

Prof. Dr. Andreas Mielke
Andreas-Hofer-Weg 47
D-69121 Heidelberg
Germany

www.andreas-mielke.de
e-mail info@andreas-mielke.de

Modellierung und Simulation

Andreas Mielke

4. März 2011

Viele unterschiedliche Systeme aus sehr verschiedenen Gebieten können modelliert und simuliert werden. Ebenso vielfältig sind die Möglichkeiten, für ein System unterschiedliche Modelle aufzustellen. Wir beschränken uns auf die mathematische Modellierung. Sie erlaubt eine schnelle Umsetzung in ein Computerprogramm und damit eine schnelle Simulation des Systems. Dabei sind unterschiedliche Punkte zu berücksichtigen, die für eine erfolgreiche Durchführung einer Modellierung wichtig sind. Auf einige dieser Punkte wird hier näher eingegangen. Dabei diskutieren wir trotz der Beschränkung auf mathematische Modelle nicht spezifisch mathematische Probleme, sondern allgemeine Aspekte der Modellbildung und Simulation im Hinblick auf praktische Anwendungen.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbemerkungen	3
2	Planung eines Projekts	4
2.1	Fragestellung	4
2.2	Vorhandene und benötigte Information	4
2.3	Machbarkeitsstudie	5
2.4	Ressourcen, Personal, Kosten	5
2.5	Dokumentation	5
3	Modellbildung	6
3.1	Einführung	6
3.2	Modellierung eines Systems	6
3.3	Dynamik	7
3.4	Stochastische Modellierung	7
4	Simulation	9
4.1	Implementierung	9
4.2	Durchführung der Simulation	10
4.3	Visualisierung	10
4.4	Optimierung	10
5	Analyse und Beurteilung der Ergebnisse	11
6	Beispielanwendung	11
6.1	Das Projekt	11
6.2	Modellierung	12
6.3	Simulation	12
6.4	Ergebnisse	13

1 Vorbemerkungen

Modelle werden in sehr vielen verschiedenen Bereichen verwendet. Je nach den Bedürfnissen, die man hat, kann ein Modell sehr unterschiedlich aussehen. Ein wesentlicher Punkt ist dabei der Abstraktionsgrad. Das Modell abstrahiert in einer bestimmten Weise von der Realität. Wie weit diese Abstraktion geht, hängt unter anderem von den Zielen ab, die man mit dem Modell verbindet. Betrachten wir als Beispiel ein Haus: Ein einfaches Modell für das Haus ist die Grundrißzeichnung eines Architekten. Er hat gelernt, sich mit Hilfe dieser Zeichnung das Haus konkret vorstellen zu können. Ein anderer kann mit der Zeichnung wenig anfangen, er braucht ein kleines, dreidimensionales Modell aus Papier oder Pappe in einem verkleinernden Maßstab, um sich das Haus vorstellen zu können. Ein dritter kann auch damit wenig anfangen, da er sich nicht vorstellen kann, wie in dem Haus das Licht durch die Fenster fällt, wie die Wände tapeziert werden könnten und wo Möbel aufgestellt werden sollen. In diesem Fall kann eine dreidimensionale Computeranimation eines Rundgangs durch das Haus sinnvoll sein.

Dieses einfache Beispiel zeigt, daß sich ein Modell nicht nur nach der zu modellierenden Realität richten muß, sondern es vielmehr auf die Fragestellung ankommt, die man von dem Modell beantwortet bekommen möchte. Das Beispiel zeigt aber noch mehr: Während die Grundrißzeichnung oder das verkleinerte dreidimensionale Modell nur statische Eigenschaften wiedergeben, kann die Computeranimation dynamische Eigenschaften beschreiben. Allerdings sind dabei auch Einflüsse zu berücksichtigen, die von dem Haus selbst unabhängig sind. Interessiert man sich beispielsweise für die Lichtverhältnisse, so spielen neben künstlichen Lichtquellen und der Lage der Fenster eben auch Sonnenstand, Wetter, Tages- oder Jahreszeit, etc. eine Rolle. Um solche Effekte zu berücksichtigen, benötigt man eine mathematische Beschreibung des Modells, die dann in ein Computerprogramm umgesetzt und simuliert wird.

Im Folgenden werden wir hauptsächlich die Modellierung und Simulation von Systemen diskutieren, deren dynamisches Verhalten untersucht werden soll. Das Ziel kann sein, eine Vorhersage zu machen (z.B. Wetter, Devisenkurse) oder einen dynamischen Prozess besser zu verstehen (z.B. Sortierung, Transport, Optimierung). In einigen Fällen kann das Verhalten des Systems deterministisch beschrieben werden. Hat man ausreichende Informationen, z.B. Anfangsbedingungen oder Randbedingungen, zur Verfügung, so kann man in einem deterministischen System das Verhalten genau vorhersagen. In sehr vielen Fällen ist das Verhalten dagegen stochastisch, also bis zu einem gewissen Grad zufällig. Das stochastische Verhalten kann entweder intrinsisch sein (z.B. bei Devisenkursen) oder durch die Einwirkung von äußeren Einflüssen (z.B. in der Mikro- und Nanotechnologie) entstehen. Häufig entsteht stochastisches Verhalten dadurch, daß man keine vollständige Information über das System hat. Das bedeutet aber nicht, daß man keine Vorhersagen für solche Systeme machen kann. In vielen Fällen sind statistische Aussagen über Mittelwerte oder Korrelationen möglich, man kann eventuell das kurzfristige Verhalten des Systems untersuchen, oder man kann das stationäre Verhalten ermitteln.

