

Herausgeber:
Jochen Wittmann
Albrecht Gnauck
Bernd Page
Volker Wohlgemuth

SIMULATION IN
UMWELT- UND
GEOWISSENSCHAFTEN

Workshop Hamburg 2000
Workshop Kölpinsee 1999



ASIM-Mitteilungen 71

Berichte aus der Umweltinformatik

**Jochen Wittmann
Albrecht Gnauck
Bernd Page
Volker Wohlgemuth (Hrsg.)**

Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften

Workshop Hamburg 2000
Workshop Kölpinsee 1999

Shaker Verlag
Aachen 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften : Workshop Hamburg 2000,
Workshop KÖlpinsee 1999 / Jochen Wittmann et al.
Aachen : Shaker, 2000
(Berichte aus der Umweltinformatik)

ISBN 3-8265-7776-0

Copyright Shaker Verlag 2000

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-7776-0

ISSN 1616-0886

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

VORWORT

Herkunft der Beiträge

Der vorliegende Band dokumentiert die Beiträge des 10. Workshops „Werkzeuge für Modellbildung und Simulation in Umwelthanwendungen“ vom März 2000 in Hamburg, eines jährlich stattfindenden Treffens der gleichnamigen Fachgruppe der Gesellschaft für Informatik. Zusätzlich umfaßt er acht Beiträge eines Workshops der Gruppe „Theorie und Modellierung von Ökosystemen“, die eine Teilgruppe der genannten Fachgruppe bildet und sich im Oktober 1999 in Kölpinsee auf Usedom traf.

Durch die Zusammenfassung dieser beiden Gruppen gelingt es den Aufsätzen dieses Bandes einerseits, ein sehr breites Themenspektrum von Anwendungsbeispielen der Methode Simulation im Bereich der Umweltmodellierung aufzuspannen. Andererseits zeigen sie, wie Anforderungen aus der Praxis analysiert, methodisiert, in Simulationssoftware gefaßt und einer Lösung zugeführt werden.

Selbstverständlich kann nicht jeder Beitrag diesen weiten Bogen spannen, zumal sich die Gruppe zur Aufgabe gemacht hat, auch Teilschritte auf dem (oftmals langen) Weg bis zur endgültigen Lösung zu dokumentieren und in ihre Workshop-Bände aufzunehmen. Vielleicht helfen dem Leser solche Einzelbeiträge eher bei der Lösung eigener Probleme als ein geschliffener Gesamtbericht über ein Projekt, der die durchlaufenen Schwierigkeiten und Sackgassen oftmals nicht mehr erkennen läßt.

Kurze Charakterisierung der Beiträge

Zum Thema Stoffstromnetze untersuchen A. Faustmann, V. Lutze, J. Marx-Gómez und C. Rautenstrauch die *Ökobilanzierung und Bewertung eines Bierherstellungsprozesses*. Einer allgemeinen Einführung in Ökobilanzen und Stoffstromnetze folgt die Beschreibung einer interessanten Fallstudie. Anhand eines ausgewählten Prozesses aus der Bierherstellung wird die Modellierung von Stoffströmen und die Ableitung von Ökobilanzen illustriert. Anschließend werden die Möglichkeiten und Grenzen der Bilanzbewertung mit Hilfe von Kennzahlensystemen diskutiert.

V. Wohlgemuth, B. Page und J. Heffer berichten über die *Einbettung von Tourenplanungsmodellen in Stoffstromnetze* und verzahnen damit ökonomische und ökologische Kriterien zur Bewertung von Produktionsprozessen. Neben der softwaretechnischen Kopplung der Optimierungsalgorithmen mit dem Werkzeug *Umberto* zur Stoffstrombilanzierung beschäftigen sie sich ausführlich mit alternativen Ansätzen zur Bewertung des Verbrauchs von Umweltressourcen. Die Konzepte Preis-, Mengen- und Zertifikatssteuerung werden durch Modifikationen der Zielfunktion realisiert und am Beispiel des Standardmodells der Tourenplanung in ihren Auswirkungen diskutiert.

F. Grüttner erläutert in seinem Beitrag Modellbasiertes Instrumentarium zur Bilanzierung der Treibhausgasemissionen Mecklenburg-Vorpommerns und zur Simulation von Klimaschutzmaßnahmen zunächst all diejenigen Faktoren, die zur Bestimmung der Treibhausgasemission einer größeren Region, z.B. eines Bundeslandes, betrachtet werden müssen. Im zweiten Teil umreißt er die Software-Komponenten, die zum Parametrisieren und Experimentieren der Bilanzgleichungen notwendig sind. Die Verwendung des Instrumentariums wird am Beispiel einer Szenariountersuchung zur CO₂-Bilanz bei Verwendung von Reststroh zur Wärmedämmung in Wohngebäuden veranschaulicht.

