

Technische Universität Ilmenau
Fakultät für Informatik und Automatisierung
Institut für Automatisierungs- und Systemtechnik

Diplomarbeit

Simulation und Optimierung eines Blaualgen-Wachstums-Modells

Eingereicht von : Hartmut Pohlheim

geboren am 22. Dezember 1966 in Neuruppin

Betreuer : Dipl.-Ing. Ingo Affa

Hochschullehrer : Prof. Dr. sc. Horst Puta

Ilmenau, den 1. Juli 1993

Inv.-Nr.: 200-93D-145

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Aufgabenstellung.....	4
2. Entwicklung des Blaualgen-Wachstums-Modells.....	5
3. "Minimalmodell"	7
3.1. Modellstruktur.....	7
3.2. Zustandsdifferentialgleichungen.....	8
3.2.1. Hilfsberechnungen	8
3.2.2. Blaualgen.....	11
3.2.3. Detritus	11
3.2.4. Stickstoff	12
4. Grundlagen der Simulation.....	13
4.1. Simulationsverfahren	13
4.1.1. Das EULERSche Polygonzugverfahren	13
4.1.2. Das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren	14
4.1.3. Eingebettete RUNGE-KUTTA-Verfahren.....	15
5. Simulation des Blaualgen-Modells.....	18
5.1. Blaualgen	18
5.2. Detritus.....	19
5.3. Stickstoff	20
5.4. Vergleich der verwendeten Simulationsverfahren	22
5.5. Fragen zur Schrittweitensteuerung.....	24
6. Grundlagen der Optimierung.....	27
6.1. Problembeschreibung.....	27
6.1.1. Systembeschreibung.....	27
6.1.2. Beschränkungen	27
6.1.3. Gütekriterien.....	28
6.2. Optimalitätsbedingungen	29
6.2.1. Unbeschränkte Systeme	29
6.2.2. Beschränkte Systeme.....	31
6.3. Optimierungsverfahren	32
6.3.1. Konjugierte Richtungen	33
6.3.2. Verwendung des Gradienten	34
6.3.3. Verfahren der Konjugierten Gradienten.....	35
7. Optimierung des Blaualgen-Modells.....	37

7.1. Steuerung des Systems	37
7.2. Zielfunktion.....	38
7.3. Hamiltonfunktion	39
7.4. Kozustände.....	40
7.5. Gradient.....	42
7.6. Ablauf der Optimierungsrechnung.....	42
8. Ergebnisse der Optimierung	45
8.1. Richtungsminimierung und Streckfaktorbestimmung	45
8.2. Steuerung durch Detritusentnahme	46
9. Erweiterung des Blaualgen-Modells	52
9.1. Struktur des erweiterten Modells	52
9.2. Zustandsgleichungen des erweiterten Modells	53
9.2.1. Detritus im Pelagial.....	53
9.2.2. Stickstoff im Pelagial	53
9.2.3. Detritus im Benthos.....	54
9.2.4. Stickstoff im Benthos	54
9.2.5. Zusätzliche Konstanten und Startwerte der Zustandsgrößen	55
9.3. Umrechnung des Energiegehaltes des Detritus.....	56
10. Zusammenfassung	58
11. Literaturverzeichnis	59
12. Abbildungsverzeichnis	62

1. Aufgabenstellung

In der vorliegenden Arbeit soll die Simulation und Optimierung eines Modells eines Ökosystems gezeigt werden. Dabei findet das Blaualgen-Wachstums-Modell für den Barther Bodden als Teil der Darß-Zingster-Boddenkette Verwendung.

Für die Simulation sind Verfahren mit einer effizienten Schrittweitensteuerung einzubauen, wobei die Steifheit und Empfindlichkeit der Differentialgleichungssysteme zu berücksichtigen ist.

Die Steuerung des Modells erfolgt durch die Entnahme von Detritus. Dafür ist ein geeignetes Zielfunktional aufzustellen, eventuelle Beschränkungen sind zu beachten.

Als Optimierungsverfahren ist das Verfahren der konjugierten Gradienten zu implementieren. Dieses ist mit anderen Optimierungsverfahren in Hinsicht auf Anwendbarkeit und Konvergenzverhalten zu vergleichen.

Die Implementierung der Algorithmen erfolgt in der Programmiersprache C, die Auswertung in graphischer Form.

Die durch die Optimierung erhaltenen Ergebnisse sind mit den realen Größen für eine mögliche Steuerung zu vergleichen.

2. Entwicklung des Blaualgen-Wachstums-Modells

Die Darß-Zingster-Boddenkette stellt mit fast 200 km² Fläche und einem Wasservolumen von etwa 400 Millionen m³ einen nicht zu unterschätzenden Anteil an den inneren Küstengewässern dar. Auf Grund des begrenzten Wasserdargebotes im Binnenland kommt diesem Wasserreservoir eine große Bedeutung im Hinblick auf verschiedene Nutzungsmöglichkeiten zu.

Für die Bewirtschaftung der Darß-Zingster-Boddenkette sind insbesondere die Brauchwasserversorgung von Industrie und Landwirtschaft, die Fischerei, das Transportwesen, die Abproduktbeseitigung (Nutzung des Selbstreinigungspotentials) und das Erholungswesen von Bedeutung.

Der anthropogene Einfluß hat sich in den letzten Jahren vor allem durch einen verstärkten Nährstoffeintrag (Abwässer aus Haushalten, Industrie und Landwirtschaft) bemerkbar gemacht. Diese verstärkte Einleitung von (Phosphor- und) Stickstoffverbindungen schränkt die limitierende Wirkung der Nährstoffe auf die Photosynthese stark ein. Das jederzeit ausreichende Angebot an Pflanzennährstoffen ruft eine starke Steigerung der Bioproduktion der Primärproduzenten (Algen) hervor. Der größte Teil der produzierten Pflanzensubstanz wird jedoch nicht von den Konsumenten gefressen, sondern als Detritus im Gewässer akkumuliert. Die Rolle der Konsumenten ist damit herabgesetzt.

Die Ursachen sind nicht zuletzt das veränderte Nahrungsangebot (minderwertige Blaualgen) und die verstärkte Sauerstoffzehrung in den tieferen, lichtarmen Gewässerschichten, wobei der Sauerstoffschwund durch den heterotrophen Abbau der verstärkt anfallenden Substanzen hervorgerufen wird.

Aus all dem resultiert eine zunehmende Eutrophierung des Ökosystems, die zu einer erheblichen Verschlechterung der Wasserqualität führt.

Aufgabe muß es sein, den verhängnisvollen Prozeß der Eutrophierung aufzuhalten und damit das Ökosystem mit gerechtfertigtem Aufwand auf ein Gleichgewicht mit einer Wasserqualität, die eine Mehrfachnutzung erlaubt, einzustellen.

Die Sektion Biologie der Universität Rostock leistete mit Forschungsarbeiten zur Analyse des Ökosystems Barther Bodden als Teil der Darß-Zingster-Boddenkette einen grundlegenden Beitrag zur Entwicklung einer Bewirtschaftungskonzeption ([Vie82] und [Wie]).

Das gesamte erstellte Modell für das Ökosystem Barther Bodden umfaßt 24 gekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung (24 DGL). Es handelt sich um ein deterministisches Modell mit zeitabhängigen konzentrierten Parametern. Eine räumliche Strukturierung wird nur durch die Unterteilung des Modells in zwei Schichten (Pelagial und oberste Sedimentschicht) erreicht. Innerhalb dieser Schichten gibt es keine räumliche Differenzierung der Zustandsgrößen. Die im Modell enthaltenen 24 Zustandsgrößen beschreiben die wesentlichen biologischen und chemischen Komponenten des Ökosystems Barther Bodden.

Dieses Gesamtmodell beinhaltet viele der real im System vorhandenen Zusammenhänge und Abhängigkeiten. Allerdings bestehen erst seit Anfang 1993 die Möglichkeiten der kontinuierlichen Erfassung der verschiedensten Zustandgrößen des Barther Boddens. Deshalb ist bis heute noch keine ausreichende Validierung der Modellparameter möglich gewesen. Mit den in nächster Zeit zur Verfügung stehenden Meßergebnissen dürfte es dann nicht mehr lange dauern, bis das Gesamtmodell (24 DGL) zu einem breiten Einsatz kommt.

Für die Simulation des Ökosystems und nachfolgende Optimierungsrechnungen wurde deshalb in [Kun] aus dem Gesamtmodell ein "Minimalmodell" abgeleitet, das als Grundlage für die folgende Arbeit diente.

3. "Minimalmodell"

Im folgenden soll die Struktur des Minimalmodells (6 DGL) näher gezeigt werden. Dabei werden alle Größen (Hilfsgrößen und Zustandsdifferentialgleichungen), die für die Arbeit mit diesem Modell nötig sind, dargestellt und ihre Zusammenhänge erläutert.

Wie jedes Modell, so stellt auch das hier verwendete Modell nur eine Approximation des realen Prozesses dar. Doch aufgrund der nachgewiesenen strukturellen Ähnlichkeit kann das grundlegende Verhalten dieses Ökosystems mit Hilfe des Modells untersucht werden.

3.1. Modellstruktur

Das "Minimalmodell" ist ein vollständig gekoppeltes, steuerbares System und hat weitestgehende strukturelle Ähnlichkeit mit dem Gesamtmodell, die Dimension ist niedriger (nur 6 statt 24 DGL) und damit ist das Modell besser überschaubar.

Von den drei im Gesamtmodell enthaltenen Phytoplanktonhauptgruppen (Grün-, Kiesel- und Blaualgen) wurden die Blaualgen ausgewählt. Ursache dafür ist, daß die Blaualgen quantitativ den größten Anteil der Algen bilden. In der Nahrungskette spielen sie eine untergeordnete Rolle, da sie kaum von Konsumenten gefressen werden. Somit ist gerade ihre Begrenzung und Verminderung ein Gradmesser für die Wasserqualität.

Das "Minimalmodell" (ab jetzt Blaualgenmodell) ist ein System aus 6 gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung. Es umfaßt den Teilprozeß des Blaualgenwachstums in einer Kausalkette.

Blaualgen und Detritus sind durch je 2 Gleichungen (Masse- und Stickstoffgehalt) vertreten. Außerdem sind organischer und anorganischer Stickstoff im Modell enthalten. Die Mikroorganismen als Destruenten werden nur indirekt in den Gleichungen für den organischen und anorganischen Stickstoff berücksichtigt. Ihr Einfluß wird im Abbau des organischen zum anorganischen Stickstoff sichtbar. In Abb. 1 sind die Beziehungen der einzelnen Zustandgrößen übersichtlich gezeigt. Eine ausführliche Erläuterung der Wechselbeziehungen erfolgt bei der Beschreibung der Zustandsgleichungen.

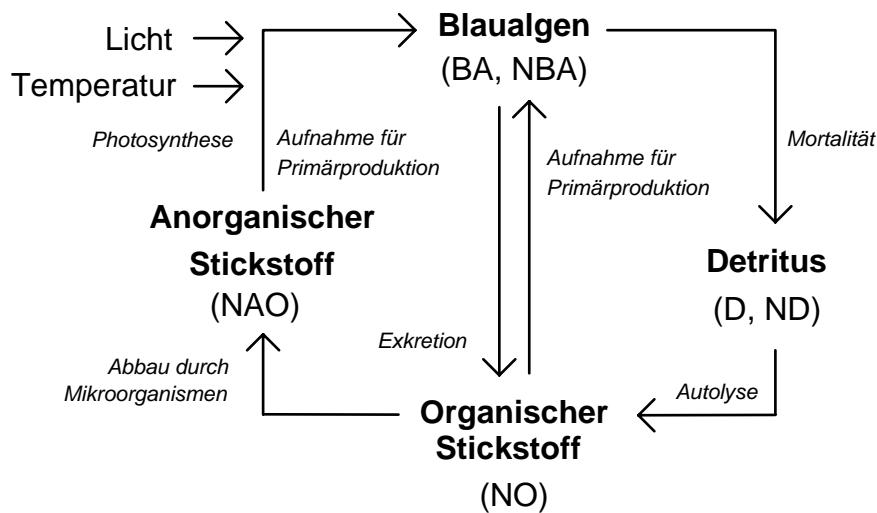


Abb 1: Struktur des Blaualgen-Modells

3.2. Zustandsdifferentialgleichungen

Das Zustandsdifferentialgleichungssystem des Modells läßt sich mathematisch wie folgt angeben:

$$\begin{bmatrix} \dot{q}_1(t) \\ \vdots \\ \dot{q}_n(t) \end{bmatrix} = f \left(\begin{bmatrix} q_1(t) \\ \vdots \\ q_n(t) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{bmatrix} \right) \quad \begin{array}{l} q(t_0) = q_0 : \text{Startvektor} \\ q(t) : \text{Zustandsvektor} \\ u(t) : \text{Steuervektor} \end{array}$$

Die einzelnen Zustandsgrößen sind vom Licht und der Temperatur sowie einigen Konstanten abhängig.

3.2.1. Hilfsberechnungen

Im Modell werden verschiedene Temperaturen verwendet, die sich jahreszeitlich verändern, genauso wie das Licht. Die Größen sind in diesem Modell nicht durch Tabellenfunktionen gegeben, sondern es wurden Hilfsberechnungen eingeführt, die die Handhabung bei der Simulation des Modells vereinfachen. (t = Tag innerhalb des aktuellen Jahres)

- tagesabhängige Temperatur
 $\text{temp} = (0,44 + 0,41 \cdot \sin(\pi / 180 \cdot (t - 114,0))) \cdot 20,0$
- Temperatur für Photosynthese
 $\text{tp} = 0,1 + 0,003045 \cdot \text{temp}^2$
- Temperatur für Respiration (Atmung)
 $\text{tr} = 0,34 + 0,0013941 \cdot \text{temp}^2$

- Temperatur für Mortalität (Absterben der Blaualgen)
 $tm_{BA} = tr$
- Temperatur für Abbau des Detritus (abgestorbene Biomasse)
 $tm_D = 0,165 + 0,002128 \cdot temp^2$
- Temperatur für Stickstoffumwandlung durch Mikroorganismen
 $tm_i = 0,49 + 0,002 \cdot temp^2 + 0,017 \cdot temp$
- Photoperiode
 $fp = 0,5 + 0,19 \cdot \sin(\pi / 180 \cdot (t - 78,0))$
- Globalstrahlung
 $iq = (264,6 + 241,2 \cdot \sin(\pi / 180 \cdot (t - 82,4)) + 12,5 \cdot \sin(\pi / 180 \cdot (2t - 58,3))) / fp$
- temperaturabhängige Sättigungslichtintensität
 $ist = 43,3 \cdot (1,11^{(temp-10,0)})$
- eingestrahlte Lichtmenge
 $iBA = fp \cdot 2,091 / \varepsilon \cdot (e^{(-iq/ist \cdot e^{(-1,3 \cdot \varepsilon)})}) \cdot e^{(-iq/ist)}$
- tatsächlich verwendeter Stickstoff
 $n_{BA} = (q_2 - NB_{Amin}) / (q_2 - NB_{Amin} + K_{sns}), \quad \text{wenn } q_2 < N_{krit}$
 $n_{BA} = (N_{krit} - NB_{Amin}) / (N_{krit} - NB_{Amin} + K_{sns}), \quad \text{wenn } q_2 \geq N_{krit}$
- Minimumfunktion: tatsächlich verwendeter Stickstoff (nBA) und eingestrahlte Lichtmenge (iBA) bilden die Begrenzung für die Assimilation:
 $min_{fkt} = \text{MIN}(n_{BA}, iBA)$

Außerdem sind sämtliche Prozesse von zeitinvarianten Koeffizienten abhängig:

- maximale Assimilationsrate
 $\mu_{max} = 1,137 \text{ d}^{-1}$
- Respirationsrate der Blaualgen
 $Kr_{BA} = 0,005733 \text{ kcal} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$
- Mortalitätsrate der Blaualgen
 $Km_{BA} = 0,0088 \text{ kcal} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$
- Exkretionsrate der Blaualgen
 $Ke_{BA} = 0,0064 \text{ kcal} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$
- Aufnahme rate des anorganischen Stickstoffes durch Blaualgen
 $Ktr_{NAO} = 1,133 \text{ kcal} \cdot \text{mg}_{at} \cdot \text{d}^{-1}$

- Aufnahme­rate des organischen Stickstoffes durch Blaualgen
 $K_{trNO} = 0,1133 \text{ kcal} \cdot \text{mg}_{at} \cdot \text{d}^{-1}$
- Halbsättigungskonstante des anorganischen Stickstoffes
 $K_{sNAO} = 1,0 \text{ mg}_{at} \cdot \text{m}^{-3}$
- Halbsättigungskonstante des organischen Stickstoffes
 $K_{sNO} = 4,0 \text{ mg}_{at} \cdot \text{m}^{-3}$
- Abbaur­ate des Detritus
 $K_{aD} = 0,04 \text{ d}^{-1}$
- Abbaur­ate des organischen Stickstoffes
 $K_{amiNO} = 0,0083 \text{ d}^{-1}$
- Halbsättigungskonstante des internen Stickstoffgehaltes der Blaualgen
 $K_{sns} = 0,07 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- minimaler Stickstoffgehalt der Blaualgen
 $N_{BAmin} = 0,38 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- kritischer Stickstoffgehalt der Blaualgen
 $N_{krit} = 0,88 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- maximaler Stickstoffgehalt der Blaualgen
 $N_{BA} = 1,36 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Extinktionskoeffizient (Lichtschwächung durch Absorb­tion und Streuung)
 $\varepsilon = 2,46 \text{ m}^{-1}$

Startwerte der Zustandsgrößen für die Simulation

- Blaualgen-Biomasse : $3,13 \text{ kcal} \cdot \text{m}^{-3}$
- Blaualgen-Stickstoffgehalt : $1,33 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Detritus : $35,3 \text{ kcal} \cdot \text{m}^{-3}$
- Detritus-Stickstoffgehalt : $0,684 \text{ mg}_{at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Organischer Stickstoff : $123,5 \text{ mg}_{at} \cdot \text{m}^{-3}$
- Anorganischer Stickstoff : $34,4 \text{ mg}_{at} \cdot \text{m}^{-3}$

3.2.2. Blaualgen

Die Blaualgen sind im Modell durch 2 Differentialgleichungen repräsentiert - die Blaualgen-Biomasse und den Stickstoffgehalt der Blaualgen.

Die Blaualgen-Biomasse setzt sich zusammen aus:

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 = BA &= \mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt} \cdot q_1 && \text{(Assimilation)} \\ &- Kr_BA \cdot tr \cdot q_1^2 && \text{(Respiration)} \\ &- Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 && \text{(Mortalität)} \\ &- Ke_BA \cdot q_1^2 && \text{(Exkretion)} \end{aligned}$$

Die Assimilation hängt von der maximalen Assimilationsrate und der limitierenden Minimumfunktion (Stickstoff oder Licht) ab. Die Minimumfunktion stellt somit die Kopplung zum Stickstoffgehalt der Blaualgen her. Die Nettoproduktion setzt sich dann aus der Assimilation verringert um Respiration, Mortalität und Exkretion zusammen.

Der Stickstoffgehalt der Blaualgen berechnet sich mit:

$$\begin{aligned} \dot{q}_2 = NBA &= KtrNAO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) && \text{(anorg. Stickstoff)} \\ &+ KtrNO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_5 / (KsNO + q_5) && \text{(org. Stickstoff)} \\ &+ Kr_BA \cdot tr \cdot q_1 \cdot q_2 && \text{(Respiration)} \\ &- \mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt} \cdot q_2 && \text{(Assimilation)} \end{aligned}$$

Der Stickstoffgehalt der Blaualgen erhöht sich durch die direkte Aufnahme von anorganischem und organischem Stickstoff sowie die Respiration. Er verringert sich durch die Assimilation.

Die Aufnahme des Stickstoffs hängt von der Differenz des maximalen zum real vorhandenen Stickstoff ab. Bei relativ geringem Stickstoffgehalt der Blaualgen ist deshalb die Aufnahme hoch.

3.2.3. Detritus

Der Detritus ist das Zerfallsprodukt der abgestorbenen Biomasse. Sein Abbau erfolgt durch Autolyse (Selbstaflösung durch eiweißabbauende Enzyme).

Er berechnet sich zu:

$$\begin{aligned} \dot{q}_3 = D &= Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 && \text{(Absterben der Blaualgen)} \\ &- KaD \cdot tmD \cdot q_3 && \text{(Autolyse des Detritus)} \end{aligned}$$

Der Stickstoffgehalt des Detritus errechnet sich mit:

$$\dot{q}_4 = ND = Km_BA \cdot tr \cdot (1 - minfkt) \cdot q_1^2 \cdot (q_2 - q_4) / q_3$$

3.2.4. Stickstoff

Der organische Stickstoff wird durch die Autolyse des Detritus und die Exkretionsverluste der Blaualgen vermehrt. Er wird durch die direkte Stickstoffaufnahme der Blaualgen und durch seinen Abbau zu anorganischem Stickstoff durch Mikroorganismen verringert.