Gerade bei komplizierteren Systemen wird das Modell entwickelt und anschließend simuliert. Häufig ist die Simulation die einzige Möglichkeit, um präzise Aussagen über das Verhalten zu bekommen. Trotzdem kann man eventuell allgemeine, heuristische Regeln finden, die für das Verhalten gelten. Die Simulation kann die Gültigkeit dieser Regeln überprüfen und Grenzen für die Gültigkeit angeben.

In den folgenden Abschnitten sollen einige Aspekte beschrieben werden, die für die Modellierung und die Simulation eines dynamischen Problems wichtig sind. Dabei geht es weniger um die konkrete mathematische Formulierung eines Modells sowie die Umsetzung in einem Com-

puterprogramm, als vielmehr um generelle, auch betriebswirtschaftliche Aspekte eines solchen Projekts. Da Modelle für sehr unterschiedliche Systeme entworfen werden können, sind allgemeine Aussagen über Modellierung sehr abstrakt. Der Text verlangt vom Leser also hohes Abstraktions- oder Vorstellungsvermögen. Ich werde an einigen Stellen Beispiele zur Illustration verwenden. Beispiele haben aber auch einen Nachteil: Sie legen die Sichtweise auf einen Spezialfall fest und schränken sie damit ein. Viele Aspekte, die an einem (guten) Beispiel deutlich gemacht werden, können auch für ganz andere Systeme eine Rolle spielen.

Es gibt spezielle Klassen von Modellen, für die die in den nächsten Abschnitten diskutierten Punkte nur teilweise gültig sind. Eine spezielle Klasse sind die neuronalen Netze. Ein Text über neuronale Netze <http://www.andreas-mielke.de/nn.html> diskutiert einige wichtige Aspekte der Anwendung neuronaler Netze.

2 Planung eines Projekts

2.1 Fragestellung

Zu Beginn eines Projekts, in dem eine Modellierung eines Systems benutzt werden soll, ist die genaue Fragestellung festzulegen, die das Modell beantworten soll. Man kann zwar für ein gegebenes System eines oder mehrere Modelle entwerfen. Jedes Modell beschreibt das gegebene System aber nur bis zu einem gewissen Grad. Das Modell beschreibt daher gewisse Aspekte des Systems eventuell recht gut, andere dagegen weniger oder garnicht. Erst die Fragestellung legt fest, an welcher Stelle eine stärkere Abstraktion möglich ist oder welche Details berücksichtigt werden müssen.

Die genaue Festlegung der Fragestellung ermöglicht es, das Modell möglichst einfach zu halten. Das macht die anschließende Analyse des Modells einfacher. Das Modell kann leichter in einem Computerprogramm implementiert werden, das Programm wird einfacher und verbraucht dadurch weniger Ressourcen. Dadurch sind die Kosten niedriger.

Im Hinblick auf zukünftige Entwicklungen ist es aber auch wichtig, die Fragestellung und damit die Modellierung nicht so eng zu fassen, daß spätere Erweiterungen nicht oder nur unter hohem zusätzlichen Aufwand realisierbar sind. In sehr vielen Fällen ergeben sich aus den Antworten auf die ursprüngliche Fragestellung neue Fragen. Es ist anstrengenswert, die Modellierung von Beginn an so flexibel zu gestalten, daß Erweiterungen leicht möglich sind.

2.2 Vorhandene und benötigte Information

Bevor ein Modell für ein System entworfen wird, ist zu klären, welche Information man für die Modellierung benötigt und welche Information über das System zur Verfügung steht. Nur wenn die Information, die man benötigt, auch vorhanden ist, ist die Modellierung sinnvoll. Ist die Information nicht vorhanden, so gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eventuell besteht die Möglichkeit, die fehlende Information zu beschaffen, oder man kann geeignete Annahmen machen, die die fehlende Information ersetzen. Eine weitere Möglichkeit ist, die Fragestellung so modifizieren, daß die vorhandene Information ausreicht. Schließlich kann sich auch herausstellen, daß sich für die Fragestellung mit der vorhandenen Information kein Modell entwickeln läßt.

Schon im vorangegangenen Unterabschnitt ist deutlich geworden, daß eine zu komplizierte Modellierung nicht sinnvoll ist. Es macht also wenig Sinn zu versuchen, alle vorhandene Information in das Modell einfließen zu lassen. Vieles, was man über das System weiß, benötigt man für die Beantwortung der gegebenen Fragestellung nicht.

