

Abschlussbericht

zum Projekt "Relationale Wachstumsgrammatiken als Basis für ein mehrskaliges metabolisches Strukturmodell der Gerste: Neue Techniken der Informatik für Functional-Structural Plant Models (FSPM)"

Winfried Kurth

1. Allgemeine Angaben

DFG-Geschäftszeichen: KU 847/6-1

Antragsteller: Prof. Dr. Winfried Kurth

Institut / Lehrstuhl: *(bis 30. 9. 2008:)*

Brandenburgische Technische Universität Cottbus
Institut für Informatik
Lehrstuhl Praktische Informatik / Grafische Systeme

(seit 1. 10. 2008:)

Georg-August-Universität Göttingen
Lehrstuhl Computergrafik und Ökologische Informatik
Abteilung Ökoinformatik, Biometrie und Waldwachstum

Büsgenweg 4
37077 Göttingen
Tel. 0551-39-9715
Fax 0551-39-3465
wk<at>informatik.uni-goettingen.de

Thema des Projekts: Relationale Wachstumsgrammatiken als Basis für ein mehrskaliges metabolisches Strukturmodell der Gerste: Neue Techniken der Informatik für Functional-Structural Plant Models (FSPM)

Berichtszeitraum: 16. 12. 2005 – 31. 12. 2008

Förderungszeitraum insgesamt (mit Vorgängerprojekt KU 847/5-1,2):

1. 4. 2002 – 31. 12. 2008

Liste der Publikationen aus diesem Projekt

2008:

Reinhard Hemmerling, Ole Kniemeyer, Dirk Lanwert, Winfried Kurth, Gerhard Buck-Sorlin: The rule-based language XL and the modelling environment GroIMP illustrated with simulated tree competition. *Functional Plant Biology* 35 (2008), 739-750.

Gerhard H. Buck-Sorlin, Reinhard Hemmerling, Ole Kniemeyer, Benno Burema, Winfried Kurth: A Rule-based Model of Barley Morphogenesis, with Special Respect to Shading and Gibberellic Acid Signal Transduction. *Annals of Botany* 101(8) (2008), 1109-1123.

Gerhard H. Buck-Sorlin, Ole Kniemeyer, Winfried Kurth: A Model of Poplar (*Populus sp.*) Physiology and Morphology Based on Relational Growth Grammars. In: Deutsch, A., Bravo de la Parra, R., de Boer, R., Diekmann, O., Jagers, P., Kisdi, E., Kretzschmar, M., Lansky, P., Metz, H. (eds.), *Mathematical Modeling of Biological Systems, Volume II (Epidemiology, Evolution and Ecology, Immunology, Neural Systems and the Brain, and Innovative Mathematical Methods)*, Chapter 28, Birkhäuser, Boston (2008), pp. 313-322.

Katarína Smoleňová, Reinhard Hemmerling: Growing virtual plants for virtual worlds. In: Myszkowski, K. (ed.): *Proceedings of the Spring Conference on Computer Graphics SCCG 2008*, Budmerice (SK), April 21-23, 2008, Comenius University Bratislava (2008), pp. 77-84.

Ole Kniemeyer, Günter Barczik, Reinhard Hemmerling, Winfried Kurth: Relational Growth Grammars – a parallel graph transformation approach with applications in biology and architecture. In: Schürr, A., Nagl, M., Zündorf, A. (eds.): *Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance AGTIVE '07*, International Workshop Kassel, Oct. 10-12, 2007, *Lecture Notes in Computer Science* 5088, Springer, Berlin etc. (2008), pp. 152-167.

Ole Kniemeyer, Winfried Kurth: The modelling platform GroIMP and the programming language XL. In: Schürr, A., Nagl, M., Zündorf, A. (eds.): *Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance AGTIVE '07*, International Workshop Kassel, Oct. 10-12, 2007, *Lecture Notes in Computer Science* 5088, Springer, Berlin etc. (2008), pp. 570-572.

Gabriele Taentzer, Enrico Biermann, Dénes Bisztray, Bernd Bohnet, Iovka Boneva, Artur Boronat, Leif Geiger, Robino Geiß, Ákos Horvath, Ole Kniemeyer, Tom Mens, Benjamin Ness, Detlef Plump, Tamás Vajk: Generation of Sierpinski triangles: A case study for graph transformation tools. In: Schürr, A., Nagl, M., Zündorf, A. (eds.): *Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance AGTIVE '07*, International Workshop Kassel, Oct. 10-12, 2007, *Lecture Notes in Computer Science* 5088, Springer, Berlin etc. (2008), pp. 514-539.

Arend Rensink, Alexander Dotor, Claudia Ermel, Stefan Jurack, Ole Kniemeyer, Juan de Lara, Sonja Maier, Tom Staijen, Albert Zündorf: Ludo: A case study for graph transformation tools. In: Schürr, A., Nagl, M., Zündorf, A. (eds.): *Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance AGTIVE '07*, International Workshop Kassel, Oct. 10-12, 2007, *Lecture Notes in Computer Science* 5088, Springer, Berlin etc. (2008), pp. 493-513.