Der organische Stickstoff berechnet sich durch:

$$\begin{aligned} \dot{q}_5 = NO = & KaD \cdot tmD \cdot q_3 \cdot q_4 && \text{(Autolyse des Detritus)} \\ & + Ke_BA \cdot q_1^2 \cdot q_2 && \text{(Exkretionsverluste)} \\ & - KamiNO \cdot tmi \cdot q_5 && \text{(Abbau durch Mikroorganismen)} \\ & - KtrNO \cdot (1 - q_2 / N_BA) && \text{(Aufnahme durch Blaualgen)} \\ & \cdot q_5 / (KsNO + q_5) \cdot q_1 \end{aligned}$$

Der anorganische Stickstoff wird mittels Abbau durch Mikroorganismen aus dem organischen Stickstoff gebildet und durch die Blaualgen verbraucht.

Er berechnet sich zu:

$$\begin{aligned} \dot{q}_6 = NAO = & KamiNO \cdot tmi \cdot q_5 && \text{(Abbau durch Mikroorganismen)} \\ & - KtrNAO \cdot (1 - q_2 / N_BA) && \text{(Aufnahme durch Blaualgen)} \\ & \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) \cdot q_1 \end{aligned}$$

4. Grundlagen der Simulation

Das Modell des Barther Boddens ist als System von Differentialgleichungen (DGL) gegeben. Die Simulation entspricht der Lösung dieses Differentialgleichungssystems (DGLS) über den interessierenden Zeitraum. Oft wird dies als Lösung eines Anfangswertproblems bezeichnet.

Mit den bekannten Werten der Variablen des DGLS zum Beginn des Zeitraums hat das DGLS eine exakte Lösung zu jedem späteren Zeitraum. Allerdings läßt sich diese exakte Lösung nur in den seltensten Fällen direkt ermitteln. Hier hilft der Computer weiter. Es gibt leistungsfähige Algorithmen, die eine schnelle und genaue Lösung solcher Probleme ermöglichen.

4.1. Simulationsverfahren

Bei der numerischen Lösung ist die Frage, wie effektiv der Algorithmus arbeitet. Das Ziel sind genaue Ergebnisse mit einem möglichst geringen Aufwand. Im Laufe der Jahre wurden verschiedene Verfahren entwickelt, die im folgenden vor allem unter diesem Gesichtspunkt erläutert werden sollen.

4.1.1. Das EULERSche Polygonzugverfahren

Die einfachste und auch anschaulichste Methode ist das EULERSche Polygonzugverfahren.

Gegeben sei eine DGL 1. Ordnung $\dot{y} = f(t, y)$ mit dem Startpunkt $y(t_0) = y_0$. Die Funktion $\dot{y} = f(t, y)$ definiert in jedem Punkt die Steigung der Lösungskurve, die durch diesen Punkt hindurchgeht und damit auch für den Startpunkt. Für ein kurzes Zeitintervall (die Schrittweite h) wird die Lösungskurve durch ein Geradenstück angenähert. Dabei ist die Geradensteigung gleich der Steigung der Lösungskurve durch den Punkt. Damit ergibt sich folgende Formel: $y_{\text{neu}} = y_{\text{aktuell}} + h \cdot f(t_{\text{aktuell}}, y_{\text{aktuell}})$, die einen neuen Wert der DGL zur Zeit $t_{\text{neu}} = t_{\text{aktuell}} + h$ liefert, der als neuer Startpunkt verwendet werden kann und so weiter bis zum Ende des Zeitraumes.

Dieses Verfahren ist einfach und funktioniert gut für einfache DGL bzw. geringe Forderungen an die Genauigkeit der Lösung. Aber für höhere Forderungen an die Genauigkeit muß die Schrittweite sehr klein gewählt werden, um den Fehler durch die stückweise Linearisierung nicht zu groß werden zu lassen. Damit steigt der Aufwand durch die Auswertung der

DGL, was vor allem bei aufwendigen DGLS zu einem starken Anstieg der benötigten Rechenzeit führt.

4.1.2. Das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren

Ebenfalls seit vielen Jahren ist das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung bekannt. Hierbei wird der neue Punkt der Lösungskurve nicht durch eine einfache Geradeapproximation ermittelt, sondern über die Berechnung von 4 Hilfsgrößen nach folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned}k_0 &= h \cdot f(t_{\text{aktuell}}, y_{\text{aktuell}}) \\k_1 &= h \cdot f\left(t_{\text{aktuell}} + \frac{h}{2}, y_{\text{aktuell}} + \frac{k_0}{2}\right) \\k_2 &= h \cdot f\left(t_{\text{aktuell}} + \frac{h}{2}, y_{\text{aktuell}} + \frac{k_1}{2}\right) \\k_3 &= h \cdot f(t_{\text{aktuell}} + h, y_{\text{aktuell}} + k_2)\end{aligned}$$

Die erste Hilfsgröße (k_0) wird wie beim EULERSchen Polygonzugverfahren berechnet. Dann folgen zwei Auswertungen in der Mitte des betrachteten Intervalls, wobei jeweils das Ergebnis der vorigen Hilfsgrößenberechnung berücksichtigt wird. Die vierte Hilfsgröße (k_3) wird am Ende des Intervalls ermittelt. Aus diesen 4 Werten errechnet sich der neue Punkt:

$$y_{\text{neu}} = y_{\text{aktuell}} + \left(\frac{1}{6}k_0 + \frac{1}{3}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{6}k_3\right)$$

Auch bei diesem Verfahren läßt sich durch die Wahl der Schrittweite das Ergebnis der geforderten Genauigkeit anpassen. Für eine hinreichend kleine Schrittweite kann die wahre Lösung beliebig genau angenähert werden.

Für eine Arbeit mit diesem und allen anderen Verfahren ist eine Abschätzung des aufgetretenen Fehlers pro Schritt und über den gesamten Zeitbereich notwendig. Der Fehler ist die Differenz aus berechnetem und exaktem Wert und abhängig von der Schrittweite (h) und der Ordnung (q) des Verfahrens:

$$y_{\text{berechnet}} - y_{\text{exakt}} = O(h^{q+1}) \Leftrightarrow \Delta y_{\text{Schritt}} \approx h^{q+1} \text{ und } \Delta y_{\text{gesamt}} \approx h^q \text{ für } h \rightarrow 0$$

Das EULERSche Polygonzugverfahren ist 1. Ordnung. Durch Halbierung der Schrittweite wird eine Fehlerverkleinerung pro Schritt auf $(\frac{1}{2}h)^{q-1} \approx \frac{1}{2} \Delta y_{\text{Schritt}}$ erreicht. Mit anderen Worten, durch Verdopplung der Schrittzahl wird ein doppelt genaues Ergebnis erreicht.

Für das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung sieht diese Bilanz etwas besser aus: $(\frac{1}{2}h)^{q-4} \approx \frac{1}{16} \Delta y_{\text{Schritt}}$. Durch eine Verdopplung der Schrittzahl wird ein (im Idealfall)

16mal genaueres Ergebnis erreicht. Dies zeigt, warum das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren so populär ist und auch heute an vielen Stellen ein gut geeignetes Verfahren ist.

Ein Problem bleibt noch. Die absolute Größe des Fehlers pro Schritt kann immer noch nicht abgeschätzt werden (die Abschätzung des Gesamtfehlers ist Gegenstand der aktuellen Forschung, siehe [DP89]). Bei einem oft verwendeten Verfahren wird der letzte Schritt noch einmal mit der halben Schrittweite durchgeführt, die Differenz der beiden ermittelten Werte gebildet und mit einer vorgegebenen Fehlerschranke verglichen. Ist die Differenz kleiner, war der erste Schritt gültig und es kann mit derselben oder sogar einer größeren Schrittweite weitergerechnet werden. War die Differenz größer als die Fehlerschranke, so muß der Schritt mit einer kleineren Schrittweite wiederholt werden.

Mit diesem einfachen Algorithmus ist eine leichte Steuerung der Schrittweite in Abhängigkeit des Fehlers pro Schritt im Vergleich zu einer vorgegebenen Fehlerschranke möglich. Einen Nachteil hat die Einfachheit aber: sie hat eine Verdopplung des Rechenaufwandes zur Folge. Dies kann zwar am Ende immer noch effektiver sein, als ohne Schrittweitensteuerung zu arbeiten, aber im folgenden werden Verfahren gezeigt, die eine effektivere Berechnung des entstandenen Fehlers mit einer hohen Ordnung verbinden.

4.1.3. Eingebettete RUNGE-KUTTA-Verfahren

Bei den eingebetteten Verfahren, die seit den 60'er Jahren entwickelt wurden, werden zwei RUNGE-KUTTA-Formeln unterschiedlicher Ordnung miteinander kombiniert. Der Wert der Formel mit der höheren Ordnung und damit der genauere von beiden wird als neuer Punkt weiterverwendet. Die Differenz mit dem Wert der Formel niedrigerer Ordnung wird als Maß für den Fehler für die Schrittweitensteuerung benutzt.

Die Koeffizienten werden so gewählt, daß die Berechnungen für die Formel niedrigerer Ordnung bei der höheren Ordnung wiederverwendet werden können. Dies bedeutet, daß z.B. für ein eingebettetes Verfahren 6.(5.) Ordnung 7 Hilfsgrößen für die Formel 6. Ordnung und mindestens 1 zusätzliche Hilfsgröße für die Kontrollformel 5. Ordnung, insgesamt 8 Hilfsgrößen ($s = 8$, Anzahl der Hilfsgrößen) benötigt werden [Feh69].

Die Berechnungen der RUNGE-KUTTA-Verfahren lassen sich in allgemeiner Form schreiben. Für die Hilfsgrößen ergibt sich:

$$k_i = f(t_{\text{aktuell}} + c_i h_{\text{aktuell}}, y_{\text{aktuell}} + h_{\text{aktuell}} \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} k_j) \quad \text{mit} \quad c_i = \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} \quad \text{und} \quad i = 0, \dots, s-1$$

Der neue Punkt berechnet sich nach:

$$y_{\text{neu}} = y_{\text{aktuell}} + h_{\text{aktuell}} \cdot \sum_{i=0}^{s-1} b_i k_i \quad (\text{Ordnung } q)$$

Die Gleichung zur Fehlerberechnung ist bis auf die Koeffizienten identisch mit der zur Berechnung des neuen Punktes:

$$\hat{y}_{\text{neu}} = y_{\text{aktuell}} + h_{\text{aktuell}} \cdot \sum_{i=0}^{s-1} \hat{b}_i k_i \quad (\text{Ordnung } p)$$

Die einzelnen Verfahren unterscheiden sich nur in der Ordnung und den Koeffizienten. Auch das klassische RUNGE-KUTTA-Verfahren lässt sich in dieser Form angeben.

a_{ij}			b_i	c_i	mit $q = 4$ und $s = 4$; kein $p \Rightarrow$ kein \hat{b}
0	0	0	$\frac{1}{6}$	0	
$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	
0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	
0	0	1	$\frac{1}{6}$	1	

Eines der bekanntesten Formelpaare wurde von FEHLBERG 1969 [Feh69] vorgestellt, von ihm als RK5(6) bezeichnet. (Bei diesem wird der Wert der Formel mit der niedrigeren Ordnung als neuer Punkt weiterverwendet.)

a_{ij}					b_i	\hat{b}_i	c_i	mit $p = 6$ $s = 8$
0					$\frac{31}{384}$	$\frac{7}{1408}$	0	
$\frac{1}{6}$					0	0	$\frac{1}{6}$	
$\frac{4}{75}$	$\frac{16}{75}$				$\frac{1125}{2816}$	$\frac{1125}{2816}$	$\frac{4}{15}$	
$\frac{5}{6}$	$-\frac{8}{3}$	$\frac{5}{2}$			$\frac{9}{32}$	$\frac{9}{32}$	$\frac{2}{3}$	
$-\frac{8}{5}$	$\frac{144}{25}$	-4	$\frac{16}{25}$			$\frac{125}{768}$	$\frac{4}{5}$	
$\frac{361}{320}$	$-\frac{18}{5}$	$\frac{407}{128}$	$-\frac{11}{80}$	$\frac{55}{128}$	$\frac{5}{66}$	0	1	
$-\frac{11}{640}$	0	$\frac{11}{256}$	$-\frac{11}{160}$	$\frac{11}{256}$	0	$\frac{5}{66}$	0	
$\frac{93}{640}$	$-\frac{18}{5}$	$\frac{803}{256}$	$-\frac{11}{160}$	$\frac{99}{256}$	0	1	1	

In den letzten Jahren wurden neue RUNGE-KUTTA-Formelpaare vorgestellt, die auf Effizienz und kleine Fehler-Koeffizienten getrimmt wurden, um so mit einer möglichst großen Schrittweite arbeiten zu können. Mehrere Arbeiten veröffentlichten DORMAND und PRINCE zu diesem Thema. Als Beispiel sei ihr Formelpaar RK5(4)7 aufgeführt:

a_{ij}						b_i	\hat{b}_i	c_i	
0						$\frac{35}{384}$	$\frac{5179}{57600}$	0	
$\frac{1}{5}$						0	0	$\frac{1}{5}$	
$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$					$\frac{500}{1113}$	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{3}{10}$	q = 5
$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$				$\frac{125}{192}$	$\frac{393}{640}$	$\frac{4}{5}$	mit p = 4
$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$			$-\frac{2187}{6784}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{8}{9}$	s = 7
$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$		$\frac{11}{84}$	$\frac{187}{2100}$	1	
$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0	$\frac{1}{40}$	1	

Weitere Formelpaare finden sich in [Feh69], [Feh70], [Feh85], eine gute Übersicht geben [Hei] und vor allem [HNW].

5. Simulation des Blaualgen-Modells

Die folgenden Diagramme zeigen die Ergebnisse der Simulation des Blaualgenmodells über einen Zeitraum von 1 Jahr (365 Tage).

5.1. Blaualgen

Die Abb. 2 zeigt, wie sich die Blaualgen-Biomasse im Verlauf eines Jahres verändert. Im Winter und zeitigen Frühjahr ist sie gering. Mit zunehmendem Licht und steigender Erwärmung erhöht sie sich und erreicht um den 175. Tag (Ende

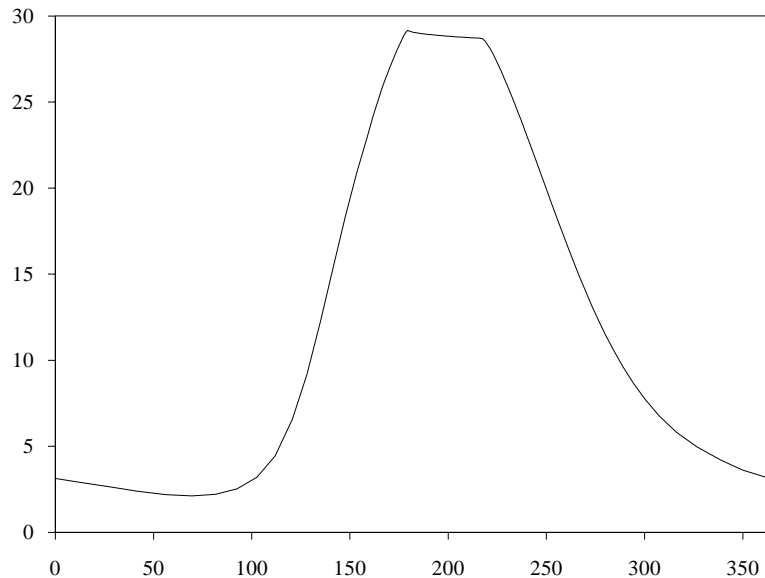


Abb 2: Blaualgen-Biomasse über 1 Jahr

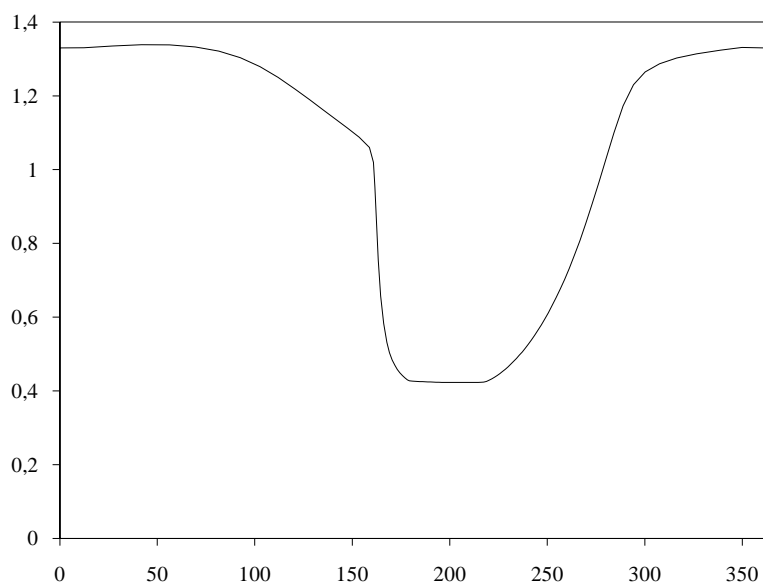


Abb 3: Stickstoffgehalt der Blaualgen über 1 Jahr

Juni) ein Maximum. Auf diesem Niveau bleibt die Blaualgen-Biomasse, bis sie ab dem 220. Tag (Anfang August) wieder absinkt. Die Begrenzung ab dem 175. Tag erfolgt vor allem durch den Mangel an anorganischem Stickstoff, der zu diesem Zeitpunkt nahezu auf Null absinkt (siehe Abb. 7).

Den Stickstoffgehalt der Blaualgen zeigt Abb. 3. Die Abnahme des Stickstoffgehaltes während des Sommers ist deutlich. Der starke Abfall zwischen dem 160. und 170. Tag korrespondiert mit dem mangelnden anorganischen Stickstoff und dem starken Wachstum der Blaualgen zu diesem Zeitpunkt.

Das gleichbleibende Niveau über 40 Tage, das zeitlich mit der maximalen Blaualgen-Biomasse zusammenfällt zeigt, daß das Angebot an Stickstoff zu diesem Zeitpunkt nicht ausreichend ist. Anorganischer Stickstoff ist praktisch keiner vorhanden, organischer Stickstoff steht erst ab dem 170. Tag in höherer Konzentration zur Verfügung (siehe Abb. 6).

5.2. Detritus

Der Detritus (Abb. 4) folgt der Blaualgen-Biomasse mit einer zeitlichen Verzögerung von etwa 50 Tagen. Das Minimum liegt um den 130. Tag (Anfang Mai). Danach erfolgt ein kontinuierlicher Anstieg bis zum Maximum um den 230. Tag (Mitte August). Mit abnehmender Blaualgen-Biomasse sinkt auch wieder der Detritusgehalt. Im Gegensatz zur Blaualgen-Biomasse gibt es kein gleichbleibendes Niveau um das Maximum. Es fehlen die harten Begrenzungen durch fehlenden Stickstoff, die die Blaualgen-Biomasseproduktion begrenzen. Durch die zeitliche Verzögerung zwischen beiden bleibt der Detritus nur kurzzeitig auf seinem Maximum.

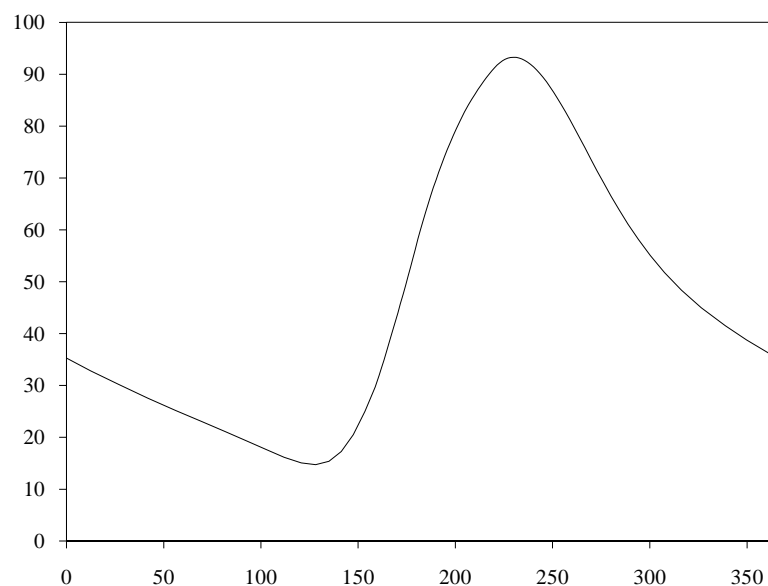


Abb 4: Detritus über 1 Jahr

Der Stickstoffgehalt des Detritus (Abb. 5) erreicht sein Maximum um den 160. Tag. Danach fällt er zu seinem Minimum um den 230. Tag ab. Diese Werte entsprechen denen des Stickstoffgehaltes der Blaualgen, allerdings ist auch hier, wie bei Detritus und Blaualgen-Biomasse, das Verhalten nicht so hart, die Anstiege der Kurven in den zugehörigen Zeiträumen sind beim Detritus flacher.