Als Kompromiß zwischen den relativen Ungenauigkeiten von Interpolationsmethoden und dem hohen Rechenaufwand prognostischer Strömungsmodelle zur Bestimmung des Windfeldes über komplexem Gelände stellen K. Senkler und U. Streit ein sogenanntes diagnostisches Strömungsmodell vor. Derartige Ansätze kommen mit relativ wenigen punktuellen Meßdaten aus und ermitteln ihr Ergebnis über iterative Verbesserung eines aus diesen Messungen geschätzten Initialwindfeldes. Nach einer Erläuterung des Verfahrens zeigen die Autoren, auf welche Weise das Berechnungsmodul in AtmoGIS integriert werden kann. Bei AutoGIS handelt es sich um eine Klassenbibliothek, die um eine virtuelle GIS-Schnittstelle herum aufgebaut ist, und sowohl auf der Seite Modell und Methoden als auch auf der Seite der anschließbaren GIS-Kerne eine große Variationsbreite bietet.

Die beiden folgenden Referentinnen beschäftigen sich mit verschiedenen Aspekten von Verkehrsmodellen: H. Unger stellt einen *Ansatz zur Wegeplanung und Wegewahl in einer städtischen Umgebung* dar. Sie bezieht insbesondere die Orientierung an Wegemarken, z.B. Kirchen, auffälligen Gebäuden, usw., sowie die Tagesplanung der Verkehrsteilnehmer mit ein. Zur Realisierung verwendet sie, ebenso wie A. Schulz im nachfolgenden Referat, einen individuenorientierten Ansatz. Schulz greift das Problem der Verkehrsmittelwahl auf und entwickelt einerseits einen Algorithmus zur Modellierung der Entscheidung eines Individuums für die Fahrt mit dem privaten PKW als Alternative zum Öffentlichen Personennahverkehr, andererseits stellt sie eine Softwarearchitektur vor, mit deren Hilfe sie eine Bewertung der für eine Fahrt getroffenen Entscheidung an die im Verkehrssystem vorgefundene tatsächliche Situation vornimmt. Die Modellindividuen sammeln auf diese Weise sukzessive Erfahrungen über Komfort und Schnelligkeit der unterschiedlichen Verkehrsmittel und lernen nach einigen Fahrten eine für sie optimale Verkehrsmittelwahl zu treffen.

Unter der Überschrift *Techniken des Knowledge Discovery in Databases zur Analyse von Simulationen am Beispiel individuenorientierter Simulationsmodelle der Umweltepidemiologie* referiert F. Köster die Arbeitsschritte des Data Mining einerseits und der Modellierung und Simulation andererseits, um in einer anschließenden Analyse weitreichende Ähnlichkeiten und wechselseitige Bezüge zwischen diesen beiden Techniken festzustellen. Er schlägt vor, beide Vorgehensmodelle zu verknüpfen. Vorteile können sich dann durch die Integration des Wissens

aus dem Systemmodell in die Data Mining Phase ergeben als auch umgekehrt die Modellbildung und die Analyse von Simulationsergebnissen dank der Data-Mining-Techniken an Effektivität und Effizienz gewinnen kann.

Unter dem Titel *Was ist eine gute Prognose?* beschäftigt sich C.H. Reick zunächst in allgemeiner Form mit möglichen Gütekriterien für eine wissenschaftliche Prognose und wendet anschließend die vorgestellten Ansätze auf ein Beispiel aus dem Bereich der Zooplanktdynamik an. Die Qualitätsmaße werden dabei in externe, interne und relative Maße gegliedert. In der Diskussion geht der Autor insbesondere auch darauf ein, welche Aussagekraft die Gütemaße für praktische Anwendungen bieten, und wie der Anwender mit unterschiedlichen Bewertungen einer Prognose durch die vorgestellten Maßzahlen umgehen soll.

J. Wittmann stellt in seinem Beitrag eine Anwendungsstudie zur Untersuchung der Grundwassersituation einer Hausmülldeponie vor. Besonderen Wert legt die Darstellung auf die Interdependenzen zwischen (in nur geringem Umfang) vorhandenen Meßdaten des realen Systems und des zu wählenden Modellansatzes. Auf dieser Basis wird ein sehr einfaches Grundwassermodell entwickelt, das die Pegelmessungen im Deponiegelände recht gut wiedergibt und aus dem sich Hinweise für eine sinnvollere zukünftige Bemessung des Untersuchungsgebietes ableiten lassen.