Dániel Varró, Márk Asztalos, Dénes Bisztray, Artur Boronat, Duc-Hanh Dang, Rubino Geiß, Joel Greenyer, Pieter Van Gorp, Ole Kniemeyer, Anantha Narayanan, Edgars Rencis, Erhard Weinell: Graph transformation tool contest on the transformation of UML models to CSP. *In: Schürr, A., Nagl, M., Zündorf, A. (eds.): Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance AGTIVE '07, International Workshop Kassel, Oct. 10-12, 2007, Lecture Notes in Computer Science 5088, Springer, Berlin etc. (2008), pp. 540-565.*

Ole Kniemeyer: Design and Implementation of a Graph Grammar Based Language for Functional-Structural Plant Modelling. Dissertation, BTU Cottbus (Fak. f. Mathematik, Naturwissenschaften und Informatik), 2008.

2007:

Winfried Kurth: Specification of morphological models with L-systems and Relational Growth Grammars. *Image – Journal of Interdisciplinary Image Science*, Vol. 5 / Special Issue.

Ole Kniemeyer, Gerhard H. Buck-Sorlin, Winfried Kurth: GroIMP as a Platform for Functional-Structural Modelling of Plants (Chapter 4). *In: Vos, J., Marcelis, L.F.M., De Visser, P.H.B., Struik, P.C., Evers, J.B. (eds.): Functional-Structural Plant Modelling in Crop Production. Springer, Dordrecht, The Netherlands (2007), pp. 43-52.*

Gerhard H. Buck-Sorlin, Ole Kniemeyer, Winfried Kurth: A grammar-based model of barley including genetic control and metabolic networks (Chapter 21). *In: Vos, J., Marcelis, L.F.M., De Visser, P.H.B., Struik, P.C., Evers, J.B. (eds.): Functional-Structural Plant Modelling in Crop Production. Springer, Dordrecht, The Netherlands (2007), pp. 243-252.*

Christian Fournier, Bruno Andrieu, Gerhard H. Buck-Sorlin, Jochem B. Evers, Jean-Louis Drouet, Abraham J. Escobar-Gutierrez, Jan Vos: Functional-structural modelling of Gramineae (Chapter 15). *In: Vos, J., Marcelis, L.F.M., De Visser, P.H.B., Struik, P.C., Evers, J.B. (eds.): Functional-Structural Plant Modelling in Crop Production. Springer, Dordrecht, The Netherlands (2007), pp. 175-186.*

Christian Groer, Ole Kniemeyer, Reinhard Hemmerling, Winfried Kurth, Heiko Becker, Gerhard Buck-Sorlin: A dynamic 3D model of rape (*Brassica napus* L.) computing yield components under variable nitrogen fertilisation regimes. Proceedings of FSPM'07, Napier, New Zealand, November 4-9, 2007, pp. 4.1-4.3.

<http://www.algorithmicbotany.org/FSPM07/Individual/4.pdf>.

Ole Kniemeyer, Reinhard Hemmerling, Gerhard Buck-Sorlin, Winfried Kurth: The rule-based language XL and the modelling environment GroIMP, illustrated with simulated tree competition. Proceedings of FSPM'07, Napier, New Zealand, November 4-9, 2007, pp. 23.1-23.5.

<http://www.algorithmicbotany.org/FSPM07/Individual/23.pdf>.

Lifeng Xu, Ole Kniemeyer, Jun Zhu, Gerhard H. Buck-Sorlin: A functional-structural model of rice (*Oryza sativa* L.) linking morphogenesis with quantitative trait loci. Proceedings of FSPM'07, Napier, New Zealand, November 4-9, 2007, p. P22-1.

<http://www.algorithmicbotany.org/FSPM07/Individual/P22.pdf>.

Ole Kniemeyer, Jan-Anton Dérer, Reinhard Hemmerling, Gerhard H. Buck-Sorlin, Winfried Kurth: Using the language XL for structural analysis. Proceedings of FSPM'07, Napier, New Zealand, November 4-9, 2007, p. P44-1.

<http://www.algorithmicbotany.org/FSPM07/Individual/P44.pdf>.

Gerhard H. Buck-Sorlin, Benno S. Burema, Jochem B. Evers, Gerie W.A.M. van der Heijden, Ep Heuvelink, Leo F.M. Marcelis, Paul C. Struik, Pieter H.B. de Visser, Theo H.J. Damen, Jan Vos: Virtual rose: a new tool to optimize plant architecture in glasshouse rose production systems. Proceedings of FSPM'07, Napier, New Zealand, November 4-9, 2007, p. 48-1.

<http://www.algorithmicbotany.org/FSPM07/Individual/P48.pdf>.

Winfried Kurth, Ole Kniemeyer, Reinhard Hemmerling, Jan Vos, Gerhard H. Buck-Sorlin: Genericness, modularity, and mutual embedding of programming paradigms for improved Functional-Structural Plant Modelling. In: 17th New Phytologist Symposium "Systems Biology and the Biology of Systems: How, if at all, are they related?", Buxton, Derbyshire, UK, 13-14th September 2007, p. 7,

<http://www.newphytologist.org/systems/abstractbook.pdf>.

Annette Weidner, Rajeev Kumar Varshney, Gerhard H. Buck-Sorlin, Nils Stein, Andreas Graner, Andreas Börner: Salzstresstoleranz bei Gerste: Assoziationskartierung kontra klassische QTL-Kartierung, *Vortr. Pflanzenzüchtung* 72 (2007), 125-130.