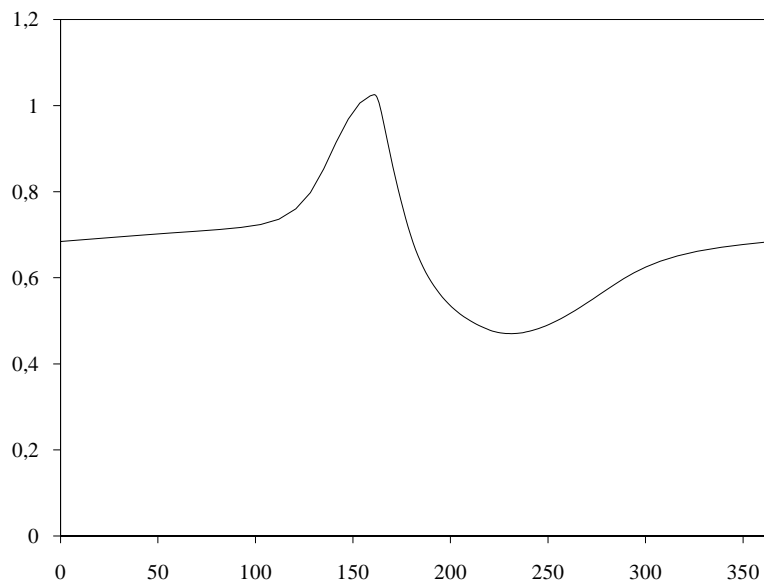


Abb 5: Stickstoffgehalt des Detritus über 1 Jahr

5.3. Stickstoff

In Abb. 6 ist das Verhalten des organischen Stickstoffes dargestellt. Vom Beginn des Jahres bis zum 125. Tag (Anfang Mai) fällt er kontinuierlich ab. Ursache ist der Verbrauch durch

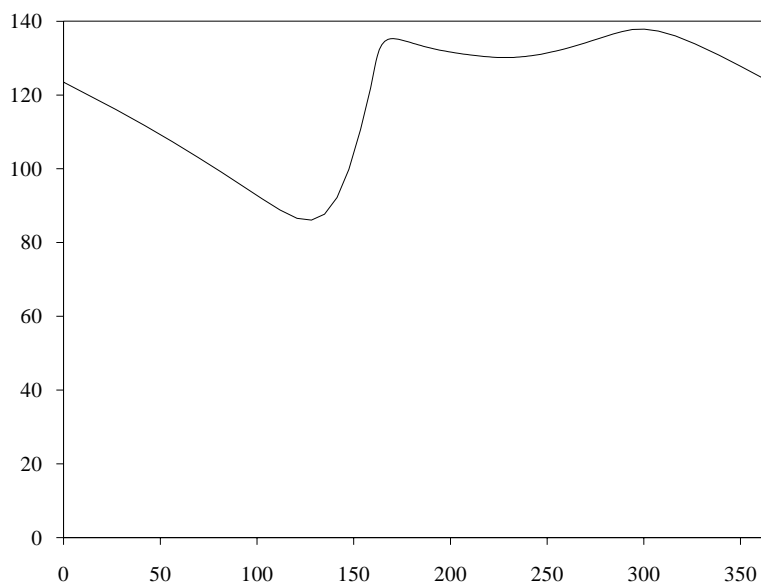


Abb 6: Organischer Stickstoff über 1 Jahr

das Wachstum der Blaualgen und der Abbau durch Mikroorganismen zu anorganischem Stickstoff.

Erst mit Zunahme des Blaualgenwachstums (Exkretionsverluste) sowie nachfolgend dem Abbau des Detritus steigt der Gehalt an organischem Stickstoff und bleibt ab dem 170. Tag auf ei-

nem fast gleichbleibend hohem Niveau bis zum 300. Tag (Mitte November).

Das Verhalten des anorganischen Stickstoffes (Abb. 7) ist genau entgegengesetzt dem des organischen Stickstoffes. Um den 120. Tag hat er sein Maximum, fällt dann innerhalb von 40 Tagen zum 160. Tag auf Null ab und steigt erst ab dem 290. Tag wieder an.

Der rapide Abbau des anorganischen Stickstoffes erfolgt durch das rasche Wachstum der

Blaualgen. Durch den Mangel an Stickstoff wird das Blaualgenwachstum dann ab dem 170. Tag radikal gebremst, der anorganische Stickstoff war nur Tage vorher aufgebraucht.

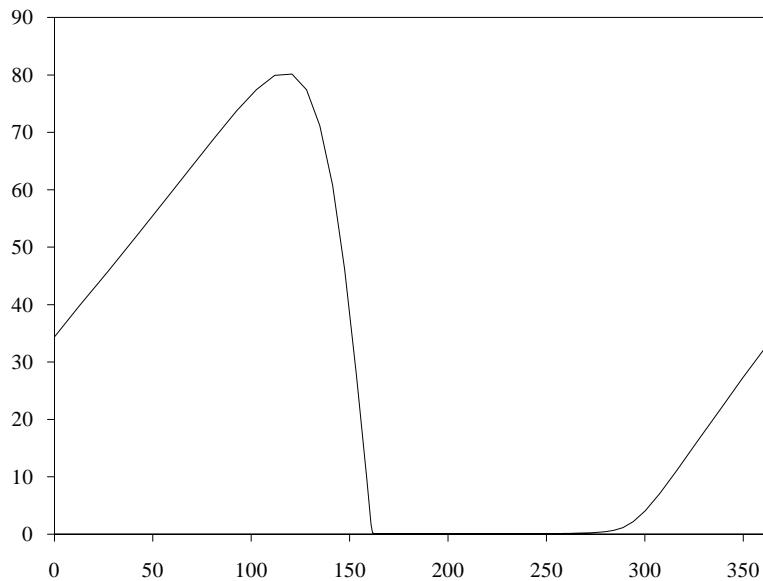


Abb 7: Anorganischer Stickstoff über 1 Jahr

An mehreren Stellen wird in den Zustandsgleichungen die Minimumfunktion verwendet.

An dieser Stelle sollen die Funktionen und Größen graphisch dargestellt werden, die die Minimumfunktion bilden.

Die Minimumfunktion ist das Minimum aus tatsächlich verwendetem Stickstoff (n_{BA}) und eingestrahelter Lichtmenge (i_{BA}). Der tatsächlich verwendete Stickstoff ist eine Konstante, wenn ein kritischer Wert N_{krit} für den Stickstoffgehalt der Blaualgen nicht unterschritten wird. In Abb. 8 ist gut zu sehen, wie N_{krit} um den 160. Tag unterschritten wird, der tatsächlich verwendete Stickstoff sackt ab. Erst nach dem 270. Tag liegt der Stickstoffgehalt der Blaualgen wieder über N_{krit} .

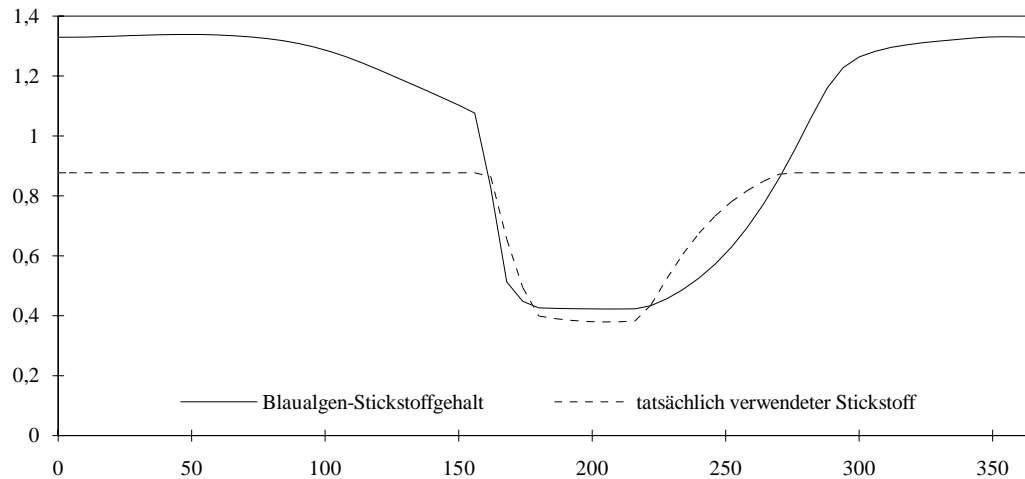


Abb. 8: Stickstoffgehalt der Blaualgen und tatsächlich verwendeter Stickstoff

Eine Darstellung der die Minimumfunktion bildenden Größen n_{BA} und i_{BA} ist in Abb. 9 zu sehen. Fast das ganze Jahr über ist die eingestrahlte Lichtmenge i_{BA} kleiner als der tatsächlich verwendete Stickstoff. Nur vom 180. bis zum 220. Tag wird für die Minimumfunktion der Wert des tatsächlich verwendeten Stickstoffes benutzt. Dieser Zeitraum ist derselbe, in dem die Blaualgen-Biomasse ihren Maximalwert erreicht.

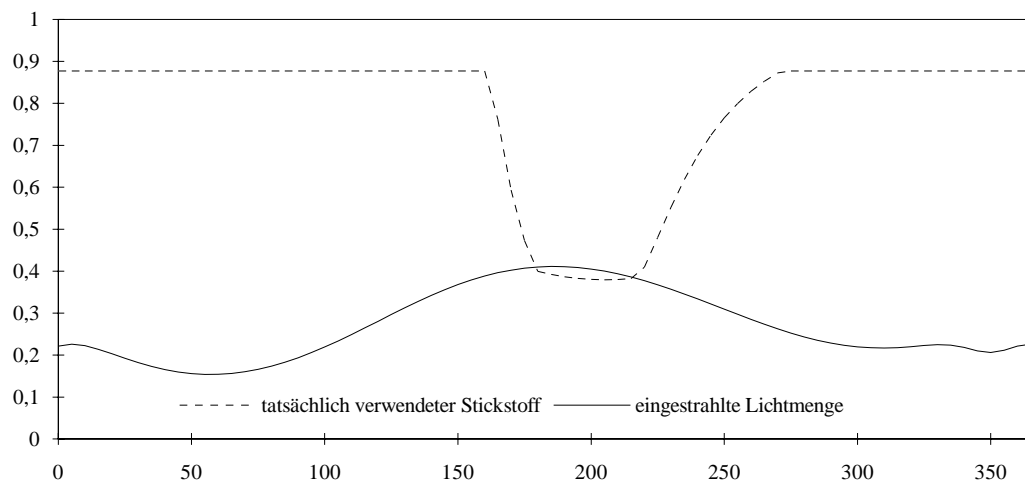


Abb. 9: Komponenten der Minimumfunktion

5.4. Vergleich der verwendeten Simulationsverfahren

Die Simulation des Blaualgen-Modells wurde mit 3 verschiedenen Verfahren durchgeführt: RUNGE-KUTTA 4. Ordnung (RK4), RUNGE-KUTTA-FEHLBERG (RK4(5)) und

DORMAND-PRINCE (DP5(4)). Im Vergleich der erhaltenen Simulationsergebnisse ergaben sich keine Unterschiede, solange bei allen Verfahren mit einer ausreichenden Genauigkeit gearbeitet wurde. Der Vorteil der Verfahren mit Schrittweitensteuerung (RK4(5) und DP5(4)) ist, daß sie sich in Abhängigkeit einer vorgegebenen Fehlergrenze allein die entsprechende Schrittweite für den jeweiligen Schritt suchen, für das Verfahren mit fester Schrittweite (RK4) mußte diese durch Versuche ermittelt werden.

Die folgende Tabelle gibt eine vergleichende Übersicht der Verfahren in Bezug auf Schrittzahl, Schrittweite und benötigte Rechenzeit (auf einem 486DX/33MHz mit 256K Cache, 16MB RAM, davon 8MB als Ramdisk zum Speichern der Zwischenwerte) bei vorgegebener relativer Fehlergrenze für eine Simulation über 1 Jahr:

Simulationsverfahren	relative Fehlergrenze	Schrittweite min/max	Schrittzahl notw./gesamt	Rechenzeit
RUNGE-KUTTA: RK4	keine	0,14/d	2555	4,8 s
RUNGE-KUTTA- FEHLBERG: RK4(5)	1.E-3	0,14/3,56	618/694	2,5 s
	1.E-5	0,062/2,86	1020/1268	4,5 s
	1.E-7	0,041/1,29	2150/2656	9,4 s
DORMAND-PRINCE: DP5(4)	1.E-3	0,16/3,74	566/606	2,4 s
	1.E-5	0,073/2,80	983/1220	4,9 s
	1.E-7	0,043/1,31	2033/2513	10,2 s

Wie aus der Tabelle zu ersehen ist, bewirken die beiden Verfahren mit Schrittweitensteuerung (RK4(5) und DP5(4)) eine deutliche Verringerung der Schrittzahl, solange eine vernünftige relative Fehlergrenze verwendet wird. Dabei ist eine Fehlergrenze von 1.E-3 für die Simulation schon zu groß gewählt, sie bringt zwar noch richtige Ergebnisse, allerdings zeigte die graphische Auswertung einige Kanten, die bei kleineren Fehlergrenzen nicht auftreten. Bei 1.E-7 ist die Fehlergrenze wiederum kleiner als notwendig, die Ergebnisse zeigen keine anderen Werte als bei 1.E-5.

Ob das Verfahren RK4(5) oder DP5(4) gewählt wird, hängt davon ab, ob mit höherer Geschwindigkeit oder mit geringerem Speicherbedarf gerechnet werden soll. Aus der Tabelle ist zu ersehen, daß DP5(4) bei gleicher Fehlergrenze mit weniger Schritten auskommt bzw. mit größerer Schrittweite rechnet. Da das Blaualgen-Modell aber einen relativ hohen Aufwand bei der Berechnung benötigt, resultiert aus der kleineren Schrittzahl kein Zeitgewinn.

Dieser erwartete Zeitgewinn wird dadurch aufgehoben, daß das DP5(4)-Verfahren einen höheren Aufwand pro Schritt erfordert.

In dieser Arbeit wurde meist mit dem DORMAND-PRINCE-5(4)-Verfahren gearbeitet, da es mit einem geringeren Speicherplatz auskommt, die relative Fehlergrenze wurde während der Optimierung um $1.E-5$ gewählt.

Mit den neuesten Verfahren von DORMAND/PRINCE (Verfahren höherer Ordnung) ließe sich noch eine weitere Verringerung der notwendigen Schrittzahl erreichen, allerdings würde dies beim Blaualgen-Modell nicht viel nützen, da dadurch die Rechenzeit nur weiter vergrößert wird, bedingt durch den größer werdenden Aufwand für die Berechnung pro Schritt bei steigender Ordnung.

5.5. Fragen zur Schrittweitensteuerung

Die RUNGE-KUTTA-Formeln sind als solche fest vorgegeben, bei ihnen läßt sich nur etwas durch die Wahl der Formel beeinflussen. Dabei ist die Gegensätzlichkeit einer hohen Ordnung, damit eines kleineren Fehlers und somit einer kleinen Schrittzahl zu der steigenden Zahl der Hilfsberechnungen bei einer hohen Ordnung zu beachten. Wie immer muß die konkrete Anwendung über die Auswahl der Formel entscheiden.

Bei den Tests der Formeln stellte sich heraus, daß durch die Wahl der Art der Schrittweitanpassung die Schrittzahl stark beeinflußt werden kann. Deshalb soll hier der Mechanismus der Schrittweitensteuerung noch einmal im Detail erläutert werden.

Vom aktuellen Punkt werden mit der aktuellen Schrittweite die Werte über eine eingebettete RUNGE-KUTTA-Formel berechnet. Diese liefert nicht nur die Werte für den neuen Punkt, sondern auch den Fehler für jeden Wert dieses Schrittes. Da das Modell des Barther Boddens ein System von DGL ist, wird von den zurückgelieferten Fehlern der größte herausgesucht und mit der zu Beginn der Simulation festgelegten Fehlergrenze (die folgenden Zahlenwerte beziehen sich auf eine Fehlergrenze von $1.E-6$) verglichen. Ist der im aktuellen Schritt aufgetretene Fehler kleiner als die Fehlergrenze, so ist dieser Schritt gültig. Waren die letzten 3 (oder eine andere Zahl größer 1) Schritte auch gültig, so wird die Schrittweite vergrößert. War allerdings der Fehler größer als die Fehlergrenze, so ist der Schritt ungültig, die Schrittweite wird verkleinert. Bis hierher war alles eindeutig.

Die Frage ist jetzt, wie stark wird die Schrittweite verkleinert/vergrößert ?

Zuerst wurde mit folgendem System gearbeitet: Muß die Schrittweite vergrößert werden, so wird mit *SWFaktorHoch* multipliziert, bei Schrittweitenverkleinerung durch *SWFaktorTief* geteilt.

Um die Auswirkungen der Faktoren zu sehen, wurden die Anzahl der notwendigen Schritte und der insgesamt gerechneten Schritte für die einzelnen Faktoren ermittelt. Sie sind für das DP5(4)-Verfahren in Abb. 10 zu sehen. Dabei wurden der Übersichtlichkeit halber die beiden Faktoren gleich groß gewählt.

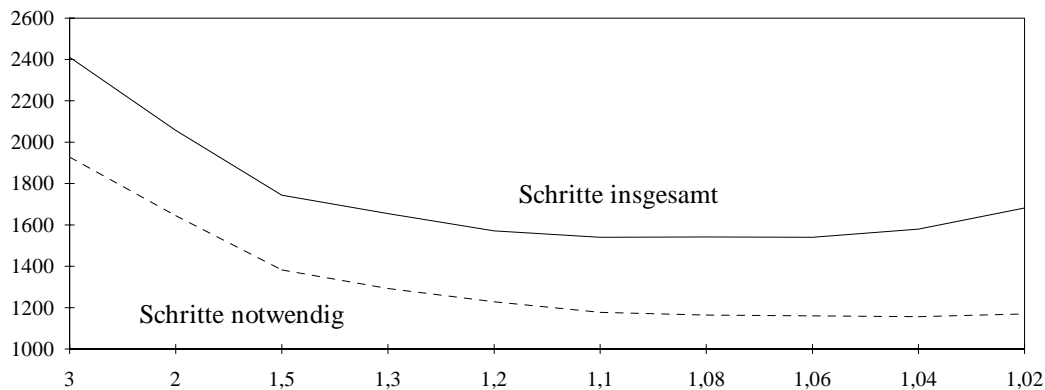


Abb 10: Schrittzahl in Abhängigkeit von 2 Schrittweitenänderungsfaktoren

Es ist deutlich zu sehen, daß es einen "optimalen" Punkt gibt, für den die notwendige Schrittzahl am kleinsten ist. Interessant ist außerdem die Differenz zwischen notwendigen und Schritten insgesamt, da dies die Schritte angibt, in denen der Fehler zu groß war, der Schritt verworfen werden mußte. Die notwendige Schrittzahl beeinflusst den Speicherplatz, der für die Zwischenspeicherung der Simulationswerte benötigt wird, die Schrittzahl insgesamt ist ein Maß für die Rechenzeit. Nach der Auswertung des Diagramms ergibt sich für die Schrittweitenfaktoren ein Wert zwischen 1,10 und 1,06.

Bei der eben beschriebenen Methode wird immer nur auf Fehler größer/kleiner als die vorgegebene Fehlergrenze reagiert. Die Größe der Differenz zwischen Fehler und Fehlergrenze hat keinen Einfluß auf die Schrittweitenänderung. Deshalb wurde nach einer Möglichkeit gesucht, diese Größe einzubeziehen.

In [Hei] und [HNW] fand sich ein Ansatz:

$$h_{\text{neu}} = \text{SWFaktor} \cdot h_{\text{aktuell}} \cdot \left(\frac{\text{Fehlergrenze}}{\text{Fehler}_{\text{berechnet}}} \right)^{\frac{1}{(p+1)}}$$

Da hier der Quotient aus dem berechneten Fehler und der Fehlerkonstante eingeht, benötigt man nur eine Formel, die für die Schrittweitenvergrößerung und -verkleinerung benutzt werden kann.

Es stellte sich wieder die Frage nach dem günstigen Schrittweitenfaktor *SWFaktor*, für eine kleine Schrittzahl. Wie oben wurde wieder die Schrittzahl (notwendig und insgesamt) über den Schrittweitenfaktor untersucht.