In fast allen Fällen ist aber a priori nicht klar, welche Information genau benötigt wird. In diesen Fällen gibt es unterschiedliche Methoden, relevante von weniger relevanter Information zu unterscheiden. Wir kommen auf diesen Punkt später zurück (siehe Abschnitt 3.2 (Modellierung)). Voraussetzung ist aber in der Regel eine mathematische Formulierung des Modells, in dem die unterschiedlichen Informationen in unterschiedlichen Termen oder Parametern enthalten sind.

2.3 Machbarkeitsstudie

Steht fest, welche Information für die Modellierung nötig ist und daß diese Information vorhanden ist, kann eine Machbarkeitsstudie sinnvoll sein. Im Rahmen einer solchen Studie kann man beispielsweise ein stark vereinfachtes Modell entwerfen, das zeigen soll, ob die Vorgehensweise überhaupt sinnvoll ist. Gerade bei langfristigen und damit teuren Projekten ist eine Machbarkeitsstudie sinnvoll. Die Kosten für eine solche Studie sind deutlich niedriger als die Gesamtkosten. Für den Fall, daß das Projekt nicht in der vorgesehenen Form machbar ist, werden also deutlich Kosten eingespart. Im Fall eines positiven Resultats liefert die Machbarkeitsstudie meist wertvolle Erfahrungen, die für das spätere Projekt von Nutzen sind. Die Kosten der Machbarkeitsstudie werden durch diese Erfahrungen häufig aufgewogen.

Da man in der Regel die in einer Machbarkeitsstudie gewonnenen Erfahrungen später nutzen will, ist es wichtig, an diese Studie die gleichen Ansprüche hinsichtlich 2.5 (Dokumentation) und 4.1 (Implementierung) zu stellen, wie in dem späteren Projekt.

2.4 Ressourcen, Personal, Kosten

Diese Aspekte sind bei der Planung des Projekts ganz wesentlich zu berücksichtigen. Allgemeine Aussagen sind hier kaum möglich. Anforderungen an Ressourcen und Personal können für unterschiedliche Projekte sehr verschieden sein. In der Regel benötigt man für die hier diskutierten dynamischen Modelle mathematisch geschultes Personal, für die Implementierung und die Simulation Personal mit entsprechenden EDV-Kenntnissen. Für die Kosten gilt das gleiche wie für andere Projekte auch. In den allermeisten Fällen überwiegen die Personalkosten die Kosten für Hard- und Software, Kosten für Verbrauchsmaterial haben in der Regel einen Anteil von deutlich unter 5%.

2.5 Dokumentation

Modellentwicklung, die Implementierung des Modells und die Simulation müssen ausreichend dokumentiert werden. Ausreichende Dokumentation heißt dabei in der Regel ausführliche Dokumentation. Es empfiehlt sich, schon während der Planung des Projekts Standards für die Dokumentation festzulegen. So wird eine bestimmte Form der Dokumentation erzwungen. Insbesondere bei lang laufenden Projekten, oder bei Projekten, an denen unterschiedliche Firmen oder Institute beteiligt sind, ist es günstig, die Dokumentation in einem nicht-proprietären Standard-Format abzulegen. XML <http://www.xml.org> bietet sich als Metasprache an.

XML erlaubt, für jeden einzelnen Schritt eine Dokumenttyp-Definition (DTD) festzulegen. XML erlaubt außerdem, die Dokumentation in unterschiedlichen Formaten (gedruckt, als HTML-Dokument, als RTF, rich text format, zum Import und zur Bearbeitung mit gängigen Textprogrammen, etc) zur Verfügung zu stellen.

3 Modellbildung

3.1 Einführung

Entwickelt man ein Modell für ein konkretes System, so muß man für unterschiedliche Aspekte des Systems entscheiden, ob sie für die Fragestellung relevant sind und daher in dem Modell berücksichtigt werden müssen oder nicht. Eine vollständige Modellierung eines Systems, in dem alle Aspekte berücksichtigt werden, ist weder möglich noch sinnvoll. Ziel einer Modellierung ist es ja gerade, von einer Vielzahl von Eigenschaften zu abstrahieren. Andererseits können Störungen des Systems eine wesentliche Rolle spielen. In diesem Abschnitt werden einige Punkte diskutiert, die bei der Modellierung zu beachten sind.

