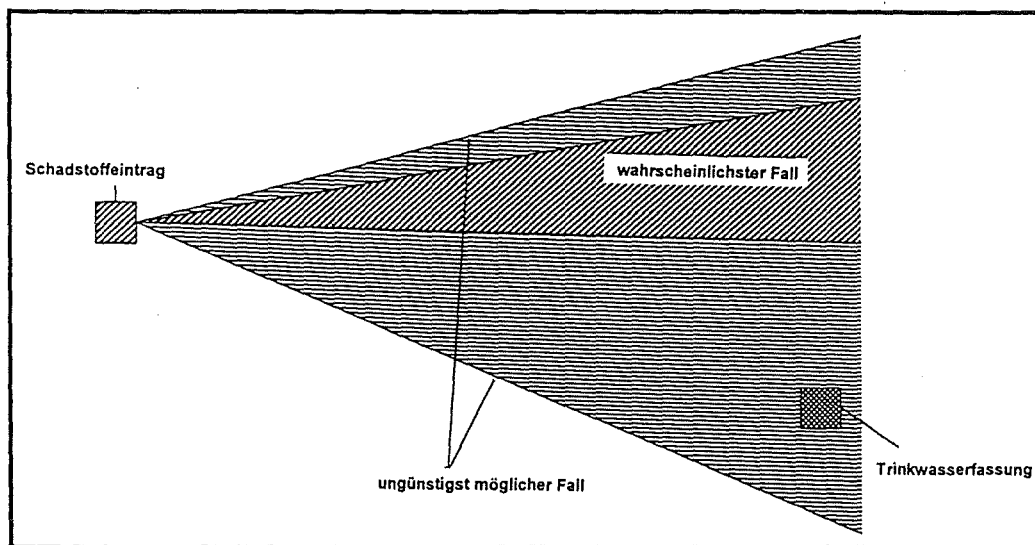


Abb. 3: Unterschied zwischen wahrscheinlichstem Fall (berechnet nach herkömmlichen hydrogeologischen Methoden) und ungünstigst möglichem Fall (berechnet mit Hilfe eines numerischen Grundwassermodells) einer Stoffausbreitung im Grundwasser

EINSATZMÖGLICHKEITEN VON GRUNDWASSERMODELLEN IM GRUNDWASSERSCHUTZ

Grundwassermodelle können für die vielfältigsten Problemstellungen eingesetzt werden. Typische Einsatzgebiete für Computermodelle sind:

Risikoanalysen für Trinkwassergewinnungsanlagen:

Trinkwassergewinnungsanlagen werden zum einen von ortsfesten Risiken bedroht (z.B. landwirtschaftlichen oder industriellen Betrieben). Ein Hauptgefährdungspotential bilden aber vor allem die mobilen Risiken (z.B. Gefahrguttransporte). Mit Grundwassermodellen können diese Risiken quantifiziert und entsprechende Sicherungsmaßnahmen prophylaktisch ergriffen werden.

Risikobeurteilung und Sanierung von Altlasten/Deponien:

Allein in Deutschland geht von vielen Tausenden von Altlasten eine unterschiedlich starke Bedrohung für das Grundwasser aus. Aus Kosten- und Kapazitätsgründen muß die Sanierung der Altlasten unter Prioritätensetzung nach dem Gefährdungspotential zeitlich gestaffelt erfolgen. Grundwassermodelle können hier das Gefährdungspotential quantifizieren und das jeweils günstigste Sanierungsverfahren berechnen. Z.B. kann auch die Frage beantwortet werden, wie ein Schadstoff möglichst schnell und gleichzeitig möglichst kostengünstig aus dem Untergrund entfernt werden kann.

Trinkwassererschließungen:

Bei Trinkwassererschließungen wird der jeweilige Brunnenstandort oftmals empirisch festgelegt. Dadurch kann nicht ausgeschlossen werden, daß durch eine nicht optimale Standortwahl die Brunnenenergiebigkeit deutlich kleiner ausfällt, als dies bei einem optimalen Standort der Fall wäre. Durch den Einsatz von Grundwassermodellen kann der Standort sowohl hinsichtlich der Brunnenenergiebigkeit als auch hinsichtlich des Schutzes vor eindringenden Schadstoffen optimiert werden.

Unfälle:

Durch Unfälle und unsachgemäßes Verhalten können Schadstoffe in das Grundwasser gelangen. Mit Hilfe von Computermodellen können die Auswirkungen einer solchen Kontamination vollquantitativ erfaßt werden und entsprechende Handlungsvorschläge zur Absicherung und Sanierung unterbreitet werden.

Prognoserechnungen:

Bei der hydrogeologischen Beurteilung von Standorten wird derzeit meist nur der Ist-Zustand betrachtet. Zukünftig mögliche Änderungen im Grundwasserkörper, z.B. infolge von auch nur kleinen Klimaänderungen oder Nutzungsänderungen, werden dabei oft nicht berücksichtigt. Durch den Einsatz mathematisch-numerischer Modelle können solche zukünftig möglichen Änderungen quantifiziert werden. Somit kann z.B. dem Gedanken der Langzeitsicherheit umfassend Rechnung getragen werden.

Störfallbetrachtungen für Deponiestandorte:

Dadurch kann der Deponiestandort bereits im Planungsstadium auch im Hinblick auf mögliche Barriereversagen optimal ausgesucht und abgesichert werden (siehe Abb. 4).

Diese numerischen Computermodelle repräsentieren in der Hand des verantwortlichen Hydrogeologen den Stand der Technik bei der Qualitätssicherung des Grundwassers und bieten hier bei entsprechender Sorgfalt die derzeit beste und transparenteste Entscheidungsgrundlage.

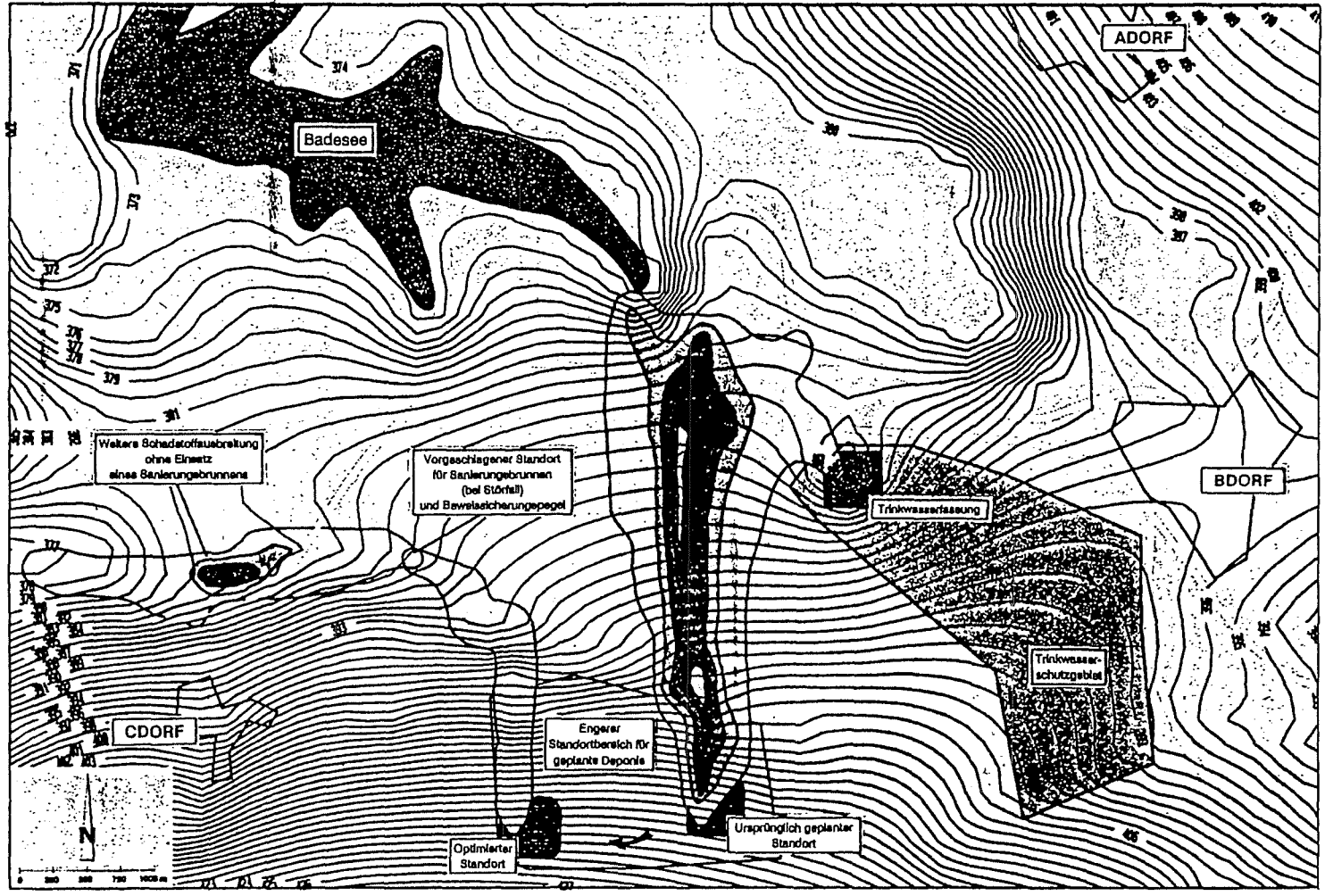


Abb. 4: Planungsinstrument zur Optimierung der Standortwahl: Aufgrund der durchgeführten Modellierung kann dieser Deponiestandort sogar innerhalb des näheren Standortbereichs so optimiert werden, daß eine Gefährdung der Umwelt nach menschlichem Ermessen quasi ausgeschlossen werden kann.

VORGEHEN BEIM EINSATZ VON GRUNDWASSERMODELLEN

Der Einsatz von Simulationsmodellen im Grundwasserschutz ist derzeit zwar Stand der Technik bei der Qualitätssicherung des Grundwassers, aber in der Praxis noch nicht selbstverständlich. Trotz der enorm gestiegenen Anzahl an Problemstellungen, insbesondere im Bereich der Altlasten und der Landwirtschaft, werden z.B. in Bayern nach unserer Schätzung derzeit nur ca. 2-3 Grundwassermodelle pro Jahr erstellt, obwohl eindeutig nachgewiesen werden kann, daß der Einsatz solcher Modelle wirtschaftlich geboten wäre. Ein Grund für den geringen Einsatz ist, daß hydrogeologische Probleme derzeit meist in Form eines betont schrittweisen Vorgehens angegangen werden, was zwar den Vorteil eines billigen Einstiegs in das Problem bietet, aber leider meist exponentiell steigende Kosten für die einzelnen Untersuchungsschritte zur Folge hat. Der Einsatz eines Computermodells erfordert dahingegen zwar relativ hohe Einstiegskosten, die Problemlösung insgesamt ist aber wesentlich preiswerter. Diese relativ hohen Einstiegskosten schrecken Auftraggeber und Fachbehörden trotz der kostenmäßigen und qualitativen Vorteile der Grundwassermodellierung oft noch ab.

Wenn man die Vorteile von Grundwassermodellen optimal ausschöpfen möchte, ist beim Einsatz dieses Werkzeuges im Rahmen der hydrogeologischen Beurteilung ein teilweise völlig anderes Vorgehen geboten, als wenn bei der hydrogeologischen Beurteilung auf ein Grundwassermodell verzichtet wird.

Sensitivitätsanalysen

Die größte Effizienz mit Grundwassermodellen kann dann erzielt werden, wenn sie von Anfang eines Projektes an eingesetzt werden. Durch sogenannte Sensitivitätsanalysen kann ein Grundwassermodell aufzeigen, wie hoch bei der vorliegenden Datenbasis die Trennschärfe der Aussage ist und in welchen Bereichen des zu untersuchenden Gebietes die größten Datenunschärfen vorliegen und wo damit der größte Untersuchungsbedarf besteht. Die Analyseergebnisse des Modells bestimmen so in einem iterativen Verfahren die jeweils nächsten Untersuchungsschritte. Dieses Verfahren orientiert sich an der Fragestellung und wird kontrolliert durch die Trennschärfe der Aussage. Dadurch werden zum Einen unnötige Untersuchungen vermieden, zum Anderen aber auch eventuelle Forderungen nach weiterreichenden Arbeiten stichhaltig begründet.

In günstigen Fällen können durch Sensitivitätsanalysen umfangreiche, geplante Untersuchungen eingespart werden, wenn durch diese Analysen nachgewiesen worden ist, daß die geplanten Untersuchungen die Trennschärfe der Aussage nicht beeinflussen. Als Beispiel seien hier Arbeiten für die ehemals geplante Wiederaufbereitungsanlage für Kernbrennstäbe in Wackersdorf (WAW) angeführt (siehe Abb. 5).

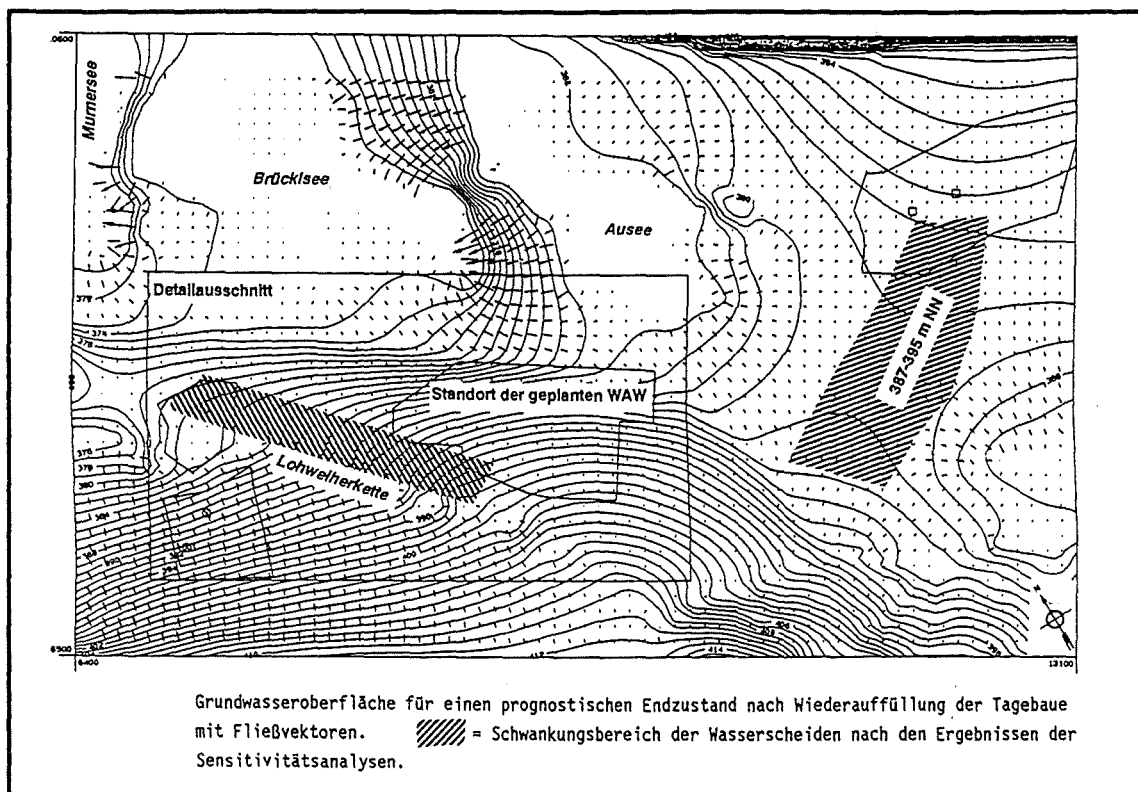


Abb. 5: Fallbeispiel für modellimmanente Fehlerrechnung WAW

Der Grundwasserkörper im Bereich der ehemals geplanten WAW befindet sich infolge früher Sumpfungmaßnahmen in nahegelegenen Braunkohletagebauen in einem instationären Zustand. Für die hydrogeologische Standortbeurteilung reichte es nicht aus, den Ist-Zustand zu beschreiben, es mußte eine Prognose des wieder stationären Endzustandes nach Beendigung der Wiederauffüllung der Tagebaue erstellt werden. Die Fehlerbreite und die Trennschärfe der Prognose wurde im Rahmen von Sensitivitätsanalysen mit Hilfe einer "worst-case-Betrachtung" quantifiziert. Die Prognoserechnungen zeigten, daß sich östlich und südlich der ehemals geplanten WAW Wasserscheiden befinden werden, die eine unterstellte Schadstoffausbreitung aus der Anlage auf die Grundwasserparzelle westlich und nördlich dieser Wasserscheiden

beschränkt. Die anschließende Fehlerrechnung belegte, daß die Wasserscheide östlich der Anlage unter allen denkbaren Randbedingungen als nahezu ortsfest anzusehen ist und die Anlage immer in der westlich davon befindlichen Grundwasserparzelle liegt. Umfangreiche Arbeiten zur Untersuchung des Bereichs östlich dieser Nord-Süd-verlaufenden Hauptwasserscheide konnten damit unterbleiben.

Konsistenzprüfungen

Die wichtigste Aufgabe von Grundwassermodellen ist am Anfang immer die Überprüfung der Konsistenz der vorhandenen Datenbasis. Sehr oft basieren mathematische Grundwassermodelle nämlich auf einer Datenbasis sehr heterogener Zusammensetzung und Qualität. So wird z.B. oft die Gesteinsdurchlässigkeit als hinreichend genau bestimmt angesehen, wenn die Größenordnung der Durchlässigkeit bekannt war. Auch heute noch gilt eine Bestimmungsgenauigkeit um den Faktor 2 in der Wasserwirtschaft in der Regel als völlig ausreichend. Dieser Faktor 2 bedeutet aber, daß ein Schadstoff sich doppelt so schnell oder langsam, als aufgrund der Datenungenauigkeit fälschlicherweise berechnet, bewegen kann.

Die Qualität der vorhandenen, meist sehr alten Daten reicht für moderne Stofftransportmodellierungen oft bei weitem nicht aus. Hier muß ein intelligentes Grundwassermodell eingesetzt werden, das eine Konsistenzprüfung der Daten vornehmen und dem bearbeitenden Hydrogeologen Hinweise geben kann, in welchen Teilen des Untersuchungsgebietes noch Untersuchungsbedarf besteht. Dadurch läßt sich die Qualität der Beurteilung deutlich steigern und gleichzeitig kann Zeit und Geld gespart werden.

Anhand eines Praxisbeispiels soll im folgenden illustriert werden, wie Konsistenzfehler durch den Einsatz eines intelligenten mathematischen Grundwassermodells erkannt werden können. Die Problemstellung war, für eine im Umfeld einer Deponie gefundene Grundwasserkontamination den Fließweg zurück zu verfolgen und die oberstromig, vermutlich in der Deponie liegende Schadstoffquelle zu finden. Bezüglich der Gesteinsdurchlässigkeiten lagen Daten vor. Für die ermittelten Durchlässigkeitswerte war auch eine einfache Plausibilitätskontrolle entsprechend den üblichen Verfahren durchgeführt worden und die Daten nach positivem Ausgang der Prüfung folglich für gut befunden worden.

Als nun durch uns für das Gebiet ein Grundwassermodell erstellt wurde, zeigte sich, daß die gemessenen und die mit Hilfe des Modells gerechneten Grundwasserspiegelstände fast nirgends in Einklang zu bringen waren. Diese Abweichungen hatten bezüglich der Problemstellung aber große Auswirkungen, da sich anhand der vorliegenden Daten keine verlässlichen Fließrichtungen berechnen ließen. Die Abweichung wurde mit Hilfe des Modells festgestellt und bei der nachfolgenden Fehlersuche konnten die aufgrund fehlerhafter Untersuchungen zugrundegelegten Gesteinsdurchlässigkeiten als der dafür hauptverantwortliche Faktor bestimmt und gezielte Untersuchungen und Verbesserungen angeregt werden.

GRENZEN VON GRUNDWASSERMODELLEN

Grundwassermodelle sind aber nicht für alle Fragestellungen geeignet, insbesondere ist ihre Anwendung bei Grundwasserleitern mit hydraulisch wirksamen Kluftsystemen prinzipiell nur sehr eingeschränkt möglich. Dies ist nicht auf mathematische oder informatische Probleme zurückzuführen, sondern allein auf die zu ungenaue hydrogeologische Kenntnis des Untergrundes, die derzeit in klüftigen Gesteinen auch mit großem Geldaufwand nicht hinreichend verbessert werden kann. So liefern beispielsweise Grundwassermodellierungen im Karst der Frankenalb großräumig zwar sehr gute Ergebnisse, insbesondere im Hinblick auf die Berechnung des großräumigen Potentialfeldes, bei der kleinräumigen Prognose einer Schadstoffausbreitung liefern die Berechnungen erwartungsgemäß aber oft fehlerhafte Resultate (siehe Abb. 6).