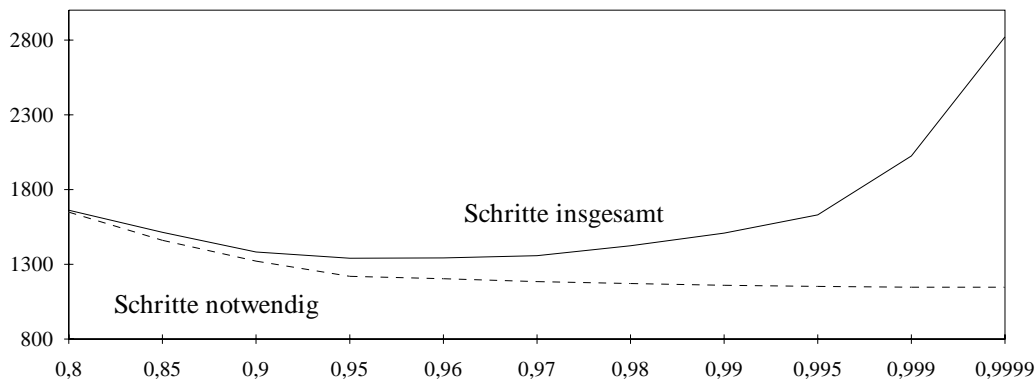


Abb 11: Schrittzahl in Abhängigkeit von 1 Schrittweitenänderungsfaktor

Hier ergibt sich ein anderes Bild. Die Anzahl der Fehlversuche steigt, je mehr sich der Schrittweitenfaktor der 1 nähert (bei 1,0 bleibt das Verfahren hängen, selbst nach 5 min, was etwa 100000 Schritten entspricht, kam es nicht über den 213. Tag des Jahres hinaus.), die Anzahl der notwendigen Schritte dagegen wird kleiner. Auch hier heißt es, wieder einen Kompromiß zu finden. Das Minimum der gesamten Schrittzahl liegt bei 0,95. Ab 0,97 ändert sich die notwendige Schrittzahl nur noch wenig, es würde sich damit ein Schrittweitenfaktor von 0,96 anbieten.

Mit diesen Untersuchungen der eingebetteten RUNGE-KUTTA-Verfahren und im besonderen der Schrittweitensteuerung sollte die Simulation so weit als möglich optimiert werden. Damit ist eine günstige Ausgangsposition für die späteren Optimierungsrechnungen gelegt, bei denen die Simulation des DGLS den Hauptteil der Berechnungen ausmacht.

6. Grundlagen der Optimierung

Im folgenden sollen die Grundlagen für die weitere Optimierungsrechnung dargestellt werden ([Phi]), die dann im nächsten Kapitel auf das vorliegende Modell angewendet werden.

Für das Modell soll der Verlauf einer Steuerung unter Beachtung der Zustandsgleichungen ermittelt werden. Damit kommt die dynamische Optimierung zur Anwendung, d.h., es wird eine optimale Steuerung in einem bestimmten Zeitintervall gesucht.

6.1. Problembeschreibung

6.1.1. Systembeschreibung

Bei dem vorliegenden Modell handelt es sich um ein kontinuierliches System mit konzentrierten Parametern.

Das System wird durch ein Differentialgleichungssystem wie folgt beschrieben:

$$\begin{bmatrix} \dot{q}_1(t) \\ \vdots \\ \dot{q}_n(t) \end{bmatrix} = f \left(\begin{bmatrix} q_1(t) \\ \vdots \\ q_n(t) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{bmatrix} \right) \quad \begin{array}{l} q(t_0) = q_0 : \text{Startvektor} \\ q(t) : \text{Zustandsvektor} \\ u(t) : \text{Steuervektor} \end{array}$$

Für die Komponenten gelten diese Bedingungen:

- Die Steuerung $u(t)$ muß im gesamten betrachteten Zeitintervall $[t_0, t_1]$ eine integrierbare Funktion sein, damit ist nur eine endliche Anzahl von Sprüngen zugelassen und zu jedem Zeitpunkt $t \in [t_0, t_1]$ ist $u(t) \in \mathbb{R}^m$.
- Der Zustandsvektor $q(t)$ muß im gesamten betrachteten Zeitintervall $[t_0, t_1]$ eine stetige Funktion sein und zu jedem Zeitpunkt $t \in [t_0, t_1]$ ist $q(t) \in \mathbb{R}^n$.

6.1.2. Beschränkungen

Während der Optimierung können verschiedene Arten von Beschränkungen auftreten: Endzustands-, Steuerungs- und Zustandsbeschränkungen. Diese lassen sich in allgemeiner Form angeben:

- Endzustand: $a_i[q(t_1)] = 0 \quad i = 1, \dots, k_e \quad k_e \leq n$

- Steuerung: $b_i[u(t)] \leq 0 \quad i = 1, \dots, k_u$
zulässiger Steuerbereich: $U_B = \{u(t) : b_i[u(t)] \leq 0, i = 1, \dots, k_u\} \in \mathbb{R}^m$
- Zustand: $c_i[q(t)] \leq 0 \quad i = 1, \dots, k_q$
zulässiger Zustandsbereich: $Q_B = \{q(t) : c_i[q(t)] \leq 0, i = 1, \dots, k_q\} \in \mathbb{R}^n$

Dabei kann man für jede Beschränkungsart Spezialfälle angeben.

Endzustandsbeschränkungen:

- freies Ende (keine Beschränkungen): $q(t_1) \in \mathbb{R}^n$
- festes Ende (Punkt als Zielmenge): $q(t_1) = q_1$
- gebundenes Ende

Steuerungsbeschränkungen:

- Komponentenbeschränkungen: $u_{i_{\min}} \leq u_i(t) \leq u_{i_{\max}}; i = 1, \dots, k_u/2$
- Hyperebenenbeschränkungen: $\alpha_i u(t) + \beta_i \leq 0; i = 1, \dots, k_u$
- Normbeschränkungen: $\|u(t)\| \leq b$

Für die Zustandsbeschränkungen kann man dieselben Spezialfälle wie für die Steuerungsbeschränkungen angeben.

Alle Beschränkungen für ein System müssen miteinander verträglich sein. Die von den Steuerungen $u(t) \in U_B$ erzeugte Menge der Zustände in \mathbb{R}^n muß für jedes $t \in [t_0, t_1]$ mit dem zulässigen Zustandsbereich Q_B einen nichtleeren Durchschnitt bilden. Die Steuerungen, die unter Beachtung der Zustandsgleichungen alle gegebenen Beschränkungen erfüllen, sind die zulässigen Steuerungen, unter denen die optimale Steuerung $u^*(t)$ auszuwählen ist.

6.1.3. Gütekriterien

Als Gütekriterium dient ein entsprechend der Aufgabe zu definierendes Zielfunktional:

$$\text{BOLZA-Form:} \quad I = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} f^0[q(t), u(t)] dt$$

Das Ziel der Optimierung ist die Minimierung des Zielfunktional I . Dabei bewertet $f^1[q(t_1)]$ den zu erreichenden Endzustand, wobei diese Bewertung nur dann einen Sinn hat,

wenn $q(t_1)$ nicht fest ist. Der zweite Term bewertet Zustand und Steuerung über den gesamten Optimierungszeitraum.

Neben der obigen Form des Zielfunktional gibt es zwei weitere, die jeweils einen der Teile der BOLZA-Form enthalten:

$$\text{LAGRANGE-Form: } I = \int_{t_0}^{t_1} f^0[q(t), u(t)] dt$$

$$\text{MAYER-Form: } I = f^1[q(t_1)]$$

Diejenige zulässige Steuerung, die das gewählte Zielfunktional minimiert, ist die optimale Steuerung $u^*(t)$.

6.2. Optimalitätsbedingungen

Um die Optimalitätsbedingungen zu erhalten, geht man von einer optimalen Steuerung $u^*(t)$ aus, die einen optimalen Zustandsvektor $q^*(t)$ erzeugt und für die $I(u^*)$ berechnet wird. Jetzt werden die Auswirkungen von "weichen Variationen" auf das Gütefunktional betrachtet. Für ein lokales Minimum von I muß bei genügend kleinem, beliebigem δu gelten:

$$\Delta I = I(u^* + \delta u) - I(u^*) = \delta I(u) \Big|_{u=u^*} + \frac{1}{2} \delta^2 I(u) \Big|_{u=u^*} + \dots \geq 0$$

Wegen $\delta u \neq 0$ findet man:

notwendige Optimalitätsbedingung: $\delta I = 0$

hinreichende Bedingung für ein Minimum (Maximum): $\delta^2 I \geq 0$ ($\delta^2 I \leq 0$)

6.2.1. Unbeschränkte Systeme

Nun wird das LAGRANGE-Funktional eingeführt:

$$I_L = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} \{f^0[q(t), u(t)] + p^T f[q(t), u(t)] - p^T \dot{q}(t)\} dt \quad p(t) : \text{Kozustandsvektor}$$

Mit der Hamiltonfunktion $H[q(t), p(t), u(t)] = f^0[q(t), u(t)] + p^T f[q(t), u(t)]$ schreibt sich das LAGRANGE-Funktional:

$$I_L = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} \{H[q(t), p(t), u(t)] - p^T \dot{q}(t)\} dt$$

Daraus ergibt sich für die 1. Variation von I_L :

$$\delta I_L = (f^1_{q_1})^T \delta q_1 + \int_{t_0}^{t_1} [H_q^T \delta q + H_u^T \delta u - p^T \delta \dot{q}] dt$$

$$\text{mit } H_q = \frac{\partial H(q, p, u, t)}{\partial q(t)}, H_u = \frac{\partial H(q, p, u, t)}{\partial u(t)}, f^1_{q_1} = \frac{\partial [q(t^1)]}{\partial q(t^1)}$$

Nach partieller Integration von $p^T \delta \dot{q}$ mit $\delta q(t_0) = 0$ entsteht:

$$\delta I_L = [f^1_{q_1} - p(t_1)]^T \delta q_1 + \int_{t_0}^{t_1} [(\dot{p} + H_q)^T \delta q + H_u^T \delta u] dt$$

Mit $\delta I_L = 0$ ergeben sich als notwendige Optimalitätsbedingungen:

Kozustands-DGL: $\dot{p}^* = - \frac{\partial H[q^*, p^*, u^*]}{\partial q^*}$

Transversalitätsbedingung: $p^*(t_1) = \frac{\partial f^1[q^*(t_1)]}{\partial q^*(t_1)}$

Minimierungsbedingung: $\frac{\partial H[q^*, p^*, u^*]}{\partial u^*} = 0$

Zusammen mit der Zustandsgleichung, die man auch als

Zustandsgleichung: $\dot{q}^* = \frac{\partial H[q^*, p^*, u^*]}{\partial p^*} q^*(t_0) = q_0$

schreiben kann, bilden diese Gleichungen ein kanonisches Differentialgleichungssystem. Aus der hinreichenden Bedingung $\delta^2 I_L \geq 0$ für ein lokales Minimum folgen als hinreichende Optimalitätsbedingungen:

H_{uu} positiv definit

$\begin{bmatrix} H_{qq} & H_{qu} \\ H_{uq} & H_{uu} \end{bmatrix}$ positiv semidefinit

$f^1_{q_1}$ positiv semidefinit

6.2.2. Beschränkte Systeme

Sobald für ein System Beschränkungen wirksam werden, verändern sich das LAGRANGE-Funktional sowie daraus folgend die notwendigen Optimalitätsbedingungen.

Bei Endzustandsbeschränkungen ergibt sich das LAGRANGE-Funktional zu:

$$I_L = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} \{f^0[q(t), u(t)] + p^T f[q(t), u(t)] - p^T \dot{q}(t)\} dt + \mu^T a[q(t_1)]$$

Dieses LAGRANGE-Funktional bewirkt nur eine Veränderung der Transversalitätsbedingung. Für ein festes Ende ist keine Bedingung für $p(t_1)$ angebar. Dies ist auch nicht notwendig, da mit $q(t_1) = q_1$ die Randbedingungen gegeben sind. Für ein gebundenes Ende ergibt sich als Transversalitätsbedingung:

$$\text{Transversalitätsbedingung: } p^*(t_1) = \left. \frac{\partial f^1[q^*(t_1)]}{\partial q^*(t_1)} + \frac{\partial a[q^*(t_1)]}{\partial q^*(t_1)} \right|^T \cdot \mu$$

Wenn Beschränkungen der Steuerung in der Form $b[u(t)] \leq 0$ zu beachten sind, so erhält das LAGRANGE-Funktional die Form:

$$I_L = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} \{f^0[q(t), u(t)] + p^T f[q(t), u(t)] - p^T \dot{q}(t)\} dt + \int_{t_0}^{t_1} \lambda^T(t) b[u(t)] dt$$

Im Vergleich zum unbeschränkten Fall verändert sich nur die Minimierungsbedingung:

$$\text{Minimierungsbedingung: } \frac{\partial H[q^*, p^*, u^*]}{\partial u^*} + \lambda^T \frac{\delta b[u^*]}{\delta u^*} = 0$$

Wesentlich komplizierter ist die Einbeziehung von Zustandsbeschränkungen $c[q(t)] \leq 0$. In diesem Fall lautet das LAGRANGE-Funktional:

$$I_L = f^1[q(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} f^0[q(t), u(t)] dt + \int_{t_0}^{t_1} \left\{ q(t) - q_0 - \int_{t_0}^{t_1} f[q(\tau), u(\tau)] d\tau \right\} dr(t) + \int_{t_0}^{t_1} c^T[q(t)] dr(t)$$

Beim Eintritt in die Zustandsschranken zu den Zeiten t_i können $p(t)$ und $r(t)$ Sprünge ausführen, so daß für sie im weiteren mit den stetigen $\bar{p}(t)$ und $\bar{r}(t)$ gearbeitet wird. Gegenüber dem unbeschränkten Fall ergeben sich für alle Optimalitätsbedingungen neue Gleichungen sowie eine zusätzliche Sprungbedingung:

$$\text{Kozustands-DGL: } \dot{\bar{p}}^* = - \frac{\partial H[q^*, p^*, u^*]}{\partial q^*} + \left. \frac{\partial \bar{c}[q^*, u^*]}{\partial q^*} \right|^T \cdot \bar{r}c[q, u] = \frac{\partial c}{\partial q} \cdot f$$

$$\text{Transversalitätsbedingung: } p^*(t_1) = \frac{\delta f^1[q^*(t_1)]}{\delta q^*(t_1)} + \frac{\delta c[q^*(t_1)]}{\delta q^*(t_1)} \Big| \cdot \bar{r}(t_1)$$

$$\text{Minimierungsbedingung: } \frac{\delta H[q^*, p^*, u^*]}{\delta u^*} = \frac{\delta c[q^*, u^*]}{\delta u^*} \Big| \cdot \bar{r}$$

$$\text{Sprungbedingung: } p^*(t_i^+) = p^*(t_i^-) - \frac{\delta c[q^*(t_i)]}{\delta q^*(t_i)} \Big| \cdot r(t_i^+)$$

Wie zu sehen ist, werden die verschiedenen Bedingungen bei beschränkten Systemen im Vergleich zu unbeschränkten um einiges komplizierter und es sind einige zusätzliche Voraussetzungen zu beachten. Deshalb sollte immer versucht werden, das zu behandelnde Problem so zu formulieren, daß es als unbeschränktes System behandelt werden kann.

6.3. Optimierungsverfahren

Im obigen Abschnitt wurden Gütekriterium sowie die Optimalitätsbedingungen genannt. Welche Verfahren gibt es, die mit der Kenntnis dieser Gleichungen zu einer Minimierung des Gütekriteriums führen?

Es ist relativ einfach, eine Funktion, die nur von einer Variablen abhängt zu minimieren. Hier seien die Suche nach dem Goldenen Schnitt bzw. durch Parabolische Interpolation genannt. Wenn man nun von einem Punkt P im N-dimensionalen Raum startet, so kann jede Funktion von N Variablen $f(P)$ entlang einiger Richtungen n mit den eindimensionalen Verfahren minimiert werden. An dieser Stelle kann man sich viele verschiedene mehrdimensionale Minimierungsverfahren ausdenken, die aus einer Folge von solchen Richtungsminimierungen bestehen. Verschiedene Verfahren differieren nur darin, wie sie die neue Richtung aussuchen, in die der nächste Versuch stattfindet.

Das einfachste Verfahren wäre, die Einheitsvektoren e_1, e_2, \dots, e_N als Satz von Richtungen zu verwenden. Mit einer eindimensionalen Minimierung wird entlang der ersten Richtung nach deren Minimum gesucht und von diesem Punkt in der zweiten Richtung zu deren Minimum und so weiter bis zur letzten Richtung. Dieser Vorgang wiederholt sich so oft wie notwendig, solange sich der Funktionswert verringert. Dieses Verfahren ist für manche Funktionen nicht zu schlecht, aber für die meisten Funktionen ineffizient. Sehr deutlich wird dies, wenn dieses Verfahren ein langes, schmales Tal entlang muß, das in einem Winkel zu den gegebenen Richtungen liegt. Um auf dem Grund dieses Tales entlang zu kommen, müssen viele kleine Schritte ausgeführt werden, immer von einem Rand des Tales

zum anderen entlang den gegebenen Richtungen. Bei N Richtungen führt dies zu einem Aufwand, der nur in den seltensten Fällen zu ertragen ist.

Es ist also deutlich, daß ein besserer Satz von Richtungen gebraucht wird als die Einheitsvektoren. Alle Verfahren zum Aufstellen der Richtungen enthalten Beschreibungen für die Aktualisierung des Satzes der Richtungen im Verlauf des Verfahrens. Dabei gibt es zwei Ziele: das Verfahren enthält einige sehr gute Richtungen, die durch ein langes, schmales Tal führen oder das Verfahren enthält eine Anzahl von Richtungen mit der speziellen Eigenschaft, daß die Minimierung entlang einer dieser Richtungen nicht von nachfolgenden Minimierungen in einer anderen Richtung verdorben wird, wodurch ein ewiges Durchlaufen der Richtungen verhindert werden kann.

Dieses Konzept der unabhängigen Richtungen wird als Methode der Konjugierten Richtungen bezeichnet, das im folgenden etwas genauer betrachtet werden soll.

6.3.1. Konjugierte Richtungen

Ausgehend von einem Punkt P im Ursprung des N -dimensionalen Koordinatensystems mit den Koordinaten x kann jede Funktion f durch eine Taylorreihenentwicklung angenähert werden:

$$f(x) = f(P) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

$$\approx c - b \cdot x + \frac{1}{2} x \cdot A \cdot x$$

$$\text{mit } c \equiv f(P) \quad b \equiv -\nabla f|_P \quad [A]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_P$$

Die Matrix A , deren Komponenten die 2. partiellen Ableitungen der Funktion im Punkt P sind, heißt HESSE-Matrix.

Der Gradient kann aus obiger Annäherung leicht zu $\nabla f = A \cdot x - b$ berechnet werden. Wie verändert sich der Gradient, wenn man sich in einer Richtung bewegt? $\delta(\nabla f) = A \cdot (\delta x)$, dies ist deutlich zu erkennen. Nun stelle man sich vor, in einer Richtung w ein Minimum erreicht zu haben und bewegt sich jetzt in einer neuen Richtung v weiter. Die Bedingung, daß die Bewegung in Richtung v nicht die Minimierung in Richtung w verdirbt, ist nur dann erfüllt, wenn der Gradient rechtwinklig auf w steht, mit anderen Worten, die Änderung des Gradienten rechtwinklig zu w ist. Daraus ergibt sich: $0 = w \cdot \delta(\nabla f) = w \cdot A \cdot v$. Wenn diese Gleichung für die Vektoren w und v gilt, so sind diese konjugiert. Gilt diese

Bedingung paarweise für alle Mitglieder eines Satzes von Vektoren, so werden diese als ein konjugierter Satz bezeichnet.

Bei einer schrittweisen Richtungsminimierung einer Funktion entlang eines konjugierten Satzes von Richtungen braucht man keine dieser Richtungen noch einmal zu minimieren. Für ein Verfahren ist es also günstig, einen Satz von N linear unabhängigen, wechselseitig konjugierten Richtungen zu liefern. Denn damit würde eine einmalige Abarbeitung der N Richtungsminimierungen direkt zum Minimum führen, wenn die Funktion von quadratischer Form ist. Für Funktionen, die keine exakte quadratische Form haben, wäre dieser erreichte Punkt nicht das exakte Minimum. Aber durch wiederholtes Abarbeiten der N Richtungsminimierungen wird das Minimum mit quadratischer Konvergenz erreicht.

POWELL entdeckte als erster eine Methode, um einen Satz von N untereinander konjugierten Richtungen zu erhalten ([Pre]). Diese Methode erfordert $N(N+1)$ Richtungsminimierungen für eine exakt quadratische Funktion. Diese Anzahl der Richtungsminimierungen erscheint auf den ersten Blick sehr hoch, allerdings darf an dieser Stelle nicht übersehen werden, daß nur die Funktion selbst benötigt wird. Damit bietet sich diese Methode dann an, wenn keine Möglichkeit zur Berechnung des Gradienten der Funktion besteht bzw. dessen Berechnung unverhältnismäßig aufwendig ist.

6.3.2. Verwendung des Gradienten

Wenn nun die Möglichkeit der Berechnung des Gradienten der Funktion besteht, welche Vorteile bringt dies?

Dazu muß etwas genauer auf die Anzahl der notwendigen Berechnungen für die beiden Varianten geschaut werden. Die Anzahl der unbekannt Parameter in $f(x) \approx c - b \cdot x + \frac{1}{2} x \cdot A \cdot x$ ist gleich der Anzahl der freien Parameter in A und b . Diese ist $\frac{1}{2}N(N+1)$, also von Ordnung N^2 . Wird einer dieser Parameter geändert, so kann dies den Ort des Minimums verschieben. Deshalb kann man nicht erwarten, das Minimum zu finden, bevor man eine gleichwertige Informationsmenge gesammelt hat, von Ordnung N^2 . Bei der Methode von POWELL wird diese Information durch N^2 einzelne Richtungsminimierungen gesammelt, wovon jede mehrere Auswertungen der Funktion erfordert.