3.2 Modellierung eines Systems

Ein erster, wesentlicher Schritt bei der Modellierung eines Systems besteht darin, die relevanten Eigenschaften des Systems zu finden. Allerdings ist es nicht in jedem Fall von vornherein klar, ob eine Eigenschaft des Systems für die Fragestellung relevant ist oder nicht. In solchen Fällen kann man unterschiedlich vorgehen. In der Regel empfiehlt es sich, Teilaspekte des Systems, für die die fragliche Eigenschaft wichtig sein könnte, in vereinfachten Modellen zu untersuchen. So kann man entscheiden, ob diese Eigenschaft wichtig ist, ohne das gesamte Modell simulieren zu müssen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, viele Eigenschaften zunächst in das Modell aufzunehmen um ihren Einfluß abschätzen zu können. Für eine solche Abschätzung ist es häufig nicht nötig, eine detaillierte Simulation des Modells vorzunehmen. Eigenschaften, die nur keinen oder nur einen kleinen Einfluß haben, kann man anschließend wieder weglassen. In beiden Fällen ist die Voraussetzung für diese Analyse, daß eine mathematische Formulierung des Modells vorliegt. Für jede Eigenschaft des Systems muß daher eine geeignete mathematische Darstellung gefunden werden.

Die mathematische Darstellung einer Eigenschaft richtet sich nach dem System und nach der Fragestellung. Manche Eigenschaften, etwa eine Länge oder Kraft, können durch kontinuierliche Variable dargestellt werden. In der Regel muß man außerdem die Einheit festlegen, in der die Eigenschaft gemessen wird. Andere, speziell qualitative Eigenschaften nehmen nur endlich viele Werte an, eventuell sogar nur zwei. In manchen Fällen kann es zweckmäßig sein, eine eigentlich diskrete Variable durch eine kontinuierliche Variable auszudrücken. Ein typisches Beispiel ist ein Preis. Daß Preise diskrete Variable sind, spielt in vielen Fällen keine Rolle. Andererseits ist es zweckmäßig, manche kontinuierliche Variable in Intervalle zu verteilen und nur noch anzugeben, in welchem Intervall sich die Variable befindet. Ein typisches Beispiel hierfür ist das Alter eines Menschen. Für das Verhalten, etwa eines Kunden, spielt das genaue Alter keine Rolle. Es genügt zu wissen, in welchem Intervall das Alter liegt. Eine kontinuierliche Variable wird so diskretisiert.

Ein nächster Schritt bei der Modellierung besteht darin festzustellen, in welcher Beziehung die einzelnen Variablen zueinander stehen. In einigen Fällen gibt es einfache Gesetzmäßigkeiten, die benutzt werden können. In anderen Fällen sind heuristische Annahmen möglich. Heuristische Annahmen können durch Beobachtungen oder Messungen erhärtet werden. Man muß aber beachten, daß sie oft nur gelten, wenn die Variablen in bestimmten Bereichen liegen. Es muß also im Rahmen des Modells sichergestellt sein, daß die Variable immer in dem Gültigkeitsbereich liegt. Schließlich können Beziehungen zwischen Variablen auch empirisch gewonnen werden. Die Beziehung zwischen zwei Variablen kann dann zum Beispiel durch eine Wertetabelle festgelegt sein. In diesem Fall muß aber sichergestellt sein, daß die Wertetabelle nicht durch andere Faktoren verändert wird.

3.3 Dynamik

Ziel der Modellierung ist es, das dynamische Verhalten eines Systems zu verstehen oder vorherzusagen. Eine wesentliche Frage für die Modellierung ist, ob für das zukünftige, zeitliche Verhalten des Systems sein derzeitiger Zustand allein ausschlaggebend ist, oder ob es auf das Verhalten des Systems in einem längeren Zeitintervall ankommt. Möchte man beispielsweise die Bewegung eines Satelliten modellieren, so genügt die Kenntnis seines momentanen Ortes und seiner Geschwindigkeit um die Bahn zu berechnen. Möchte man dagegen die Dynamik von Devisenkursen modellieren, so ist der derzeitige Kurs nicht ausreichend, sondern die Kursentwicklung in der Vergangenheit wird eine entscheidende Rolle spielen.

Eine zweite Frage ist, ob die Modellierung der Dynamik des Systems kontinuierlich oder diskret vorgenommen wird. In vielen Fällen ist es möglich, das dynamische Verhalten des Systems wie in einem Film in eine Folge von Bildern zu zerlegen. Man betrachtet das System also nur zu bestimmten Zeitpunkten. In manchen Fällen ist dies sogar die natürliche Beschreibung des Systems. In anderen Fällen scheint es dagegen natürlicher, die Zeit als kontinuierliche Variable zu betrachten. Doch auch dann kann man mit gewisser Vorsicht eine diskrete Beschreibung wählen, wenn man den Abstand zwischen zwei Zeitpunkten nur kurz genug wählt. Wir kommen darauf im Abschnitt 4.1 (Implementierung) zurück.

3.4 Stochastische Modellierung

Stochastisches, also zufälliges Verhalten tritt in sehr vielen Fällen auf. Da dieser Aspekt in vielen Fällen nicht beachtet wird, gehe ich hierauf etwas ausführlicher ein.

Es gibt zwei Quellen für stochastisches Verhalten. Stochastisches Verhalten kann durch äußere Störungen des Systems verursacht werden oder es kann in dem System selbst enthalten sein. Beide Fälle kann man sich an Beispielen deutlich machen:

Störungen.

