

Simulatie van continue processen

C. T. DE WIT

Instituut voor Biologisch en Scheikundig Onderzoek van Landbouwgewassen (IBS), Wageningen

English Summary see p. 218

Volgens Warner (1964) van de afdeling 'Biophysics and Bio-engineering' van het Latter-Day Saints Hospital te Salt Lake City (Utah, VS) kan simulatie worden gedefinieerd als het bouwen van een model van een proces en het observeren van zijn gedrag. De biologisch geïnteresseerde onderzoeker ziet het simuleren als een mogelijkheid tot het samenvatten van conclusies uit waarnemingen van losstaande verschijnselen in een complex model waarvan de werking het gedrag van het gehele proces voorspelt. Het model is een nuttig instrument, als het een basis vormt voor het ontwerpen van nieuwe proeven en door extrapolatie en analogie het inzicht in de werkelijke verschijnselen vergroot. Het dient rekenschap af te leggen van alle relevante waarnemingen en geen veronderstellingen te bevatten, die bewezen onjuist zijn.

De eis dat het model geen met de werkelijkheid strijdige veronderstellingen bevat, lijkt nogal voor de hand liggend, wanneer het de bedoeling is de werkelijkheid weer te geven. Men dient echter wel te bedenken dat er veel modellen zijn voorgesteld, die pertinent onjuiste veronderstellingen bevatten om een oplossing mogelijk te maken. Simulatie maakt het mogelijk dat de modelbouwer zich niet langer beperkt tot modellen waarvoor een analytische oplossing kan worden gegeven en dat de aandacht van de oplossingstechniek zich verplaatst naar het bestuderen van resultaten.

In dit artikel zal de wijze van werken bij het simuleren van continue processen aan de hand van enkele voorbeelden worden uiteengezet, zonder nader in te gaan op details. Ook zal geen aandacht worden besteed aan het simuleren van processen waarbij het toevals-element een grote rol speelt, zoals bijv. bij wachttijdproblemen.

Diffusie

Wanneer een blokje agar met een zijde met een kleurstofoplossing in aanraking wordt gebracht, diffundeert de kleurstof in de agar. Na verloop

* Voordracht van dr. ir. C. T. de Wit in de lezingenreeks 'Het model in het landbouwkundig onderzoek', gehouden ter gelegenheid van de najaarsvergadering van de Studiekring voor Statistische Techniek op 22 november 1967 te Wageningen.

van langere tijd is de concentratie in het gehele blokje gelijk aan die in de oplossing, maar voordien zal een met de tijd opschuivende zone van veranderende concentratie worden waargenomen. Analytisch kan worden berekend hoe de concentratie in het blokje afhangt van de afstand tot het grensvlak en van de tijd, maar dit is al zo moeilijk, dat de meesten de oplossing zullen overschrijven uit een handboek.

Het antwoord kan ook worden gevonden door simuleren. Dit gebeurt als volgt. Men denkt zich het agarblokje evenwijdig aan het grensvlak verdeeld in elementen met een dikte DX . Uit proeven in de stationaire toestand is bekend dat de diffusie door een dergelijk element evenredig is met het concentratieverschil van de kleurstof aan beide zijden en kan de diffusiecoëfficiënt (D) worden berekend. In het blokje kan op ieder tijdstip de snelheid van diffusie (DIF) van het ene element naar het volgende worden berekend uit de concentraties ($CONC$) op dat tijdstip, met de *snelheidsvergelijkingen*:

$DIF01 = D(CONC0 - CONC1)/DX$ voor de diffusie van de oplossing (element 0) naar element 1

$DIF12 = D(CONC1 - CONC2)/DX$ voor de diffusie van element 1 naar element 2 (enz. voor alle overgangen)

De concentraties op een iets later tijdstip kunnen nu worden berekend met behulp van *niveauvergelijkingen*:

$CONC1 := CONC1 + DT(DIF01 - DIF12)/DX$
voor het eerste element

$CONC2 := CONC2 + DT(DIF12 - DIF23)/DX$
voor het tweede element (enz. voor alle elementen)

Hierin betekent het teken $:=$ 'wordt' en is DT het korte tijdsinterval waarover de snelheid wordt gerealiseerd.