Nun bringt jede Ermittlung des Gradienten N neue Komponenten. Wenn man diese Informationen günstig einsetzt, braucht man nur noch N einzelne Richtungsminimierungen durchzuführen, um das Minimum der Funktion zu ermitteln.

Ein einfaches Verfahren zur Einbeziehung des Gradienten könnte wie folgt aussehen: Begonnen wird bei einem Startpunkt P_0 . So oft wie nötig wird von P_i aus in Richtung $-\nabla f(P_i)$, entgegengesetzt zum Gradienten, eine Richtungsminimierung durchgeführt und so der neue Punkt P_{i+1} erreicht. Oft wird diese Variante als Gradientenverfahren bezeichnet.

Allerdings benötigt diese Methode wieder sehr viele kleine Schritte, wenn sie durch ein langes, schmales Tal geht, denn nach jeder Richtungsminimierung steht der neue Gradient rechtwinklig zur vorigen Richtung, man muß also eine rechtwinklige Richtungsänderung vornehmen, die nur in den seltensten Fällen zum Minimum führt.

Wie schon weiter oben angeführt, so möchte man auch hier nicht in Richtung des neuen Gradienten gehen, sondern in eine Richtung, die konjugiert zum vorigen Gradienten ist und wenn möglich sogar zu allen vorhergehenden Richtungen. Verfahren, die solche Richtungen liefern, werden als Verfahren der Konjugierten Gradienten bezeichnet.

6.3.3. Verfahren der Konjugierten Gradienten

Das Verfahren der Konjugierten Gradienten arbeitet mit zwei Folgen von Vektoren (Gradient g und Suchrichtung s):

$$g_{i+1} = g_i - \lambda_i A \cdot s_i \quad s_{i+1} = g_{i+1} + \beta_i s_i \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

mit dem Startvektor $g_0 = -\nabla f(P_0)$ und $s_0 = g_0$. Diese Vektoren erfüllen die Orthogonalitätsbedingungen und sind konjugiert zueinander:

$$g_i \cdot g_j = 0 \quad s_i \cdot A \cdot s_j = 0 \quad g_i \cdot s_j = 0 \quad i \neq j$$

Die skalaren Werte λ_i und β_i (Streckfaktor) sind gegeben durch:

$$\lambda_i = \frac{g_i \cdot g_i}{s_i \cdot A \cdot s_i} = \frac{g_i \cdot s_i}{s_i \cdot A \cdot s_i} \quad \beta_i = \frac{g_{i+1} \cdot g_{i+1}}{g_i \cdot g_i}$$

Angenommen, man kennt die HESSE-Matrix A . Dann könnte man mit den Gleichungen $g_{i+1} = g_i - \lambda_i A \cdot s_i$ und $s_{i+1} = g_{i+1} + \beta_i s_i$ Schritt für Schritt konjugierte Richtungen s_i finden, in deren Richtung man dann die Richtungsminimierung durchführt. Nach N solchen Minimierungen hätte man das Minimum der quadratischen Form erreicht. Leider ist A unbekannt.

Es gibt aber ein Theorem, das dieses Problem elegant löst: Ausgangspunkt ist der Gradient für einen Punkt P_i mit $g_i = -\nabla f(P_i)$. Angenommen, man geht von P_i aus in Richtung s_i zum lokalen Minimum von f am Punkt P_{i+1} und setzt $g_{i+1} = -\nabla f(P_{i+1})$. Dann ist g_{i+1} derselbe

Vektor, den man durch die Gleichung $\mathbf{g}_{i+1} = \mathbf{g}_i - \lambda_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{s}_i$ berechnet hätte, aber ohne \mathbf{A} zu kennen.

Damit hat man eine Basis für einen Algorithmus, der weder die Kenntnis der HESSE-Matrix noch den Speicherplatz zu ihrer Verwaltung benötigt. Eine Folge von konjugierten Richtungen \mathbf{s}_i wird nur durch Richtungsminimierungen und die Auswertung des Gradienten aufgebaut.

Neben der oben angegebenen Bestimmung des Streckfaktors β_i nach FLETCHER-REEVES wurden später weitere Varianten veröffentlicht, die verschiedene Vorteile haben. Deshalb hier die wichtigen Verfahren zusammenhängend:

$$\text{FLETCHER/REEVES:} \quad \beta_i = \frac{\mathbf{g}_{i+1} \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i}$$

$$\text{POLAK/RIBIERE:} \quad \beta_i = \frac{(\mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i) \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i}$$

$$\text{HESTENES/STIEFEL:} \beta_i = \frac{(\mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i) \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{(\mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i) \cdot \mathbf{s}_i}$$

Aus $\mathbf{s}_{i+1} = \mathbf{g}_{i+1} + \beta_i \mathbf{s}_i$ ist leicht zu ersehen, daß für $\beta_i = 0$ die Verfahren der Konjugierten Gradienten in das Gradientenverfahren übergehen. Dies wird außerdem verwendet, um nach N Minimierungsschritten das Verfahren mit einem Gradientenschritt neu zu starten. Damit kann ein Außer-Tritt-Kommen des Algorithmus verhindert werden, bzw., wenn dies auftrat, die Minimierung neu gestartet werden.

7. Optimierung des Blaualgen-Modells

Mit den im vorigen Kapitel dargestellten Grundlagen zur Optimierung kann die Anwendung auf das vorliegende Problem beginnen.

Die Optimierungsaufgabe besteht darin, das Blaualgen-Modell so zu steuern, daß sich die Gewässergüte verbessert. In [Kun] wurden Überlegungen angestellt, wie diese zu bewerten ist. Im vorliegenden Modell wird die Gewässergüte am besten durch die Zustandsgröße der Blaualgen-Biomasse beschrieben. Je größer die Blaualgen-Biomasse, um so geringer ist die Gewässergüte. Mit einer sich verschlechternden Gewässergüte verringern sich die Möglichkeiten der Nutzung dieses Gewässers. Durch detaillierte Untersuchungen könnte man eine Schaden/Nutzen-Funktion in Abhängigkeit der Gewässergüte/der Blaualgen-Biomasse ermitteln. Ein Ansatz dazu findet sich in [Kun], allerdings ist eine solche Kosten/Nutzen-Analyse von unzähligen Faktoren abhängig, die oftmals nur unscharf angebbbar sind bzw. eine Frage der Auffassung sind.

Eine weitere Frage besteht in den möglichen Steuerungen des Systems, so daß eine Verringerung der Blaualgen-Biomasse und damit eine Verbesserung der Gewässergüte erreicht wird.

7.1. Steuerung des Systems

Bei der Wahl einer Steuerung sind folgende Punkte zu beachten:

1. Möglichkeit der praktischen Anwendbarkeit,
2. Effektivität des Verfahrens,
3. vergleichsweise geringe negative Seiteneffekte bzw. Beeinflussung auf andere Komponenten oder Prozesse,
4. Kosten und Nutzen müssen in einem ausgewogenen Verhältnis zueinander stehen.

Zur Steuerung des Blaualgen-Modells bestehen verschiedene Möglichkeiten, die im folgenden genannt und nach den oben genannten Kriterien verglichen werden sollen:

1. Verringerung des Eintrags von Stickstoff in das System
2. Entnahme von Blaualgen
3. Entnahme von Detritus

Außerdem existieren noch verschiedene andere Möglichkeiten, die aber von geringerem Einfluß sind bzw. nur eine statische Steuerung ermöglichen.

Die Verringerung des Eintrags von Stickstoff in das System ist von großer praktischer Bedeutung. Hier sei nur auf die Möglichkeiten der Abwasserreinigung, geschlossener Wasserkreisläufe in der Industrie, geschlossener Stickstoffkreisläufe in der Landwirtschaft und des verringerten Einsatzes von Düngemitteln verwiesen. Allerdings ist der verringerte Stickstoffeintrag schwer durch eine praktische dynamische Steuerung angebar. Eine Verringerung der Zustandsgrößen des organischen und anorganischen Stickstoffs im Modell ist möglich, im Endeffekt aber von geringerer Bedeutung in der Anwendung einer Steuerung.

Eine Entnahme von Blaualgen wäre der direkte Weg zur Verbesserung der Wasserqualität. Leider gibt es noch keine Technologie, mit der dies möglich ist. So wurde diese Methode in bisherigen Arbeiten (z.B. [Aff]) dazu verwendet, um die theoretische Steuerbarkeit des Modells zu zeigen und erste Varianten einer Optimierung zu implementieren. Vorteil der Blaualgen-Entnahme ist die direkte Rückwirkung auf die zu beeinflussende Zustandsgröße und nicht über Umwege wie bei anderen Steuerungen.

Eine dynamische Steuerung des Blaualgen-Modells durch Detritus-Entnahme läßt sich praktisch durch Schlammabgaberungen und Bau von Sedimentfallen realisieren. Dabei wird das mit Stickstoff angereicherte Sediment aus dem System entnommen. Für diese Steuerungsmethode gibt es Versuche zur Abschätzung von Kosten und Nutzen ([Kun] und [Vie90]). Da die Größen für Kosten und Nutzen stark von den aktuellen Gegebenheiten sowie speziellen Einschätzungen abhängen, soll im weiteren nicht auf Kosten/Nutzen-Rechnungen eingegangen werden.

Für die weitere Optimierung wird mit einer Steuerung des Systems durch Entnahme von Detritus gearbeitet, da dieses Verfahren die größte Bedeutung für eine eventuelle praktische Anwendung der hier erarbeiteten Ergebnisse hat.

7.2. Zielfunktion

Die Optimierung des Blaualgen-Modells erfolgt durch Minimierung einer Zielfunktion (Gütekriterium). In dieser Funktion müssen alle Größen berücksichtigt sein, die für die Bewertung des Zustandes sowie die Steuerung des Systems von Bedeutung sind. Die Zielfunktion für die Minimierung der Blaualgen-Biomasse wurde wie folgt aufgestellt:

$$I(u) = \frac{1}{2} \int_{t_{\text{Beginn}}}^{t_{\text{Ende}}} (W_u \cdot [u(t)]^2 + W_{q_1} \cdot [q_1(t) > q_{1_{\text{max}}}]^2) dt + W_{\text{Ende}} \cdot \left([q_{1;3}(t_{\text{Ende}}) - q_{1;3_{\text{soll}}}(t_{\text{Ende}})]^2 \right)$$

Dabei sind W_u , W_{q_1} und W_{Ende} die Wichtungen für die Steuerung $u(t)$, die Blaualgen-Biomasse $q_1(t)$ sowie den Endzustand der Blaualgen-Biomasse $q_1(t_{\text{Ende}})$ und des Detritus $q_3(t_{\text{Ende}})$. Damit wird eine differenzierte Bewertung der Größen bei der Optimierung möglich.

Bei der Einbeziehung des Zustandes der Blaualgen-Biomasse wird nicht der gesamte Wert betrachtet, sondern nur der Anteil, der über einem zu spezifizierenden Maximalwert $q_{1\text{soil}}$ liegt. Dadurch wird nicht die generelle Verringerung der Blaualgen-Biomasse bewertet, sondern nur die Verringerung der Spitzenwerte. Diese Spitzenwerte sind es, die die geringe Gewässergüte hervorrufen und durch die Steuerung des Systems verhindert werden sollen.

Die Optimierung des Blaualgen-Modells kann als unbeschränktes Problem behandelt werden, da keine Beschränkungen der Zustände oder der Steuerung auftreten, die nicht durch eine entsprechende Wahl der Wichtungsparameter beseitigt werden können.

7.3. Hamiltonfunktion

Die Hamiltonfunktion ergibt sich mit der Definition $H = f^0 + p^T \cdot f$ und den vorherigen Angaben in Kurzform wie folgt:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{2} \left(W_u \cdot u^2 + W_{q_1} \cdot (q_1 > q_{1\text{max}})^2 \right) && \text{(Zielfunktion)} \\
 & + p_3 \cdot u && \text{(Steuerung)} \\
 & + [p_x \cdot \dot{q}_x]_{x=1\dots 6} && \text{(Modellgleichungen)}
 \end{aligned}$$

Mit Einsetzen der DGL des Blaualgen-Modells ergibt sich die vollständige Hamiltonfunktion zu:

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} \left(W_u \cdot u^2 + W_{q_1} \cdot (q_1 - q_{1_{\max}})^2 \right) \\
& + p_3 \cdot u \\
& + p_1 \cdot \left[\mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt} \cdot q_1 \right. \\
& - Kr_BA \cdot tr \cdot q_1^2 \\
& - Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 \\
& \left. - Ke_BA \cdot q_1^2 \right] \\
& + p_2 \cdot \left[KtrNAO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) \right. \\
& + KtrNO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_5 / (KsNO + q_5) \\
& + Kr_BA \cdot tr \cdot q_1 \cdot q_2 \\
& \left. - \mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt} \cdot q_2 \right] \\
& + p_3 \cdot \left[Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 \right. \\
& \left. - KaD \cdot tmD \cdot q_3 \right] \\
& + p_4 \cdot \left[Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 \cdot (q_2 - q_4) / q_3 \right] \\
& + p_5 \cdot \left[KaD \cdot tmD \cdot q_3 \cdot q_4 \right. \\
& + Ke_BA \cdot q_1^2 \cdot q_2 \\
& - KamiNO \cdot tmi \cdot q_5 \\
& \left. - KtrNO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_5 / (KsNO + q_5) \cdot q_1 \right] \\
& + p_6 \cdot \left[KamiNO \cdot tmi \cdot q_5 \right. \\
& \left. - KtrNAO \cdot (1 - q_2/N_BA) \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) \cdot q_1 \right]
\end{aligned}$$

7.4. Kozustände

Die Randbedingungen der Kozustand-DGL berechnen sich mit der:

$$\text{Transversalitätsbedingung: } p(t_{\text{Ende}}) = \frac{\delta W_{\text{Ende}} \cdot [q(t_{\text{Ende}}) - q_{\text{soll}}(t_{\text{Ende}})]^2}{\delta q(t_{\text{Ende}})}$$

Damit ergibt sich:

$$p_1(t_{\text{Ende}}) = W_{\text{Ende}} \cdot 2 \cdot [q_1(t_{\text{Ende}}) - q_{1_{\text{soll}}}(t_{\text{Ende}})]$$

$$p_3(t_{\text{Ende}}) = W_{\text{Ende}} \cdot 2 \cdot [q_3(t_{\text{Ende}}) - q_{3_{\text{soll}}}(t_{\text{Ende}})]$$

Alle anderen Randbedingungen der Kozustand-DGL sind 0.

Die Kozustands-DGL sind definiert als

$$\text{Kozustands - DGL: } \dot{p}(t) = - \frac{\delta H}{\delta q}$$

Damit ergeben sich die einzelnen Kozustände:

$$\begin{aligned}
 \dot{p}_1 = & -W_{q_1} \cdot q_1 \\
 & - p_1 \cdot [\mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt} \\
 & - 2 \cdot Kr_BA \cdot tr \cdot q_1 \\
 & - 2 \cdot Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1 \\
 & - 2 \cdot Ke_BA \cdot q_1] \\
 & - p_2 \cdot [Kr_BA \cdot tr \cdot q_2] \\
 & - p_3 \cdot [2 \cdot Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1] \\
 & - p_4 \cdot [2 \cdot Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1 \cdot (q_2 - q_4) / q_3] \\
 & - p_5 \cdot [2 \cdot Ke_BA \cdot q_1 \cdot q_2 \\
 & - KtrNO \cdot (1 - q_2 / N_BA) \cdot q_5 / (KsNO + q_5)] \\
 & - p_6 \cdot [-KtrNAO \cdot (1 - q_2 / N_BA) \cdot q_6 / (KsNAO + q_6)] \\
 \dot{p}_2 = & - p_2 \cdot [-KtrNAO / N_BA \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) \\
 & - KtrNO / N_BA \cdot q_5 / (KsNO + q_5) \\
 & + Kr_BA \cdot tr \cdot q_1 \\
 & - \mu_{\max} \cdot tp \cdot \text{minfkt}] \\
 & - p_4 \cdot [Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 / q_3] \\
 & - p_5 \cdot [Ke_BA \cdot q_1^2 \\
 & + KtrNO / N_BA \cdot q_5 / (KsNO + q_5) \cdot q_1] \\
 & - p_6 \cdot [KtrNAO / N_BA \cdot q_6 / (KsNAO + q_6) \cdot q_1]
 \end{aligned}$$

Wenn $q_2 < N_{\text{krit}}$ und $n_{\text{Ba}} < i_{\text{Ba}}$ ist, so ist minfkt keine Konstante mehr, sondern hängt von q_2 ab. Damit erhöht sich \dot{p}_2 in diesem Fall um den folgenden Wert:

$$\begin{aligned}
 \dot{p}_2 + & = Ksns / (q_2 - NB_{\text{Amin}} + Ksns)^2 \cdot \\
 & \left\{ - p_1 \cdot [\mu_{\max} \cdot tp \cdot q_1 \right. \\
 & \quad + Km_BA \cdot tr \cdot q_1^2] \\
 & \quad + p_2 \cdot [\mu_{\max} \cdot tp \cdot q_2] \\
 & \quad + p_3 \cdot [Km_BA \cdot tr \cdot q_1^2] \\
 & \quad \left. + p_4 \cdot [Km_BA \cdot tr \cdot q_1^2 \cdot (q_2 - q_4) / q_3] \right\} \\
 \dot{p}_3 = & - p_3 \cdot [-KaD \cdot tmD] \\
 & - p_4 \cdot [-Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 \cdot (q_2 - q_4) / q_3^2] \\
 & - p_5 \cdot [KaD \cdot tmD \cdot q_4] \\
 \dot{p}_4 = & - p_4 \cdot [-Km_BA \cdot tr \cdot (1 - \text{minfkt}) \cdot q_1^2 / q_3] \\
 & - p_5 \cdot [KaD \cdot tmD \cdot q_3]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_5 &= -p_2 \cdot \left[+K_{trNO} \cdot (1 - q_2/N_{BA}) \cdot K_{sNO} / (K_{sNO} + q_5)^2 \right] \\ &\quad - p_5 \cdot \left[-K_{amiNO} \cdot t_{mi} \right. \\ &\quad \left. - K_{trNO} \cdot (1 - q_2/N_{BA}) \cdot K_{sNO} / (K_{sNO} + q_5)^2 \cdot q_1 \right] \\ &\quad - p_6 \cdot \left[K_{amiNO} \cdot t_{mi} \right] \\ \dot{p}_6 &= -p_2 \cdot \left[K_{trNAO} \cdot (1 - q_2/N_{BA}) \cdot K_{sNAO} / (K_{sNAO} + q_6)^2 \right] \\ &\quad - p_6 \cdot \left[-K_{trNAO} \cdot (1 - q_2/N_{BA}) \cdot K_{sNAO} / (K_{sNAO} + q_6)^2 \cdot q_1 \right] \end{aligned}$$

7.5. Gradient

Der Gradient entspricht der Minimierungsbedingung und berechnet sich aus der Hamiltonfunktion:

$$\text{Minimierungsbedingung:} \quad g(t) = \frac{\delta H}{\delta u} = W_u \cdot u(t) + p_3(t)$$

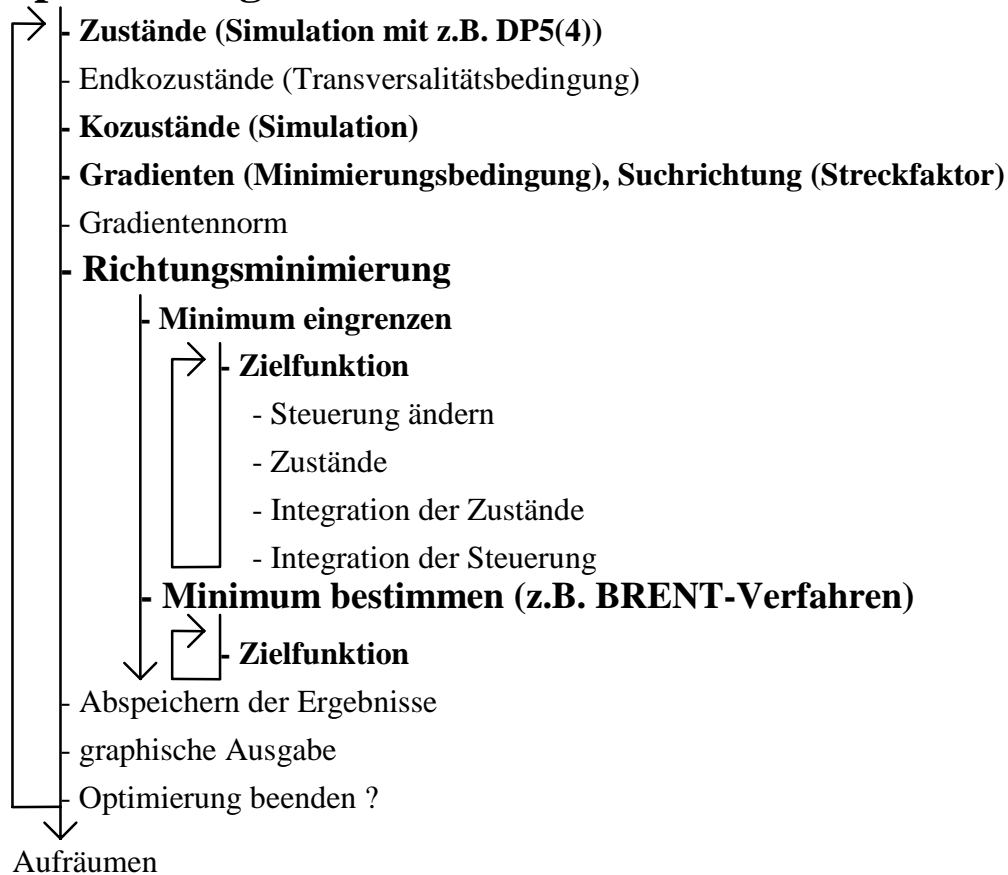
7.6. Ablauf der Optimierungsrechnung

Die oben beschriebenen Gleichungen und Algorithmen wurden in einem Programm in C implementiert. An dieser Stelle soll der grundlegende Aufbau dieses Programms beschrieben werden.