A. Gnauck beschäftigt sich intensiv mit der Simulation der Wassergüte im Bereich der Unteren Havel bei Berlin. Im vorliegenden Aufsatz verwendet er seine Erfahrungen zu einem Vergleich von Simulationswerkzeugen, die die Wassergüte von Fließgewässern behandeln. Ausführlich werden die Systeme AQUASIM, HavelMod, QUASAR und STREAMPLAN bezüglich des jeweils benötigten Datenmaterials, der Funktionalität und der Einsatzbreite vorgestellt und miteinander verglichen. Die Aussagen stützen sich dabei auf vom Autor selbst durchgeführte Untersuchungen, die als Beispiele angegeben werden.

R. Wieland und K.-O. Wenkel gehen in ihrem Beitrag auf softwaretechnische Aspekte der Modellierung mit Fuzzy-Ansätzen ein. Um die Portabilität von Ökosystemmodellen hin zum Anwender zu vereinfachen, schlagen sie eine Migration in die lizenzfreie Scriptsprache PYTHON in Verbindung mit der Software Dislin zur Visualisierung der Simulationsergebnissen vor. Die Vorgehensweise wird anhand von Codesegmenten erläutert, die sich leicht an nutzerspezifische Modelle anpassen lassen. Ein Beispiel zeigt die Machbarkeit der vorgeschlagenen Modelltransformation. Die aufgetretenen Unstimmigkeiten in den Modellergebnissen werden diskutiert und geben Hinweise auf eine präzisere Formulierung der Fuzzy-Regeln.

R. Grützner stellt in seinem Beitrag ein Programmsystem vor, das auf eine Mehrfachnutzung von Modellen auch über die Grenzen eines bestimmten Simulationssystems hinweg abzielt. Ausgangspunkte sind dabei mathematische Modellbeschreibungen, die in eine werkzeugneutrale Form, in META-Beschreibungen, überführt werden. META-Modelle sind mit Editoren bearbeitbar und in die

unterschiedlichsten Simulationssprachen transformierbar. Durch die Anbindung aller Werkzeuge an die META-Beschreibung ist der Nutzer nicht gezwungen, die Werkzeuge (Editoren, Analysatoren u.a.) der unterschiedlichsten Zielsimulationssysteme zu benutzen.

Mit der Analyse von Produktionsprozessen beschäftigt sich A. Weber-Marin. Sie wendet die Methode der strukturierten Analyse auf die Prozesse bei der Herstellung textiler Produkte, insbesondere der Garnherstellung an. Mit Hilfe von Ressourcenflußdiagrammen und Zustandsübergangdiagrammen können die Produktionsparameter im Sinne einer ökologisch und ökonomisch nachhaltigen Prozeßführung eingestellt werden.

N.-X. Thinh et al. berichten über Grundlagenforschung im Bereich der Modellierung von Prozessen der Besiedelung städtische Räume. Um einen Indikator für die Kompaktheit der Siedlungsfläche zu erhalten, führen sie ein Gravitationsmaß ein. An 43 Städten Deutschlands untersuchten sie anschließend die Korrelationen zwischen diesem Kompaktheitsmaß und den Werten für Dispersion, Bodenpreis, Stadfläche und Versiegelungsgrad.

Die Frage „Hat die Evolution Zielfunktionen?“ beantworten T. Wilhelm und R. Brüggemann mit einer Übersicht über mögliche allgemeine Zielgrößen ökologische Systeme. Dabei werden sowohl ökologische (maximum power, maximale Entropie, ...) als auch physikalische Kriterien diskutiert. Dabei kann die Frage, ob überhaupt eine und wenn ja, welche Zielfunktion hinter Prozessen der Ökologie stehen, wichtige Leitlinien für die Modellierung dieser Prozesse geben.

Auch die Autoren A. Schultz und W. Mirschel überschreiben ihren Beitrag mit einer Frage: Dauerbeobachtungen - Notwendige Quelle der Agroökosystemmodellierung? Sie fordern einen Kompromiß in der Datenerhebung, der zwischen der Solidität einer Dauerbeobachtung und der Aktualität einer kurzfristigen Datenerhebung liegen muß. Die Beispiele zeigen, daß gewisse Daten (Wetter, Wachstum von Wintergetreide) über längere Zeiträume beobachtet werden müssen, während andererseits ein Wechsel der Anbaumethoden und der stetige Züchtungsfortschritt Meßdaten aus ferner Vergangenheit unbrauchbar machen. Ein solcher Kompromiß läßt sich nur bei sorgfältiger Planung der Datenerhebung bezüglich ihres Datenumfangs aber auch ihrer zeitlichen Ausdehnung finden.