Hiermee is de toestand een tijdsinterval DT later bepaald. Wanneer de uitgangstoestand bekend is (zoals hier: de initiaal-waarden van alle concentraties nul, behalve die in de oplossing), kan de toestand op elk tijdstip daarna worden berekend door herhaald gebruik van snelheids- en niveauvergelijkingen. Bij deze berekening worden geen

systematische fouten gemaakt, wanneer in elke ronde eerst alle snelheden worden uitgerekend en dan alle niveaus verhoogd.

De berekening is des te nauwkeuriger, naarmate de stappen DT en de elementdikten DX kleiner worden genomen; beide zijn niet onafhankelijk, omdat de veranderingen in ieder element klein dienen te zijn in vergelijking met de inhoud zelf. Aanvaardbare waarden voor de intervallen kunnen het gemakkelijkst proberenderwijs worden vastgesteld. De waarden zijn klein genoeg, wanneer door verdere verkleining de uitkomst niet noemenswaard verandert. Het blijkt dat de waarden van DX en D in de orde van $0,01$ cm en van seconden acceptabele resultaten geven.

Een wat meer wantrouwende geest zou het resultaat van de gesimuleerde met die van de analytische oplossing kunnen vergelijken, althans in dit geval. Wanneer echter de concentratie in de oplossing op vrij willekeurige wijze met de tijd verandert, de temperatuur en hierdoor de diffusiecoëfficiënt niet constant blijft, ionen in het spel zijn of het water met een niet constante snelheid door het agarblok beweegt, is dit onmogelijk.

In al deze gevallen is het wel mogelijk te simuleren. Wanneer bijv. het verloop van de temperatuur bekend is, kan voor elk moment de diffusiecoëfficiënt worden berekend uit een tabel die het verband tussen diffusiecoëfficiënt en temperatuur weergeeft. Vervolgens is dan met behulp van het blok snelheidsvergelijkingen en het blok niveauvergelijkingen de toestand kort daarop te berekenen, waarna het spel zich kan herhalen.

Het systeem kan op deze wijze worden uitgebreid, tot de oplossing van complexe problemen mogelijk is. Dit is bijv. gedaan door dr. M. Frere, een Amerikaanse gastmedewerker op het IBS en het Laboratorium voor Landbouwscheikunde in Wageningen, ter berekening van de verdeling van ionen in de grond om de wortel onder invloed van opname, waterstroom naar wortel en uitwisseling van ionen tussen oplossing en grond.

Hoe complex ook, het systeem is nooit moeilijk beschrijfbaar, wanneer van de detailprocessen voldoende bekend is: het is dan altijd mogelijk uit de toestand op een bepaald ogenblik de snelheden van verandering af te leiden en deze vervolgens te gebruiken voor het ophogen van de niveaus.

Het uitvoeren van een simulatie

Aan het doen van een simulatie is veel organisatie- en rekenwerk verbonden en deze wijze van werken is dan ook alleen praktisch uitvoerbaar op snelle en grote rekenautomaten. De procedure is in één van de gebruikelijke talen, zoals FORTRAN, te programmeren. In dat geval moeten

eerst een routine worden geschreven, die de ruimte (het agarblok of het wortelmilieu) definieert en indeelt en een routine die alle beginwaarden initialiseert. Dan dient de routine die alle snelheden uitrekent, te worden ingevoerd en vervolgens de routine die de niveaus ophoogt. Dit geheel moet natuurlijk gevat worden in een schema dat voor herhaald gebruik zorgt en de gesimuleerde tijd bijhoudt. Dit vraagt vrij veel werk, en enigszins grote programma's blinken niet uit door overzichtelijkheid en zijn vrij moeilijk te wijzigen. Dit komt doordat het in deze procedure-talen nodig is de volgorde van bewerking te specificeren, zodat berekeningen die op een onderdeel betrekking hebben maar waarvan de resultaten ook in andere onderdelen gebruikt worden, her en der in het programma verspreid kunnen liggen.