Am Beginn des Programms steht die Initialisierung der Parameter. Dies reicht von der Wahl des Simulationsverfahrens, des Optimierungsverfahrens, des Optimierungshorizontes, der Wichtungparameter bis zur Wahl der Genauigkeit von Simulation und Richtungsminimierung sowie der Namen der Dateien, in denen die Zwischenergebnisse und die Ergebnisse der Rechnung abgespeichert werden. (Alle Ergebnisse der Berechnungen werden in diesem Programm in Dateien gespeichert. Wenn diese Dateien auf einer Ramdisk abgelegt werden, gibt es nur unwesentliche Geschwindigkeitseinbußen im Vergleich zur Speicherung in dynamischen Arrays. Durch die Speicherung in Dateien entfällt die limitierende Wirkung des unter DOS verfügbaren Hauptspeichers, es können fast beliebig viele Daten gespeichert werden.)

Danach beginnt die Optimierung. Den groben Ablauf zeigt folgendes Schema:

Initialisierung

Optimierung

Als erstes werden die Zustandsdifferentialgleichungen über den Optimierungszeitraum simuliert. Die Ergebnisse werden in einer Datei abgelegt. Aus den Endzuständen lassen sich mit der Transversalitätsbedingung die Endkzustände berechnen. Durch Rückwärtssimulation erhält man daraus die Kozustände, die in einer Datei von derselben Struktur wie die Zustände gespeichert werden. Die Berechnung der Kozustände erfolgt zu denselben Zeitpunkten wie die der Zustände, da die Zustandswerte in den Gleichungen der Kozustände verwendet werden. (Die Überprüfung der lokalen Fehler der Kozustandssimulation ergab keine Instabilitäten.)

Aus den Kozuständen und der aktuellen Steuerung lassen sich die Gradienten berechnen. Ab dem 2. Optimierungsschritt kann außerdem der Streckfaktor der konjugierten Gradientenverfahren ermittelt werden und daraus die Suchrichtung bestimmt werden. Auch diese Daten werden in einer Datei von derselben Struktur wie bei den Zuständen gespeichert. Zu Kontrollzwecken wird an dieser Stelle außerdem die Gradientennorm berechnet.

Nun folgt der rechenintensive Teil der Optimierung. In Suchrichtung wird nach dem Minimum der Zielfunktion gesucht. Zuerst wird dazu das Minimum der Zielfunktion einge-

grenzt. Für jede Berechnung der Zielfunktion muß dabei die alte Steuerung gesichert werden und mit der zu testenden Schrittweite in Suchrichtung eine neue Steuerung ermittelt werden. Danach erfolgt mit dieser Steuerung die Simulation der Zustandsgleichungen. Eine Integration der Zustände und der Steuerung sowie die Bewertung der erreichten Endzustände ergibt die Zielfunktion. Am Ende wird die alte Steuerung wieder zurückgeholt. Eine weitere Routine sucht jetzt das Minimum mit einer parametrisierten Genauigkeit - und jedes Mal muß die Zielfunktion mit Steuerungsänderung, Zustandssimulation sowie Zustands- und Steuerungsintegration berechnet werden.

Mit der gefundenen Schrittweite (bestes Alpha) wird die Steuerung des Systems geändert und als Grundlage für den nächsten Optimierungsschritt benutzt. Damit wäre ein Schritt der Optimierung fast geschafft.

Für die Auswertung werden alle notwendigen Ergebnisse in einer Datei auf Festplatte abgelegt (Zustände, Kozustände, Gradienten und Suchrichtung, Zielfunktion und bestes Alpha, Gradientennorm und die berechnete Steuerung). Mit diesen Werten kann nach Abschluß der Optimierung eine exakte Auswertung erfolgen.

Zur Kontrolle des Verlaufs der Optimierung zur Laufzeit des Programms wurde die Möglichkeit der graphischen Ausgabe der einzelnen zeitabhängigen Größen (Zustände, Steuerung) implementiert. Damit ist eine anschauliche Bewertung jedes einzelnen Schrittes möglich.

Das Programm wurde so weit als möglich modularisiert. Dadurch konnte eine gute Übersichtlichkeit erreicht werden. Erweiterungen lassen sich leicht einbauen. Der Quelltext ist vollständig dokumentiert. Dies betrifft einmal die Schnittstellen zu anderen Funktionen, aber auch den algorithmischen Ablauf. Durch die extensive Verwendung von Makros lassen sich Veränderungen an zentraler Stelle vornehmen. Mit all diesen Maßnahmen ist eine leichte Weiterverwendung der implementierten Routinen gegeben.

8. Ergebnisse der Optimierung

8.1. Richtungsminimierung und Streckfaktorbestimmung

Ein Test des erstellten Programms fand mit dem Modell des Doppelintegrators statt. Dadurch konnten mit geringem Aufwand die modellunabhängigen Programmteile untersucht werden.

Zu Beginn wurden die beiden Verfahren zur Richtungsminimierung (Goldener Schnitt und Parabolische Interpolation nach BRENT) verglichen. Dabei zeigte sich in Übereinstimmung zu [Pre], daß das Verfahren des Goldenen Schnittes etwa 2-3 mal so viele Schritte benötigt, wie das Verfahren nach BRENT. Und da das Verfahren nach BRENT selbst im ungünstigsten Fall immer noch so gut wie das Verfahren des Goldenen Schnittes arbeitet, wurde in den weiteren Berechnungen immer das Verfahren nach BRENT verwendet.

Außerdem wurden die 4 Verfahren zur Bestimmung des Streckfaktors verglichen.

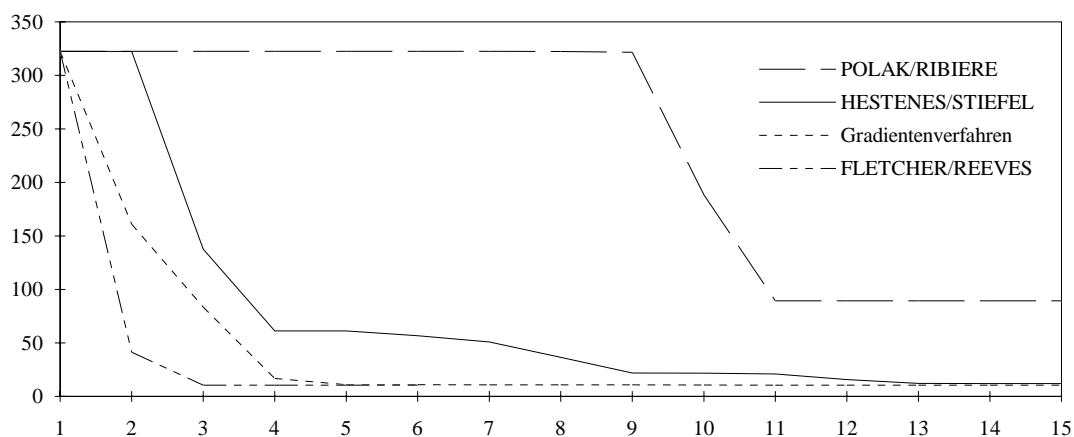


Abb 12: Vergleich der Verfahren zur Streckfaktorbestimmung

In Abb. 12 ist zu sehen, wie sich jedes Verfahren bei einer konkreten Optimierung am Doppelintegrator verhielt. Aus der Darstellung des nach jedem Optimierungsschritt erreichten Zielfunktionswert ist zu entnehmen, wie schnell sich jedes Verfahren an das Optimum heranarbeitet.

Das konjugierte Gradientenverfahren nach FLETCHER/REEVES braucht die wenigsten Schritte, um dem Optimum sehr nahe zu kommen. Das Gradientenverfahren benötigt einige Schritte mehr, schafft es aber auch sehr schnell. Bei den konjugierten Gradientenverfahren nach POLAK/RIBIERE und HESTENES/STIEFEL dauert die Optimierung allerdings we-

sentlich länger und selbst nach einem Vielfachen der Schritte wird kein so gutes Ergebnis wie bei den anderen beiden Verfahren erreicht.

Dieses Verhalten der einzelnen Verfahren zeigte sich bei den Tests am Doppelintegrator immer wieder. Bei der weiteren Arbeit wurde deshalb meist mit dem konjugierten Gradientenverfahren nach FLETCHER/REEVES gearbeitet.

8.2. Steuerung durch Detritusentnahme

Für jede Optimierungsrechnung ist nach der Entscheidung für die Verfahren zur Simulation, Richtungsminimierung und Streckfaktorbestimmung, die noch modellunabhängig fallen können, die Wahl der Wichtungparameter von großer Bedeutung. Damit wird nicht nur vorgegeben, wie stark die einzelnen Größen (Zustand, Endzustand und Steuerung) in das Zielfunktional eingehen. Außerdem kann damit verhindert werden, daß durch eine zu starke Steuerung das Modell in einem Maße beeinflußt wird, daß es nicht mehr stabil ist. Dann verhält es sich zwar mathematisch immer noch richtig, allerdings besteht kein Zusammenhang mehr zu dem System, für das das Modell erstellt wurde.

Bei den durchgeführten Optimierungsrechnungen wurde also weniger auf ein besonders kleines Zielfunktional geachtet, sondern mehr welchen Verlauf eine Steuerung des Modells über den Optimierungshorizont ergibt. Dies trägt in wesentlich größerem Maße zum Verständnis des Systems bei.

Bei den ersten Rechnungen zeigte sich sehr schnell, daß eine Optimierung über einen Zeitraum von 1 Jahr keinen allzu großen Sinn macht. Eine Beeinflussung der Blaualgen-Biomasse findet über den Umweg des Stickstoffentzugs durch die Detritusentnahme statt, eine Wirkung also erst zu späteren Zeiten. Deshalb wurde mit längeren Zeiten gearbeitet. Im folgenden sind die Ergebnisse einer Optimierung über 5 Jahre gezeigt. (Das erstellte Programm erlaubt die Optimierung über nahezu beliebige Zeiträume. Durch die Speicherung der Zwischenergebnisse in Dateien gibt es kaum Beschränkungen des Speicherplatzes. Allerdings kann eine Optimierung über mehrere Jahre recht lange dauern.)

In dieser Rechnung wurden folgende Parameter verwendet: Wichtung Steuerung: 100; Wichtung Zustand: 0,1; Wichtung Endzustand: 0,01; Minimalwert Detritus: 5 (ein Absinken des Detritus unter diesen Wert wird verhindert, allerdings sollte durch die Wahl der Wichtung dieser Wert nur selten berührt werden); Maximalwert Blaualgen-Biomasse: 15 (nur Ergebnisse oberhalb dieses Wertes werden in das Zielfunktional einbezogen).

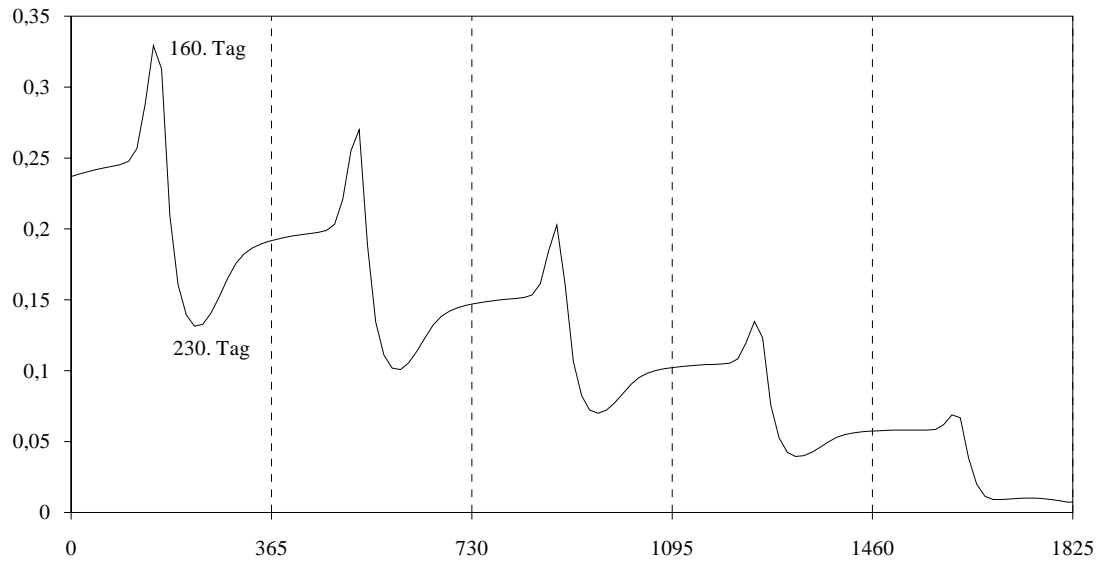


Abb 13: Verlauf der Steuerung bei Detritusentnahme (Entnahme je Tag)

In Abb. 13 ist der Verlauf der erhaltenen Steuerung zu sehen. Es ergab sich ein charakteristischer Verlauf, der sich auch in den anderen Optimierungsrechnungen zeigte, allerdings schwankten die konkreten Werte in Abhängigkeit der gewählten Wichtungen.

Deutlich ist die Spitze der Detritusentnahme um den 160. Tag jeden Jahres sowie ein Minimum um den 230. Tag zu erkennen. Im Lauf der Jahre wird der absolute Wert der Steuerung immer kleiner, allerdings bleibt der Verlauf der Steuerung derselbe.

Wie wirkt sich nun diese Steuerung auf das Modell aus?

Abb. 14 zeigt den aus der Steuerung resultierenden Verlauf der Blaualgen-Biomasse über denselben Zeitraum. Damit konnte gezeigt werden, daß eine Beeinflußung der Blaualgen-Biomasse über den Entzug von Detritus machbar ist. Das typische Verhalten der Blaualgen-Biomasse, wie von der Simulation des Modells her bekannt, ist auch weiterhin zu erkennen. Allerdings werden von Jahr zu Jahr die Maxima der Blaualgen-Biomasse immer mehr begrenzt. Die Ursachen für diese Begrenzung lassen sich in den Abbildungen der anderen Zustandsgrößen genauer untersuchen. Dabei wird das Verhalten dieser Größen mit dem unbeeinflußten Fall verglichen.

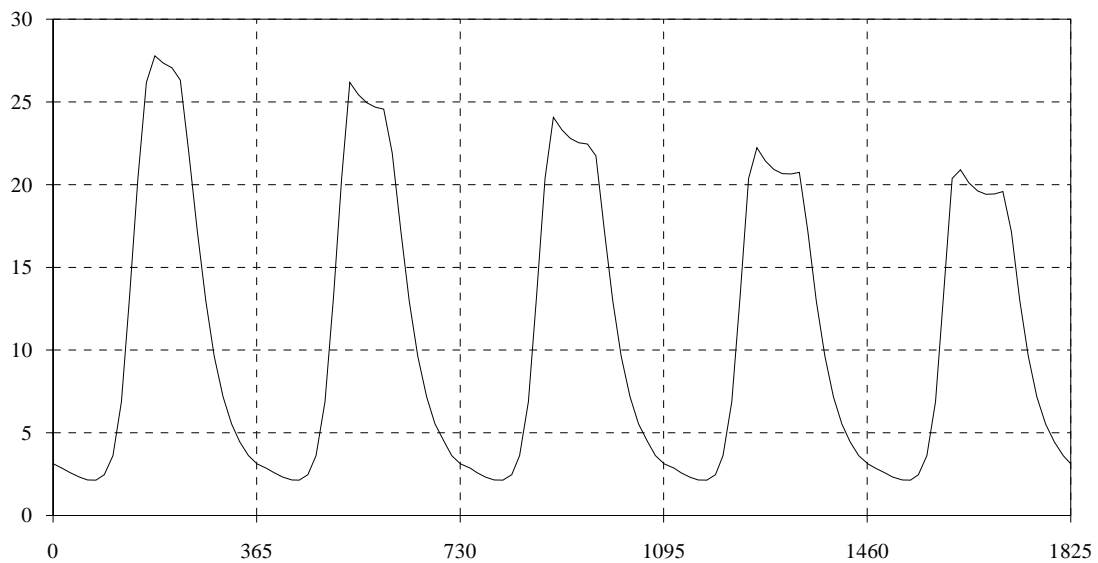


Abb 14: Blaualgen-Biomasse bei Steuerung durch Detritusentnahme

Auf den ersten Blick scheint der Stickstoffgehalt der Blaualgen in Abb. 15 durch die Steuerung nicht beeinflußt zu werden. Bei genauerem Hinsehen ist aber zu erkennen, daß die Bereiche, in denen der Stickstoffgehalt stark abfällt, breiter werden. Zur Verdeutlichung ist für das 4. Jahr der Verlauf des Stickstoffgehaltes im unbeeinflußten Fall eingezeichnet. Wenn der Stickstoffgehalt der Blaualgen stark absinkt (unter N_{krit}), so wirkt dies über die Minimumfunktion auf das Blaualgen-Wachstum.

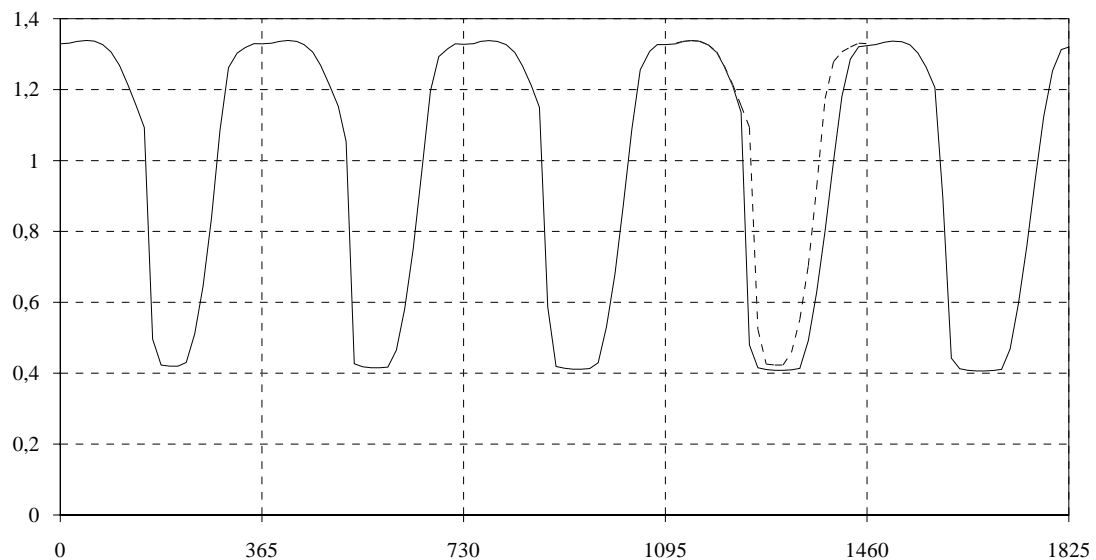


Abb 15: Blaualgen-Stickstoffgehalt bei Steuerung durch Detritusentnahme

Die Entnahme von Detritus vermindert den Detritus im System. Im Laufe der Jahre wird der Spitzenwert des Detritus verkleinert. Allerdings bleibt auch hier das typische Verhalten der Zustandsgröße erhalten, wie Abb. 16 zeigt.

