BEM – Note
Programmversion 4.03
Tabellarischer CTIN–Input
Transformierte Zeitachsen*

Dr. Jürgen Prenzel†

21. Februar 1993

Ab sofort ist der Programmlevel 4.03 im Einsatz.

1 Input-Funktion als Tabelle

Diese Funktion wurde für ein Projekt entwickelt, das die Versauerungsentwicklung eines Wassereinzugsgebietes über einen Zeitraum von ca. 200 Jahren simuliert. Dabei wird der Input an Ionen in das oberste Kompartiment als relativ komplizierte Funktion der Zeit angenommen. Diese Funktion setzt sich außerdem aus mehreren additiven Teilfunktionen zusammen, nämlich Deposition, Verwitterung und Pflanzenaufnahme.

Im folgenden wird diese Funktion als YIN–Funktion (von "yearly input data") bezeichnet.

1.1 Aufruf

Die YIN–Funktion wird durch Angabe der `-y` Option beim Aufruf aktiviert:
`bem run` *modell_file* `-y`
oder
`bem runcas` *link_file* `-y`

1.2 Eingabe der Input–Tabelle

Bei Benutzung der YIN–Funktion hat der dritte Abschnitt des Modell–Files (nach der zweiten `end`–Zeile) eine völlig abweichende Gestalt. Dies gilt bei Kaskaden für das oberste Kompartiment, das heißt für den File, der in der ersten `hor`–Zeile des Link–Files eingetragen ist. Es gelten die folgenden Regeln:

1.2.1 Kommentare

Kommentar–Zeilen
`*` *Kommentar*

*Ausgabe lokal z.B. durch `texouthp3d1 /usr/users/jprenze/public/doc/bem_note2`

†Institut für Bodenkunde und Waldernährung der Universität Göttingen

sind beliebig erlaubt.

1.2.2 `yin` – Zeile

Von Kommentaren abgesehen, wird als erste Zeile die folgende erwartet:

`yin` `flow:`$flow$ `yr0:`J_0 `mon0:`M_0 `dyr:`ΔJ `dmon:`ΔM

Dabei hat $flow$ dieselbe Bedeutung wie auf einer `exp`–Zeile. J_0 und M_0 definieren die Lage des Startpunktes der Simulation auf der Zeitachse in Jahren plus Monaten. ΔJ und ΔM bestimmen ebenso die Länge eines Modell–Zeitschritts. Z.B würde

`yin flow:1 yr0:1945 mon0:3 dyr:0.1`

Den Parameter $flow$ auf 1 setzen, den Simulationsbeginn mit dem Ende des März im Jahre 1945 gleichsetzen und einen Simulationsschritt als 1/10 Jahr auffassen.

Alle Zahlenwerte können beliebige nichtnegative Dezimalwerte annehmen. Die Angaben in Monaten sind einfach als 1/12 Jahre zu denken, die zu den Angaben in Jahren addiert werden. Alle fünf Angaben sind optional. Als Standardwerte werden angenommen: $flow = 1$, $J_0 = 1848$, $M_0 = 0$ (d.h. Jahresbeginn), $\Delta J = 1$ und $\Delta M = 0$.

1.2.3 Elemente

Als folgende Zeile wird eine Liste von Element–Namen erwartet

elt_1 elt_2 ... elt_n

Hier sind die Elemente, durch Zwischenraum getrennt, aufzuführen, für die in der anschließenden Tabelle ein Input definiert werden soll. Die Schreibweise muß den `cat`– und `ani`–Zeilen entsprechen.

1.2.4 Tabelle

Bis zum Ende des Files folgt jetzt eine Tabelle, deren Zeilen folgendermaßen aufgebaut sind:

J M c_1 c_2 ... c_n

Wenn n Elemente vorgegeben sind (s.o.), muß jede Zeile der Tabelle aus $n+2$ durch Zwischenraum getrennten Zahlen bestehen. Die beiden ersten Zahlen definieren einen Zeitpunkt $t = J + 1/12\,M$. t muß im allgemeinen in jeder Zeile der Tabelle größer sein als in der vorhergehenden. Falls t doch einmal von einer Zeile zur nächsten abnimmt, wird dies als der Beginn einer neuen additiven Komponente der Gesamt–Input–Funktion aufgefaßt.