Veel van de programmeermoeilijkheden worden opgevangen door het gebruik van simulatietalen die speciaal voor het programmeren van continue processen zijn geschreven. Deze hebben allemaal een routine die de opdrachten na het inlezen op rekenvolgorde legt, zodat het programma overzichtelijk kan worden geschreven en gemakkelijk is te veranderen. Bij dit ordenen worden de opdrachten die de initiaalwaarden van de niveaus bepalen en de exogene variabelen definiëren, voraan gelegd. Daarna komen de opdrachten die rechts van het gelijkteken alleen niveaus en exogene variabelen hebben staan en daarna de opdrachten die gebruik maken van de tot dan bekende variabelen, enz., totdat de uiteindelijke niveauvergelijkingen zijn bereikt. Dan zorgt een ingebouwde klok voor het herhaald gebruik van de machinaal geordende vergelijkingen.

Sortering is mogelijk, omdat in een simulatieprogramma geen structurele vergelijkingen, d.w.z. n vergelijkingen met n onbekenden, voorkomen. Er is nl. geen systeem te bedenken, waarin de snelheden die zich op een bepaald moment voordoen, van elkaar afhankelijk zijn. Elke snelheid hangt af van de toestand van het systeem op het moment van zijn bestaan. Interacties worden dus niet geprogrammeerd maar komen in de loop van de tijd tot stand door de wederzijdse beïnvloeding van toestanden en snelheden, ofwel door informatie-terugkoppeling. De sorteerroutine gaat meteen na of alle variabelen gedefiniëerd zijn en of er ook cirkelredensaties voorkomen in de trant van een slecht woordenboek waarin staat: op volgorde leggen, zie: rangschikken; rangschikken, zie: sorteren; sorteren, zie: op volgorde leggen.

Het programmeren in deze talen wordt bovendien vergemakkelijkt, omdat naast de logaritmische-, de machts-, de wortel- en de geometrische functies, gebruik gemaakt kan worden van speciale functies. Zo betekent in DYNAMO (DYNAMIC MODELLING; Pugh, 1963)

$$V = \text{NORMRN}(12,2)$$

dat de waarde van V gekozen wordt uit een normale verdeling met gemiddelde 12 en standaardafwijking 2, en

$$V = \text{TABLE}(\text{NAME}, P, 0, 9, 1)$$

$$\text{NAME} = 2/5/6.3/8/9/10/10/10/10/10$$

dat de waarde van V afhangt van P en gevonden wordt door lineaire interpolatie in een tabel, waarvan de bij $P = 0, 1, 2, \dots, 9$ (dus van 0 tot 9 met intervallen 1) behorende waarden worden gegeven door de rij getallen NAME.

Andere talen, zoals CSMP/360 (Continuous System Modelling Program; IBM, 1967) hebben ook functies voor het oplossen van impliciete vergelijkingen, laten behalve de punt-helling-methode (gebruikt in het voorbeeld) andere methoden van integratie toe en hebben een NO SORT routine die het mogelijk maakt voor onderdelen van het programma de volgorde van uitrekenen te specificeren, zodat variabelen kunnen worden geïndiceerd. In alle talen kan de simulatie op eenvoudige wijze met andere initiaalwaarden en constanten worden herhaald en is het specificeren van de uitvoer, ook in grafische vorm, erg eenvoudig.

Met DYNAMO, dat wel enige beperkingen oplegt, kan voor minder geld meer worden uitgerekend dan met FORTRAN. CSMP/360 biedt veel meer mogelijkheden, maar dit is een 'two-pass language': het programma wordt eerst vertaald in FORTRAN en dan in machine-code. Deze taal is ook aanmerkelijk duurder in gebruik dan FORTRAN.

Simulatie van gewasgroei

Samen met dr. R. Brouwer (IBS) wordt gewerkt aan een simulatie van de gewasgroei. Een centraal gedeelte van het simulatieprogramma is weergegeven in het relatie-model (Forrester, 1961) van fig. 1. Een dergelijk model geeft wel de onderlinge afhankelijkheid van de grootheden, doch niet de kwantitatieve verbanden.