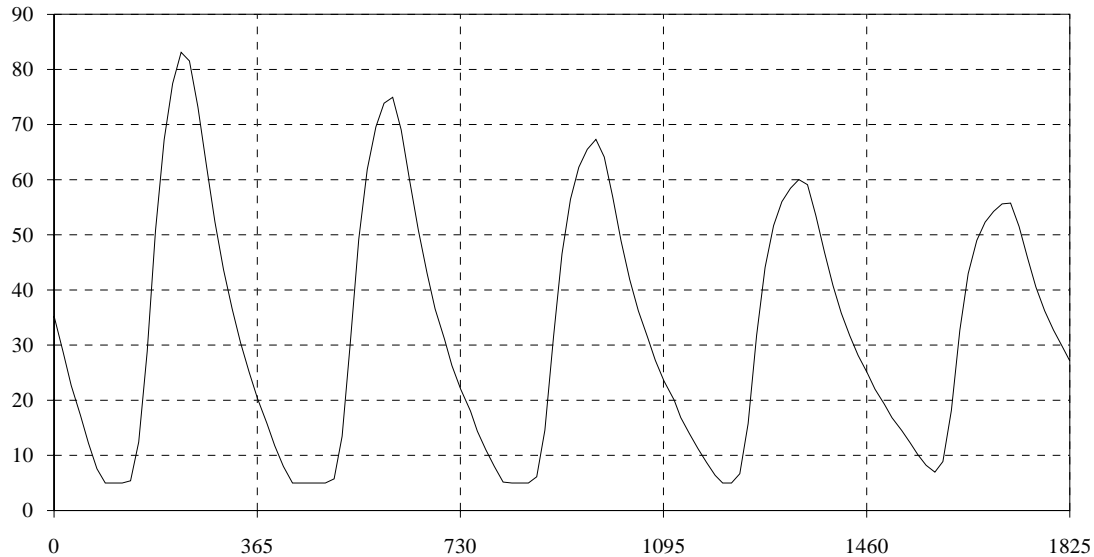


Abb 16: Detritus bei Steuerung durch Detritusentnahme

In den ersten 3 Jahren ist zu sehen, daß der Detritus im Minimum an die festgelegte Begrenzung (Minimalwert) gefahren wurde. Allerdings erfolgt dies nur während weniger Tage und hat nur einen geringen Einfluß. Durch eine höhere Wichtung der Steuerung könnte dies verhindert werden, dann ist aber der Einfluß der resultierenden Steuerung auf das System noch geringer.

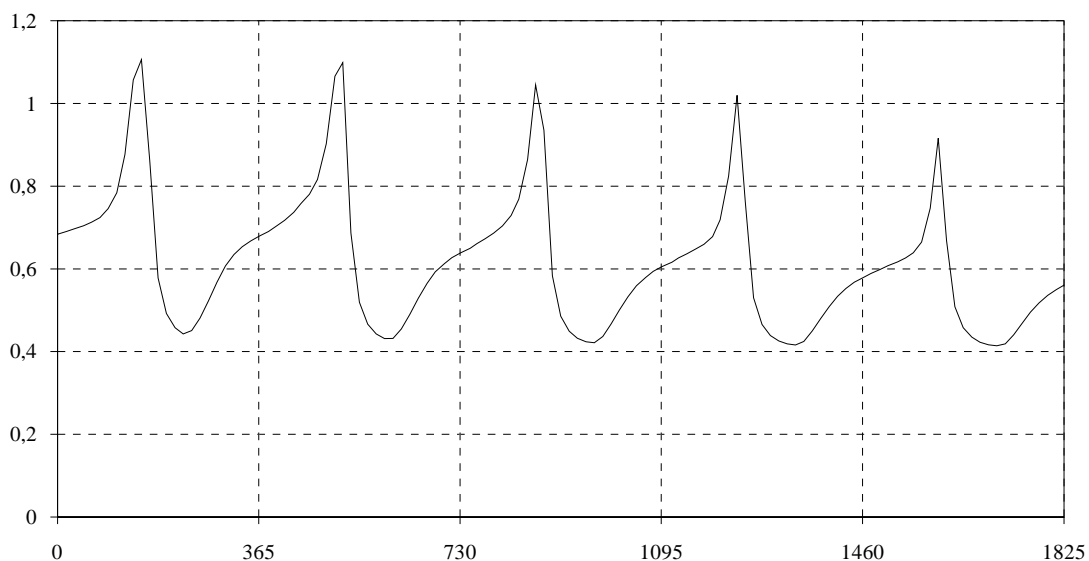


Abb 17: Stickstoffgehalt des Detritus bei Steuerung durch Detritusentnahme

Den Stickstoffgehalt des Detritus, dargestellt in Abb. 17, beeinflusst die Steuerung nur in geringem Maße. Aber auch hier ist eine Verringerung der Spitzenwerte zu erkennen.

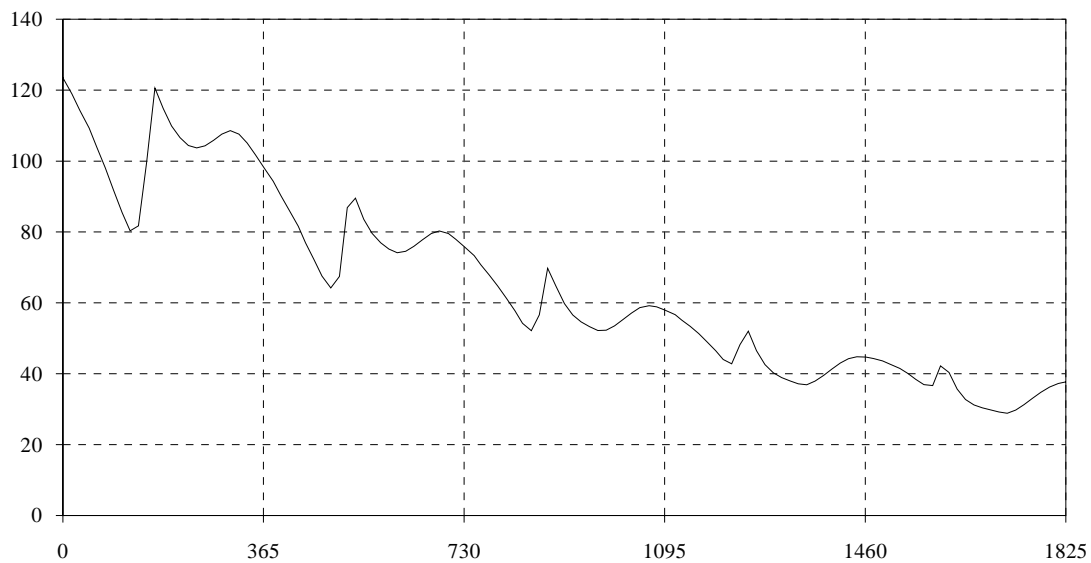


Abb 18: Organischer Stickstoff bei Steuerung durch Detritusentnahme

Am stärksten wirkt sich die Steuerung auf die Zustandsgrößen von organischem und anorganischem Stickstoff aus. Beide Größen gehen stark zurück. Der organische Stickstoff, Abb. 18, verringert sich im Verlauf der 5 Jahre auf ein Drittel seines ursprünglichen Wertes.

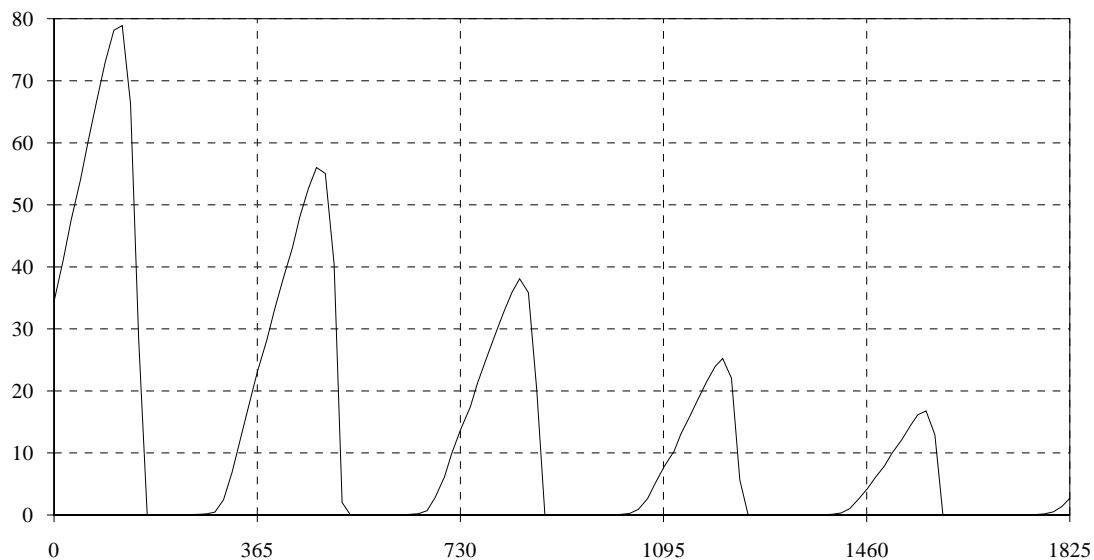


Abb 19: Anorganischer Stickstoff bei Steuerung durch Detritusentnahme

Beim anorganischen Stickstoff in Abb. 19 ist diese Verringerung noch ausgeprägter. Der Spitzenwert erreicht im 5. Jahr nur noch ein Fünftel des Wertes im 1. Jahr. Außerdem ist der Zeitraum, in dem jeder anfallende anorganische Stickstoff sofort wieder verbraucht wird, mehr als doppelt so lang.

Die Ergebnisse der Optimierung zeigen, daß eine Steuerung durch Detritusentnahme zuerst auf die Größen von organischem und anorganischem Stickstoff wirkt. Erst über den Umweg des fehlenden oder sich verringernden Stickstoffs im System wird die Blaualgen-Biomasse beeinflusst. Nur wenn der Stickstoff aus dem System herausgenommen wird, kann das Blaualgen-Wachstum begrenzt werden.

Mit diesem Wissen wäre jetzt zu fragen, wie sich der in Abb. 13 erhaltene Verlauf der Steuerung bei Detritusentnahme anschaulich erklären läßt. Ziel ist, Stickstoff auf möglichst effektivem Weg durch Detritusentnahme aus dem System zu entfernen. Wann kann dies am günstigsten geschehen? Wenn der Stickstoffgehalt des Detritus hoch ist. Damit müßte die Steuerung einen ähnlichen Verlauf wie der Stickstoffgehalt des Detritus haben. Abb. 20 zeigt eine vergleichende Gegenüberstellung der berechneten Steuerung und des Stickstoffgehaltes des Detritus.

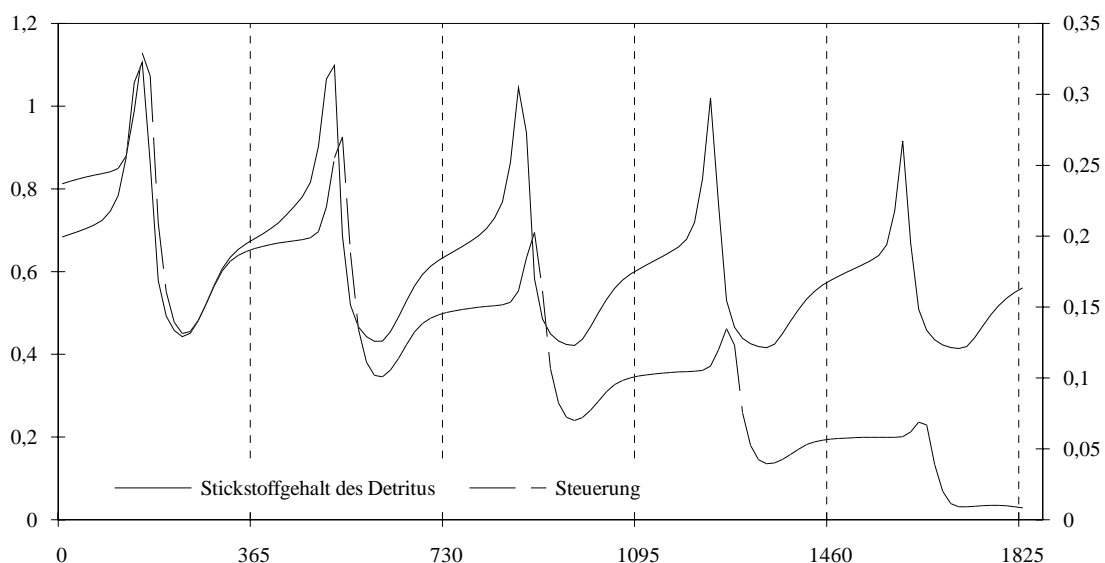


Abb 20: Gegenüberstellung von Steuerung und Stickstoffgehalt des Detritus

Vor allem im 1. Jahr ist der Zusammenhang zwischen Steuerung und Stickstoffgehalt des Detritus gut zu erkennen. Die Steuerung folgt dem Stickstoffgehalt des Detritus ohne Verzögerung und mit demselben Kurvenverlauf. In den weiteren Jahren wirken andere Effekte verstärkt auf die Steuerung (weniger Stickstoff im System), aber selbst dann verhält sich die Steuerung noch ähnlich dem Stickstoffgehalt des Detritus.

9. Erweiterung des Blaualgen-Modells

Mit dem Fortschreiten der Arbeit wurde nach Möglichkeiten gesucht, daß Modell zu erweitern. Damit sollte eine bessere strukturelle Nachbildung des realen Systems durch das Modells erreicht werden. Bei einem Besuch des Fachbereiches Biologie der Universität Rostock bestand die Möglichkeit des Kennenlernens des Gesamtmodells (24 DGL). In Gesprächen wurde nach einer sinnvollen strukturellen Erweiterung des Minimalmodells gesucht und die folgende Struktur erarbeitet.

9.1. Struktur des erweiterten Modells

Ein wichtiger Aspekt des realen Systems ist seine Unterteilung in 2 Schichten: Pelagial (Freiwasser) und Benthos ("Bodenschlamm"). Zwischen diesen beiden Schichten findet ein Austausch durch Aussinken und Aufwirbeln des Detritus sowie mittels Durchmischung von Interstitial- und pelagischem Wasser statt. Damit kann die erweiterte Struktur des Blaualgen-Modells wie folgt dargestellt werden:

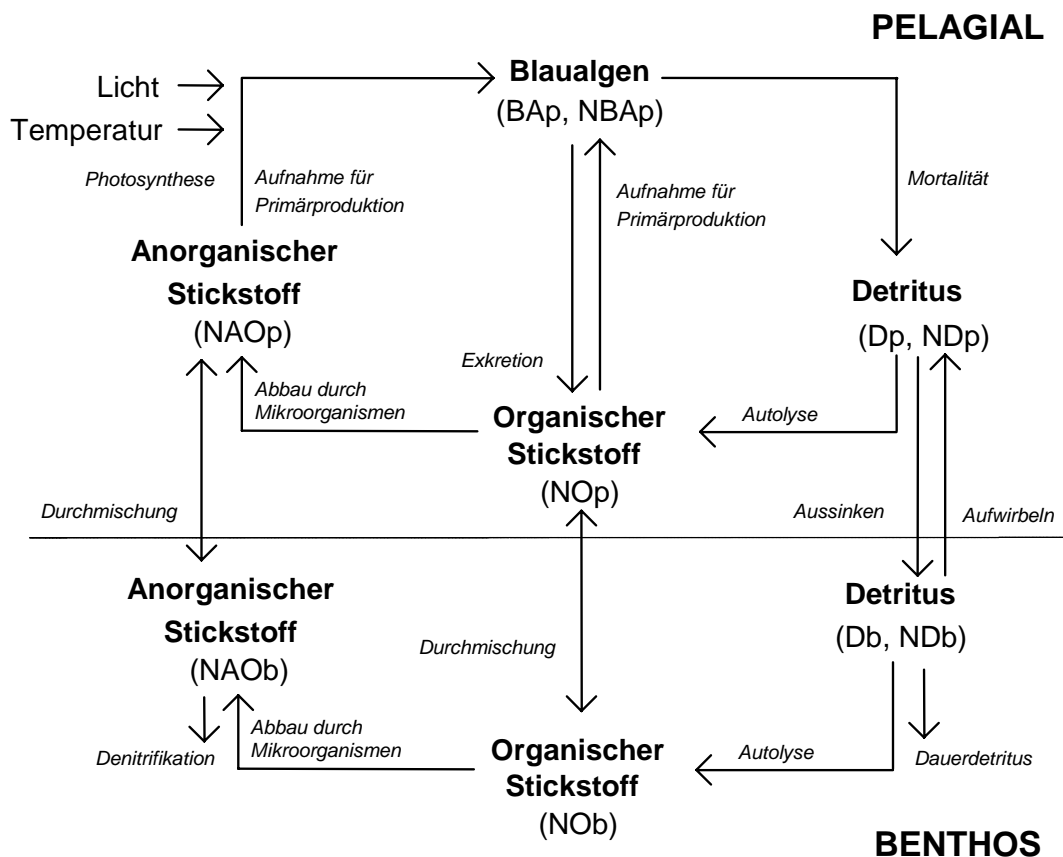


Abb 21: Struktur des erweiterten Blaualgen-Modells

9.2. Zustandsgleichungen des erweiterten Modells

An dieser Stelle sollen nur die Änderungen der Zustandsgleichungen gegenüber dem Minimalmodell genannt werden.

Die DGL für Blaualgen-Biomasse und Stickstoffgehalt der Blaualgen bleiben wie gehabt. Durch die Prozesse des Aufwirbelns und Aussinkens ändert sich daran nichts.

9.2.1. Detritus im Pelagial

Der Detritus im Pelagial wird durch das Aussinken von Detritus verringert. Durch das Aufwirbeln des benthischen Detritus wird er erhöht. Mit TPEL (Tiefe des Pelagial) erfolgt die Umrechnung vom Detritus im Pelagial, der pro Kubikmeter angegeben wird auf Detritus im Benthos (pro Quadratmeter).

$$\begin{aligned} \dot{q}_3 = D_p = & +\text{Mortalität Blaualgen} \\ & - \text{Autolyse Detritus}_{\text{Pelagial}} \\ & - \text{KASD} \cdot q_3 / \text{TPEL} \quad (\text{Aussinken Detritus}_{\text{Pelagial}}) \\ & + \text{KAWD} \cdot q_7 / \text{TPEL} \quad (\text{Aufwirbeln Detritus}_{\text{Benthos}}) \end{aligned}$$

Der Stickstoffgehalt des Detritus im Pelagial verändert sich zusätzlich durch die Differenz des Stickstoffgehaltes im Pelagial und Benthos.

$$\begin{aligned} \dot{q}_4 = \text{ND}_p = & +\text{Mortalität Blaualgen} \\ & + \text{KAWD} \cdot q_7 / \text{TPEL} \cdot (q_8 - q_4) / q_3 \quad (\text{Aufwirbeln Detritus}_{\text{Benthos}}) \end{aligned}$$

9.2.2. Stickstoff im Pelagial

$$\begin{aligned} \dot{q}_5 = \text{NO}_p = & +\text{Autolyse Detritus}_{\text{Pelagial}} \\ & + \text{Exkretionsverluste Blaualgen} \\ & - \text{Aufnahme durch Blaualgen} \\ & - \text{Abbau durch Mikroorganismen} \\ & + \text{KDU} \cdot (q_9 - q_5) \cdot \text{TBEN} / (\text{TBEN} + \text{TPEL}) \quad (\text{Durchmischung}) \end{aligned}$$

Aufgrund der Durchmischung von Interstitial- und pelagischem Wasser findet ein Austausch von organischem und anorganischem Stickstoff statt, der von der Differenz der Größen im Interstitial- und pelagischen Wasser abhängt.

$$\begin{aligned}\dot{q}_6 = \text{NAO}_p = & +\text{Abbau durch Mikroorganismen} \\ & - \text{Aufnahme durch Blaualgen} \\ & + \text{KDU} \cdot (q_{10} - q_6) \cdot \text{TBEN} / (\text{TBEN} + \text{TPEL}) \quad (\text{Durchmischung})\end{aligned}$$

9.2.3. Detritus im Benthos

Der Detritus im Benthos wird durch die Autolyse zu organischem Stickstoff verringert. Das Aussinken des pelagischen Detritus erhöht den benthischen Detritus, das Aufwirbeln verringert ihn. Zusätzlich kann der Prozess der Umsetzung des benthischen Detritus in Dauerdetritus einbezogen werden. Allerdings verschwindet dieser Dauerdetritus aus dem Kreislauf (mathematisch).

$$\begin{aligned}\dot{q}_7 = D_b = & -\text{KaDB} \cdot \text{tmD} \cdot q_7 \quad (\text{Autolyse Detritus}_{\text{Benthos}}) \\ & + \text{KASD} \cdot q_3 \quad (\text{Aussinken Detritus}_{\text{Pelagial}}) \\ & - \text{KAWD} \cdot q_7 \quad (\text{Aufwirbeln Detritus}_{\text{Benthos}}) \\ & - \text{KDD} \cdot q_7 \quad (\text{Umsetzung in Dauerdetritus})\end{aligned}$$

Der Detritus im Benthos ist der Detritus, der praktisch wirklich aus dem System entfernt werden kann (Schlammfallen, Schlammabgerungen). Hier findet sich der Ansatz zur praktischen Kopplung einer Steuerung.

$$\dot{q}_8 = \text{ND}_b = +\text{KAdSD} \cdot q_3 \cdot (q_4 - q_8) / q_7 \quad (\text{Aussinken Detritus}_{\text{Pelagial}})$$

Der Stickstoffgehalt des benthischen Detritus wird nur durch das Aussinken beeinflusst.