Günter Barczik, Winfried Kurth: From designing objects to designing processes: Algorithms as creativity enhancers. In: Kieferle, J., Ehlers, K. (eds.): Predicting the Future. 25th eCAADe Conference Proceedings, ISBN 978-0-9541183-6-5 (Frankfurt/M., Sept. 26-29, 2007), pp. 887-894.

Dirk Lanwert: Funktions- / Strukturorientierte Pflanzenmodellierung in E-Learning-Szenarien. Dissertation, Universität Göttingen (Fak. f. Forstwissenschaften und Waldökologie), 2007, <http://webdoc.sub.gwdg.de/diss/2008/lanwert/lanwert.pdf>.

2006:

Gerhard H. Buck-Sorlin, Reinhard Hemmerling, Ole Kniemeyer, Benno Burema, Winfried Kurth: New rule-based modelling methods for radiation and object avoidance in virtual plant canopies. In: Fourcaud, T., et al. (eds.): Proceedings of the Second International Symposium on Plant Growth Modeling, Simulation and Visualization (PMA06), Beijing, China, November 13-17, 2006, *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics* (in press).

Winfried Kurth, Gerhard Buck-Sorlin, Ole Kniemeyer: Relationale Wachstumsgrammatiken: Ein Formalismus zur Spezifikation multiskalierter Struktur-Funktions-Modelle von Pflanzen. In: Modellierung pflanzlicher Systeme aus historischer und aktueller Sicht. Symposium zu Ehren von Prof. Dr. Dr. h.c. Eilhard Alfred Mitscherlich, *Schriftenreihe des Landesamtes für Verbraucherschutz, Landwirtschaft und Flurneuordnung Brandenburg*, Reihe Landwirtschaft, Band 7 (2006), pp. 36-45.

Gerhard Buck-Sorlin, Ole Kniemeyer, Winfried Kurth: Physiologie und Morphologie der Pappel (*Populus* sp.) modelliert mit Relationalen Wachstumsgrammatiken. In: Wunn, U. (ed.): DVFFA Sektion Forstliche Biometrie und Informatik, 17. Tagung, Freiburg, 26.-28. 9. 2005. *Die Grüne Reihe* (ISSN 1860-4064), pp. 1-11.

Andrea Matros, Steffen Amme, Barbara Kettig, Gerhard H. Buck-Sorlin, Uwe Sonnewald, Hans-Peter Mock: Growth at elevated CO₂ concentrations leads to modified profiles of secondary metabolites in tobacco cv. SamsunNN and to increased resistance against infection with potato virus. *Plant Cell And Environment* 29 (1) (2006), 126-137.

Annette Weidner, Rajeev Kumar Varshney, Gerhard H. Buck-Sorlin, Ulrike Lohwasser, Nils Stein, Andreas Graner, Andreas Börner: QTLs for salt tolerance of three different barley mapping populations. *In: Börner, A., Pánková, K., Snape, J.W. (eds.): Proc. 13th Intern. EWAC Workshop, June 27 - July 1, 2006, Prague, Czech Rep. (2006), pp. 51-55.*

Annette Weidner, Folkard Asch, Said Abdul Wali Dadshani, Gerhard H. Buck-Sorlin, Andreas Börner: Improving crop salt tolerance: a worldwide challenge for plant nutrition and plant breeding. *In: 1st Joint Conference of the German Society for Plant Nutrition – DGP and the Research Centre Biotechnology & Plant Breeding University Hohenheim "Plant Nutrition meets Plant Breeding", Hohenheim, 26. – 28. 9. 2006.*

2005:

Winfried Kurth, Ole Kniemeyer, Gerhard H. Buck-Sorlin: Relational Growth Grammars – A Graph Rewriting Approach to Dynamical Systems with a Dynamical Structure. *In: Banâtre, J.-P., Fradet, P., Giavitto, J.-L., Michel, O. (eds.): Unconventional Programming Paradigms. Lecture Notes in Computer Science 3566 (2005), 56-72.*

Gerhard H. Buck-Sorlin, Ole Kniemeyer, Winfried Kurth, Barley morphology, genetics and hormonal regulation of internode elongation modelled by a Relational Growth Grammar. *New Phytologist* 166 (2005), 859-867.

2. Arbeits- und Ergebnisbericht

2.1 Ausgangsfragen und Zielsetzung des Projekts

Die Repräsentation der Verknüpfung von pflanzlicher Struktur und Funktion in Simulationsmodellen stellt hinsichtlich Transparenz des Codes, Skalierbarkeit, Wiederverwendbarkeit und Kombinierbarkeit von Teilmodellen aufgrund der involvierten Komplexitäten eine besondere Herausforderung dar. Dieser sollte durch eine geeignete Modellspezifikationsprache und weitere Werkzeuge aus der Informatik begegnet werden. Im Vorgängerprojekt (Teilprojekt 9 der FOR 472/1 "Virtual Crops", KU 847/5-1,2) wurden der Formalismus der Relationalen Wachstumsgrammatiken (parallele Graphgrammatiken als Verallgemeinerung von L-Systemen), die Programmiersprache XL zu dessen Nutzung und eine entsprechende Entwicklungs- und Visualisierungssoftware, GroIMP (Growth-grammar related Interactive Modelling Platform), in Vorversionen entwickelt und an einfachen Beispielen erprobt. Ziele des hier referierten, ursprünglich auf 3 Jahre angelegten Projekts waren:

- (a) Nachweis der Eignung der Sprache XL für komplexere, mehrere Skalenebenen (Gene / Metabolismus / Morphologie des Individuums) umfassende *Functional-Structural Plant Models* (FSPM) an einem biologisch/agronomisch relevanten Beispiel. Dazu vorgesehen war ein Modell der Kulturgerste (*Hordeum vulgare* L.) unter besonderer Berücksichtigung des Stickstoffmetabolismus, des Wachstums und der Architekturentwicklung. Teilbausteine sollten ökophysiologische Modelle der N-Nutzungs-Effizienz und ein Sink-Source-basiertes Modell für C- und N-Flüsse in der Pflanze sein.
- (b) Entwicklung und Einsatz eines solchen FSPM als Forschungswerkzeug in Interaktion mit experimentell arbeitenden Wissenschaftlern.
- (c) Ein 3D-Gewebemodell des apikalen Meristems; hierzu sollte die Sprache XL entsprechend weiterentwickelt werden.
- (d) Verbesserung der Sprache XL hinsichtlich Transparenz und leichter Aufrufbarkeit häufig benutzter Funktionalitäten im Zusammenhang mit FSPM.
- (e) Auch die Modellierplattform GroIMP, die das Arbeiten mit XL erst ermöglicht, sollte anwenderfreundlicher gemacht werden, und es sollten Schnittstellen, u.a. für die Netzwerkvisualisierung, ergänzt werden.

2.2 Entwicklung der durchgeführten Arbeiten

Hinsichtlich der Projektorganisation und -durchführung waren drei Probleme zu bewältigen:

- Das Projekt ist nur für eine Laufzeit von 2 Jahren bewilligt worden.

Abhilfe: Auf das 3D-Meristemmodell (Arbeitspaket C im Antrag) sowie auf die geplanten Gewächshausversuche zur Stickstoffnutzungseffizienz bei Gerste (Arbeitspaket D) musste von vornherein verzichtet werden. Außerdem wurde Herr Kniemeyer, der sein Promotionsvorhaben im Vorgängerprojekt begonnen hatte, zeitweise aus Uni-Mitteln querfinanziert (vom 1. 4. 2005 bis 30. 9. 2006).

- Die mit der Abteilung Molekulare Zellbiologie (MZB) des IPK Gatersleben vereinbarte Kooperation zur empirischen Untersuchung und Modellierung der Stickstoffnutzungseffizienz bei Gerste kam nicht zustande.

Zu den Gründen gehörte der Wegfall der Förderung für das Teilprojekt 3 der FG „Virtual Crops“ (bis 2005 von der DFG gefördert), die am IPK vorgesehen war – dies verminderte den Anreiz bei der Abt. MZB und schränkte deren finanziellen Spielraum ein. Hinzu kam die Ablehnung eines gemeinsamen Manuskripts durch gleich zwei internationale Zeitschriften. Mit

diesem Artikel sollte die experimentelle Grundlage für ein multiskaliertes *Proof-of-Concept*-Modell der NUE bei Gerste gelegt werden. Die Ablehnung führte letztlich zu einer deutlichen Abkehr der Abt. MZB von weiteren gemeinsamen Modelliervorhaben. Wie jedoch der Publikationsliste zu entnehmen ist, wurde die bereits bestehende Kooperation auf dem Gebiet der allgemeinen Physiologie und Genetik fortgeführt (zwei gemeinsame Publikationen), wobei hier vor allem auf die Expertise von Herrn Dr. Buck-Sorlin in der statistischen Modellierung zurückgegriffen wurde.

Abhilfe: Durch die Nutzung bestehender Kontakte zur Universität Göttingen und durch Abschluss eines neuen Kooperationsvertrages wurde es Herrn Kniemeyer ermöglicht, seinen Dienort ab dem 1. 10. 2006 an die Abteilung Ökoinformatik, Biometrie und Waldwachstum der Universität Göttingen (damalige Leitung: Prof. Dr. B. Sloboda) zu verlegen. Er konnte dort auf baummorphologische Daten zurückgreifen und ein C-Allokations-, Wachstums- und Architekturmodell der Buche in XL implementieren (siehe Hemmerling et al. 2008 und Dissertation Kniemeyer, S. 317ff.). Außerdem wurde eine Kooperation mit Prof. Dr. H. Becker (Abteilung Pflanzenzüchtung der Agrarwissenschaftlichen Fakultät der Universität Göttingen) etabliert, der sich allerdings nicht auf die Gerste, sondern auf Raps (*Brassica napus* L.) spezialisiert hat. In der gemeinsam mit ihm betreuten Diplomarbeit von Christian Groer gelang es, ein selbst entwickeltes N- und C-Allokationsmodell mit einem Photosynthesemodell und einem Pflanzenarchitektur- und Wachstumsmodell zu koppeln und einheitlich in XL zu realisieren, womit ein Teil des für Gerste geplanten Arbeitsprogramms in Kooperation mit einem Agronomen an Raps verwirklicht werden konnte (siehe auch unten, 2.3). Ferner wurde es durch die Präsenz von Herrn Kniemeyer in Göttingen möglich, den Einsatz von GroIMP in einem E-Learning-Projekt zur Baum- und Bestandessimulation zu erproben und dies in eine weitere Promotion (D. Lanwert, Fakultät für Forstwissenschaften und Waldökologie der Universität Göttingen) einfließen zu lassen, was die Nutzungsfreundlichkeit, Netzfähigkeit und Erprobung von GroIMP (s. Ziel (e)) gefördert hat.