Oft wird das Verhalten eines Systems durch unterschiedliche Störungen beeinflusst. Einige wenige, größere Störungen des Systems lassen sich eventuell explizit berücksichtigen. Das gilt zum Beispiel für den Einfluß anderer Himmelskörper auf die Bewegung eines Satelliten um die Erde. Inwieweit solche Störungen zu berücksichtigen sind, hängt von der Fragestellung ab und von der Genauigkeit, die für die Vorhersage benötigt wird. Oft hat man aber sehr viele, kleine Störungen, die nicht alle explizit berücksichtigt werden können.

Man kann die Summe vieler kleiner Störungen durch einen stochastischen Einfluß berücksichtigen. Ein typisches Beispiel für ein solches System ist die Bewegung eines kleinen Teilchens in einer Flüssigkeit. Das kleine Teilchen wird durch die Flüssigkeitsmoleküle hin- und hergestoßen. Es bewegt sich unregelmäßig hin und her. Diese unregelmäßige Bewegung kann modelliert werden und es ist möglich, bestimmte Eigenschaften der Bewegung zu beschreiben. Die Bewegung wird Brownsche Bewegung genannt. In den meisten Fällen wirken andere Kräfte auf das Teilchen, die eigentlich von Interesse sind und in dem Modell auftreten. Die Wirkung dieser Kräfte wird durch die Stöße der Flüssigkeitsmoleküle gestört. Das gilt zum Beispiel für die Modellierung von Systemen in der Nanotechnologie oder von mikrobiologischen Systemen.

Intrinsische Stochastizität.

In anderen Fällen ist das stochastische Verhalten von dem System selbst vorgegeben. Ein typisches Beispiel ist die Modellierung eines Devisenkurses. Wir gehen von dem Idealfall aus, daß alle Marktteilnehmer die gleichen Informationen haben. Ein Devisenkurs, also ein Preis für eine Währung in einer anderen Währung, entsteht durch ein Gleichgewicht von Angebot und Nachfrage. Der Devisenmarkt funktioniert nur deshalb, weil verschiedene Teilnehmer des Marktes aus diesen Informationen unterschiedliche Schlüsse ziehen und sich daher unterschiedlich verhalten. Gleiches Verhalten würde zu keinem vernünftigen Verhalten des Marktes führen, da alle Teilnehmer entweder verkaufen oder kaufen würden. Erst das unterschiedliche Verhalten der Teilnehmer führt zu einem funktionierenden Markt. Gründe für unterschiedliches Verhalten bei gleicher Information liegen an einer unterschiedlichen Erwartungshaltung der Marktteilnehmer, oder auch an unterschiedlichen Bedürfnissen und Interessen. Gerade bei einem Markt mit vielen Teilnehmern ist es nicht möglich, das Verhalten jedes Teilnehmers deterministisch zu beschreiben. Das stochastische Verhalten des Systems ist also intrinsisch im Modell vorhanden.

Stochastische Größen in einem Modell werden auch als Rauschen bezeichnet. In vielen Fällen ist Rauschen unerwünscht. Betrachtet man zum Beispiel die Signalübertragung in einem Wellenleiter, dann wird man versuchen, Störungen zu unterdrücken, die zu einem Rauschen führen. Modelle, in denen stochastische Größen vorkommen, erlauben trotz der Zufälligkeit, die in dem Modell enthalten ist, eine Vorhersage oder eine Beschreibung des Systems. Man erhält allerdings nur statistische Aussagen, etwa über Mittelwerte oder Wahrscheinlichkeiten. Andererseits treten in einem stochastischen Modell neue Phänomene auf. Stichwörter hierfür sind stochastische Resonanz oder rauschinduzierte Stabilität:

- Stochastische Resonanz ist ein Verstärkungseffekt, der in vielen Systemen beobachtet wird. Ein periodisches Signal wird in diesen Systemen durch zusätzliches Rauschen erheblich verstärkt.
- Rauschen kann einen eigentlich instabilen Zustand des Systems so stabilisieren, daß sich das System hauptsächlich in diesem Zustand befindet.

Beide Phänomene werden insbesondere in der Nanotechnologie oder in mikrobiologischen Systemen beobachtet. Der Grund dafür ist, daß in kleinen Systemen Störungen einen sehr viel größeren Einfluß haben. Rauschen spielt in kleinen Systemen eine wesentlich größere Rolle.

4 Simulation

4.1 Implementierung

Hat man ein Modell aufgestellt, so möchte man als nächstes mit Hilfe des Modells Aussagen über das modellierte System bekommen. In wenigen Fällen kann man analytisch, also durch mathematische Umformungen Eigenschaften des Modells herleiten. Die Simulation stellt ein wichtiges Werkzeug dar, um Erkenntnisse über das modellierte System zu erhalten.