Die Zahlen c_i definieren eine Funktion von t als ein Polygon, zwischen den angegebenen Zeiten wird also linear interpoliert. Die durch negative Änderungen von t getrennten Teil–Funktionen werden addiert und ergeben dann die `ctin`–Werte für die angegeben Elemente.

1.3 Beispiel

Zur Veranschaulichung diene ein besonders einfaches Beispiel. Das Modell soll nur die Ionen SO_4^{2-} und Ca^{2+} enthalten, ohne Festphase und ohne Komplexbildungen. Der Input sei zusammengesetzt aus Deposition, Verwitterung und Aufnahme. Das Anfangsgleichgewicht sei mit 1980 identifiziert und die Simulation laufe in Schritten von 1 Jahr bis 1990. Die Deposition sei für Ca^{2+} konstant 100

μmol/L, für SO_4^{2-} am Anfang 300 und ab 1986 200 μmol/L. Die Verwitterung liefere Ca^{2+} in einer konstanten KOnzentration von 5 μmol/L. Die Aufnahme nehme von 0 μmol/L im Jahre 1980 auf 10 μmol/L im Jahre 1990 zu.

Diese Annahmen ließen sich bisher für BEM wie folgt kodieren:

```
* SIMPEL-MODELL zum Test der YIN-Funktion
* hier zum Vergleich ohne YIN
cat Ca 2
ani SO4 2
end
ctl0 Ca:105 SO4:300
estcon Ca:205 SO4:300
vls estph:3.7 eststr:500
end
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:300 Ca:104
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:300 Ca:103
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:300 Ca:102
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:300 Ca:101
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:300 Ca:100
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:200 Ca:99
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:200 Ca:98
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:200 Ca:97
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:200 Ca:96
exp nrep:1 flow:1
ctin SO4:200 Ca:95
end
```

Bei Benutzung der YIN-Funktion kann man nun auch schreiben:

```
* SIMPEL-MODELL zum Test der YIN-Funktion
*
cat Ca 2
ani SO4 2
end
ctl0 Ca:105 SO4:300
estcon Ca:205 SO4:300
vls estph:3.7 eststr:500
end
yin flow:1 yr0:1980
Ca SO4
* Deposition:
1981    0 100 300
```

```
1985     0 100 300
1986     0 100 200
1990     0 100 200
* Aufnahme:
1981 0  -1   0
1990 0 -10   0
* Verwitterung
1981 0   5   0
1990 0   5   0
```

Beide "Modelle" liefern dasselbe Ergebnis.

2 Ausgabe von Zeiten anstelle von 'steps'

Die Ausgabevariable `num`, d.h. die Nummer des simulierten Schrittes eines konsekutiven Batchexperiments, wird oft mit einer realen Zeit identifiziert. Damit dies auch in Tabellen und Plots berücksichtigt werden kann, wird eine neue Ausgabevariable eingeführt. Das Format lautet:

`time` t_0 Δt $kopf$

Die Definition besteht also aus vier Wörten, die bei Übergabe durch einen File (`-d` – Option) durch Zwischenräume getrennt sein können, aber bei Übergabe in der Aufrufzeile durch das Zeichen `_` verbunden sein müssen. t_0 bestimmt den Wert, der dem Anfangsgleichgewicht (Schritt 0) zugeordnet wird. Δt bestimmt das Zeitintervall, das mit einem Simulationsschritt identifiziert wird. Das Label $kopf$ ist optional. Wenn es fehlt wird `time` eingesetzt.

Ein Beispiel:

```
bem  tab  tyin01  time_1980_1_Jahre  pH  ctl_Ca  ctl_SO4
```