De rechthoeken stellen de niveaus voor, d.w.z. die grootheden die ook blijven bestaan, als het proces stilstaat, zoals bijv. de reserves in het gewas. De omzettingen worden weergegeven door pijlen, terwijl de snelheid van deze omzettingen wordt voorgesteld door kranen in deze pijlen. Het is direct te zien dat de reserves toenemen ten gevolge van de fotosynthese en verminderen als gevolg van respiratie en groei van stengel, blad en wortel.

Het overige deel van fig. 1 geeft aan, hoe de snelheid van de bladgroei afhangt van de toestand van het systeem. Alle grootheden die uiteindelijk nodig zijn om de snelheden te berekenen,

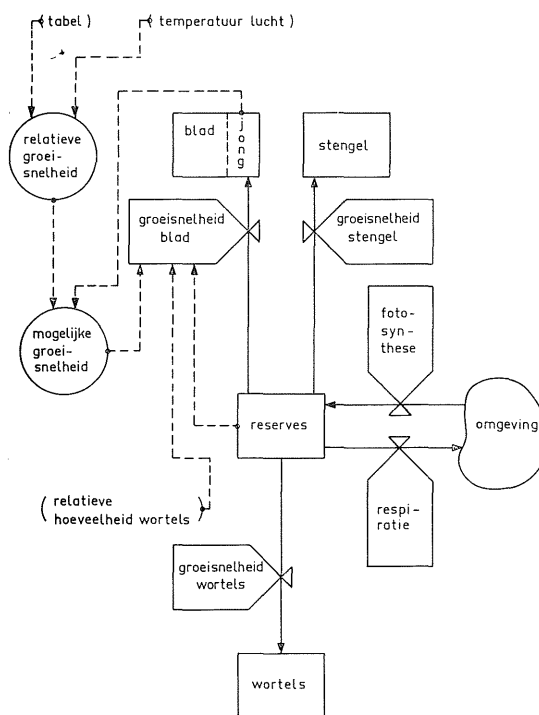


Fig. 1 Centraal gedeelte van een model van de groei van een plant of gewas

worden weergegeven in cirkels en alle relaties of de stromen van informatie door gestippelde pijlen. In het hoofdstuk 'Weer' wordt de temperatuur van de lucht tussen het gewas gegenereerd en uit een tabel die het verband aangeeft tussen temperatuur en relatieve groeisnelheid, voor het geval dat er voldoende wortels en reserves zijn, wordt de bij deze temperatuur behorende relatieve groeisnelheid afgelezen. Wanneer de leeftijdsopbouw van het aanwezige blad wordt bewaard, kan ook worden nagegaan hoeveel blad nog jong genoeg is om te groeien en hieruit en uit de relatieve groeisnelheid kan dan de mogelijke groeisnelheid berekend worden. Deze mogelijke groeisnelheid kan echter alleen worden gerealiseerd, wanneer er voldoende wortels zijn (waarover aanstonds nog meer), en voldoende reserves.

Interacties worden uiteraard niet geprogrammeerd maar komen automatisch tijdens het simuleren tevoorschijn, zoals blijkt uit het bestaan van informatie-terugkoppelkringen, bijv. de kring groeisnelheid, gewicht blad, mogelijke groeisnelheid, groeisnelheid. De groeisnelheid hangt ook niet direct af van de fotosynthese, maar wel indirect. Immers wanneer de fotosynthese laag is, blijven de reserves niet op peil en kan groei niet plaatsvinden. Het reserveniveau van een plant kan in een paar uur van een teveel naar een tekort omslaan, zodat een dergelijk systeem met stappen in

de orde van grootte van een uur moet worden doorgenomen.