Ein mathematische Modell besteht aus einer Reihe von mathematischen Beziehungen. Häufig sind dies Gleichungen, eventuell auch Ungleichungen. Die Gleichungen beschreiben zum Beispiel den Zustand des Systems zu einem Zeitpunkt als Funktion der Zustände des Systems zu früheren Zeitpunkten. In vielen Fällen handelt es sich dabei um Differentialgleichungen oder Integralgleichungen. Dies gilt dann, wenn man eine kontinuierliche Folge von Zuständen betrachtet, die Zeit also als kontinuierliche Variable betrachtet wird. Auch wenn dies auf den ersten Blick als natürlich erscheinen mag, gibt es Systeme, bei denen es sich anbietet, die Zeit diskret zu behandeln. Wir sind darauf schon im Abschnitt 3.3 (Dynamik) eingegangen. Wenn man ein Modell in einem Computerprogramm simulieren will, muß man immer eine diskrete Zeit wählen. Ein Computer ist nicht in der Lage, mit kontinuierlichen Variablen zu arbeiten (abgesehen von Programmpaketen, die algebraische Umformungen durchführen können; solche Programmpakete sind für Simulationen aber ungeeignet). Die Implementierung des Modells kann grob in folgenden Schritten durchgeführt werden:

1. Ausgehend von den mathematischen Gleichungen, die das Modell beschreiben, ist als erster Schritt ein Algorithmus zu finden, der diese Gleichungen löst. Zu einem solchen Algorithmus gehört auch, bei kontinuierlichen Modellen eine geeignete Diskretisierung der kontinuierlichen Variablen zu finden.
2. Als nächstes ist eine Programmiersprache oder ein geeignetes Programmpaket festzulegen, in dem die Implementierung vorgenommen werden soll. Neben gängigen Programmiersprachen wie C, C++, Java, Fortran gibt es auch Programmpakete, die auf einer höheren Ebene eine Implementierung ermöglichen. Die Auswahl richtet sich dabei zum einen nach den Kenntnissen der Mitarbeiter, aber insbesondere auch danach, welche Vorarbeiten schon geleistet wurden. Für viele Algorithmen zur Lösung unterschiedlicher Probleme gibt es fertige Routinen. Diese Routinen sind häufig ausgiebig getestet und sehr stabil. Wenn es möglich ist, solche Routinen zu nutzen, sollte man das tun, um Zeit zu sparen und mögliche Fehlerquellen bei der Programmierung zu eliminieren.
3. In einem nächsten Schritt wird das Modell programmiert. Dabei ist von Beginn an auf eine ausführliche Dokumentation (siehe Abschnitt 2.5 (Dokumentation)) und auf eine strukturierte Programmierung zu achten. Andernfalls ist die Fehlersuche und die Einarbeitung neuer Mitarbeiter unmöglich.
4. Nach der Programmierung muß das erstellte Programmpaket ausführlich getestet werden. Dabei geht es nicht nur um die selbstverständliche Elimination von Programmierfehlern. Ein wesentliches Problem ist, das Computer nicht beliebig genau rechnen. Die Rechengenauigkeit ist zwar sehr hoch, trotzdem können anfängliche kleine Rundungsfehler bei einem nichtlinearen Problem zu sehr großen Fehlern im Endresultat führen. Fertige Routinen sind in der Regel, aber nicht immer, in dieser Hinsicht getestet und optimiert. Es gibt unterschiedliche Techniken, mit denen Rundungsfehler und speziell deren Fortpflanzung kontrolliert und minimiert werden können.

5. Abhängig davon, wer das Programm schließlich bedienen soll, kann man eine Benutzeroberfläche vorsehen. Unerlässlich ist neben der Dokumentation eine Bedienungsanleitung. Außerdem muß festgelegt werden, wie die erzeugten Daten weiterzuverarbeiten oder zu analysieren sind.

4.2 Durchführung der Simulation

Die Durchführung der Simulation richtet sich nach der ursprünglichen Fragestellung. Sie gibt vor, welche Daten am Ende benötigt werden. Die Simulation selbst sollte außerdem vorher gut geplant werden. Da Simulationen speziell bei komplizierteren Modellen unter Umständen sehr lange Laufzeiten haben, verursacht eine schlecht geplante Simulation, die später in modifizierter Form wiederholt werden muß, vermeidbare zusätzliche Kosten.

Häufig werden die Daten, die das Simulationsprogramm liefert, zunächst abgespeichert und erst später weiterverarbeitet. In manchen Fällen ergeben sich auch aus der Analyse der Daten neue Fragen, die eine spätere Verarbeitung der Daten notwendig machen. Daher ist es notwendig, für alle berechneten Daten genau zu dokumentieren, mit welchen Parametern und welchen Einstellungen sie vorgenommen wurden. Nur so lassen sich die Daten später eindeutig zuordnen. Nicht ausreichend dokumentierte Daten sind für spätere Auswertungen wertlos.