- Herr Dr. Buck-Sorlin, der im Projekt mit der Weiterentwicklung des Gerstenmodells und mit der (Ko-) Betreuung weiterer Modelliervorhaben betraut war, schied zum 1. 5. 2007 aus dem Projekt aus, um am Wageningen UR (Niederlande) an der Abteilung Crop and Weed Ecology eine Anstellung als Senior Scientist anzutreten (wo er mit den hier im Projekt entwickelten Werkzeugen weiterarbeitet).

Abhilfe: Für Herrn Dr. Buck-Sorlin wurde für 5 Monate die Biologin und Mathematikerin Katarína Smoleňová aus Bratislava für das Projekt eingestellt. Nach kurzer Einarbeitungszeit hat sie sowohl die Sprache XL für computergrafische Pflanzenmodelle erfolgreich eingesetzt (Smoleňová & Hemmerling 2008) als auch das Gerstenmodell ausgebaut (siehe unten, 2.3; noch unpubl.). Allerdings musste bei letzterem weitgehend auf Literaturdaten zurückgegriffen werden.

Durch die zweimalige Neubesetzung von Projektstellen (Hemmerling, Smoleňová) kam es ferner zu Phasen der Vakanz, wodurch sich die Gesamtdauer des Projekts von 24 auf 28,5 Monate (mit abschließenden Hilfskraft-Arbeiten am Ende: auf 33,5 Monate) verlängerte.

2.3 Darstellung der erreichten Ergebnisse und Diskussion

(1) Formalismus der Relationalen Wachstumsgrammatiken

Dieser parallel anwendbare Graph-Grammatik-Typ, der der Sprache XL zugrunde liegt, erfuhr seine mathematische Fundierung durch saubere Einbettung in die bestehende Theorie der Graph-Grammatiken auf kategorientheoretischer Grundlage, einschließlich der erforderlichen Beweise (Dissertation Kniemeyer, S. 89-121). Insbesondere war es nichttrivial, zu zeigen, dass Lindenmayer-Systeme (L-Systeme) mit ihrer gewohnten Semantik als Spezialfall in dem

neuen Formalismus vollständig mit eingeschlossen sind. – In der Diplomarbeit von S. Lobe wird gezeigt, dass verschiedene andere Grammatik-Typen aus der Literatur (u.a. Baum-, Web- und Plexgrammatiken) im Formalismus der Relationalen Wachstumsgrammatiken nachgebildet werden können.

(2) Programmiersprache XL

Diese schon im Vorgängerprojekt konzipierte Sprache, die Java erweitert und gleichzeitig den RGG-Formalismus zugänglich macht, wurde um anwendungsnahe Konstrukte erweitert und syntaktisch auf eine einheitliche Grundlage gestellt: Das Konzept der Operatorüberladung ermöglichte es, die Auswertung rechter Regelseiten elegant und effizient zu implementieren (Diss. Kniemeyer, S. 160ff.; unter Mitwirkung von R. Hemmerling). Es wurden Konstrukte für die einfache Spezifikation von Transportprozessen in Modellen eingeführt (Diss. Kniemeyer, S. 152f. und 323f.). Die Erweiterung durch "Instanzierungsregeln" (S. 182f.) ermöglichte nicht nur eine speicherplatzsparende Darstellung vieler gleichartiger Objekte, sondern auch die XL-Implementation sämtlicher "Multiplikator-Knoten" aus dem interaktiven Pflanzenmodellierungssystem "Xfrog" (Deussen & Lintermann 1997, Deussen 2003) sowie von Erweiterungen hiervon (Diplomarbeit Henke; Publikation nach Reviewing in Überarbeitung). Das Konstrukt der Graph-Queries erlaubte nicht nur eine einheitliche Syntax für linke Regelseiten und die Implementation sensitiver Regelanwendungen, sondern als Zusatznutzen eine einfache Spezifikation von Analyse-Anfragen an simulierte wie an digitalisierte echte Pflanzen, analog etwa zur AmapMOD-Analysesoftware (Posterbeitrag auf der FSPM'07 in Napier; S. 742 in Hemmerling et al. 2008). Es gelang, die Sprache XL so zu erweitern, dass auch die Vertex-Vertex-Algebra (vv) von Smith (2006) damit simuliert werden kann, was ein dynamisches Modell einer sich in Verzweigungen ausstülpenden Meristem-Oberfläche (als 2-dimensionales Netzwerk) ermöglichte (Diss. Kniemeyer, S. 335ff.). Damit wurde immerhin ein Teilschritt in Richtung des Zieles (c), siehe 2.1, erreicht. In Arbeit sind zur Zeit Sprachkonzepte für Interpolation und zur einfachen Erstellung von Animationen (Masterarbeit Mannl). Ferner wurden Teile des XL-Sprachumfangs außerhalb der Grundimplementation (in der Software GroIMP) auch als Plugins für die kommerziellen 3D-Modellierungswerkzeuge Cinema4D, Maya und 3DStudiomax zur Verfügung gestellt (studentische Arbeiten).