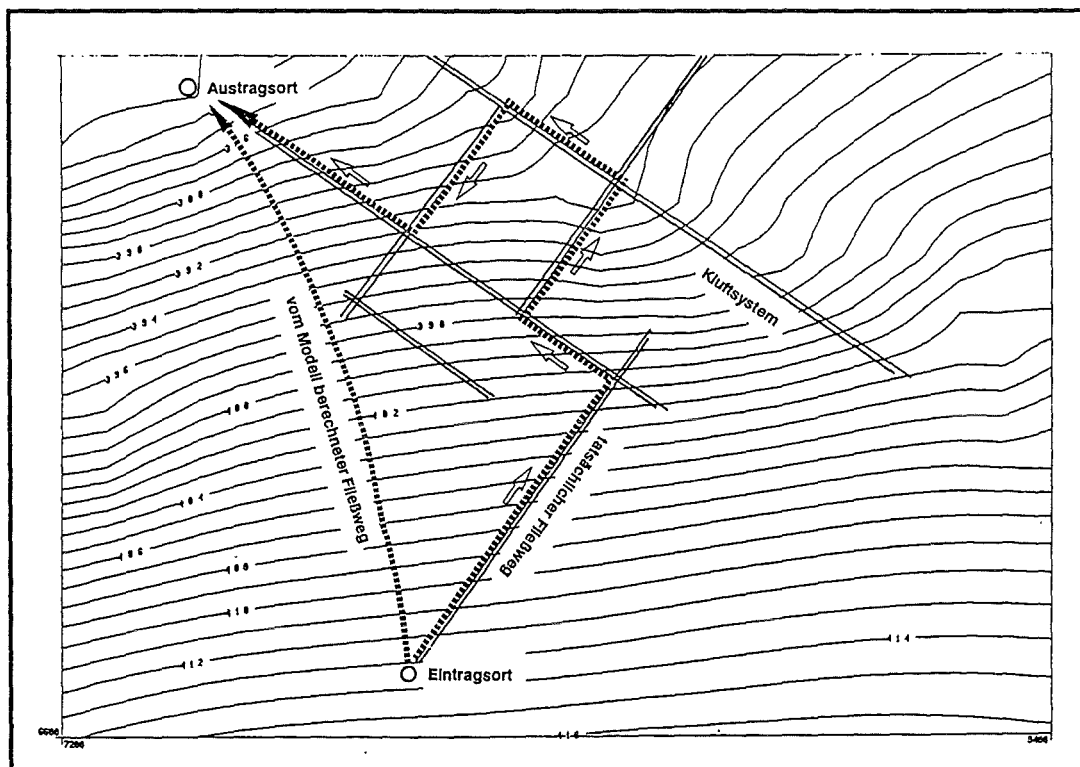


Abb. 6: Beispiel für die Grenze der Prognosefähigkeit mathematischer Grundwassermodelle: Stoffausbreitung in einem Karst-Grundwasserleiter.

Der Austrittspunkt des Schadstoffes wird in diesem Beispiel vom Modell zwar richtig prognostiziert, der konkrete Fließweg dahingegen kann nicht richtig erkannt werden. Hier müssen Ersatzstrategien im Sinne von "worst-case"-Betrachtungen oder zufallsbasierten statistischen Auswertungsverfahren entwickelt und eingesetzt werden.

Fallbeispiel: Modellierung eines Karst-Grundwasserleiters

Abb. 7 zeigt als Fallbeispiel die Möglichkeiten eines Grundwassermodells im Karst. Es handelt sich hierbei um die modelltechnisch schwierigste Form des mitteleuropäischen Karstes, die Massenfazies. Die Schwierigkeit dieser Grundwasservorkommen kann dadurch verdeutlicht werden, daß selbst Tracerversuche hier bisher nahezu immer ohne Ergebnis bleiben und daher für die Beantwortung von Fragestellungen nicht herangezogen werden können. Hier kann im Prinzip nur noch mit worst-case-Analysen gearbeitet werden, da nur diese hier verlässliche Aussagen liefern.

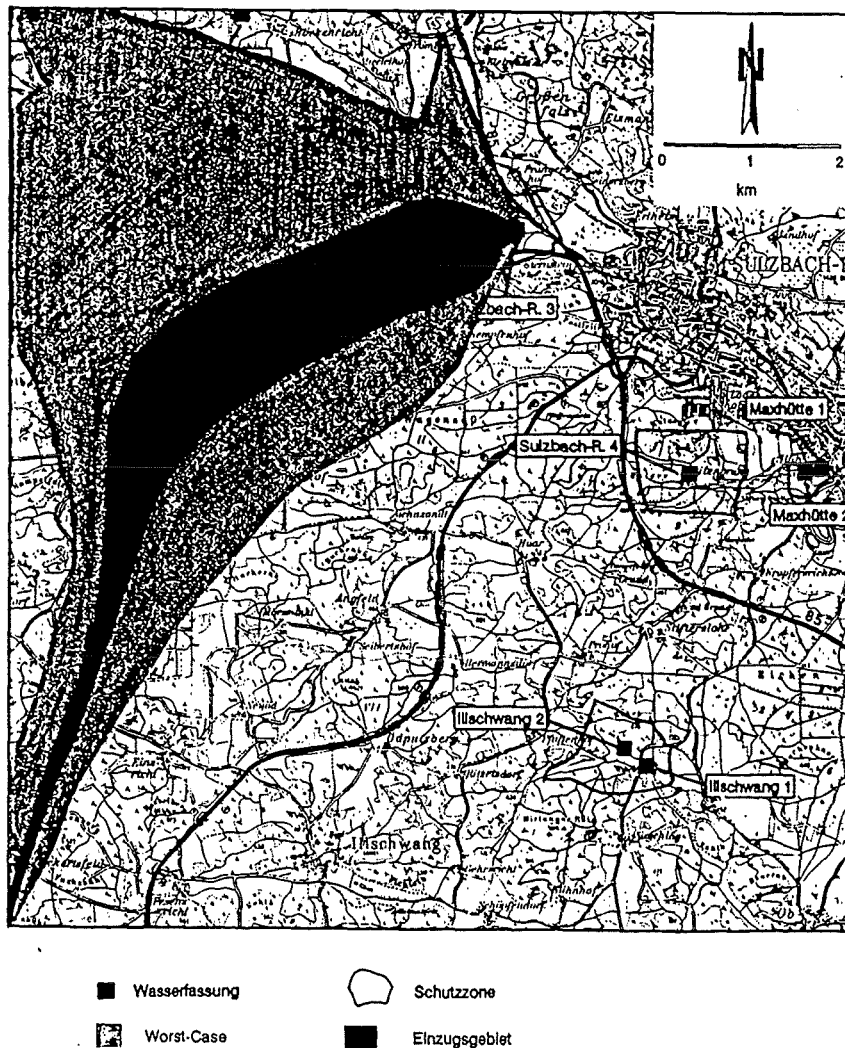


Abb. 7 : Worst-case-Rechnung für die Einzugsgebietermittlung eines Trinkwasserbrunnens

OFFENE FRAGEN BEIM EINSATZ VON GRUNDWASSERMODELLEN

Dispersion

Unter Dispersion versteht man die Verminderung eines Konzentrationsgradienten aufgrund einer Fließgeschwindigkeitsverteilung im Aquifer. Die Dispersion ist daher ein Ausdruck für Inhomogenitäten im Aquifer. Wie wichtig die Dispersion für Fragen des hydrogeologischen Alltags ist, zeigt Abb. 8.

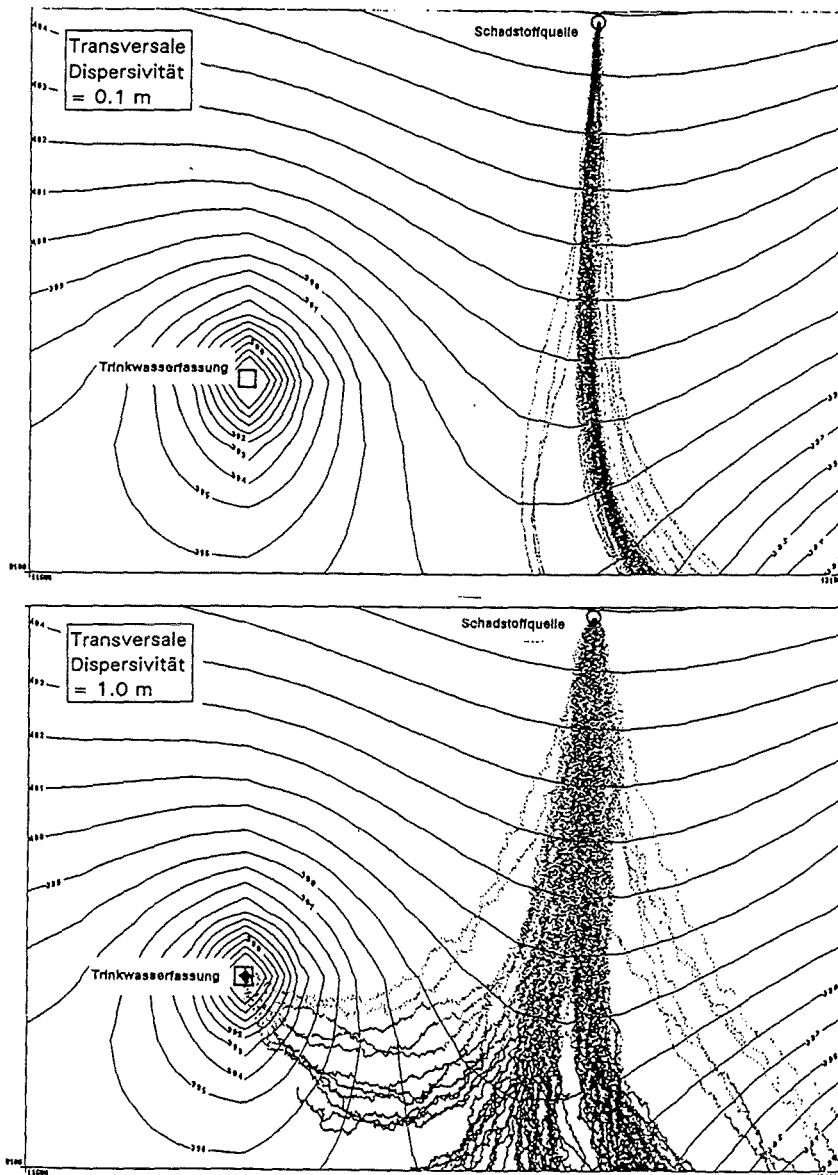


Abb. 8: Einfluß der transversalen Dispersivität auf die Stoffausbreitung im Grundwasser: Für das betrachtete Szenario tritt bei einem kleinen Wert für die transversale Dispersivität von 0.1 m keine Kontamination der Trinkwasserfassung auf (oberes Bild), während ein höherer Wert von 1.0 m zu einer Kontamination führt (unteres Bild).

Je länger der Fließweg eines Schadstoffpartikels ist, desto größer ist die Anzahl und die Ausdehnung der Inhomogenitäten, die dieser Partikel "sehen" kann. Deshalb wächst allgemein die Dispersion mit der Länge des Fließweges (siehe Abb. 9).

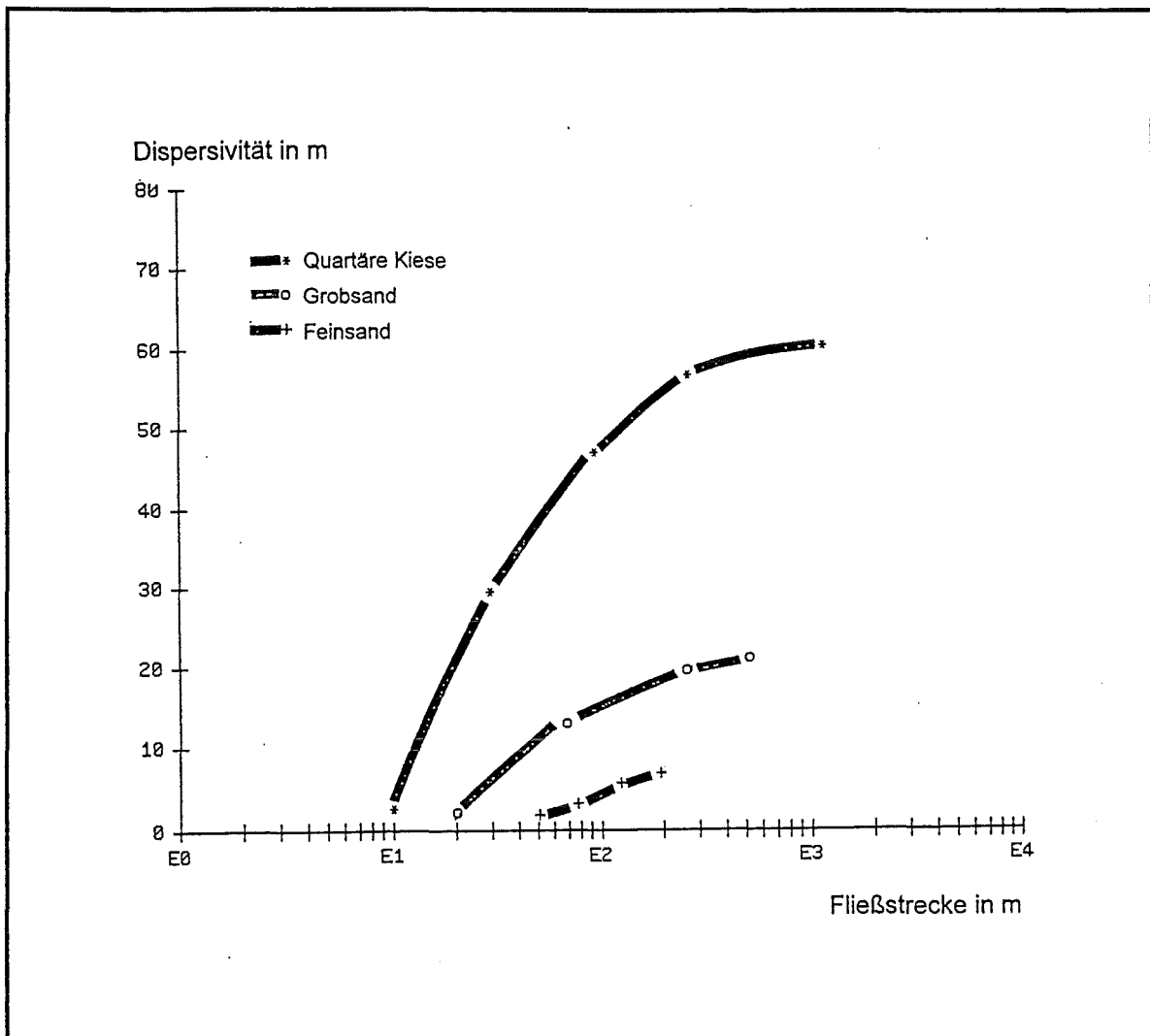


Abb. 9: Abhängigkeit der Dispersion von der Länge des Fließweges

Es ist für die Beurteilung von Stofftransportmodellen deshalb wichtig, ob sie mit einer fließstreckenabhängigen Dispersion rechnen oder nicht. Welche Auswirkungen das selbst in einfachsten Fällen haben kann, zeigt Abb. 10.

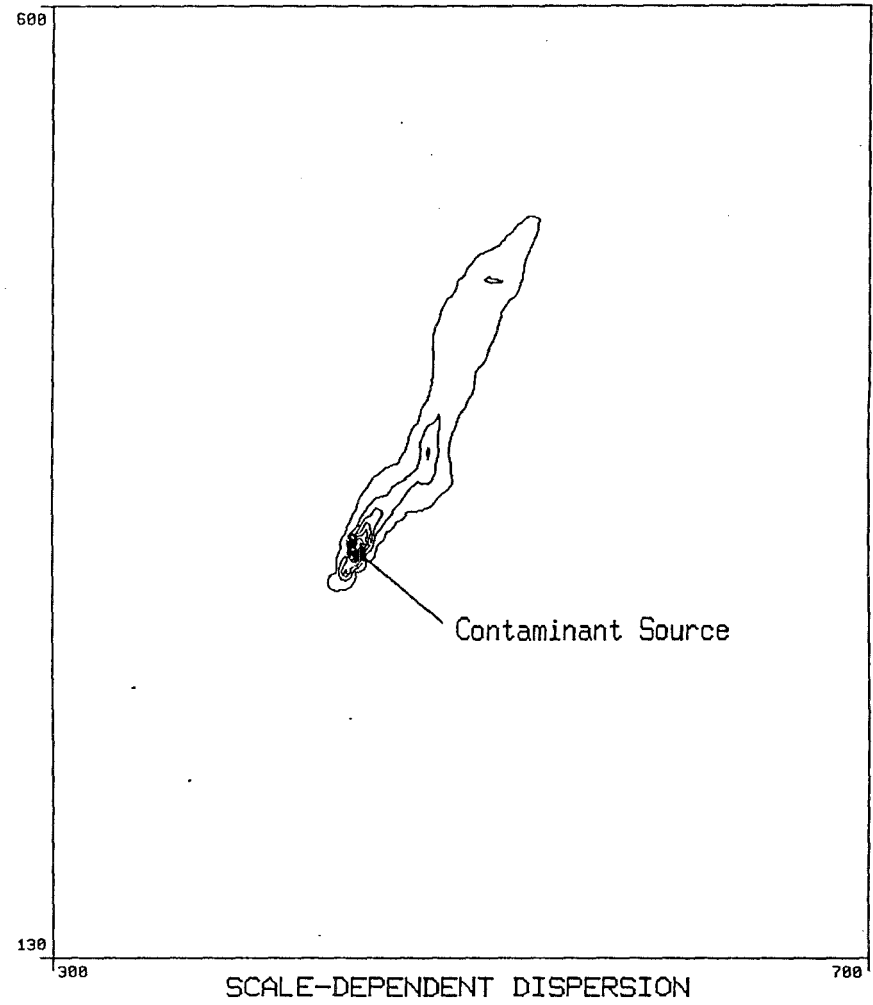
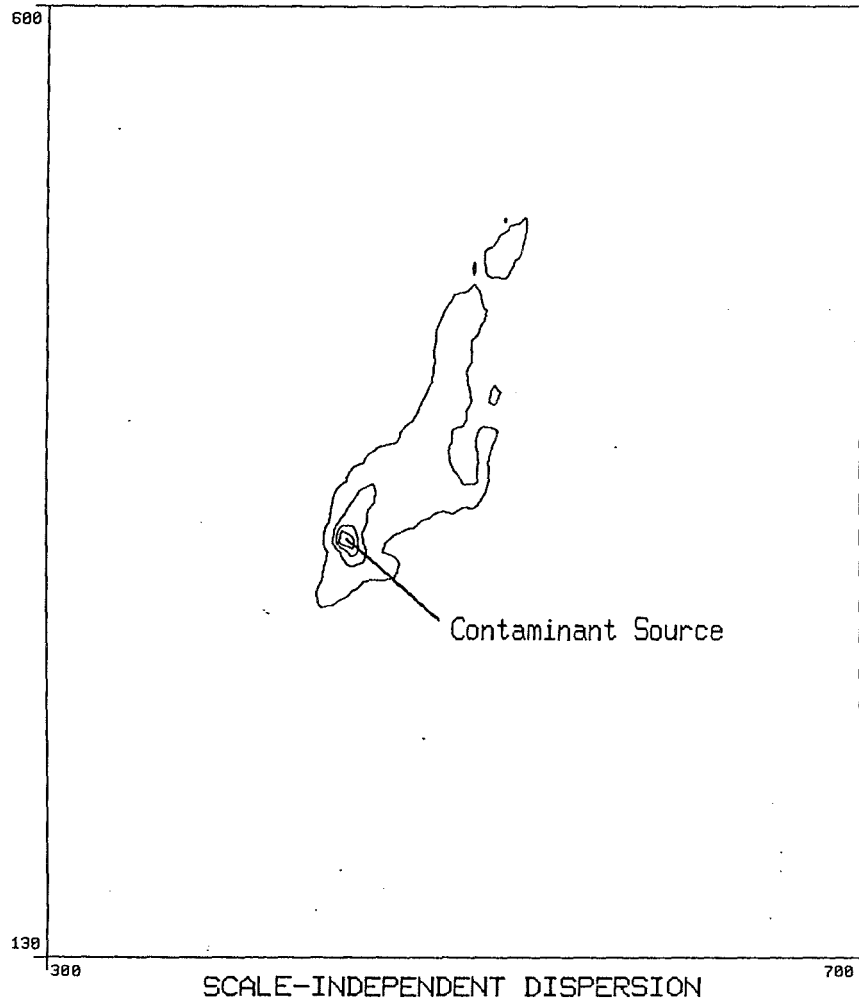


Abb. 10: Einfluß der Skalenabhängigkeit der Dispersion auf die Stofftransportmodellierung

PFAFF versucht derzeit mit Unterstützung des Bayerischen Staatsministeriums für Landesentwicklung und Umweltfragen diesen Effekt in einem Forschungsvorhaben zu quantifizieren.