Unter dem provozierend fragenden Titel „Ökologisches Gleichgewicht - geht ein Konzept in Rente?“ analysiert H.-H. Thulke, inwieweit Aussagen über Gleichgewichtszustände eines ökologisches Systems von praktischer Relevanz sind. Als Beispiel führt er ein Wirte-Parasiten-Modell an, mit dessen Hilfe die Ausrottung des Fuchsbandwumes durch gezielte Ködergaben erreicht werden soll. Thulke betont in seinen Ausführungen, daß bei derartigen Fragestellungen die Prozeßdynamik, also die Frage *wie* der Gleichgewichtszustand eines Systems erreicht wird, von wesentlich größerer Bedeutung ist als der eingeschwungene Endzustand selbst. Dies gilt umso mehr, wenn – wie im Beispiel – durch gezielte Management-

maßnahmen auf das Systemverhalten der Weg zum ökologischen Gleichgewicht beeinflusst werden soll.

Theoretische Überlegungen zur formalen Beschreibung von Ökosystemen unternimmt A. Gnauck unter dem Titel "Automaten und Petri-Netze – Werkzeuge der Ökosystemtheorie". Er zeigt auf, welche Formalismen zur Modellierung ökologischer Prozesse herangezogen werden können, und gibt die Analogien zwischen den Elementen der formalen Definitionen und den Elementen der zu modellierenden realen Systeme an.

In ihrem Beitrag „Ertragsabschätzung bei Wintergetreide auf den Skalen zwischen Schlag und Region“ übertragen W. Mirschel, A. Schultz und K.-O. Wenkel die Modelle der AGROSIM-Familie, die am ZALF Müncheberg entwickelt wurden, auf verschiedene räumliche Skalen. Berücksichtigt wird dabei die Praxisschlagebene, die Landkreisebene und die Ebene verschiedener europäischer Standorte. Die Autoren stellen für alle betroffenen Skalen Simulationsergebnisse vor und diskutieren die notwendigen Input-Parameterdaten, Spezifika und Einschränkungen beim Skalenwechsel.

Mit Meta-X[®] stellen H. Lorek, J. Finke, M. Malachinski und M. Sonnenschein ein Softwaretool vor, das die vergleichende Szenarienanalyse bei Metapopulationsmodellen unterstützt. Grundlage ist ein Markovsches Modell zur Besiedlung von Landschaftsausschnitten (sogenannten Patches), die zur Besiedlung geeignet und untereinander über Landschaftsbrücken verbunden sind. Mit den Verwaltungsstrukturen Szenario, Experiment und Projekt bietet Meta-X[®] eine Software-Unterstützung von der Modell-Parametrisierung bis hin zur Modell-Dokumentation.

Ein bekanntes Problem der Ökologie stellt die Eutrophierung von Seen dar. In ihrem Beitrag „Quantitative Abschätzung der Auswirkungen seeinterner Maßnahmen auf die Phosphor - Bindung im Sediment“ diskutieren I. Schauser, M. Hupfer und R. Brüggemann eine mögliche Gegenmaßnahme: Durch Abdeckung des Sediments mit Seekreide versucht man, die Phosphorbildung im Sediment zu beeinflussen. Die Autoren entwickeln ein Modell zur Abschätzung derartiger sehr langsam wirkender Eingriffe auf die Phosphorbilanz und diskutieren ihre Ergebnisse anhand von Messungen am Arendsee.

Ein wichtiger Indikator für die ökologische Gewässergüte sind die am Gewässergrund vorzufindenden wirbellosen Kleinlebewesen, das sog. Makrozoobenthos. M. Kinder et al. versuchen Prognosen der Habitateignung für diese Kleinlebewesen, indem sie die Sohlschubspannung des Gewässers über Messungen mit akustischen Doppler-Geräten berechnen und diese Werte zu der Strömungspräferenzkurve des Makrozoobenthos in Beziehung setzen. Mit solchen Modellansätzen lassen sich anschließend Neubau-, Ausbau- und Kompensationsmaßnahmen bei größeren Flüssen, die zu Schifffahrtsstraßen ausgebaut sind, unter ökologischen Gesichtspunkten bewerten.

Wie ist dieser Band zu verstehen?

Alle die referierten Beiträge können als Mosaiksteinchen aufgefaßt werden, die ein Bild der Modellierung und Simulation in den Umwelt- und Geowissenschaften entstehen lassen, das sich in den Dimensionen Anwendungsbreite und methodischer Tiefe aufspannt. Fehlende Steinchen –oder gar weiße Flecken im Mosaik- sollen der Fachgruppe Ansporn für weitere Arbeiten sein!