(3) Software GroIMP

Die XL-Entwicklungs- und Visualisierungsumgebung GroIMP (Growth-grammar related Interactive Modelling Platform), von der eine lauffähige und offen zugängliche Version schon aus dem Vorläuferprojekt vorlag, wurde in wichtigen Teilaspekten weiterentwickelt und anwenderfreundlicher gemacht:

- Es wurde ein Strahlungsmodell implementiert, welches auf Monte-Carlo-Raytracing beruht und als Bibliotheksmodul von GroIMP heraus in beliebigen, in XL geschriebenen Modellen sehr einfach aufrufbar ist. Damit lassen sich Szenen mit beliebig vielen, (auch spektral) unterschiedlichen Lichtquellen und eine beliebige Anzahl virtueller Lichtsensoren simulieren. Schon zuvor war für zeiteffizientere Strahlungsabfragen und für Vergleichszwecke ein einfacheres Beschattungsmodell implementiert worden, welches auf dem Beschattungskegel-Prinzip (Pretzsch, Pfreundt) beruht und ältere, schon in der Vorgängersoftware Grogra verwendete Ansätze portierte. Beide Modelle wurden publiziert und u.a. im Gerstenmodell eingesetzt (Buck-Sorlin, Hemmerling et al. 2006, 2008). Das Raytracingmodell wurde auch für einen fotorealistischen Renderer für die Visualisierung virtueller Pflanzenbestände herangezogen und in mehreren studentischen Arbeiten um Komponenten für Photon Tracing, bidirektionales Raytracing, Metropolis Light Transport, Radiosity, und für schnelles, paralleles Raytracing auf der Grafikkarte ergänzt.

- In einem gesonderten Fenster der GroIMP-Benutzungs Oberfläche wurde eine 2-dimensionale, editierbare Graphansicht verfügbar gemacht, die eine bessere Übersichtlichkeit des Graphtransformationsprozesses für die Benutzer und eine Unterstützung des Debuggings der Regeln ermöglicht (Diplomarbeit Fonkeng). Diese Algorithmen wurden auch für die interaktive Visualisierung metabolischer Netzwerke verfügbar gemacht (vgl. Ziel (e); Diplomarbeit Zhao).
- Bibliotheksfunktionen für die einfache Erzeugung und Anzeige von modellgenerierten Funktionsverläufen (Charts), insbes. zur Visualisierung der zeitlichen Verläufe von Modellvariablen, wurden bereitgestellt (vgl. Abb. unten).
- Es wurden Datenschnittstellen implementiert für die Austauschformate DXF, X3D (bidirektional), GraphML, OBJ, Xfrog, PDB, DTD (nur Import) und MTG (nur Import, Teilumfang) (s.a. Dissertation Kniemeyer, S. 389). Dies wurde von verschiedenen Anwendern gewünscht und hat den Austausch von Modellen und Modellergebnissen erleichtert. Von großer praktischer Bedeutung ist auch die neu geschaffene Möglichkeit des Exports von Tabellen (von Simulationsergebnissen) nach Microsoft Excel und in andere Dokumentenformate. Ferner wurden Arbeiten an einem allgemeinen, XML-orientierten Datenaustauschformat für multiskalierte Pflanzenmodelle auf Graphen-Basis begonnen ("MSML", Diplomarbeit S. Schneider).
- Aus Mitteln für studentische Hilfskräfte wurde am Ende des Projekts eine webfähige Schnittstelle zur Modellvernetzungsplattform OpenALEA, einem an INRIA/CIRAD Montpellier von Godin und Pradal (Pradal et al. 2008) betriebenen Open-Source-Projekt, implementiert, die zur Zeit in der Erprobungsphase ist (gemeinsame Publikation geplant).

GroIMP wurde verschiedenen Benchmark-Tests und Vergleichen mit anderen Graphtransformations-Softwaretools unterzogen (AGTIVE Tool Contest, s. Taentzer et al. 2008, Rensink et al. 2008, Varró et al. 2008, und Diss. Kniemeyer, S. 347ff.), wobei sowohl hinsichtlich Rechenzeit- und Speichereffizienz als auch in der visuellen Performanz GroIMP zur Spitzengruppe zählte. Zum Vergleich von GroIMP mit dem kommerziellen "Konkurrenzprodukt" LStudio sei auf Hemmerling et al. (2008), S. 749 verwiesen.

Zur Verbesserung der internationalen Zugänglichkeit und zur Öffnung als echtes, webbasiertes Open-Source-Projekt wurde GroIMP mitsamt Quellcode ab Version 0.9.6 unter Sourceforge veröffentlicht (<http://sourceforge.net/projects/groimp>; siehe aber auch <http://www.grogra.de>). Die Zahl der Downloads bewegt sich im vierstelligen Bereich (Stand 31. 1. 2009: 9917), wobei die FSPM-Tagung von 2007 einen starken Anstieg markierte, und es gab zahlreiche Anfragen aus dem In- und Ausland.