9.2.4. Stickstoff im Benthos

Der durch Autolyse abgebaute benthische Detritus erhöht den organischen Stickstoff im Benthos. Eine Verringerung erfolgt durch den Abbau zu anorganischem Stickstoff durch Mikroorganismen sowie die Durchmischung von Interstitial- und pelagischem Wasser.

$$\begin{aligned}\dot{q}_9 = \text{NO}_b = & +\text{KADB} \cdot \text{tmD} \cdot q_7 \cdot q_8 / \text{TBEN} \quad (\text{Autolyse Detritus}_{\text{Benthos}}) \\ & - \text{KamiNO} \cdot \text{tmi} \cdot q_9 \quad (\text{Abbau durch Mikroorganismen}) \\ & - \text{KDU} \cdot (q_9 - q_5) \cdot \text{TPEL} / (\text{TBEN} + \text{TPEL}) \quad (\text{Durchmischung})\end{aligned}$$

Beim anorganischen Stickstoff im Benthos tritt zusätzlich der Effekt der Denitrifikation auf, durch den dieser verringert wird.

$$\begin{aligned} \dot{q}_{10} = \text{NAO}_b = & +\text{KamINO} \cdot \text{tmi} \cdot q_9 \quad (\text{Abbau durch Mikroorganismen}) \\ & - \text{KDEN1} \cdot q_{10}^{\text{KDEN2}} / \text{TBEN} \quad (\text{Denitrifikation}) \\ & - \text{KDU} \cdot (q_{10} - q_6) \cdot \text{TPEL} / (\text{TBEN} + \text{TPEL}) \quad (\text{Durchmischung}) \end{aligned}$$

9.2.5. Zusätzliche Konstanten und Startwerte der Zustandsgrößen

Neben den Konstanten des Minimalmodells werden beim erweiterten Modell einige neue Konstanten verwendet:

- Aussinkrate des Detritus: $\text{KASD} = 0,023 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$
- Aufwirbelungsrate des Detritus: $\text{KAWD} = 0,026 \text{ d}^{-1}$
- Durchmischungsrate Interstitial- und pelagisches Wasser: $\text{KDU} = 0,065 \text{ d}^{-1}$
- Denitrifikationsrate des Anorganischen Stickstoffes im Benthos:
 $\text{KDEN1} = 0,01(\text{mg_at} \cdot \text{m})^{0,25} \cdot \text{d}^{-1}$
 $\text{KDEN2} = 0,75$
- Abbaurrate des Detritus im Benthos: $\text{KADB} = 0,033 \text{ d}^{-1}$
- Tiefe des Pelagials: $\text{TPEL} = 1,8 \text{ m}$
- Tiefe des Benthos: $\text{TBEN} = 0,05 \text{ m}$
- Umsetzungsrate in Dauerdetritus: $\text{KDD} = 0,03 \text{ d}^{-1}$

Startwerte der Zustandsgrößen des erweiterten Modells

- Blaualgen-Biomasse im Pelagial: $3,13 \text{ kcal} \cdot \text{m}^{-3}$
- Blaualgen-Stickstoffgehalt im Pelagial: $1,33 \text{ mg_at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Detritus im Pelagial: $35,3 \text{ kcal} \cdot \text{m}^{-3}$
- Detritus-Stickstoffgehalt im Pelagial: $0,684 \text{ mg_at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Organischer Stickstoff im Pelagial: $123,5 \text{ mg_at} \cdot \text{m}^{-3}$
- Anorganischer Stickstoff im Pelagial: $34,4 \text{ mg_at} \cdot \text{m}^{-3}$
- Detritus im Benthos: $17,5 \text{ kcal} \cdot \text{m}^{-2}$
- Detritus-Stickstoffgehalt im Benthos: $0,61 \text{ mg_at} \cdot \text{kcal}^{-1}$
- Organischer Stickstoff im Benthos: $125 \text{ mg_at} \cdot \text{m}^{-3}$

- Anorganischer Stickstoff im Benthos: $15,0 \text{ mg}_{\text{at}} \cdot \text{m}^{-3}$

Die dargestellten Gleichungen wurden in einem ersten Test mit dem Programmsystem PSI simuliert. Dabei wurden sinnvolle Ergebnisse erhalten. Die Struktur der Gleichungen ist richtig, die Parameter müssen in ihrer Größe aber noch genauer aufeinander abgestimmt werden.

Da in der vorliegenden Arbeit das Hauptaugenmerk auf der Optimierung des Minimalmodells lag, wurden keine weiteren Untersuchungen mit dem erweiterten Modell durchgeführt. In weitergehenden Arbeiten können diese Gleichungen aber als Grundlage genutzt werden.

9.3. Umrechnung des Energiegehaltes des Detritus

Die Ergebnisse für die Steuerung wurden bisher in der Einheit angegeben, die auch bei den Rechnungen verwendet wurde, dem Energiegehalt des Detritus. Daraus kann aber noch nicht direkt eine praktische Größe wie Volumen oder Masse abgelesen werden. Deshalb soll hier die Umrechnung vom Energiegehalt des Detritus in Volumen bzw. Masse angegeben werden.

Ausgangspunkt ist die in den Berechnungen benutzte Größe: der Energiegehalt des benthischen Detritus (q_7) in der Einheit $\text{kcal} \cdot \text{m}^{-2}$. Mit dem spezifischen Energiegehalt des Detritus läßt sich die aschefreie Trockenmasse berechnen:

$$\text{AFTM} = \frac{\text{Energiegehalt pro Fläche}(q_7)}{\text{spezifischer Energiegehalt}(3,8 \text{kcal} \cdot \text{g}_{\text{AFTM}}^{-1})}$$

Über den Zwischenschritt Trockenmasse und mit dem Wassergehalt des Detritus kann die Frischmasse berechnet werden:

$$\text{Trockenmasse(TM)} = 2,5 \cdot \text{AFTM} \cdot \text{Wassergehalt} = 75\%$$

$$\Rightarrow \text{Frischmasse(FM)} = 4,0 \cdot \text{TM} = 10,0 \cdot \text{AFTM}$$

Mit der Dichte des Detritus $\rho_{\text{Benthos}} = 1,1 \text{ t} \cdot \text{m}^{-3}$ erhält man aus der Frischmasse das Volumen. Genau wie die Frischmasse bezieht sich das Volumen bisher noch auf die Fläche. Durch Multiplikation mit der Gesamtfläche des Barther Boddens bekommt man die absoluten Größen der Steuerung:

$$\text{Masse} = \frac{q_7 \cdot 2,5 \cdot 4,0 \cdot \text{Fläche}_{\text{Bodden}}}{3,8 \text{ kcal} \cdot \text{g}^{-1}} \Rightarrow \text{Masse}|_{\text{t}} = q_7|_{\text{kcal} \cdot \text{m}^{-2}} \cdot 2,6 \cdot \text{Fläche}_{\text{Bodden}}|_{\text{km}^2}$$

$$\text{Volumen}|_{\text{m}^3} = \text{Masse}|_{\text{t}} \cdot 0,91$$

Da in dieser Arbeit mit dem Minimalmodell gearbeitet wurde, ist keine Steuerung für den benthischen Detritus, sondern nur für den pelagischen Detritus vorhanden. Mit den oben angeführten Gleichungen ist eine Umrechnung des pelagischen Detritus in Masse und Volumen möglich. Es darf aber nicht übersehen werden, daß der pelagische Detritus z.Zt. nicht direkt aus dem System entfernt werden kann. Trotzdem soll diese Umrechnung hier gezeigt werden, um einen Eindruck von der Größenordnung einer Steuerung zu erhalten.

Der pelagische Detritus wird in $\text{kcal} \cdot \text{m}^{-3}$ berechnet. Deshalb wird statt der Fläche mit dem Volumen des Boddens gerechnet, bzw. mit der durchschnittlichen Wassertiefe (TPEL=1,8m) das Volumen in die Fläche umgerechnet. Damit ergibt sich die Masse zu:

$$\text{Masse}|_{\text{t}} = q_3|_{\text{kcal} \cdot \text{m}^{-3}} \cdot 4,7 \cdot \text{Fläche}|_{\text{Bodden}}|_{\text{km}^2}$$

Bei einer Boddenfläche von 80 km^2 ergibt sich für die Steuerung in Abb. 13:

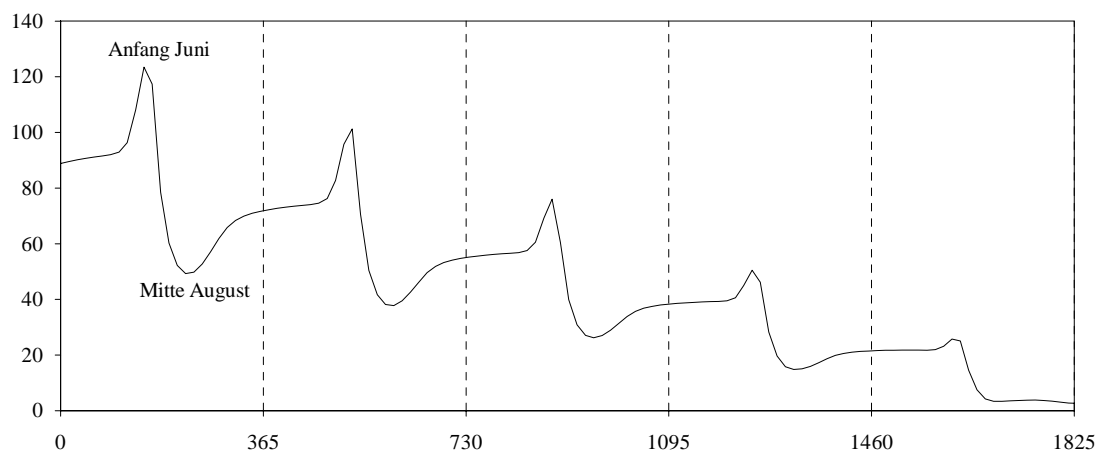


Abb 22: Masse des zu entnehmenden Detritus pro Tag in Tonnen über 5 Jahre

Mit dieser abschließenden Betrachtung wird die Suche nach einer optimalen Steuerung des Blaualgen-Modells durch Detritusentnahme in dieser Arbeit abgeschlossen.

10. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Anwendung der Simulation und Optimierung auf das Modell eines Ökosystem untersucht, das Blaualgenmodell des Barther Boddens.

Zu Beginn stand der Vergleich verschiedener Simulationsverfahren. Dabei wurden Aspekte der Schrittweitensteuerung durch eingebettete Verfahren sowie die Art der Schrittweitanpassung besonders untersucht. Durch Auswahl des günstigsten Verfahren kann die notwendige Schrittzahl der Simulation stark verringert werden. Im Hinblick auf die folgenden Optimierungsrechnungen wurden das RUNGE-KUTTA-FEHLBERG-Verfahren 4.(5.) Ordnung und das DORMAND-PRINCE-Verfahren 5.(4.) Ordnung verwendet.

Die Grundlagen der dynamischen Optimierung werden ausführlich erläutert. Die dargestellte Theorie wird auf das Blaualgenmodell angewendet.

Für die Optimierung wurden das Gradientenverfahren und konjugierte Gradientenverfahren verwendet. Nach einer Erläuterung der zugrundeliegenden Überlegungen folgt der Algorithmus des Optimierungsprogramms.

Das Blaualgenmodell läßt sich durch Entnahme von Detritus steuern. Die berechnete optimale Steuerung hat dasselbe prinzipielle Verhalten wie der Stickstoffgehalt des Detritus. Durch die Umrechnung des Energiegehaltes des Detritus in Masse und Volumen konnte die absolute Größenordnung der Steuerung gezeigt werden.

Alle Algorithmen wurden in einem in C erstellten Programm implementiert. Die Berechnungen sind in vertretbarer Zeit beendet, wobei die konkrete Parametrierung einen großen Einfluß auf die Rechenzeit hat. Der Speicherbedarf stellt durch die Zwischenspeicherung der Ergebnisse in Dateien kein Problem dar. Zur Laufzeit des Programms können die Zwischenergebnisse graphisch dargestellt werden. Eine Erweiterbarkeit des Programms sowie die leichte Anpassung an veränderte Aufgabenstellungen ist durch die Modularisierung des Programms problemlos möglich.

Am Ende wurde eine Erweiterung des Blaualgenmodells auf 10 Zustandsgrößen vorgestellt. Dazu erfolgt eine Unterteilung des Systems in 2 Schichten, Pelagial und Benthos. In ersten Simulationen ergab dieses erweiterte Modell sinnvolle Ergebnisse.

11. Literaturverzeichnis

- [Aff] AFFA, I.: "Simulation und Optimierung mit einem Blaualgen-Wachstums-Modell"
TH ILMENAU, Diplomarbeit, 1991
- [DP89] DORMAND, J. R., PRINCE, P. J.: "Practical Runge-Kutta Processes"
SIAM J. Sci. Stat. Comput. 10, 977-989, 1989
- [EMR] ENGELN-MÜLLGES, G.; REUTTER, F.: "Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit Turbo-Pascal-Programmen"
BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim/Wien/Zürich, 1987
- [Ezz] EZZELL, B.: "Graphics Programming in Turbo C++"
Addison-Wesley, Reading, 1990
- [Feh69] FEHLBERG, E.: "Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle"
Computing 4, 93-106, 1969
Berichtigung in Computing 5, 184, 1970
- [Feh70] FEHLBERG, E.: "Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme"
Computing 6, 61-71, 1970
- [Feh85] FEHLBERG, E.: "Some Old and New Runge-Kutta Formulas with Step-size Control and Their Error Coefficients"
Computing 34, 265-270, 1985
- [HNW] HAIRER, E., NORSETT, S. P., WANNER, G.: "Solving ordinary differential equations I"
Springer, Berlin/Heidelberg, 1987
- [HW] HAIRER, E., WANNER, G.: "Solving ordinary differential equations II"
Springer, Berlin/Heidelberg, 1991

- [Hei] Heinzl, G.: "Beliebig genau (Moderne Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen)"
c't 8, 172-186, 1992
- [Hub] HUBERT, M.-L. u.a.: "Zustrom und Aufwirbelung im Stickstoff-Kreislauf-Modell des Barther Boddens"
Zeitschrift der WPU Rostock Naturwissenschaftliche Reihe 2, 5-8, 1987
- [Kun] KUNTZE, B.: "Anwendung von Optimierungsverfahren auf das mathematische Modell des Barther Bodden zur Ermittlung optimaler Steuerstrategien"
TH Ilmenau, Dissertation, 1990
- [Kos] KOSMOL, P.: "Methoden zur numerischen Behandlung nichtlinearer Gleichungen und Optimierungsaufgaben"
B. G. Teubner, Stuttgart, 1989
- [Phi] PHILIPPOW, E. u.a.: "Taschenbuch der Elektrotechnik
Band 2: Grundlagen der Informationstechnik"
Verlag Technik, Berlin, 1977
- [Pie] PIESENS, R. u.a.: "QUADPACK - a subroutine package for automatic integration"
Springer, Berlin/Heidelberg, 1983
- [Pre] PRESS, W. H. u.a.: "Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing - Second Edition"
Cambridge University Press, 1992
- [PD] PSENICNYI, B. N., DANILIN, J. M.: "Numerische Methoden für Extremalaufgaben"
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1982
- [Put] PUTA, H.: "Optimale Steuerung und Simulation"
TH Ilmenau, Vorlesung, 1990
- [Sch] SCHWARZ, H. R.: "Numerische Mathematik"
B. G. Teubner, Stuttgart, 1988

- [Str] STRATEN, G. van: "Identification, uncertainty assessment and prediction in lake eutrophication"
Proefschrift, Universität Twente, 1986
- [Wie] WIEDEMANN, B.: "Simulation des dynamischen Ökosystemmodells Barther Bodden auf dem Digitalrechner unter besonderer Berücksichtigung des Stickstoffkreislaufes ..."
Universität Rostock, Dissertation, 1985
- [Vie82] VIETINGHOFF, U.: "Die mathematische Modellierung des Ökosystems Barther Bodden als Beitrag zur Ökosystemanalyse der Boddenkette West"
Universität Rostock, Dissertation B, 1982
- [Vie90] VIETINGHOFF, U. u.a.: "Ecosystem Management in Estuaries: Costs and Benefits"
Limnologica 20 (1), 157-163, 1990

12. Abbildungsverzeichnis

	Seite
1. Struktur des Blaualgen-Modells	8
2. Blaualgen-Biomasse über 1 Jahr	18
3. Stickstoffgehalt der Blaualgen über 1 Jahr	18
4. Detritus über 1 Jahr	19
5. Stickstoffgehalt des Detritus über 1 Jahr	20
6. Organischer Stickstoff über 1 Jahr	20
7. Anorganischer Stickstoff über 1 Jahr	21
8. Stickstoffgehalt der Blaualgen und tatsächlich verwendeter Stickstoff	22
9. Komponenten der Minimumfunktion	22
10. Schrittzahl in Abhängigkeit von 2 Schrittweitenänderungsfaktoren	25
11. Schrittzahl in Abhängigkeit von 1 Schrittweitenänderungsfaktor	26
12. Vergleich der Verfahren zur Streckfaktorbestimmung	45
13. Verlauf der Steuerung bei Detritusentnahme (Entnahme je Tag)	47
14. Blaualgen-Biomasse bei Steuerung durch Detritusentnahme	48
15. Blaualgen-Stickstoffgehalt bei Steuerung durch Detritusentnahme	48
16. Detritus bei Steuerung durch Detritusentnahme	49
17. Stickstoffgehalt des Detritus bei Steuerung durch Detritusentnahme	49
18. Organischer Stickstoff bei Steuerung durch Detritusentnahme	50
19. Anorganischer Stickstoff bei Steuerung durch Detritusentnahme	50
20. Gegenüberstellung von Steuerung und Stickstoffgehalt des Detritus	51
21. Struktur des erweiterten Blaualgen-Modells	52
22. Masse des zu entnehmenden Detritus pro Tag in Tonnen über 5 Jahre	57

Erklärung

Hiermit erkläre ich, diese Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angeführten Literaturquellen und Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Ilmenau, den 14. Juni 1993

Thesen zur Diplomarbeit

Simulation und Optimierung eines Blaualgen-Wachstums-Modells

vorgelegt von: Hartmut Pohlheim

1. Das verwendete Blaualgenmodell umfaßt den geschlossenen Stickstoffkreislauf des Barther Bodden mit 6 Zustandsgrößen: Energiegehalt und Stickstoffgehalt von Blaualgen und Detritus sowie organischer und anorganischer Stickstoff.
2. Mit dem mathematische Modell können risikolos viele Varianten der Bewirtschaftung und Steuerung getestet werden. Eine Simulation dauert auf dem Rechner Minuten, ein nicht vertretbares Experiment (mit vielleicht katastrophalen Folgen) würde Jahre dauern.
3. Für die Simulation der Differentialgleichungen wurden verschiedene Verfahren implementiert und verglichen.
4. Die neuen Simulationsverfahren (z.B. von DORMAND und PRINCE) ermöglichen die einfache Kontrolle des lokalen Simulationsfehlers, der für die Steuerung der Schrittweite verwendet wird. Dadurch kann immer mit der höchstmöglichen Schrittweite gerechnet werden. Dies führt zu einer deutlichen Verringerung der notwendigen Schrittzahl.
5. Die Art der Anpassung der Schrittweite hat einen oft unterschätzten Einfluß auf die absolute Anzahl an Simulationsschritten. Durch Einbeziehung des Verhältnisses von lokalem Simulationsfehler zu maximal zulässigem Simulationsfehler kann eine effektive Veränderung erfolgen. Durch weitere Untersuchungen wurde der Nutzen einer zusätzlichen Feinabstimmung gezeigt.
6. Zur Steuerung des Modells wurde die Entnahme von Detritus gewählt.
7. Für die Optimierung wurden das Gradientenverfahren sowie konjugierte Gradientenverfahren programmiert. Der Test der Verfahren fand am Modell des Doppelintegrators statt. Das beste Konvergenzverhalten zeigten das Gradientenverfahren und das konjugierte Gradientenverfahren nach FLETCHER/REEVES.
8. Die Steuerbarkeit des Modells durch Detritusentnahme konnte gezeigt werden.

9. Eine kurzfristige Beeinflussung des Blaualgenmodells (1 Jahr) durch Steuerung ist nicht möglich. Steuerungsstrategien müssen langfristig (> 2 Jahre) angelegt werden. Deshalb wurde die Optimierung über einen Zeitraum von 5 Jahren durchgeführt.
10. Die optimale Steuerung für die Detritusentnahme hat den gleichen prinzipiellen Verlauf wie der Stickstoffgehalt des Detritus.
11. Mit der Umrechnung des Energiegehaltes des Detritus in Masse Detritus konnte die absolute Größe der berechneten Steuerung gezeigt werden.
12. Am Ende der Arbeit wird eine Erweiterung des Blaualgenmodells vorgestellt. Mit der Unterteilung des Modells in 2 Schichten (Pelagial und Benthos) kann eine bessere strukturelle Nachbildung des Systems erreicht werden. Eine erste Simulation des erweiterten Modells brachte sinnvolle Ergebnisse.
13. Das in C erstellte Programm kann leicht an verschiedenste Aufgabenstellungen angepaßt werden. Damit besteht die Möglichkeit, unterschiedliche Aspekte eines Modells zu untersuchen. Außerdem kann das Programm als Grundlage für weitergehende Arbeiten dienen.