Problem eines solchen Mosaiks, dessen Steinchen geographisch verteilt und mit sehr unterschiedlichen Werkzeugen gebrannt werden, ist der gemeinsame Rahmen, in dem sie angeordnet werden. Dieser Sammelband bietet einen derartigen Rahmen, und der Dank der Herausgeber gilt Frau N. Schlungbaum, die mit sehr viel Einsatz das Layout gestaltet hat und manches der abgelieferten Mosaiksteinchen mit Intelligenz und dem nötigen Nachdruck „in Form“ gebracht hat und auf diese Weise in großem Maße für das entstandene Gesamtbild mitverantwortlich ist.

Ob der Leser nun am Gesamtbild interessiert ist oder sich nur das eine oder andere Steinchen herauspicken möchte: mögen die Beiträge Anlaß zur Diskussion und Anregung für die eigene Arbeit geben!

J. Wittmann.

Inhaltsverzeichnis

Workshop Hamburg 2000

A.Faustmann, V.Lutze, J.Marx-Gómez und C.Rautenstrauch

Stoffstrombasierte Ökobilanzierung und Bewertung eines
Bierherstellungsprozesses – Fallstudie.....1

V.Wohlgemuth, B.Page und J.Hefter

Einbettung von Tourenplanungsmodellen in Stoffstromnetze.....15

F.Grüttner

Modellbasiertes Instrumentarium zur Bilanzierung der Treibhausgasemissionen
Mecklenburg-Vorpommerns und zur Simulation von Klimaschutzmaßnahmen.....33

K.Senkler und U.Streit

Anwendung einer offenen Simulationsumgebung für atmosphärische Prozesse –
Integration eines diagnostischen Strömungsmodells in AtmoGIS.....43

A.Schulz

Ein Individuenmodell zur Verkehrsmittelwahl im Stadtverkehr.....53

H.Unger

Individuenstruktur und Umweltmodellierung für die individuenbasierte Simulation
einer variablen, urbanen Umgebung.....67

F.Köster

Techniken des Knowledge Discovery in Databases zur Analyse von
Simulationen am Beispiel Individuenorientierter Simulationsmodelle in
der Umweltepidemiologie.....81

C.H.Reick

Was ist eine gute Prognose?.....97

J.Wittmann

Modellieren zwischen Anwendererwartungen und fehlenden Systemdaten
am Beispiel eines Grundwassermodells für eine Hausmülldeponie.....111

A.Gnauck

Vergleich von Simulationswerkzeugen für die Wassergüte von Flußgewässern.....123

R.Wieland und K.-O.Wenkel

Entwicklung eines Fuzzy-Moduls für die Scriptsprache Python.....141

<i>R.Grützner</i>	
Ein Konzept zur multivalenten Simulation von mathematischen Modellen.....	149
<i>A.Weber Marin</i>	
Strukturierte Analyse für den Lebenszyklus von textilen Produkten.....	161
<i>N-X.Thinh, G.Arlt, B.Heber, J.Hennersdorf und I.Lehmann</i>	
Untersuchungen zur Kompaktheit kreisfreier Städte in Deutschland.....	173
 Workshop KÖlpinsee 1999	
<i>T.Wilhelm und R.Brüggemann</i>	
Hat die Evolution Zielfunktionen?.....	183
<i>A.Schultz und W.Mirschel</i>	
Dauerbeobachtungen – Notwendige Quelle der Agroökosystemmodellierung?.....	195
<i>H.-H.Thulke</i>	
Ökologisches Gleichgewicht – geht ein Konzept in Rente?.....	205
<i>A.Gnauck</i>	
Automaten und Petri-Netze – Werkzeuge der Ökosystemtheorie.....	217
<i>W.Mirschel, A.Schultz und K.-O.Wenkel</i>	
Ertragsabschätzung bei Wintergetreide auf den Scalen zwischen Schlag und Region.....	227
<i>H.Lorek, J.Finke, M.Malachinski und M.Sonnenschein</i>	
Meta-X [®] - ein Werkzeug zur vergleichenden Szenarienanalyse von Metapopulationsmodellen.....	239
<i>I.Schauser, M.Hupfer und R.Brüggemann.</i>	
Quantitative Abschätzung der Auswirkungen seeinterner Maßnahmen auf die Phosphor-Bindung im Sediment.....	255
<i>M.Kinder, M.Adler, F.Schöll, M.Schleuter und G. Steinebach</i>	
Zur Habitatmodellierung bei großen Fließgewässern.....	269