Uns bekannte Arbeitsgruppen, die GroIMP intensiver verwenden, gibt es an den Universitäten Göttingen, Wageningen, Hangzhou, und an der MediaDesign-Hochschule Berlin. An der BTU Cottbus wurden zwei Workshops und zwei Tutorials mit internationaler Beteiligung zu XL und GroIMP organisiert, ferner fanden zwei GroIMP-Kurse in Hangzhou statt. Zwecks Einarbeitung in XL fanden zwei mehrmonatige Gastaufenthalte ausländischer Nachwuchswissenschaftler an der BTU Cottbus statt (B. Burema von Wageningen UR (NL) und Tully Yates von Rothamsted Research, Harperden (UK)).

GroIMP gehört in der internationalen FSPM-Community inzwischen zu den führenden regelbasierten Modellierplattformen. Es wird heute an zwei verschiedenen Abteilungen der Wageningen UR (CWE und PRI) im Rahmen der Projekte "Virtual Rose" und "Mobile Lighting in Greenhouses" verwendet, und es ist innerhalb der Abteilung CWE geplant, für die Modellierung von Weizen demnächst ganz von der kommerziellen Software LStudio nach GroIMP zu wechseln. Außerdem hat Herr Buck-Sorlin GroIMP durch eine Vorlesungsreihe und ein Praktikum an der Zhejiang University (Hangzhou, China) eingeführt. Die Akzeptanz ist sehr gut, da mittlerweile eine intuitive Nutzer Oberfläche vorliegt; die klare Struktur und das

von den neuen Nutzern (v.a. aus den Bereichen Gartenbau, Landwirtschaft und Biologie) als sehr nützlich bewertete Modellportfolio tragen offenbar ebenfalls zur Akzeptanz bei. Letztlich wird auch die Tatsache positiv aufgeführt, dass GroIMP eine freie, auf Java basierende Software ist. Dieser Umstand wird vor allem in finanzschwächeren Ländern und Institutionen von Bedeutung sein. – Obwohl die fachübergreifende, projektbezogene Zusammenarbeit, v.a. mit den Arbeitsgruppen am IPK Gatersleben, im Berichtszeitraum noch nicht den von uns gewünschten Status erreichen konnte, ist die internationale Gemeinschaft gleichwohl auf die von uns in mehreren Publikationen vorgestellten Ideen und Initiativen aufmerksam geworden. Vornehmlich vertraten wir hier die Auffassung, dass es sich bei unserem Ansatz der multiskalierten FSP-Modellierung um "Systembiologie auf einer höheren Skalenebene" handelt (vgl. a. Kurth et al. 2007). In der Folge erhielt Herr Buck-Sorlin seit 2005 mehrere Einladungen zu systembiologischen Tagungen und Workshops (Mai 2005: Norwich, UK; Juni 2005: Hangzhou, China; September 2007: Buxton, UK), auf denen er unseren Ansatz auch den eher molekularbiologisch arbeitenden Kollegen vorstellen konnte.

(4) Rapsmodell

In der Diplomarbeit (Studiengang Informatik) von Christian Groer wurde ein FSPM des Winterrapses erstellt, in dem die Stickstoffnutzungseffizienz (NUE) eine zentrale Rolle spielt und in dem ein Mechanismus zum Transport von Assimilaten implementiert ist, der global (d.h. auf der Pflanzenindividuenzebene) das relative Sink-Strength-Konzept realisiert, nach dem ein wachsendes Organ mit anderen Organen des gleichen Typs um Assimilate konkurriert. In diesem Modell ist jedes simulierte Blatt an eine Instanz des LEAFC3-Modells gekoppelt. Weiterhin wurde das LEAFC3-Modell in Anlehnung an die Arbeiten von Müller et al. (2005) erweitert, um die einzelnen Photosyntheseparameter N-sensitiv (d.h. auf die Konzentration des angebotenen Stickstoffs im Boden bzw. im Blatt reagierend) zu machen. Um den Einfluss der zeitlichen Dynamik der Stickstoffdüngung auf die Ertragsbildung beim Winterraps (das als Kulturart mit besonders schlechter NUE bekannt ist) zu untersuchen, erstellte Herr Groer zusätzlich noch in XL Optimierungsfunktionen, mit denen er Algorithmen zur Auffindung optimaler Düngungsszenarien testete. Die Arbeit wurde unter Cobetreuung von Herrn Prof. Dr. H. Becker (Universität Göttingen) durchgeführt, der hierfür auch Datensätze aus Feldversuchen zur Verfügung stellte. Die resultierende Diplomarbeit war von sehr gutem wissenschaftlichem Wert, daher wurde ein Auszug aus der Arbeit bei der Tagung FSPM'07 in Napier (Neuseeland) von Herrn Buck-Sorlin als Vortrag vorgestellt. Der eingereichte dreiseitige Abstract erreichte einen Spitzenplatz im Ranking durch die Reviewer, die vor allem den innovativen Charakter des Modells lobten ("weltweit erstes Raps-FSPM mit NUE-Einbindung"). Ein an *Functional Plant Biology* eingereichtes Manuskript über das Modell befindet sich nach erstem Review in Überarbeitung.