De mate van detail en wisselwerking blijkt uit de invloed van de wortel op de spruitgroei. Wanneer een deel van de wortels van een plant wordt verwijderd, houdt de spruit op met groeien en gaan de overblijvende wortels harder groeien totdat de oude verhouding ongeveer hersteld is. Op grond van een zorgvuldige analyse van de verschijnselen is dit in de simulatie als volgt bewerkstelligd. Na verwijdering van een deel van de wortels is bij gelijkblijvende verdamping de onderdruk in de bladeren groter; hierdoor wordt de groei minder, zodat meer reserves beschikbaar komen voor de wortels en deze harder gaan groeien. Wanneer echter tegelijkertijd door verhoging van de luchtvochtigheid de verdamping wordt verkleind, een deel van de bladeren wordt verwijderd of door verhoging van de temperatuur de permeabiliteit van het wortelstelsel vergroot, treedt de beïnvloeding van de groei minder of niet op. Voor het uitwerken van deze gedachtengang is het nodig tijdens de simulatie de verdamping, de hoeveelheid en de morfologie van blad en wortel en de permeabiliteit en de graad van verkurking van het wortelstelsel bij te houden en te laten samenkomen in een stuurgetal, dat de relatieve hoeveelheid wortels is genoemd.

Het volledige programma bestaat dan ook uit een 200 vergelijkingen die ieder voor zich een onderdeel van het fysiologische gebeuren voorstellen. Met behulp van dit model is het mogelijk de groei van planten en gewassen in klimaatkamer en veld van opkomst tot bloei te simuleren, voorlopig met de beperking, dat water- en meststofvoorziening optimaal blijven.

Slotheschouwing

In het begin van dit artikel zijn enkele eisen genoemd, waaraan een simulatiemodel dient te voldoen, en de vraag is of deze vervulbaar zijn. De ervaringen tot nu toe zijn positief.

Het model van de beweging van ionen in het wortelmilieu maakt het inderdaad mogelijk de gevolgen van alle wisselwerkingen te overzien en verhoogt zodoende door analogie het inzicht in de werkelijkheid. Het legt eveneens rekenschap af van alle relevante waarnemingen op dit gebied en bevat geen veronderstellingen die de fysische kennis geweld aan doen of vereenvoudigingen die nodig zijn om tot een oplossing te komen.

Het gewasgroeimodel heeft tot nieuwe proeven geleid, waarin veel meer aandacht wordt besteed aan de verschillen in gedrag tussen plant en ge-

was en waarin de invloed van plotselinge veranderingen in het milieu op de plant in de tijd worden vervolgd, d.w.z. dat meer aandacht geschonken wordt aan de plant in een niet-stationaire toestand.

Het model wordt gebruikt voor extrapolatie, vooral van kennis uit het laboratorium en de klimaatkamer naar het veld. Het levert eveneens nieuwe inzichten op, hetgeen alleen al hieruit blijkt, dat de inhoud van het model in de loop van twee jaar grondig gewijzigd is op basis van het gedrag van het model.

De in allerlei opzichten minder goede overeenkomst tussen het gesimuleerde experiment en het werkelijke experiment pleit niet tegen simulatie, maar geeft die gebieden aan, waar verder onderzoek noodzakelijk is.

Tenslotte zij opgemerkt dat veel van belang zijnde artikelen te vinden zijn in de laatste jaargangen van het tijdschrift 'Simulation', uitgegeven door Simulation Councils, San Diego (Cal.) en in Nederland aanwezig in de bibliotheken van het Unilever Research-Laboratorium te Vlaardingen en het Instituut voor Biologisch en Scheikundig Onderzoek van Landbouwgewassen te Wageningen.

Samenvatting

Aan de hand van enkele voorbeelden waarmee ervaring is opgedaan, worden de mogelijkheden van simulatie van continue processen met behulp van digitale rekenautomaten besproken. Deze voorbeelden betreffen met name de ionenbeweging naar de wortels en de groei van planten en gewassen, welke beide systemen momenteel met behulp van simulatietechnieken worden bestudeerd.

Summary

Simulation of continuous processes

Some principles of simulation of continuous processes by means of digital simulation are discussed. The examples concern the movement of ions towards the roots and the growth of plants and crops, which two systems are being studied at present by means of simulation.

Literatuur

- Forrester, J. W.: *Industrial Dynamics*. Massachusetts Institute of Technology Press, Boston 1961.
 IBM: *System 360 Continuous System Modelling Program. User's manual*. H20-0367-0 (1967).
 Pugh, A. L.: *Dynamo User's Manual*. M.I.T. Press, Boston 1963.
 Warner, H. R.: *Simulation as a tool for biological research*. *Simulation* 4 (1964) 57-63.