Ausbreitungsverhalten reaktiver oder komplexbildender Stoffe

Das Ausbreitungsverhalten reaktiver Stoffe und komplexbildender Stoffe ist bisher nur in groben Zügen bekannt. Wenig bekannt ist z.B. über

- die Ausbreitung von Komplexen abhängig von ihrer Konzentration,
- die Ausbreitung von reaktiven Stoffen abhängig von der Dispersion oder
- die Ausbreitung von reaktiven Stoffen abhängig von der mineralogischen Zusammensetzung des Gesteins.

ZUSAMMENFASSUNG

Für die Qualitätssicherung des Grundwassers bietet der Einsatz von Grundwassermodellen eine ganze Reihe von Vorteilen. Begutachtungen unter Einbeziehung von Grundwassermodellen sind im Vergleich zu mit herkömmlichen hydrogeologischen Methoden durchgeführten Begutachtungen

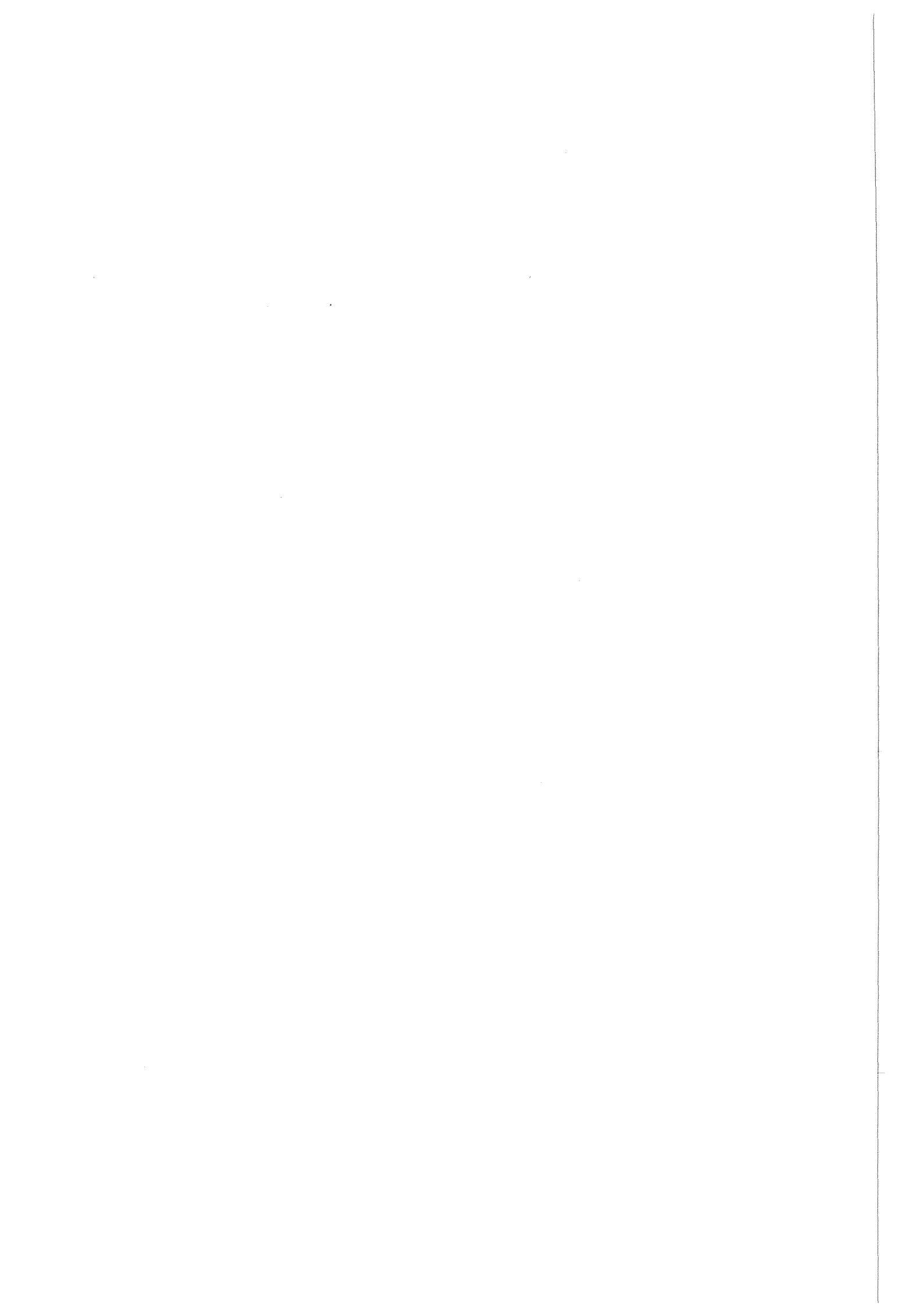
- ♦ konsistent,
- ♦ genauer, da bessere Interpolationsfähigkeit (konvektive Grundwasserbewegung),
- ♦ realistischer durch Berücksichtigung der dispersiven Stoffausbreitung
- ♦ akzeptanzerhöhend durch Transparenz aller Aussagen,
- ♦ voll belastbar aufgrund ihrer Fähigkeit zu "worst-case"-Berechnungen und exakten Ermittlung des Fehlerbalkens,
- ♦ prognosefähig, auch bei instationären Verhältnissen oder zukünftigen, z.B. klimatischen Veränderungen,
- ♦ kostengünstiger durch z.B.
 - Vermeidung von abundanten Felduntersuchungen,
 - Reduzierung der Bohrkosten,
 - exakte Bestimmung der Aussagegenauigkeit (Abbruchkriterium),
 - Mehrfachnutzen und langjährige Verfügbarkeit,
 - Optimierung von Standorten und Sanierungsmaßnahmen,
 - Reduzierung von Prozeßkosten durch exakte Verursacherermittlung

Grundwassermodelle können aufgrund ihrer Prognosefähigkeit ideal für Störfallbetrachtungen eingesetzt werden. Dadurch können sowohl ortsfeste als auch mobile Risiken für das Grundwasser minimiert werden.

Bei Schadensfällen stellen Grundwassermodelle eine verlässliche und bei Vorliegen eines Strömungsmodells sogar sofort verfügbare Entscheidungshilfe zur Beurteilung des Handlungsbedarfs dar.

Wenn man die Vorteile von Grundwassermodellen optimal ausschöpfen möchte, ist beim Einsatz dieses Werkzeuges im Rahmen der hydrogeologischen Beurteilung ein teilweise völlig anderes Vorgehen geboten, als wenn bei der hydrogeologischen Beurteilung auf ein Grundwassermodell verzichtet wird.

So lassen sich viele Probleme im Grundwasserschutz heute durch den Einsatz moderner Informatikverfahren lösen oder doch zumindest wesentlich verringern. Aus Kostensicht ist der Einsatz von Computermodellen oft bereits wirtschaftlicher, als der Verzicht darauf, da durch ihren Einsatz anderweitig oft erheblich eingespart werden kann, z.B. bei der Anzahl der benötigten Grundwassermeßstellen. Gleichzeitig läßt sich die Qualität der Aussagen durch den Einsatz solcher Modelle erheblich steigern, die Aussagen werden reproduzierbar und die Entscheidungsfindung kann viel transparenter gestaltet werden.



A Graph-Theoretic Approach to Qualitative Simulation:
Computer-Aided Technology Assessment Software

Michael H. Ruge
Siemens AG

Zusammenfassung

Technikfolgenforschung oder Technology Assessment ist eine Dienstleistung an die Bereiche und Zentralabteilungen der Siemens AG, die den Umfang möglicher positiver wie auch negativer Folgen ökonomischer wie technischer Art firmenpolitischen Handelns im Gebrauch und in der Entwicklung von Technologien zu beurteilen vermag. Das Ziel dieses Berichts liegt aber nicht in einer Betrachtung der Projekt- oder Methodikseite von Technikfolgenforschung, sondern vielmehr in einer Beschreibung von Simulationstechniken mit Relevanz für Technikfolgenforschung.

In den sechziger Jahren kam als erste Sprache zur Beschreibung stark rückgekoppelter Systeme System Dynamics auf. Diese Simulationssprache ist auch zur Beschreibung rein technischer Systeme geeignet und weit verbreitet. Das Problem bei der Simulation technisch-ökonomischer Systeme, wie sie in der Technikfolgenforschung vorkommen, liegt häufig darin begründet, daß nicht allen Variablen genaue Daten zugeordnet bzw. die Beziehungen zwischen ihnen nicht durch exakte funktionale Zusammenhänge (z.B. durch Differentialgleichungssysteme) beschrieben werden können.

Neuere qualitative Verfahren können gegen dieses Problem Abhilfe schaffen. Das hier vorgestellte Verfahren ist einer Methodik zur qualitativen Simulation von Prozessen aus dem Bereich der Verfahrenstechnik entlehnt, die vom Massachusetts Institute of Technology untersucht wurden. Dieser Algorithmus QUAF (QUALITATIVE ANALYSIS OF CAUSAL FEEDBACK) wurde vom Autor auf das Problemfeld der Simulation **technisch-ökonomischer Systeme** zugeschnitten; der auf seiner Basis entwickelte Prototyp COMPUTER-AIDED TECHNOLOGY ASSESSMENT SOFTWARE (CATS) eignet sich aber auch zur Beschreibung **rein technischer Systeme**. Ein wesentliches Ziel ist ferner, Fehler in der Modellierung zur Durchführung einer quantitativen Simulation zu vermeiden. Ein nächster Schritt könnte daher die Integration dieser neueren qualitativen Simulationstechnik mit bereits bewährten, quantitativen Ansätzen darstellen, wie sie beim System Dynamics vorliegen.

Abstract

The primary function of technology assessment within Siemens is to provide the groups and central divisions with assessments that identify the range of likely positive and negative consequences, economic as well as physical, of policy alternatives affecting the use of technology. The aim of this report is not to focus on the project or methodology side of technology assessment. The description of simulation techniques is what this report is primarily about.

In the sixties, the first description language for feedback systems was system dynamics. This simulation language can be used for the description of purely technical as well as technical-economic systems. The lack of exact (quantitative) data and functional relationships (i.e. by systems of differential equations in system dynamics) represents a major difficulty in modelling the latter kind of systems which are typical of technology assessment projects.

Newly developed qualitative methods may assist in modelling complex technical-economic situations in which not all variables are known or can be determined within reasonable means. The method presented in this report originates from work done at the Massachusetts Institute of Technology in the chemical engineering field. The algorithm QUAF (QUALITATIVE ANALYSIS OF CAUSAL FEEDBACK) was adapted to the problem area of **technical-economic systems**, but the prototype COMPUTER-AIDED TECHNOLOGY ASSESSMENT SOFTWARE (CATS) the algorithm is implemented into can be used for **purely technical systems** as well. One of the main goals is to assist the designer in avoiding typical mistakes as they occur when modelling quantitative relationships (i.e. in designing a system dynamics model). As a possible future goal remains the integration of this qualitative modelling technique with well-established quantitative methods such as system dynamics.

Technology Assessment

The term technology assessment is used to describe a multitude of methods and methodologies for the systematic research of the development of new or already existing technologies. This research includes the study of individual, organizational and sociological consequences of these technologies (opportunities as well as risks). In particular, a technology assessment project deals with the analysis of non-intended consequences of technology applications and any indirect effects which often do not show up immediately, but evolve over time. The cumulative and synergetic effects are taken under consideration as are the consequences to existing social structures on the cultural, technological or political side. These consequences may themselves provide a feedback to technology development which often cannot be measured through ordinary quantitative techniques. All this is done without neglecting any desired primary, directly quantifiable consequences of the use or the development of (new) technologies. [OTA 1993]

The primary function of technology assessment within Siemens is to provide the groups and central divisions with assessments that identify the range of likely positive and negative consequences, economic as well as physical, of policy alternatives affecting the use of technology. The goal is to identify existing or probable impacts of technology or technological programs, alternative technological methods and management programs for specific actions and areas. At the end of any such assessment, findings are presented in a clear and descriptive manner, and additional activities are undertaken if it is deemed to be necessary.

The primary function of technology assessment within Siemens is to provide the groups and central divisions with assessments that identify the range of likely positive and negative consequences, economic as well as physical, of policy alternatives affecting the use of technology.

When working in the area of technology assessment, similar problems on the methodological, scientific and practical side occur as they need to be addressed when performing a prognosis in the technical-economic or even socio-technical area. Exact quantitative variables and functional relationships lack as means to describe future developments. Few indicators are available and usable for direct prognosis into the future. Furthermore, classical economic methods tend to neglect feedback structure among various indicators. [Petermann 1994]

For new technologies, there is a further difficulty to be considered here. New technologies are characterized by their multi-functionality: These technologies interact with nearly any aspect of modern life. Not surprisingly, it is extremely difficult to describe the potential of future technology development, or even the user and

**Founding
Technology
Assessment
Referat**

usage requirements of the future and the consequences resulting through the employment of these technologies. [Bullinger 1991]

Therefore, values such as functionality, productivity and safety alone do not fully describe the situation in which Siemens interacts. These economic and technical aspects need to be complemented with a framework of other indicators, since nowadays, any (new) technology is bound to be viewed on aspects such as environmental safety and social tolerance. Ignoring this framework may very well lead to a situation in which it is difficult to ensure the future use and development of technologies.

As a response to this newly encountered situation, the Referat for Technology Assessment, in short TA Referat, exists at Siemens since 1990. From the early beginning, three different levels were identified as being significant to the success of technology assessment at Siemens: the methodology level, the software level and finally the project level.

While the methodology level can be described as development of new and adaptation of existing methods for technology assessment, the project level deals with the completion of assessments according to the guidelines listed above.

On the project level, two (confidential) technology assessments have been *completed* so far: one on the usage of future photovoltaic technologies - a cooperation of Siemens Solar GmbH, Bayernwerk, KWU and ZFE -, the other one on the future DRAM market for the semiconductor division at Siemens. Sensitivity analysis and system dynamics - both explained at the end of this report - were used extensively for the modelling and simulation part of these assessments besides verbal qualitative descriptions of the system. This led to the effort of developing a modelling and simulation environment enhancing the value of these qualitative descriptions of technical-economic systems - the development of the qualitative simulation prototype COMPUTER-AIDED TECHNOLOGY ASSESSMENT SOFTWARE (CATS).

Qualitative Analysis of Causal Feedback

COMPUTER-AIDED TECHNOLOGY ASSESSMENT SOFTWARE (CATS) was developed at Siemens R&D to discover and analyze causal feedback in technical-economic systems. Two aims are being pursued: First, the system structure is monitored from the very beginning and is searched for necessary or missing feedback structures, thereby avoiding principal modelling errors. Second, it is possible to analyze short- and long-term changes in characteristic system variables to disturbances acting upon the system. Incidentally, quantitative data is not needed to perform a qualitative simulation which enhances the usability of CATS for systems not entirely known.

Causal analysis therefore represents a means to analyze the system without extensive formal modelling. If needed, it can be taken as a first step in performing detailed quantitative modelling with tools such as system dynamics (see below).

The basis of the qualitative simulation in CATS was laid down by the Massachusetts Institute of Technology [Kramer 1990; Oyeleye & Kramer 1988]. There, a tool was needed to describe process malfunctions of large systems in chemical engineering. Qualitative simulation was considered as the only suitable way to do so since other simulation methods are often not very informative regarding trend analysis and too time-consuming - time being critical in discovering faults in these process systems. While time is usually not a factor for the simulation of the technical-economic or socio-economic systems considered here - this usually takes a few minutes at most -, it is the lack of data which makes it difficult and tedious to apply standard quantitative (discrete or continuous) simulation techniques.

The advantage of performing a qualitative rather than quantitative simulation is that not all details of the technical-economic system need to be known.

Let us demonstrate the tool CATS with a simple example. The graph in Fig. 1 contains just a few variables (*productivity, production, appliances, market, demand, cost per unit, decision, revenue and profit*). The arcs among the variables indicate their relationship to each other. Informally speaking, a filled arc represents a positive influence among two variables (i.e. an increase in *production* leads to an increase in *revenue*), while an unfilled arc indicates a negative relationship (i.e. an increase to *appliances* sold leads to a decrease of the remaining *market*).

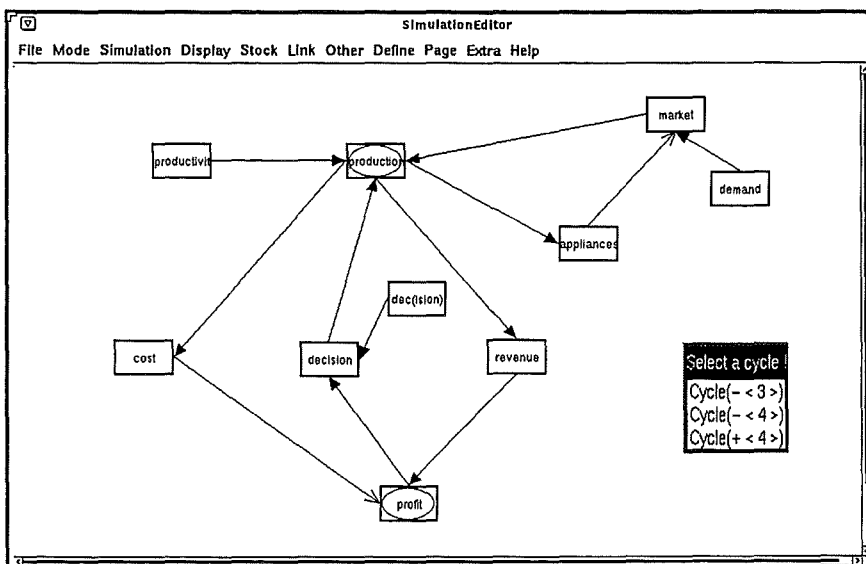


Fig. 1 A simple qualitative system in CATS

Actually, there is a formal mathematical theory based upon systems of qualitative differential equations. For more on this, see for example [Oyeleye 1989; Ruge & Siepmann 1993].

Once a first (heuristic) system is drawn in CATS, a cycle analysis can be performed. The graph in *Fig. 1* obviously contains three cycles:

- a negative *market cycle*, consisting of *production, market* und *appliances*
- a negative *cost cycle*, consisting of *production, cost per unit, profit* and *decision*
- a (strongly) positive *revenue cycle*, consisting of the variables *production, revenue, profit* and *decision*

Within this simple model, growth provided through the *revenue cycle* is limited by the *market* and the *cost cycles*. If the designer feels that the model is ready for simulation, he may do so. Note that the interactive simulation environment CATS allows the designer to make system changes at anytime. Clearly, a cycle analysis should be re-performed if major changes have occurred to the system.

This report would become too extensive in size if all the details of qualitative simulation were described here. Just so much: Basically, changes to variables of the same *component* are being considered as a reaction from *disturbances* pointing at the *component* and not having any arcs pointing to themselves. Here, a (*strongly connected*) *component* is a subgraph in which each variable can be reached from any other one of that component. In the example above, the three cycles *market, cost* and *revenue* form a single *component* with disturbances *production, demand* and *dec(ision)*. For more information on the technical details of qualitative simulation, see [Ruge & Siepmann 1992].

Once a disturbance has been identified, the qualitative time-progression of the involved *component* system variables is determined. In the example, a typical response of a system variable such as *market* to a disturbance like a sudden decrease in *demand* can be visualized as follows:

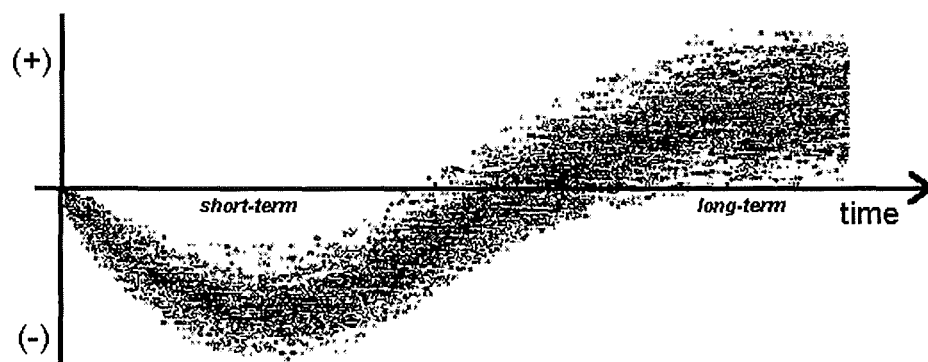


Fig. 2 Time-progression of the system variable *market*

Behaviour of system variables is always provided *relative* to their original values, i.e. to the values the variables possessed before the disturbance had occurred.