4.3 Visualisierung

Für viele Zwecke kann eine Visualisierung der Daten nützlich sein. Es gibt je nach Fragestellung sehr unterschiedliche Möglichkeiten zur Visualisierung. Neben gängigen Diagrammen kann man auch eine dynamische Visualisierung, etwa in Form eines Films in Betracht ziehen. Hierfür gibt es spezielle Programmpakete, die zum Teil sehr komfortabel sind. Es ist sinnvoll, die Möglichkeit einer Visualisierung schon bei der Planung zu berücksichtigen. In vielen Fällen werden für die Visualisierung zusätzliche Daten benötigt, die von dem Simulationsprogramm zur Verfügung gestellt werden müssen.

4.4 Optimierung

Schon während der Implementierung, aber auch während der Simulation können Optimierungen vorgenommen werden. Sie betreffen zum Beispiel die Rechengeschwindigkeit, den Speicherbedarf, aber auch die Rechengenauigkeit oder Benutzerfreundlichkeit. Rechengeschwindigkeit und Speicherbedarf sind wesentliche Aspekte für entstehende Kosten. Die Rechengenauigkeit kann, wenn nötig, durch geeignete Maßnahmen erhöht werden. In manchen Fällen kann es aber auch sinnvoll sein, sie zu Gunsten von Rechengeschwindigkeit oder Speicherbedarf zu senken. Alle genannten Aspekte können nicht gleichzeitig optimiert werden. Man kann zum Beispiel die Rechengenauigkeit auf Kosten des Speicherbedarfs erhöhen. Die Optimierung richtet sich daher nach den Bedürfnissen des jeweiligen Projekts.

Oft wird eine Optimierung der Rechenzeit mit dem Hinweis auf die schnellen Prozessoren als unnötig abgetan. In der Tat fällt eine Reduktion der Kosten für die reine Rechenzeit kaum ins Gewicht. Man muß sich aber klar machen, daß eine längere Rechenzeit auch eine längere Arbeitszeit und damit höhere Personalkosten verursachen kann.

5 Analyse und Beurteilung der Ergebnisse

Die Analyse und Beurteilung der Ergebnisse richtet sich nach der Fragestellung des Projekts. Generelle Aussagen sind hierzu kaum möglich. Ein wichtiger Punkt ist aber eine vernünftige Fehlerabschätzung. Wir haben schon darauf hingewiesen, daß alle numerischen Ergebnisse mit Fehlern behaftet sind. Fehlerquellen liegen zum einen in den Rundungsfehlern. In vielen Fällen ist aber auch schon der Algorithmus eine Fehlerquelle. Kaum ein Algorithmus löst ein gegebenes Problem fehlerfrei. Fehler entstehen zum Beispiel durch Diskretisierungen oder durch spezielle Eigenschaften des Algorithmus selbst. Fehler entstehen auch dadurch, daß in dem Modell von bestimmten, kleinen Einflüssen abstrahiert wurde. Alle diese Fehlerquellen müssen in Betracht gezogen werden und diskutiert werden. Nur so ist eine sinnvolle Fehlerabschätzung möglich.

Die Fehlerabschätzung selbst ist schon in der Planungsphase zu berücksichtigen. In praktischen Fällen macht es zum Beispiel wenig Sinn, ein ungenaues Modell sehr genau zu simulieren. Ebenso wenig sinnvoll ist es, in dem Modell viele kleine Effekte zu berücksichtigen, aber die Simulation so ungenau zu machen, daß diese Effekte in den Resultaten gar keine Rolle spielen. In einer optimalen Modellierung und Simulation sollten die unterschiedlichen Fehler alle etwa dieselbe Größenordnung haben.

Eine genaue Abschätzung der Rechenfehler bei der Simulation erfordert in den meisten Fällen selbst einen erhöhten Rechenaufwand. Im Idealfall sollte das Programm selbst zu allen Daten auch eine Abschätzung des Rechenfehlers liefern. In vielen (guten) Routinen, die man für die Implementierung nutzen kann, sind entsprechende Möglichkeiten vorgesehen.

Das gleiche gilt für die Abschätzung der Fehler aus der Modellierung. Sie können zum Beispiel durch die Hinzunahme weiterer Terme oder durch die Variation von Parametern abgeschätzt werden, eventuell auch durch den Vergleich mit Daten, die von dem modellierten System selbst stammen.

Generell kann man sagen, daß die Fehler von dem Projektbudget abhängen. Je mehr Geld man bereit ist zu investieren, desto genauere Ergebnisse kann man erhalten. Allerdings ist dieser Zusammenhang nicht einfach linear: Durch eine Verdopplung des Budgets lassen sich die Fehler sicher nicht halbieren!