Fig. 2 demonstrates that as the change to a particular variable such as a decrease in *demand* occurs, the variable under consideration (i.e. *market*) decreases short-term (initially), but may show an increase in the long run (ultimately) - all looked at relatively from its original value. Formally, for each system variable, one distinguishes inverse behaviour (i.e. behaviour as shown in Fig. 2), monotone behaviour (e.g., long-term behaviour is in the same direction as short-term behaviour) and compensatory behaviour (e.g., the system variable attempts to return to its original value in the long run).

The description of results obtained through qualitative simulation is best presented in a table. Let us close this section with a brief description of the (pretty obvious) short- and long-term behaviour of changes to all system variables in the *component* caused by a disturbance at either *dec(ision)* or *demand*.

Increase at variable	Short-term response	Long-term response
<i>decision</i> (of positive stimulating nature)	increase in revenue, production and the cost per unit; a statement on the future profit (up or down) is not possible (<i>explanation</i> : an increase in production may lead to higher cost per unit which affects the profit)	all system variables attempt to return to their original values
<i>demand</i>	increase in all variables of the market cycle (market, production, appliances)	decrease in production and appliances; market may become smaller in the long run (<i>explanation</i> : a sudden high demand is quickly fulfilled; the market becomes saturated)

Table 1 Initial and ultimate system responses

(The statements need to be reversed in case a decrease instead of an increase is considered.)

Other Qualitative Methodologies

There are several ways on how to principally perform a qualitative simulation: The traditional way is to reason by a discrete event form of simulation. By this, we mean that simulation proceeds from event to event rather than considering a succession of time points as it is usually with quantitative simulation. This is the approach of the so-called QUALITATIVE SIMULATION, or QSIM. [Kuipers 1986]

In the qualitative simulation QSIM, events correspond to instants at which descriptive variables take on or pass through landmark values. Between such events, descriptive variables are understood to be holding at or moving between landmark

QSIM

values. The assignments at events are often referred to as states. During qualitative simulation, a next event is determined by selecting a descriptive variable that is moving toward a landmark value. Due to the ambiguity inherent to the simplified qualitative relations, there may be several possible next events. All are considered by branching to multiple new states and a multitude of simulation paths is considered that way. The simulation process may continue for each path until either all variables no longer show any changes, a cycle is recognized or an infinite value is attained by some variable.

As mentioned before, a qualitative simulation may serve as a basis for a quantitative one. Incidentally, there are attempts under way to integrate a QSIM-type simulation with system dynamics [Dalle Molle 1987].

Another approach is the one oriented towards the process side of the physical system, and not so much on the event side. This method, called QUALITATIVE PROCESS THEORY (QPT), is described in detail in [Struß 1988]. To the knowledge of the author, research is completed.

QPT

This process-oriented approach was originally developed as a representational framework in physics. Processes are considered as the origins of any changes to the system. The interaction of processes is mediated by the objects they act upon. Since processes create or destroy objects and change their parameters, they may affect the conditions of other processes. One process may create, activate or deactivate another one. There is a collection of potential processes occurring in some domain or task, which serves as a source for process instances.

There are various other qualitative simulation methods most of which are only partially supported by computer usage, i.e. *SIBYL: A Qualitative Decision Management System* [Lee 1990], *QUAL: A microcomputer system for qualitative simulation* based on Sykes' methodology [Cochrain & Paul 1990], and *ENVISION*. New recent approaches attempt to combine this field with neural networks [Garcelon & Nevill 1990] or the extensive area of bond graphs. The latter show some parallels to *signed directed graphs*, the underlying methodology to the qualitative simulation method implemented in CATS.

Other Simulation Techniques

System dynamics

The following section will briefly describe some (quantitative) simulation techniques relevant for technology assessments. The most prominent probably is system dynamics which became famous as the modelling tool for the World Models of the Club of Rome. System dynamics was developed in the sixties by J. Forrester [Forrester 1961].

System dynamics is a modelling method based on the assumption of ubiquity of feedback processes in human interactions. A technical-economic system is modelled as a feedback structure from a high level of abstraction. Thereby, behaviour is generated by the interactions of many feedback loops which are described by a complex coupled system of differential equations. The system is solved with stan-

dard Euler or Runge-Kutta methods; results are usually displayed as time diagrams where the past is used as a verification for the correctness of the model.

System dynamics has been applied to a variety of domains, from purely technical systems to ecological forecasting. System dynamics does not allow any hierarchical modelling, and large models are somewhat difficult to overlook.

It should be noted that the Siemens prototype CATS uses a cause-effect graph for its qualitative modelling approach. Such graphs may be associated with Forrester schematics [Burns 1977] and thus with system dynamics [Dolado 1992], and qualitative models be developed from system dynamics. On the one hand, qualitative modelling (and simulating) with CATS can be seen as a first step in obtaining a (quantitative) system dynamics model; on the other, it is possible to verify certain parts of a system dynamics model with the qualitative simulation tool in CATS. This is why a rudimentary system dynamics ansatz is integrated into CATS.

The underlying software for sensitivity analysis was developed at the Studiengruppe für Biologie und Umwelt (sbu), Munich, by F. Vester. It is based on an algorithm closely related to system dynamics, but without the *differential equations part* [Vester & v. Hesler 1980].

**Sensitivity
analysis**

By this, we mean that all variables carry initial values, and functional relationships are defined among the variables, usually in a graphical fashion or by a simple algebraic equation. During each time step, the functional relationships define new values for all variables by adding (or subtracting) appropriate quantities. This software does not know any out- or inflows as they are common within system dynamics.

This approach works well whenever these relationships are *quantifiable*, that is some kind of numerical relationship can be defined among any two variables. It is already more difficult whenever some variables cannot be described in exact quantitative terms and only possess values such as low, medium, high. By assigning values to these variables such as -1, 0, +1, say, it is formally possible to quantify them, however, there still remains the difficulty of defining functional *relationships* among them. The author feels that systems primarily composed of *qualitative* variables can be modelled this way, but possibly not simulated.

Hierarchical modelling is one of the strengths of this modelling tool which was developed at the University of Koblenz-Landau as part of a project for the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) from 1988 through 1990 [Möhring et al. 1992]. MIMOSE is a functional programming language as well as the name of the simulation software.

MIMOSE

The entire model is split into two or more levels in which different types of behaviours are analyzed. As a simple example, one may think of a group and an individual, both having an opinion. The model could then be build as the group changing its opinion according to certain rules, and the individual changing his/her opinion according to what has happened within the group. This model can be extended by introducing a multitude of groups and/or individuals interacting with each other. The final multi-level model consists of macro- and micro-modelling components and is therefore avoiding the mix-up of these components as it can occur within a system dynamics model.

As with system dynamics, MIMOSE is built upon a system of coupled differential equations which are solved using standard methods (Runge-Kutta and Euler algorithms).

Conclusion

What are the advantages of applying CATS within a technology assessment project? The idea is to build a heuristic model using qualitative information, thereby formalizing purely verbal (qualitative) statements and enabling the designer to analyze causal feedback of the model. This is achieved by undertaking the following steps.

At the beginning of each modelling process, variables deemed to be necessary in describing the technical-economic system are noted. (Further variables may be added later.) Next, *qualitative relationships* among these variables and any known differential or algebraic equations are plugged into a model in CATS which allows for an ad-hoc simulation. Note that (quantitative) differential equations need to be converted into the qualitative *language* used in CATS. Once the qualitative simulation results are satisfactory, the model can be extended to a quantitative, i.e. a system dynamics model if so desired.

The advantage of not applying system dynamics or other quantitative methods from the beginning lies in the fact that certain *principal* modelling difficulties of qualitative nature are easier spotted because these may disguise through improper choice of parameters or of the functional relationships among the variables within a quantitative simulation tool. Qualitative simulation should be understood as a means to develop good models, simulate them quickly and use them building up complex (quantitative) models.

Further information can directly be obtained from:

Michael H. Ruge, Ph.D.
Siemens AG
Dept. ZFE BT SE 5 TA
D-81730 Munich
Germany

Telephone: +49 89 636 49414
Fax: +49 89 636 49540
Email: ruge@sioux.siemens.zfe.de

References

- Bullinger, H.-J. (1991). *Technikpotentialabschätzung - Wissenschaftlicher Anspruch und Wirklichkeit*. In: Reichweite und Potential der Technikfolgenabschätzung. Stuttgart, C.E. Poeschel-Verlag. 105.
- Burns, J. R. (1977). *Converting Signed Digraphs to Forrester Schematics and Converting Forrester Schematics to Differential Equations*. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics SMC-7(10): 695.
- Cochrain, J. K. and B. K. Paul (1990). *QUAL: A Microcomputer System for Qualitative Simulation*. 11: 300.
- Dalle Molle, D. T. and T. F. Edgar (1987). *Qualitative Modelling of Dynamic Systems*. AIChE Annual Meeting, New York, Section 88: Expert Systems in Process Control.
- Dolado, J. J. (1992). *Qualitative Simulation and System Dynamics*. System Dynamics Review 8(1): 55.
- Forrester, J. W. (1961). *Industrial Dynamics*. Cambridge, Massachusetts, Productivity Press.
- Garcelon, J. H. and G. E. J. Nevill (1990). *Qualitative Analysis of Preliminary Designs Using Artificial Neural Networks*. 1990 ASME International Conference and Exhibition, Boston.
- Kramer, M. A. (1990). *Process Systems Diagnosis: Theory and Practise*. International Workshop on Principles of Diagnosis, Stanford University, 23-25 July 1990.
- Kuipers, B. (1986). *Qualitative Simulation*. Artificial Intelligence 29: 289.
- Lee, J. (1990). *A Qualitative Decision Management System*. Center for Coordination Science, Sloan School of Management, M.I.T. Jan. 1990.
- Möhring, M., V. Strotmann and A. Flache (1992). *MIMOSE: Einführung in die Modellierung - Sprachbeschreibung*. Universität Koblenz-Landau. Apr. 1992.
- OTA (1993). *Annual Report to the Congress, 20th Anniversary Edition, Fiscal Year 1992*. Office of Technology Assessment, Washington D.C.
- Oyeleye, O. O. and M. A. Kramer (1988). *Qualitative Simulation of Chemical Process Systems: Steady-State Analysis*. AIChE Journal 34(9): 1441.
- Oyeleye, O. O. and M. A. Kramer (1989). *Guidelines for Developing Signed Directed Graphs*. Laboratory for Intelligent Systems in Process Engineering, Dept. of Chem. Engineering, M.I.T. Oct. 1989.
- Petermann, T. (1994). *Ein Beobachter am Rande des Spielfeldes, kein Mitspieler*. Frankfurter Rundschau. Frankfurt. 18 Apr. 1994.
- Ruge, M. H. and E. Siepmann (1992). *A Qualitative Analysis Method Applied to Technology Assessment*. Modellierung und Simulation im Umweltbereich, Rostock, Mecklenburg-Vorpommern, Universität Rostock, Fachbereich Informatik, AG Modellierung und Simulation, Gesellschaft für Informatik e.V., Regionalgruppe Rostock/Wismar. 25/26 June 1992.
- Ruge, M. H. and E. Siepmann (1993). *Technology Assessment and Qualitative Simulation*. Modelling and Simulation: ESM 93, Lyon, France, Society for Computer Simulation International. 7-9 June 1993.
- Strauß, P. (1988). *Qualitative Reasoning - An Introduction*. Corp. R & D, Siemens AG, Munich.
- Vester, F. and A. v. Hesler (1980). *Sensitivitätsmodell*. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Innern, Regionale Planungsgemeinschaft, Untermain, Frankfurt am Main.

Inhalt

- 1. Aufgaben der Technikfolgenforschung**
- 2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse**
- 3. Qualitative Simulation**
- 4. System Dynamics**
- 5. Ausblick**

Inhalt

- 1. Aufgaben der Technikfolgenforschung**
- 2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse**
- 3. Qualitative Simulation**
- 4. System Dynamics**
- 5. Ausblick**

Definition

Technikfolgenabschätzung und -bewertung (TA) ist ein planmäßiges, systematisches, organisiertes Vorgehen, das

- (1) den Stand einer Technik und ihrer Entwicklungsmöglichkeiten analysiert;
- (2) unmittelbare und mittelbare technische, wirtschaftliche, gesundheitliche, ökologische, humane, soziale und andere Folgen dieser Technik und möglicher Alternativen abschätzt;
- (3) aufgrund definierter Ziele und Werte diese Folgen beurteilt oder auch weitere wünschenswerte Entwicklungen empfiehlt;
- (4) Handlungs- und Gestaltungsmöglichkeiten daraus ableitet und ausarbeitet,

so daß begründete Entscheidungen ermöglicht und gegebenenfalls durch geeignete Institutionen getroffen und verwirklicht werden können.

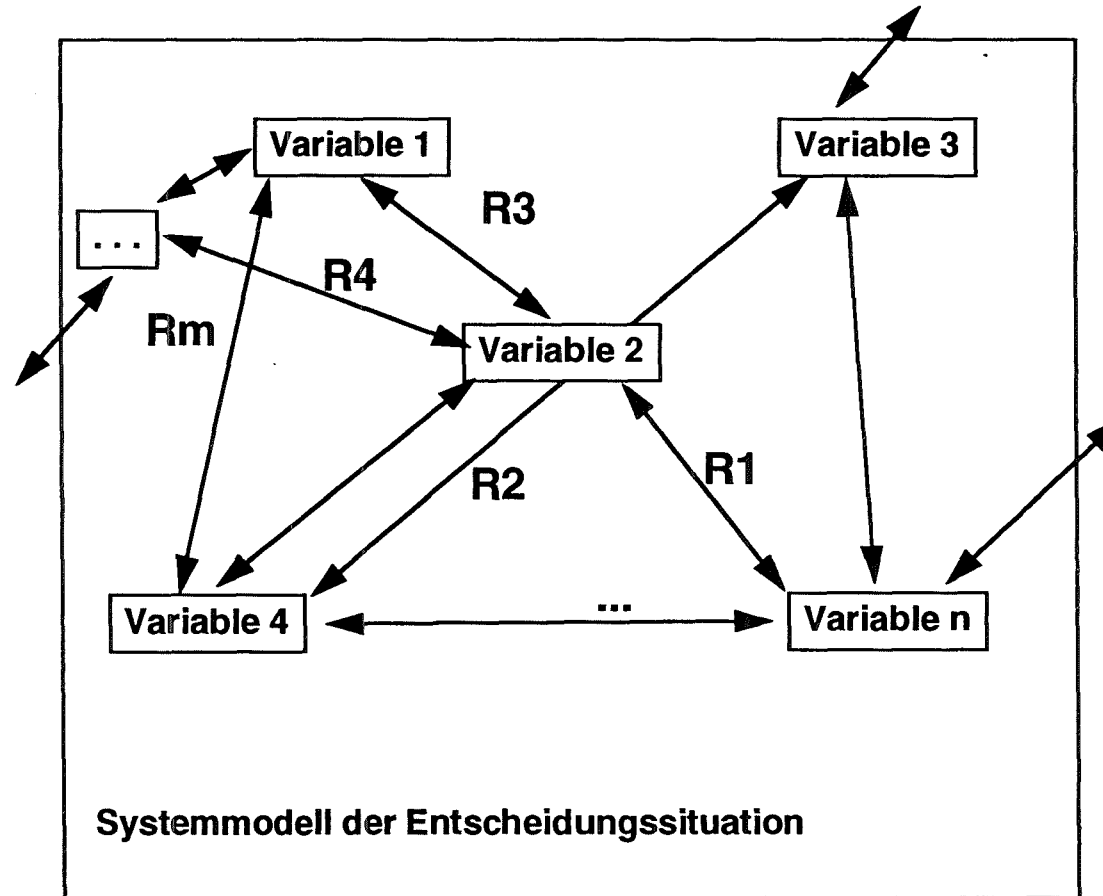
Elemente eines Systemmodells

Daten (-> Variable)

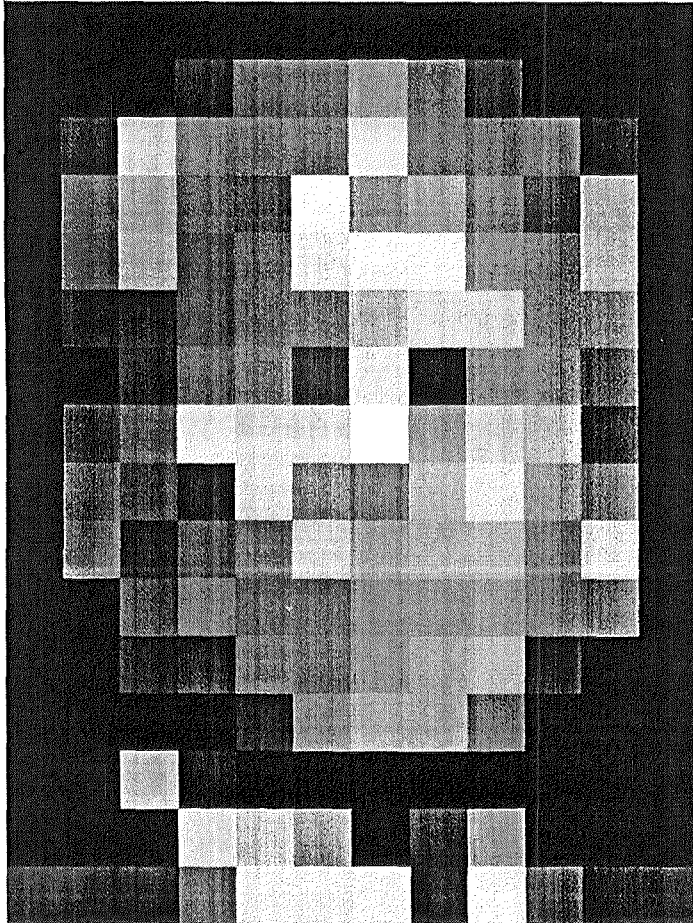
Zahlen
Werte
Fakten
Tabellen
etc.
Meinungen
Standpunkte

Relationen

Funktionen
Qualitative
Einflüsse
textuell



Bild



Hier sehen Sie das Modell eines Wirklichkeitsausschnitts, der durch wenige scharfe Daten, nämlich 150 Quadraten in 8 verschiedenen Graustufen angenähert wurde. Im Gegensatz zu dem Text, den Sie gerade lesen und erkennen, ist bei dieser "scharfen" Einstellung des Fokus der Folie das Bild (Modell) nur schwer oder gar nicht zu erkennen

Wo wird TFF durchgeführt?

Kompetenzzentren für TFF bzw. TA sind u.a.:

- Office of Technology Assessment (gegründet 1972)
- Büro für Technikfolgenabschätzung und Bewertung (TAB) (gegründet 1990)
- VDI-Ausschuß "Technikbewertung im Innovationsmanagement"
- Akademie für Technikfolgenabschätzung, Stuttgart
- Wuppertal-Institut für Klima, Umwelt, Energie GmbH
- FhG für Systemtechnik und Innovationsforschung, Karlsruhe

TA in Unternehmen wird u.a. betrieben bei

- Daimler-Benz AG (seit ca. 10 Jahren mit 20 MA)
- Volkswagen AG
- Chemische Industrie (Sicherheitsfragen)
- Siemens AG (Referat für Technikfolgenforschung)

TFF bei der Siemens AG

- Studie "Büroautomatisierung", ca. 1980
- Technologiegespräch 1985
- Referat für Technikfolgenabschätzung und -bewertung bei ZFE, seit 1990

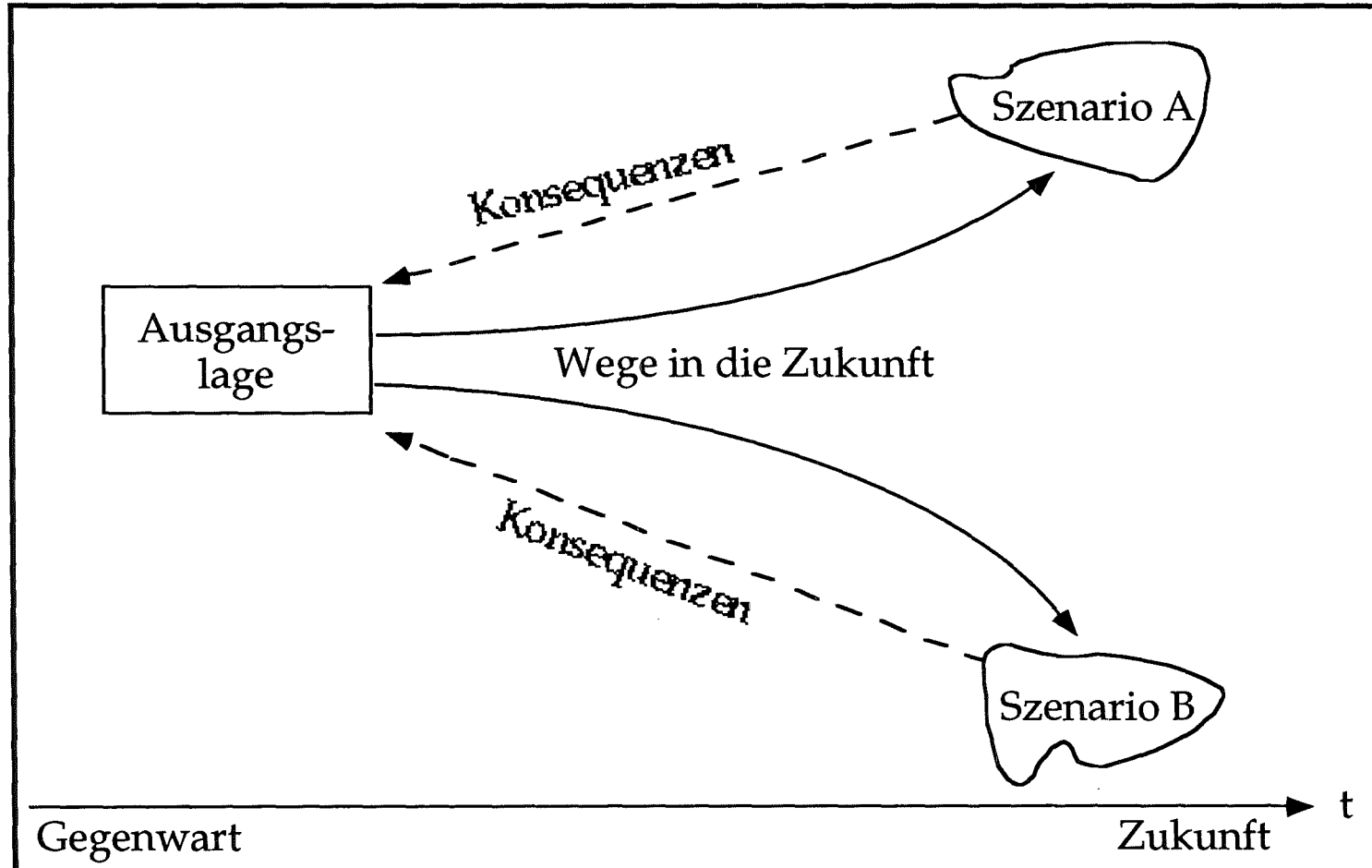
TFF bei Siemens

	Aufgaben	Ergebnisse
Software	Bewertung existierender Werkzeuge und Spezifikation, Rapid Prototyping	Computer Aided Technology Assessment Software (CATS)
Methoden	Bewertung bekannter Methoden (z.B. Sensitivitätsmodell)	
Anwendungen	Bildung von interdisziplinären Teams Durchführung von TA-Workshops und Interviews	Strategien und Produktideen

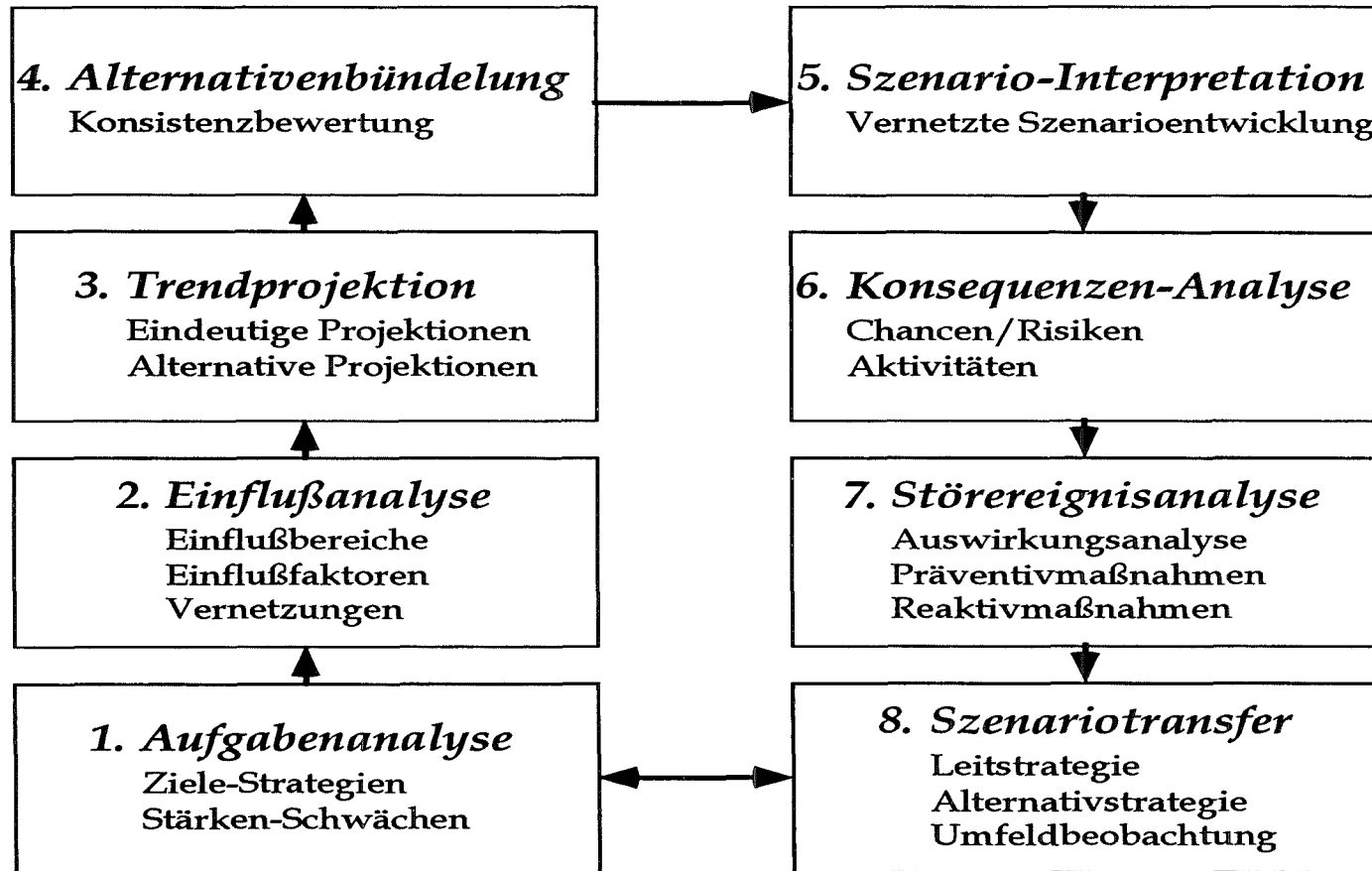
Inhalt

1. Aufgaben der Technikfolgenforschung
2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse
3. Qualitative Simulation
4. System Dynamics
5. Ausblick

Wege in die Zukunft



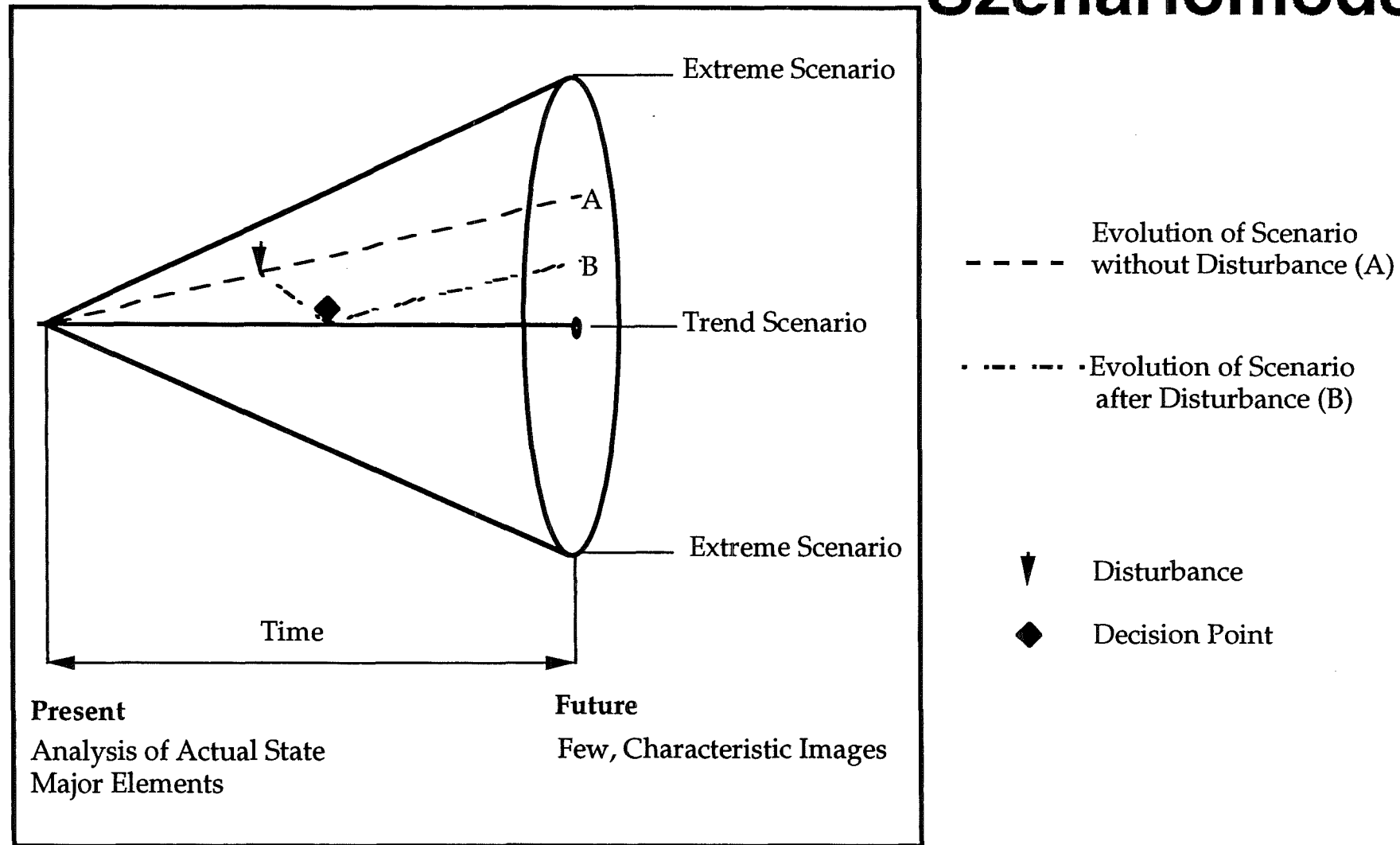
Ablaufplan



Planungsgespräch

- **Interdisziplinäre Teilnehmer aus relevanten Bereichen , z.B. Forschung, Entwicklung, Ökonomie, Vertrieb, Gesellschaft, Anwender**
- **Ziele - Leitbilder**
- **Ausgangsfragen - Abgrenzungen**
- **Zeithorizont**
- **Art der Ergebnisse (z.B. Maßnahmen für Störereignisse, Früherkennung langfristiger Trends)**
- **Weitere Studien**

Szenariomodell



Sensitivitätsanalyse

- 1. Komplexe Realitätsausschnitte können durch wenige Daten wesentlich modelliert werden.**
- 2. Neben Fakten müssen auch Meinungen und Standpunkte in ein Systemmodell einbezogen werden.**
- 3. Ein Problem liegt in der Bestimmung der Relationen (Vernetzung).**
- 4. Überleben bildet das Hauptziel der biokybernetischen Interpretation und Bewertung.**

Entscheidungsunterstützung

- Optionen für alternative Wege in die Zukunft
- Maßnahmen für stabile, überlebensfähige Systeme
- Frühwarnung, Störereignis
- Reduktion der Informationen aufs Wesentliche
- Rationalisierung, Kommunikation

Gesamtkonzept

- **Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse:**

Durch Deskriptoren und deren Relationen wird ein Wirkungsgefüge der Gesamtsituation erzeugt.

- **Literaturrecherchen:**

Zu bestimmten Teilaspekten werden die Bereiche geklärt, die durch Deskriptoren und Szenarien abstrakt beschrieben sind.

- **Einzelinterviews:**

- Vertiefung der Teilszenarien mit relevanten Partnern
- Rückkopplung durch Einzelinterviews über Teilergebnisse der Studie

Kriterienmatrix: Einzelunternehmen (EU)	Lebensbereiche						Phys. Größen			Strukturgrößen				Systemgrößen				
	Wirt- schaft	Bevölker- ung	Human- ökologie	Natur- haushalt	Infra- struktur	Gemein- wesen	Ma- terie	Ener- gie	Infor- mation	Fluß- größen	Struktur- größen	Zeitl. Dynamik	Räuml. Dynamik	Öffnet Sys. d. Input	Öffnet Sys. d. Output	Von Innen beeinflussbar	Von Außen beeinflussbar	
Gesellschaft und Politik																		
Zukunftsorient. E&U-Politik	1					1		1		1	1			1		0.5	0.5	
Akzeptanz von PV	2		1						1	1							1	
Kritisches Verhalten d. Bevölk.	3		1						1	1				1			1	
Image des Unternehmens	4		1						1	1					1	1		
Bionische Energieversorgung	5			1		1		1		1			1				1	
Führung und Wirtschaftsweise																		
Public Relations ⁶		1							1	1		1	1		1	1		
Vertrieb, Umsatz	7	1							1	1			1		1	1		
Management&Unternehmensziele	8	1							1	1	1					1		
Nutzen d. EU	9	1							1	1	1						1	
Herstellungskosten PV-Produkte	10	1								1					1	0.5		
Solidität	11	1							1	0.5	1					1		
Wirtschaftl. d. Solarstroms	12	1										1			1	0.5	0.5	
Struktur und Produktionsweise																		
Qualität PV-Module, Produkte	13		1				1		1	1					1	1		
Flexibilität, Diversität	14	1	1	1		0.5			1	1						1		
Innovationsfähigkeit d. EU	15	1							1				1					
Mensch im Unternehmen																		
Arbeitsplatzqualität	16		1	1			1			1			1			1		
Identifikation, Motivation d. MA	17	1		1					1				1					
Ökologie																		
Umweltfreundlichkeit d. Produkte	18				1		1			1	1				1	1		
Stoff- u. Energiedurchsatz	19				1	1	1	1		1				1	1	0.5	0.5	
Belastung d. Naturhaushalts	20				1		1	1			1			1	1	0.5	0.5	
Summe		10	6	4	3	2.5	2	5	3	13	4.5	13	9	6	3	9	11.5	6

	Wirkung von Zeile auf Spalte	Einflußmatrix Teilmodell Einzelunternehmen (EU)																				Legende: 1 = Schwacher Einfluß 2 = Mittlerer Einfluß 3 = Starker Einfluß	Aktivsumme
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20		
																					AS		
Gesellschaft und Politik	Zukunftsorientierte E&U-Politik		2		1	3		3	1	2			2	1		2		1	3	3	3		
	Akzeptanz von PV	2				1	2		3	1	1		1	1		1		3					
	Kritisches Verhalten der Bevölkerung	3	3	2		1	1	2		1	1			1	1			1	3	1	3		
	Image des EU und seiner Produkte	4		2					1	3	1	2		2					3				
	Bionische Energieversorgung	5	1	1		1				2	2			1	2	3	2			1		2	
Führung und Wirtschaftsweise	Public Relations	6	1	3	1	2				1									1				
	Verkauf, Umsatz	7				2					3	3		3				1	1	2		3	
	Management & Unternehmensziele des EU	8	1			1		3	1			2		1		3	3	3	3	1	2	2	
	Nutzen d. EU	9	1							3				2				1					
	Herstellungskosten d. PV-Produkte	10		1		2			3						3	3							
	Solidität	11		1	1		3			1	1	3					1	1	1				
	Wirtschaftl. des Solarstroms	12	3	3		2	2		3	2	3		2							2			
Struktur und Produktionsweise	Qualität d. PV-Module, Produkte	13		2	2	2	1	1	3		1	2	2				1		1	2	2	2	
	Flexibilität, Diversität	14		2		1	1		2			2			2			1	1				
	Innovationfähigkeit des EU	15	1			3	1	1	1		2	3	1	2	3	2			1	2	2		
Mensch im Unternehmen	Arbeitsplatzqualität	16													3	1			3				
	Identifikation, Motivation d. MA	17							1			2			2	1	2			2	1		
Ökologie	Umweltfreundlichkeit der Produkte	18		3	3	3	1	1				2			2		1	1	1		3	3	24
	Stoff- & Energiedurchsatz d. EU	19		3	2	2		1			1	1						1	3			3	17
	Belastung des Naturhaushalts	20	3	3	3	1	1	1	1		2								1	1			17
	Passivsumme	PS	15	28	11	28	13	11	28	15	23	12	18	11	20	11	13	7	22	19	18	16	339

Variablenname	Management und Unternehmensziele (E8)	
Indikatoren	Planung (kurz-, mittel-, langfristig) Umsetzungsvermögen (Vorgaben, Ziele) Geringe Abhängigkeit Wahrnehmung der Rolle im System u. der politischen u. sozialen Verantwortung (Arbeitsplätze, Krisenvorsorge) Ganzheitliche Frühwarnung Funktionsorientierung Ermöglichen von Symbiosen und Synergien Personalpolitik, Mitbestimmung Lobbyismus	
Störung	Wechsel der Ziele Führungswechsel Wirtschaftliche Krisen	
Quantifizierung		
	kleiner Handlungsspielraum reaktiv wenig Geld	großer Handlungsspielraum antizipativ viel Geld
Datengrundlage, Datenbeschaffung, Datenbezug		
	z.B. Bücher, Artikel, Managementliteratur, Statistiken, Studien	

Systemische Variableneigenschaften aus dem Einzelunternehmen:

Kritische (Instabil)

- Verkauf, Umsatz (2.05)
- Management und Unternehmensziele
- Akzeptanz der Bevölkerung
- E&U-Politik
- Image
- Innovation
- Umweltfreundlichkeit

Aktive (Hebel zur Veränderung)

- Kritisches Verhalten der Bevölkerung
- Wirtschaftlichkeit des Solarstroms
- Innovation
- Naturhaushalt
- Umweltfreundlichkeit

Problemspezifische Modelle (Szenarien)

Wichtige Fragestellungen:

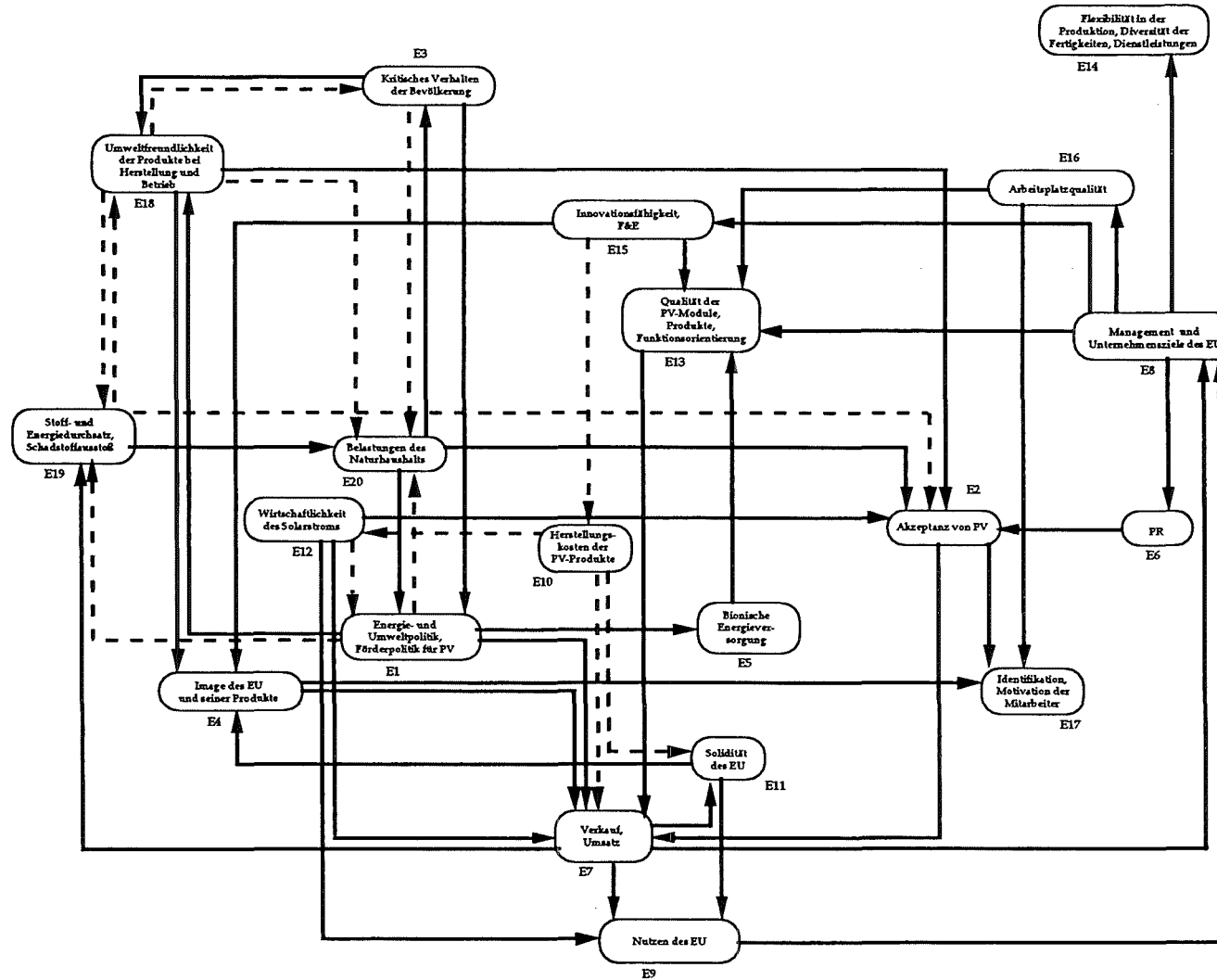
Kaufentscheid-Märkte

Vergleich Energiesituation - PV

Umwelt & Energieerzeugung

<p>Ziel: Absicherung der Umweltverträglichkeit der verschiedenen PV-Technologien und der PV-Produkte</p>		
<p>Strategie 5:</p> <p>Erstellung von Stoff-, Energie- und Kostenbilanzen für die eingesetzten und zukünftig geplanten PV-Technologien</p> <p><u>Maßnahmen:</u></p> <p>Stoff- und Energiebilanzen für spezifische PV-Technologien erarbeiten</p> <p>Bewertung der Stoff- und Energiebilanzen; Konsequenzen für Produktion, Vertrieb und Öffentlichkeitsarbeit</p> <p>Einrichtung eines Softwaresystems zur Stoffflußanalyse</p> <p>Einbindung in die Organisationsstruktur</p>	<p>Strategie 6:</p> <p>Förderung und Thematisierung von Recycling und Entsorgung von PV-Anlagen</p> <p><u>Maßnahmen:</u></p> <p>Kooperation und gemeinsame Forschung mit anderen Firmen</p> <p>Ausnutzung von Forschungsaktivitäten</p> <p>Initiative zur Internalisierung sozialer Kosten der Stromerzeugung</p>	<p>Strategie 7:</p> <p>Recyclinggerechte Produktion: Einbau von "Sollbruchstellen" zur Rezyklierung</p> <p><u>Maßnahmen:</u></p> <p>Forschung</p> <p>Rücknahme der PV-Module vorbereiten</p>

Szenario A		
<i>Deskriptor</i>	<i>Ausprägung im Jahr 2005</i>	<i>Begründung</i>
Technik		
1. Neu-/Weiterentwicklung (\$/Wp)	1 \$/Wp	CIS/CGS Tandemzelle Dünnschicht auf Glas
4. Energieökonomische Verbraucher	a = 0,95	konsequenter Einsatz moderner Halbleiter und neuer magnetischer Materialien
	•	
	•	
	•	
Ressourcen		
7. Einsatzstoffe (Preis)	steigend	Verknappung (Abfall-Si für PV), Umweltschutz auflagen
8. Geld (BSP)	konstant	unveränderte Lage
	•	
	•	
	•	



Inhalt

1. Aufgaben der Technikfolgenforschung
2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse
3. Qualitative Simulation
4. System Dynamics
5. Ausblick

Technikfolgenforschung

Qualitative Simulation

Computer-Aided Technology Assessment Software (CATS)

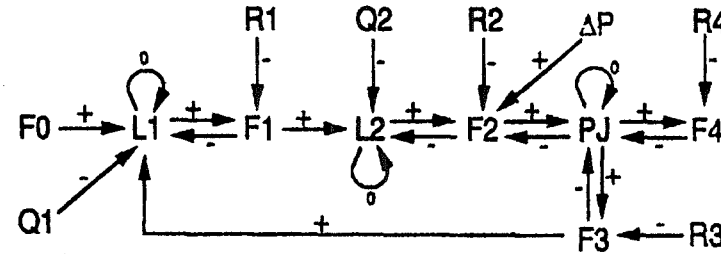
- ◆ **Erstellung eines Systems (qualitativer) Differentialgleichungen**
- ◆ **Integration algebraischer Komponenten**
- ◆ **Aufbau eines Signierten Gerichteten Graphen**
- ◆ **Qualitative Analyse und Simulation**



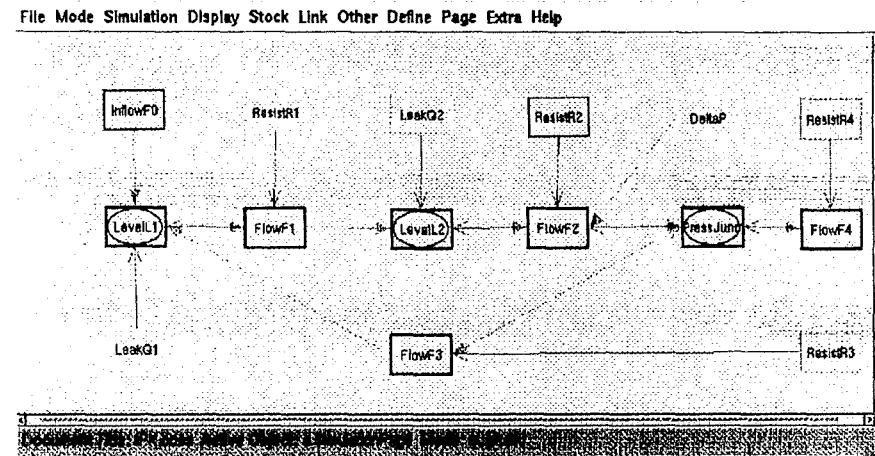
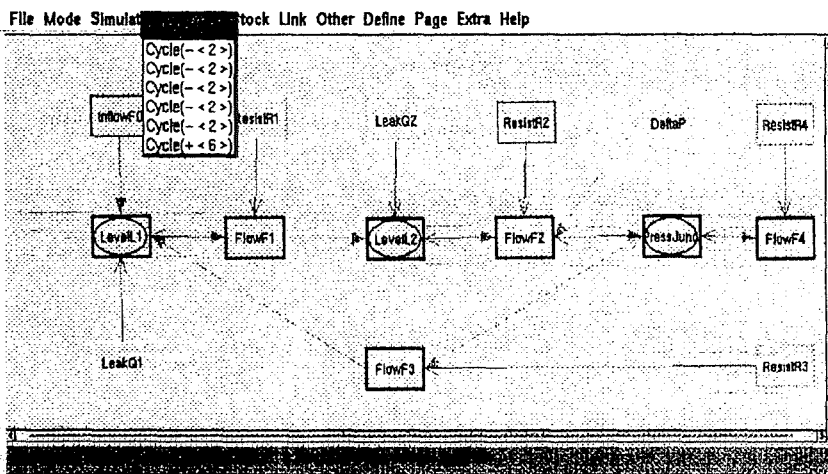
Recycle Tank System

Systemmodell:

Zwei Tanks L1, L2 sind durch eine Zuleitung F1 miteinander verbunden. Der obere Tank L1 hat eine Zuleitung F0, während der untere Tank L2 einen Abfluß F4 besitzt. Eine Pumpe PJ befördert Flüssigkeit vom unteren Tank L2 zurück in den oberen Tank L1.



Signierter Gerichteter Graph

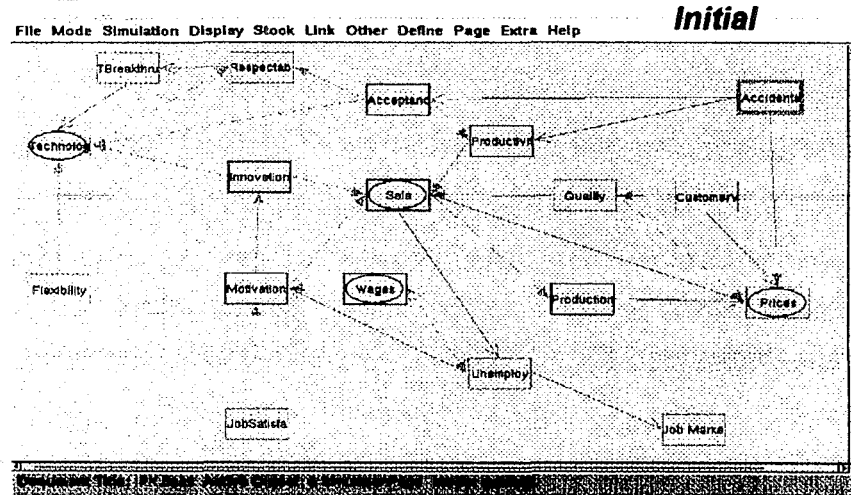
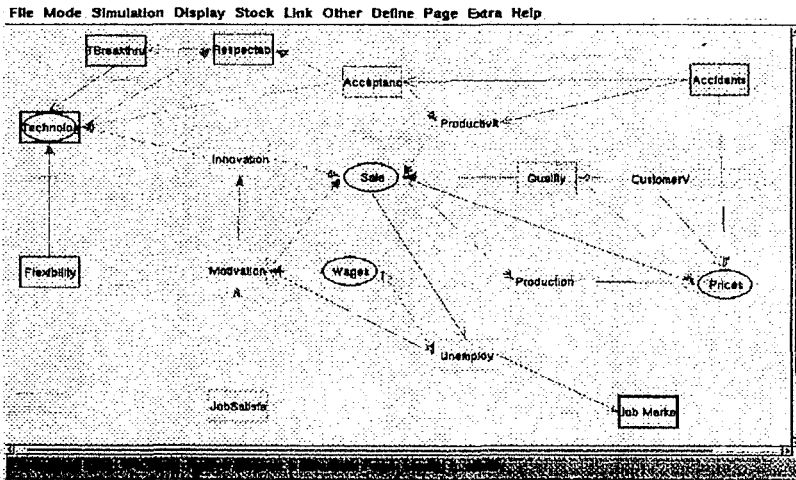


Realisation in CATS

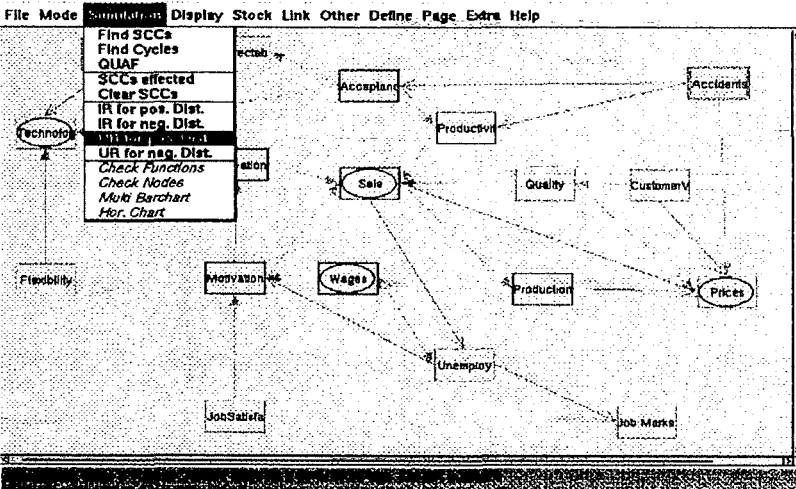
Rückkopplungsanalyse

Das Tool CATS

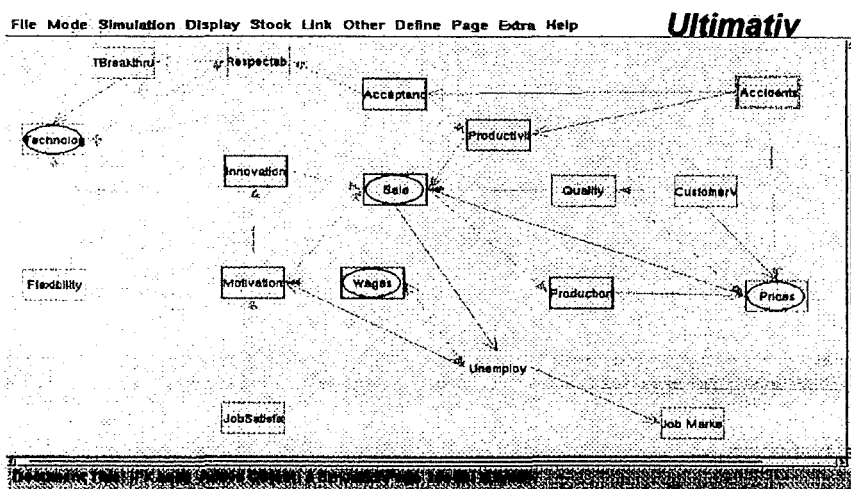
136



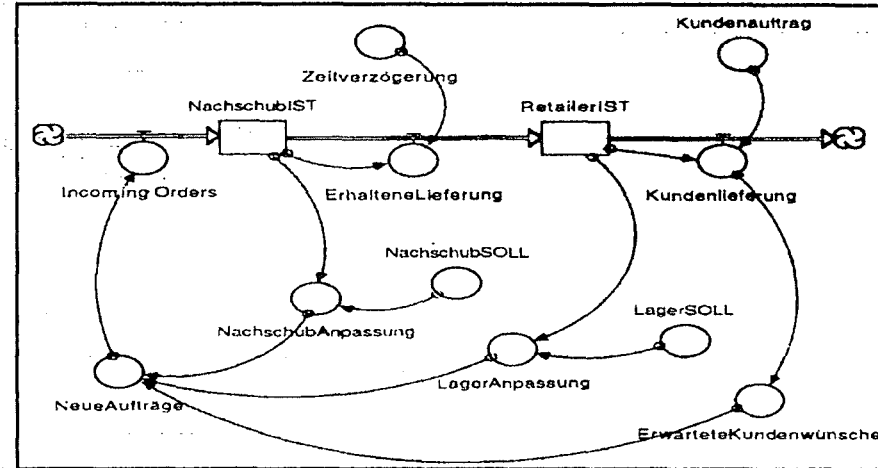
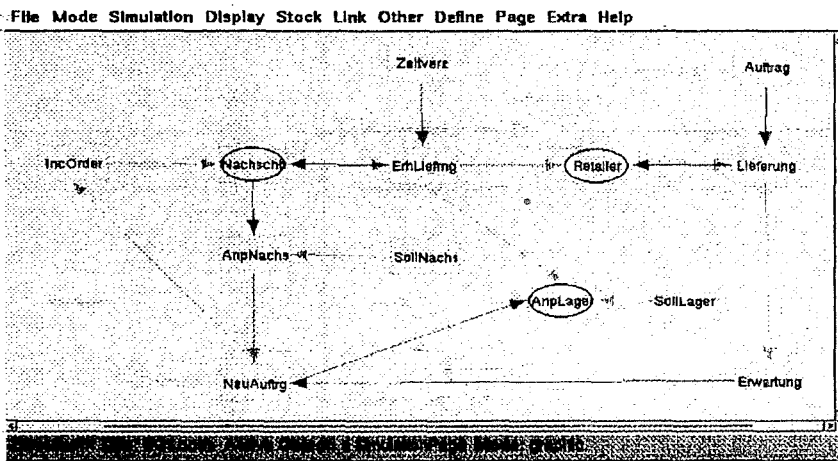
Modell / Bedienoberfläche



Antwort-Patterns

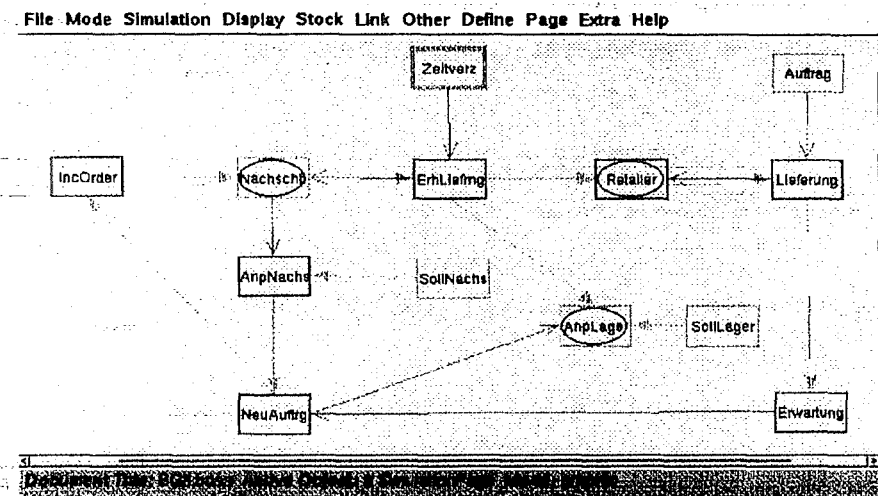
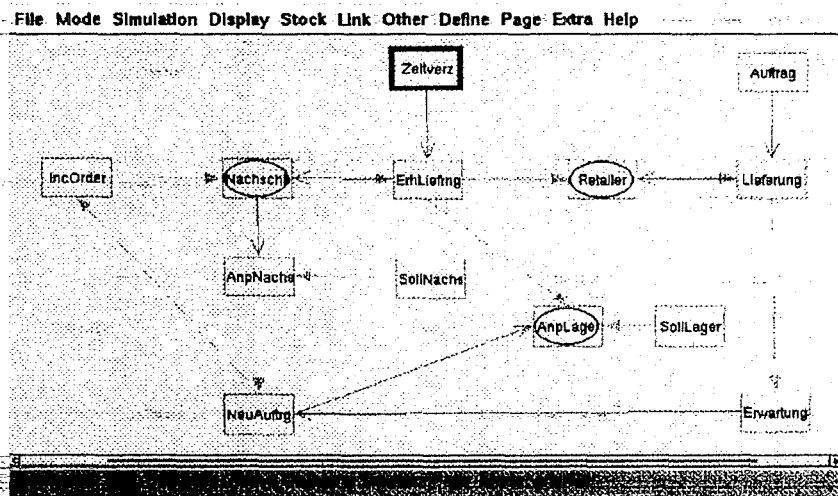