6 Beispielanwendung

6.1 Das Projekt

In diesem Beispiel wird ein Projekt beschrieben, in dem kleine, unregelmäßig geformte Metallteile (Größe ca ein bis fünf Zentimeter Durchmesser) nach dem Metall sortiert werden sollten. Es handelte sich um nicht magnetische Metalle, hauptsächlich Aluminium, Kupfer, Zink, Zinn und Blei, zum Teil auch um Legierungen. Ziel war, die Metallteile mit Hilfe eines Wirbelstromtrennverfahrens zu trennen. Läßt man die Metallteile durch ein Magnetfeld fliegen, so werden sie unterschiedlich stark in dem Magnetfeld gebremst. Diese Änderung in der Flugbahn kann man nutzen, um die verschiedenen Metalle zu separieren. Die Stärke der Bremsung hängt von dem Verhältnis von Leitfähigkeit zu Dichte ab. Metalle mit einem stark unterschiedlichen Verhältnis von Leitfähigkeit zu Dichte sollten sich also sehr gut trennen lassen.

Um das Verfahren zu testen, wurden zunächst Fallversuche durchgeführt. Anschließend wurde eine kleine Modellanlage gebaut, mit deren Hilfe das Verfahren getestet wurde. Reale, unregelmäßig geformte Teilchen ließen sich wegen der Streuungen nicht gut sortieren. Versuche mit regelmäßig geformten idealen Teilchen liefen dagegen sehr erfolgreich. Im Grenzbereich der Modellanlage deutet sich ein unerwarteter Effekt an. Obwohl Aluminium und Kupfer ein sehr ähnliches Verhältnis von Leitfähigkeit zu Dichte hatten, schien eine Trennung möglich zu sein. Dies ließ sich nicht durch die normale Wirbelstrombremsung erklären, offenbar spielte ein zweiter Effekt eine Rolle.

Da eine neue Modellanlage, mit der man den Effekt hätte untersuchen können, sehr teuer geworden wäre, entschied man sich zu einer mathematischen Modellierung. Ziel dieser Modellierung war es zu verstehen, welcher Effekt hier eine Rolle spielte, und anschließend zu klären, wie dieser Effekt ausgenutzt werden könnte. Die erste Frage ist qualitativer Natur. Hierzu genügte eine gute Modellierung des Systems. Die zweite Frage ist quantitativer Natur. Zu ihrer Beantwortung war eine genaue Simulation nötig.

6.2 Modellierung

Die Modellierung der Flugbahn eines Metallteilchens durch ein Magnetfeld ist ein physikalisches Problem. Die Naturgesetze, die hier anzuwenden sind, sind wohlbekannt. Andererseits ist es schwierig, die genauen Kräfte zu berechnen, die auf die Teilchen wirken. Sie hängen von der Magnetfeldverteilung und von der Stromverteilung ab, die beide nur mit Hilfe komplizierter Differentialgleichungen bestimmt werden können. Der Effekt, der für das neue Verhalten verantwortlich war, konnte aber identifiziert werden.

In einem nächsten Schritt mußte ein detailliertes Modell für die Simulation entwickelt werden. Es sollte nicht nur die idealen Teilchen, sondern auch die unregelmäßig geformten, realen Teilchen simulieren können. Das Problem war damit, daß Streuungen auftraten, die schwer zu fassen waren. Diese Streuungen konnten aber im Rahmen einer stochastischen Modellierung berücksichtigt werden. Wie groß die Streuungen waren, ließ sich mit der vorhandenen Modellanlage bei abgeschaltetem Magnetfeld gut messen. In der Gleichung, die die Bewegung der Teilchen beschreibt, wurde ein stochastischer Term eingefügt, der die Streuungen ohne Magnetfeld genau reproduzierte. Das so erhaltene Modell konnte dann simuliert werden.

6.3 Simulation

Die Gleichungen, die die Bewegung beschreiben, sind stochastische Differentialgleichungen. Hierfür gibt es Standardalgorithmen, die relativ leicht angewandt werden konnten. Die Implementierung war daher sehr schnell durchführbar. Als Programmiersprache wurde Fortran gewählt, da die vorhandenen Routinen am geeignetsten erschienen. Diese Routinen sind inzwischen nach C übertragen worden, so daß das Problem heute auch mit C programmiert werden könnte.

Da die Streuungen bei den Realteilchen relativ groß waren, spielte die Rechengenauigkeit eine untergeordnete Rolle. Die Fehlerabschätzung war daher relativ einfach durchzuführen.

6.4 Ergebnisse

Wie oben schon erwähnt, konnte die Modellierung den gesuchten Effekt erklären. Bei der Simulation stellte sich aber heraus, daß dieser Effekt zwar für die idealen Teilchen verwendet werden konnte, für die realen Teilchen aufgrund ihrer unregelmäßigen Form und Größe dagegen nicht. Die Streuungen überdeckten den Effekt vollständig. Eine Trennung von Kupfer und Aluminium ist auf diese Weise für reale Schredderschrotte also nicht möglich.

Obwohl dieses Resultat negativ war, kann die Simulation als ein Erfolg gewertet werden. Der Effekt konnte erklärt werden. Die Simulation war deutlich billiger als der Bau einer zweiten Modellanlage. Zudem hätte man ohne die Simulation nicht gewußt, welche spezifischen Eigenschaften die zweite Modellanlage hätte haben müssen. Durch die Simulation wurden letztlich erhebliche Kosten eingespart.