Management-Planspiel: Beer Game



Qualitatives Modell

System-Dynamics-Modell



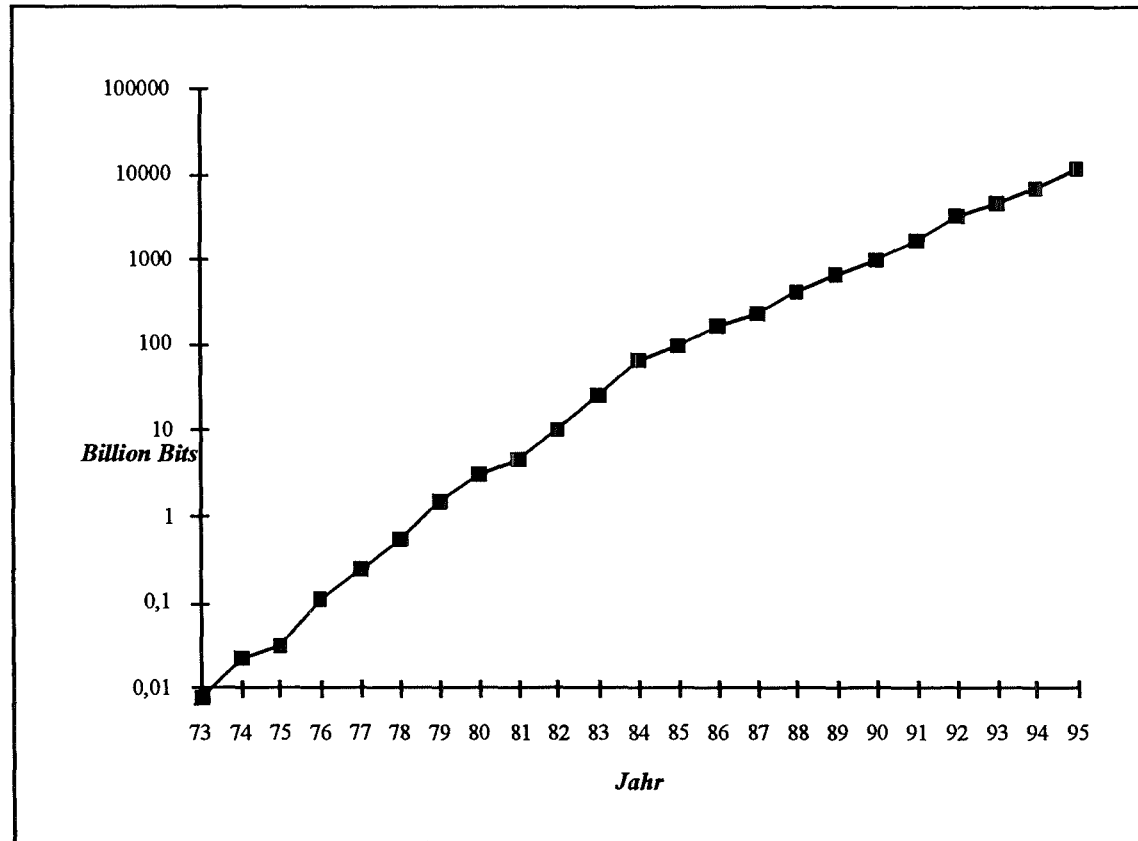
Durch Störung tangierte Variablen

Antwort auf Störung

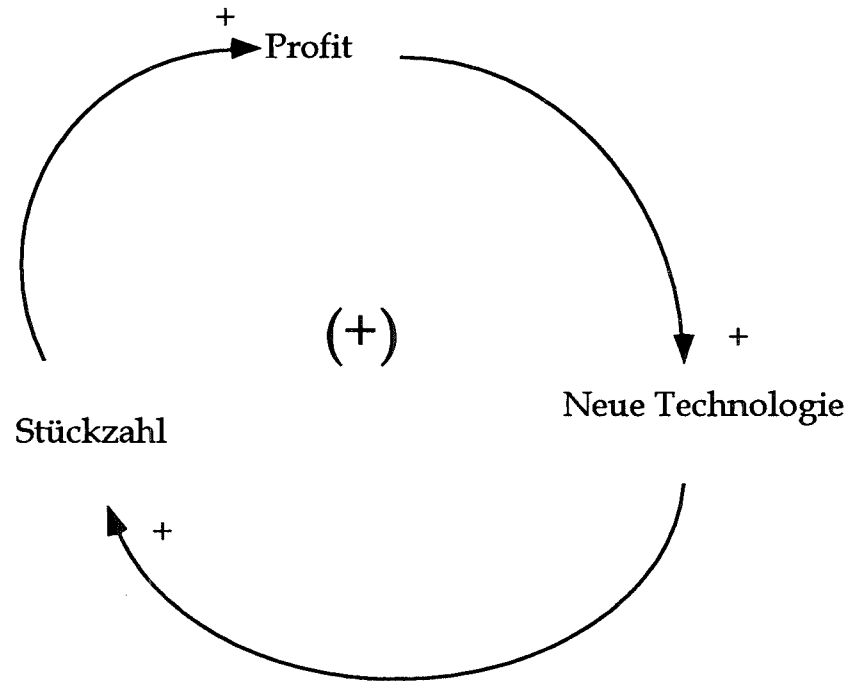
Inhalt

1. Aufgaben der Technikfolgenforschung
2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse
3. Qualitative Simulation
4. System Dynamics
5. Ausblick

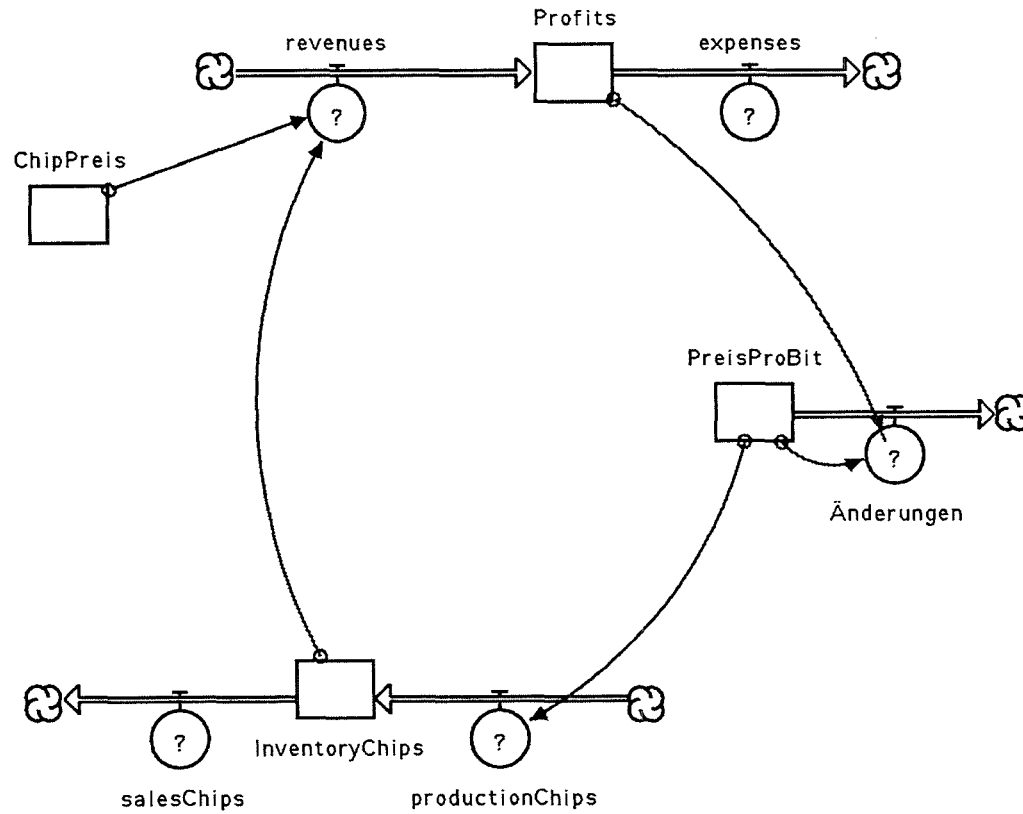
Extrapolation



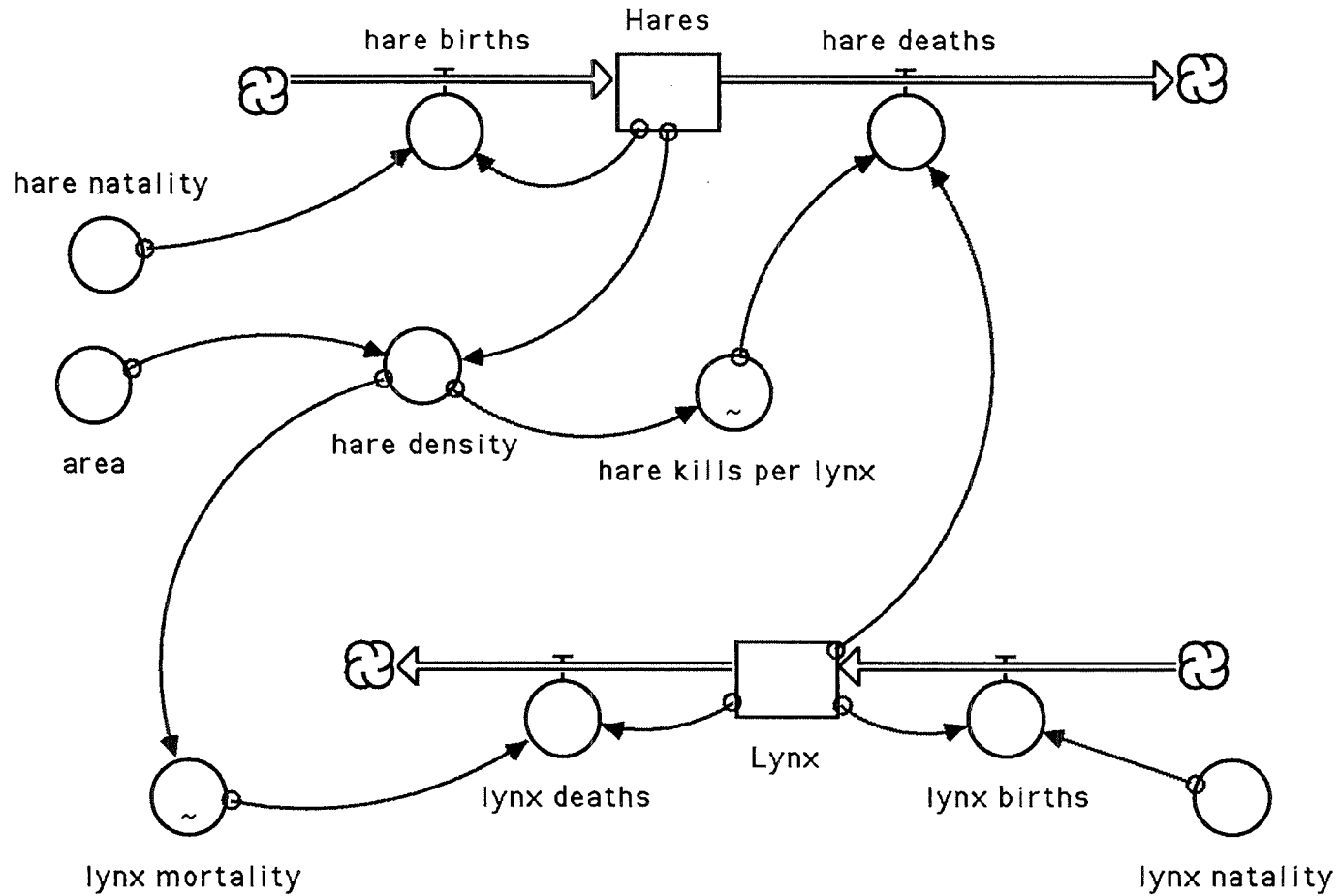
Motor der Entwicklung



Modellierung

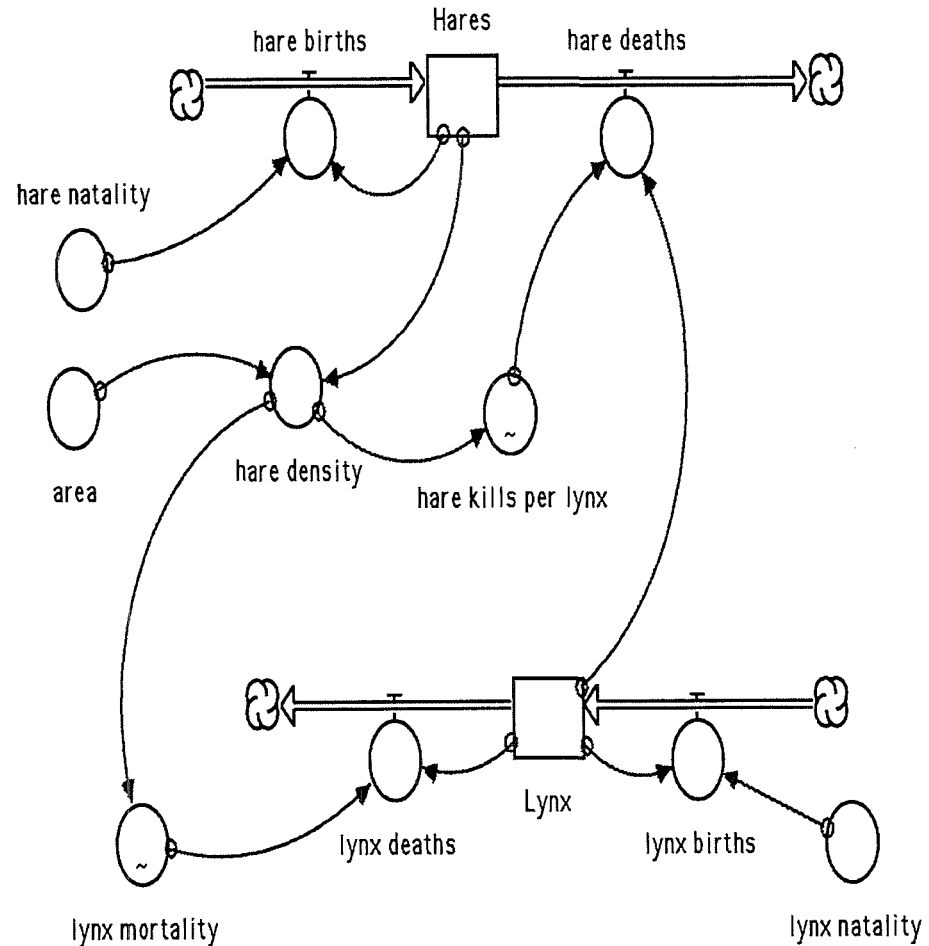


Ein einfaches Beispiel

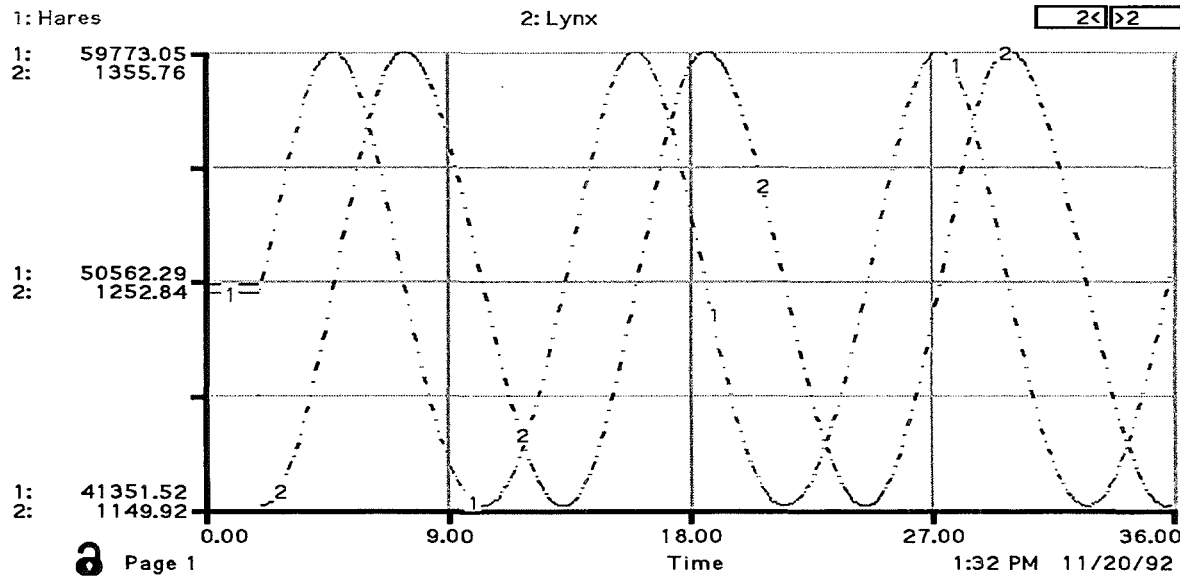


Zwei Beschreibungsebenen

$Hares(t) = Hares(t - dt) + (hare_births - hare_deaths) * dt$
 INIT Hares = 5E4
 hare_births = Hares*hare_natality
 hare_deaths = Lynx*hare_kills_per_lynx
 $Lynx(t) = Lynx(t - dt) + (lynx_births - lynx_deaths) * dt$
 INIT Lynx = 1250
 lynx_births = Lynx*lynx_natality
 lynx_deaths = Lynx*lynx_mortality+PULSE(100,2,1E3)
 area = 1E3
 hare_density = Hares/area
 hare_natality = 1.25
 lynx_natality = .25
 hare_kills_per_lynx = GRAPH(hare_density)
 (0.00, 3.89e-318), (50.0, 50.0), (100, 100), (150, 150), (200, 200), (250, 250), (300, 300), (350, 350), (400, 400), (450, 450), (500, 500)
 lynx_mortality = GRAPH(hare_density)
 (0.00, 0.5), (10.0, 0.45), (20.0, 0.4), (30.0, 0.35), (40.0, 0.3), (50.0, 0.25), (60.0, 0.2), (70.0, 0.15), (80.0, 0.1), (90.0, 0.05), (100, 0.005)

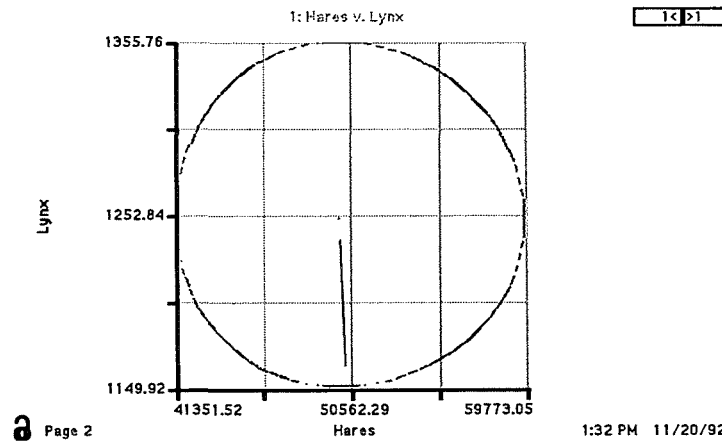


Resultate



Zeitreihen-
entwicklung

Phasenraumdarstellung

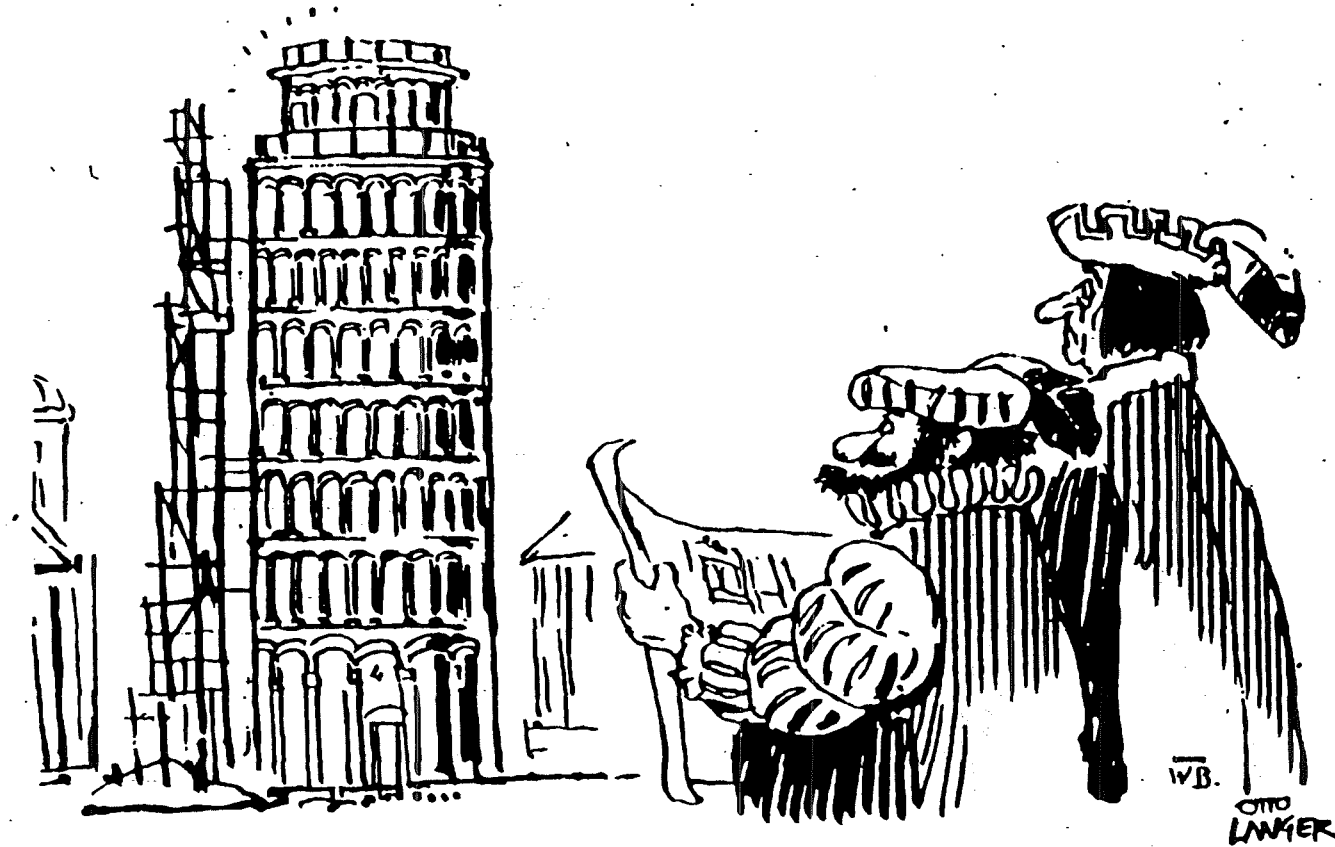


Inhalt

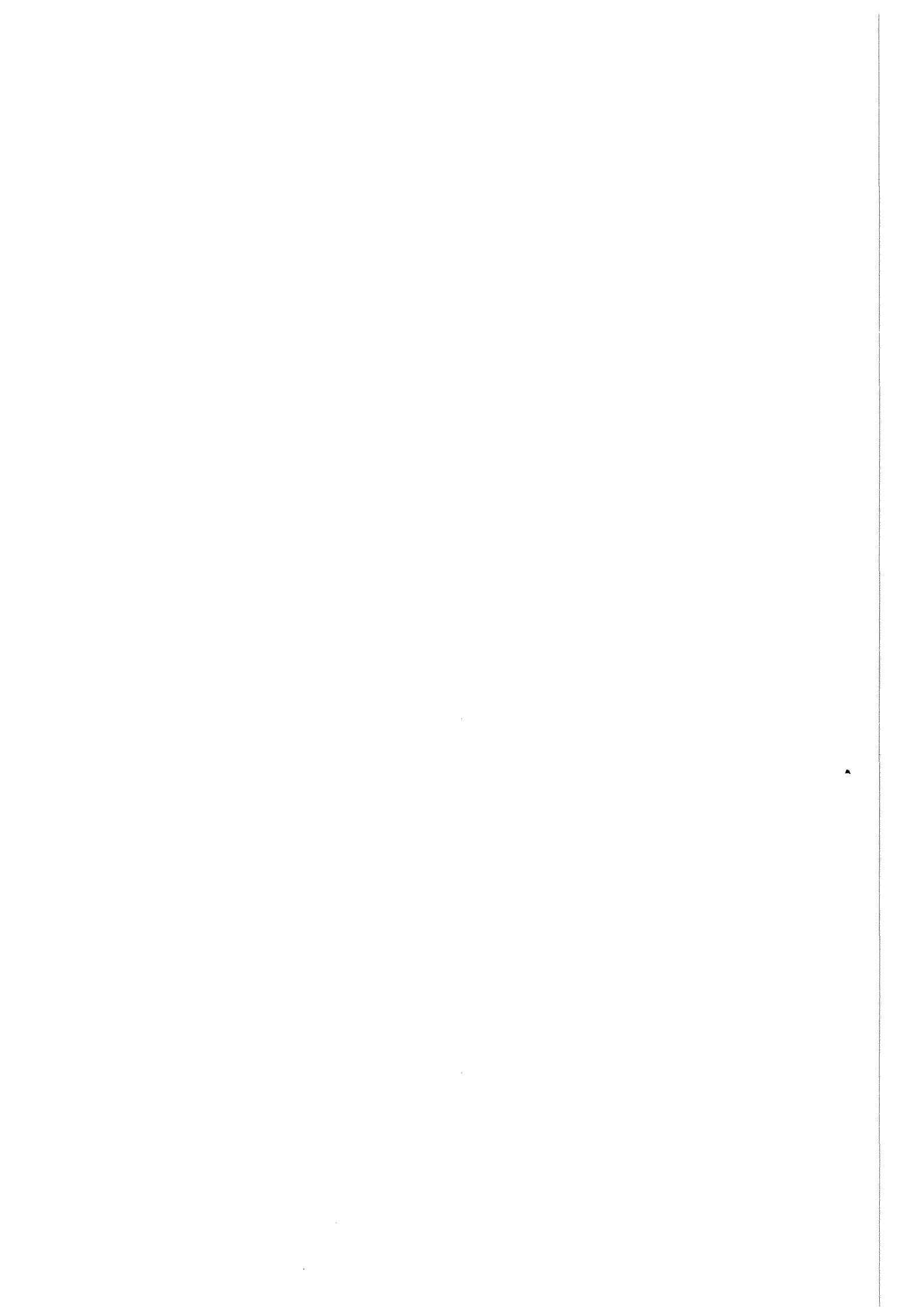
- 1. Aufgaben der Technikfolgenforschung**
- 2. Szenariotechnik und Sensitivitätsanalyse**
- 3. Qualitative Simulation**
- 4. System Dynamics**
- 5. Ausblick**

Thesen

1. TFF als Gestaltungsprozeß
 - Mögliche Folgen werden bereits bei Innovationen mitberücksichtigt
2. Randbedingungen für TFF
 - Marktwirtschaftliches Prinzip
 - Staatliche Rahmenbedingungen
3. TFF als Dienstleistung für Entscheider
 - Rationalisierung
 - Verantwortung
4. TFF setzt Interdisziplinarität voraus
 - Methodisches Vorgehen
 - Zusammensetzung des TFF-Teams
5. TFF als Lernprozeß
 - Methoden
 - Organisationsstruktur



"Beim Fundament haben wir tüchtig Geld gespart."



Dipl.-Ing. Michael Schebesta, Prof. Dr.-Ing. habil. Wilfried Krug

DUAL-Zentrum GmbH, Gillestraße 2, 01219 Dresden

Tel.: (0351) 477 91 0

Fax: (0351) 47791 99

Simulationsstudien von Wasserversorgungssystemen

Einleitung

Simulation hat sich als ein geeignetes Werkzeug der Prozeßgestaltung und Planung aber auch der Steuerung in vielfältigen Bereichen durchgesetzt.

Durch die Entwicklung von Simulatoren der 5. Generation ist es auch dem Fachmann aus der Industrie bzw. nichtindustriellen Bereichen möglich Simulation einzusetzen.

Dies setzt den Einsatz eines leicht erlernbaren Werkzeuges voraus. Ein Bereich, der in dem folgenden Beispiel simuliert wurde, sind Wasserversorgungssysteme.

Die Anforderungen an Faktoren, wie Zuverlässigkeit, Qualität und Preis sind bei der Trinkwasserversorgung sehr hoch. Sicherheitsaspekte insbesondere bei der Versorgung haben höchste Priorität.

Das eingesetzte Simulationstool ARENA™

Geschichtliche Entwicklung der Simulationssoftware am Beispiel ARENA/SIMAN/CINEMA

Der entscheidende Durchbruch in der Simulationstechnik liegt in den 70/80-er Jahren mit der Entwicklung der 4. Generation von Simulationssoftware. Entscheidende Kriterien dieser Entwicklungsstufe sind die Möglichkeit der Bildschirmanimation der zu simulierenden Modelle und der Einsatz anwendungsspezifischer Simulatoren.

Ein bedeutender Vertreter dieser Simulationssoftwaregeneration ist SIMAN/CINEMA, produziert von Systems Modeling Corporation. Der Ursprung der Simulationssprache SIMAN reicht in die späten 70-er Jahre zurück.

Die Bildschirmanimation wurde über das 1984 entwickelte und ein Jahr später integrierte CINEMA realisiert. 1989 stellte Systems Modeling die überarbeitete SIMAN-Version IV vor. Der besondere Fortschritt ist die Möglichkeit einer interaktiven Simulationsmodellerstellung unter Verwendung graphischer Symbole. Alle SIMAN - Module wurden in diese Menüoberfläche integriert. Dabei werden dem Nutzer die verfügbaren Symbole für das jeweilige Modul in Menüs angeboten.

Seit 1993 ist das objektorientierte, grafische interaktive Simulationstool ARENA verfügbar, mit dem es möglich ist, eigene Templates (ebenfalls objektorientiert) zu entwickeln. Damit erhält der Nutzer die Möglichkeit, sowohl allgemeine Simulationen durchzuführen, als auch mit Simulationstools zu arbeiten, die seiner Fachsprache entsprechen. Hinzu kommen vielfältige Möglichkeiten an Schnittstellen zu anderen Softwaresystemen, die eine Integration ermöglicht.

Durch die Offenheit und das Gesamtkonzept ist es über 5000 Nutzern in aller Welt möglich, in den unterschiedlichsten Bereichen Simulation durchführen zu können.

Die Simulationsdurchführung bei Wasserversorgungssystemen

Ziele der Simulation:

Gemeinsam mit dem Unternehmen wurden folgende Unternehmensziele festgelegt:

1. Reduzierung der Energiekosten
2. Optimierung der Wasserversorgung
3. Gewährleistung der Wasserversorgung (auch bei Störungen)
4. Verkürzung der Reaktionszeiten bei Störungen

Die Vorgehensweise:

Um die gestellten Ziele zu erreichen, wurde folgende Vorgehensweise realisiert:

1. Datenaufnahme und -bereitstellung sowie die Modellierung der momentanen Wasserversorgungssituation einschließlich einer notwendigen Energiekostenanalyse
2. Erstellen des Istmodells
3. Modellvalidierung und -verifikation
4. Simulationsexperimente
5. Finden einer verbesserten Lösungsvariante zur energiekostenminimierten Prozeßführung bei der Trinkwasserbereitstellung unter Berücksichtigung verschiedener zeitabhängiger Elektroenergetarife zur Kosteneinsparung. Dies beinhaltet eine Simulationsmodellerstellung sowie den Energiekostenvergleich mit der jetzigen Kostensituation.
6. Auflisten bisher noch fehlender Meßstellen, welche als Mittel der sicheren Versorgungsnetzüberwachung ins Leitsystem integriert werden sollten.
7. Kopplung des Leitsystems mit dem Simulationsprogramm
8. Ausarbeitung eines simulationsgesteuerten Havariereaktionssystems

Ergebnisse der Simulation:

Als Ergebnis der Simulation ist es möglich, eine Elektroenergiekosteneinsparung von 17% zu erzielen. Es wurde eine neue Strategie der Wasserversorgung erarbeitet, sowie die Grundlagen eines Havarie-Reaktionssystems geschaffen.

Bei der Umsetzung der Resultate wird der Nutzen der Simulation auf jährlich 50.000-100.000 DM geschätzt.

Die Modellierung wird zukünftig durch ein Template Wasserversorgungssysteme unterstützt, so daß sich der Modellierungsaufwand auf ein Minimum reduziert und die Terminologie der Wasserversorger berücksichtigt wird.

ARENA™ ist ein eingetragenes Warenzeichen der Systems Modeling Corp.

4. AK - Treffen 23.06. - 24.06.94 Halle/Saale

Teilnehmerliste

Name	Anschrift
Angelus, Armin	Martin-Luther-Universität, URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Dr. Benz, Joachim	Universität Gesamthochschule Kassel, FB 11 Nordbahnhofstr. 1a 37213 Witzenhausen
Bohley, Christian	Martin-Luther-Universität, URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Dr. Böhme, Peter	Martin-Luther-Universität Institut für Informatik 06099 Halle
Dr. Brüggemann, Rainer	GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH PUC Ingolstädter Landstr. 1 85758 Neuherberg
Dubsky, Gerolf	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Agro-Ökosystemforschung Neuer Weg 22 06484 Quedlinburg
Dipl.Inform. Grebe, Norbert	Universität Passau Lehrstuhl Operationsresearch und Systemtheorie Innstr. 33 94030 Passau
Grell, Jens-Peter	Martin-Luther-Universität, URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Prof. Grützner, Rolf	Universität Rostock Fachbereich Informatik Institut für Praktische Informatik 18051 Rostock
Dr. Hohmann	Technische Universität Magdeburg Institut für Simulation und Graphik PSF 4120 39016 Magdeburg

Kathe, Andreas	Martin-Luther-Universität, URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Kaal, Klaus	Fa. Timologie Fuchsweg 186 78351 Bodman
Dr. Keller, Hubert	Kernforschungszentrum Karlsruhe Institut für Angew. Informatik PSF 3640 76021 Karlsruhe
Dipl.-Math. Kock, Uwe	Umweltamt der Stadt Münster Berliner Platz 8 48127 Münster
Dr.- Ing. Krause, K.H.	Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft Institut für Biosystemtechnik Bundesallee 50 38116 Braunschweig
Lorek, Helmut	OFFIS Westerstr.10-12 26121 Oldenburg
Naumann, Stefan	Martin-Luther-Universität ,URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Prof. Dr. Paul, Wolfgang	Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft Braunschweig-Völkenrode Institut für Biosystemtechnik Bundesallee 50 38116 Braunschweig
Dr. Pfaff, Thomas	Heinrich-Kley-Str. 2 80807 München
Dr. Ruge, Michael, H.	Siemens AG Abt. ZFE BT SE 5TA 81730 München
Senf, I.	Martin-Luther-Universität, URZ Weinbergweg 17 06099 Halle
Scherbesta, M.	DUALZENTRUM Dresden Gillestr. 2 / Ecke Dohnaerstr. 01219 Dresden
Dr.- Ing. Weigelt, Klaus	BEC-Vertriebsgesellschaft mbH TZW Richard-Wagner-Str. 31 18119 Warnemünde

Fachgruppe 'Informatik im Umweltschutz'

Ausgangspunkt und Historie

Zur Lösung der anstehenden Aufgaben im Umweltschutz ist die Entwicklung einer leistungsfähigen Informationsverarbeitung erforderlich. Der Informatik kommt hierbei eine zentrale Rolle und damit verbunden eine entsprechende Verantwortung zu. In der Schriftenreihe 'Schlüsseltechnologie Informationsverarbeitung' der Gesellschaft für Informatik (GI) informiert eine eigene Broschüre 'Umwelt & Informatik' über diese Thematik.

Wegen der großen Bedeutung des Themas wurde 1986 in der Gesellschaft für Informatik der Fachausschuß FA 4.6 und die Fachgruppe FG 4.6.1 'Informatik im Umweltschutz' gegründet.

Ziele, Aufgabe

Die Fachgruppe befaßt sich mit allen Fachfragen des Informatikeinsatzes in den Bereichen Umweltschutz, Umweltplanung, Umweltsanierung und Umweltforschung. In ihr arbeiten derzeit etwa 800 Fachleute aus Forschung, Lehre, Verwaltung und Industrie zusammen. Die Fachgruppe hat das vorrangige Ziel, den Erfahrungsaustausch und die wechselseitige Anregung zwischen Forschung, Entwicklung und Anwendung zu fördern und die Basis für einen intensiveren und qualitativ verbesserten Einsatz der Informatik bei der Lösung von Umweltproblemen zu schaffen. Sie hat insbesondere die Aufgabe, die Verbreitung und den Einsatz moderner Informatikmethoden und -techniken im Umweltbereich zu fördern und die Entwicklung leistungsfähiger, anwendungsspezifischer Informatikwerkzeuge fachlich zu unterstützen.

Aktivitäten

Die Fachgruppe veranstaltet seit 1986 jährlich ein Symposium, auf dem neben dem gesamten Themenspektrum der Informatik im Umweltschutz jeweils ein bestimmtes Schwerpunktthema behandelt wird. Die Fachbeiträge werden in einem ausführlichen Tagungsband publiziert. Die Symposien verzeichnen Teilnehmer aus Forschung, Industrie und Behörden und stoßen auf sehr große Resonanz in der Fachöffentlichkeit. Zweimal im Jahr finden Sitzungen der Fachgruppe statt, die der Diskussion der fachlichen und organisatorischen Probleme dienen. Als Mitteilungsorgan der Fachgruppe dient der 2-3mal jährlich erscheinende Rundbrief 'Informatik im Umweltschutz'. In ihm wird über die aktuellen Entwicklungen und Aktivitäten berichtet. Er enthält auch eine Liste der Publikationen der Fachgruppe.

Arbeitskreise

Zur Bearbeitung besonderer Themenbereiche werden Arbeitskreise eingesetzt, die wiederum eigene Workshops und Arbeitstagen zu ihren Spezialthemen durchführen.

Mitarbeit in der Fachgruppe

Die Mitarbeit in der Fachgruppe 'Informatik im Umweltschutz' ist nicht zwingend an eine gleichzeitige Mitgliedschaft in der GI gebunden. Es wird jedoch angestrebt, daß Fachgruppenmitglieder in der Regel auch GI-Mitglieder sind oder werden. Anträge auf Aufnahme in die GI oder die Fachgruppe sind an die Geschäftsstelle der GI zu richten:

Gesellschaft für Informatik e.V. (GI)
Godesberger Allee 99
D-53175 Bonn

Arbeitskreis

'Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung'

Der Arbeitskreis 'Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen' ist ein Arbeitskreis der Fachgruppe 4.6.1 'Informatik im Umweltschutz' der Gesellschaft für Informatik e.V.

Problemstellung

Die Modellierung und Simulation ist eine der wichtigsten Problemlösungsmethoden im Umweltbereich, um Vorhersagen und Abschätzungen des Verhaltens von Umweltsystemen durchzuführen. Das gilt insbesondere bei der Bestimmung der anthropogenen Einwirkungen auf die Umwelt. Dazu sind heute modernste Methoden und Werkzeuge erforderlich, um den komplexen Umweltsystemen bei den wachsenden Umwelthanforderungen gerecht zu werden.

Eine der wesentlichsten Aufgaben der Informatik ist es, hierfür geeignete Methoden und Werkzeuge zu entwickeln, sie einem breiten Anwendungskreis verfügbar zu machen und die Kenntnisse zur Nutzung zu vermitteln.

Historie, Ziel und Themen des AK

Der AK wurde im März 1992 gegründet. Er hat sich zum Ziel gesetzt, die Erarbeitung der fachlichen Grundlagen der Modellbildung und Simulation im Umweltbereich sowie der zugehörigen Methoden und Softwarewerkzeuge zu fördern. Der AK bildet eine Basis für

den Informationsaustausch der in diesem Bereich Tätigen. Insbesondere wird die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Informatikern, Anwendern und Fachexperten aus einschlägigen Bereichen gefördert. Der Arbeitskreis arbeitet mit der "Arbeitsgemeinschaft Simulation" ASIM eng zusammen.

Schwerpunkthemen sind:

Systeme und Werkzeuge zur Modellbildung und Simulation/Schnittstellen
Simulations- und Experimentiermethoden
Modellbildung im Umweltbereich
Anwendungen und Integration
Simulation und Umweltinformationssysteme

Aktivitäten

Der Arbeitskreis veranstaltet Workshops und Treffen der Mitglieder und Interessierten zum Themenkreis des AK. Bisher wurden folgende Workshops durchgeführt:

1. Workshop "Modellierung und Simulation im Umweltbereich",
25.6.-26.6.1992, Universität Rostock
2. Workshop "Werkzeuge für die Simulation und Modellbildung in
Umweltanwendungen", FH Karlsruhe, 5.11.-6.11.1992
3. Workshop "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in
Umweltanwendungen" 28.10.-29.10.1993; GH-Kassel, Teil Witzenhausen
4. Workshop: 23.6.-24.6.1994; Martin-Luther-Universität Halle
5. Workshop: 2.3.-3.3.1994 Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft
Braunschweig-Völkenrode

Leiter / Ansprechpartner

Prof. Dr. habil. Rolf Grützner
Universität Rostock, FB Informatik
Lehrstuhl Modellierung/Simulation
Albert-Einstein-Str. 21
D - 18051 Rostock
Tel.: (0381) 4983369 Fax: (0381) 446089
Email: gruet@informatik.uni-rostock.de

Literatur

Grützner, R.; Möller, A.; Pawletta, Th. (Hrsg.): Beiträge zum Workshop Modellierung und Simulation im Umweltbereich. 25.6.-26.6.1992, Universität Rostock, FB Informatik, 1992

Keller, H. B.; Grützner, R. (Hrsg.): 2. Treffen des AK "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen". Berichte des Kernforschungszentrums Karlsruhe, KfK 5159, März 1993

Keller, H. B.; Grützner, R.; Benz, J. (Hrsg.): 3. Treffen des AK "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen". Berichte des Kernforschungszentrums Karlsruhe, KfK 5310, April 1994

Keller, H. B.; Grützner, R.; Angelus, R.; (Hrsg.): 4. Treffen des AK "Werkzeuge für Simulation und Modellbildung in Umwelthanwendungen". Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe - Technik und Umwelt, FZKA 5552, erscheint.