(5) Arabidopsismodell

Im Zusammenhang mit den beiden in GroIMP integrierten Strahlungsmodellen wurde im Rahmen eines Praktikums von Herrn Benno Burema (Wageningen UR, NL) an der BTU Cottbus sowie am IPK Gatersleben zwischen September und Dezember 2006 ein in XL geschriebenes Modell zur Simulation der lokalen Messung der Lichtqualität von Blättern in *Arabidopsis thaliana* angefertigt. Dieses Modell bildet die komplette vegetative Entwicklung ab und enthält außerdem eine einfache Funktion zur Ableitung des aktivierten Phytochrom-Verhältnisses (Pfr/P) aus der Lichtqualität (Verhältnis des Rotlichts (R) zum Infrarotlicht (FR) einer bestimmten Wellenlänge: Dieses Verhältnis ist im Schatten eines Bestandes aufgrund der Rotlichtabsorption durch das Laub stark erniedrigt).

(6) Gerstenmodell

Zu Beginn des Projekts wurde das aus dem Vorgängerprojekt stammende Modell der Wintergerste erweitert und modifiziert, um die Entwicklung von *Sommergerste* über einen Zeitraum von 120 Tagen zu simulieren (hierfür lag ein detaillierter Datensatz mit Wetterdaten der Station Gatersleben aus dem Jahre 1999 vor). Auch wurde das publizierte Modell LEAFC3 (Nikolov et al. 1995), welches Herr Nikolov Herrn Buck-Sorlin als Delphi-Sourcecode zusandte, in Java übersetzt und in der GroIMP-Modellierumgebung lauffähig gemacht. Voruntersuchungen mit einfacheren Photosynthesemodellen (z.B. ECOPHYS für Pappel, Host et al. 1990) im Jahre 2005 hatten ergeben, dass diese zu ungenau waren. LEAFC3 ist ein Modell vom Farquhar-Typ, d.h., es berechnet die Nettophotosyntheserate als Funktion ausgewählter biochemischer und biophysikalischer Prozesse (Rubisco-Aktivität, Dunkelatmung, Transpiration, Leitfähigkeit der Spaltöffnungen für CO₂,...). Das Modell wurde zunächst für Gerste neu parametrisiert und dann mit Wetterdaten der Station Gatersleben als *Standalone*-Modell getestet, bevor es mit dem Gerstenmodell gekoppelt wurde. Die Ergebnisse des gekoppelten Modells wurden auf einem Workshop in Wageningen im März 2006 vorgestellt.

Im Frühjahr 2007 wurde das mittlerweile sehr komplexe Gerstenmodell einem kompletten *Refactoring* unterzogen, d.h. es wurde programmtechnisch in einzelne, miteinander über klar definierte Schnittstellen gekoppelte Module aufgeteilt. Außerdem wurde das 2004/05 erstellte Biosynthesenetzwkmodell der Gibberellinsäurebiosynthese um ein Modul erweitert, das die Signalkaskade von der Erzeugung des bioaktiven GA1 zum beobachteten Effekt (Streckung der Internodien als Funktion der Konzentration des LUE1-Proteins) modelliert. Mit diesem Signaltransduktionsnetzwerk konnten qualitativ die Phänotypen mehrerer Gerstenmutanten simuliert werden, welche nicht oder nur eingeschränkt auf die externe Gabe von GA1 reagieren. – Mit dem refaktorierten Gerstenmodell, welches nun neben dem morphologischen Modell zwei Lichtmodelle, ein Photosynthesemodell sowie ein Biosynthese- und Signaltransduktionsnetzwerk für Gibberellinsäure enthält, wurden von März bis April 2007 umfangreiche Simulationsstudien durchgeführt, zunächst mit dem Ziel, das komplexe Strahlungsmodell zu testen. In einem weiteren Schritt wurde dann ein virtueller Bestand (neun Gerstenpflanzen) simuliert, in dem die Parameter "Pflanzenabstand" und "Pfr/P-Schwellenwert für Bestockung" getestet wurden. Letzterer Parameter stellt den Versuch einer (theoretischen) Quantifizierung der Beschattungstoleranz dar, d.h. je kleiner der Wert gewählt wird, desto beschattungstoleranter ist die Pflanze. Diese Arbeiten, deren Vorläufer bei der Tagung PMA'06 in Beijing im Rahmen eines Vortrags präsentiert wurden, resultierten in einer Publikation in *Annals of Botany*.

Durch Katarína Smoleňová wurde in der Endphase des Projekts eine neue Version des Gerstenmodells konzipiert, die auf einem klassischen ökophysiologischen, kompartimentbezogenen Modell von Johnson & Thornley (1985) für die Licht-, Temperatur- und N-Abhängigkeit des Wachstums basiert und dieses (mit der Annahme einer uniformen Assimilatverteilung für gleichartige Organe) auf die einzelnen Organe herunterbricht. Das Photosynthesemodell wird weiterhin über das GroIMP-Raytracing-Strahlungsmodell angetrieben, berücksichtigt jetzt aber auch den N-Gehalt der Pflanze. Ferner sind Submodelle für Respiration, Seneszenz, N-Aufnahme, Mineralisation und Düngemittel-Anwendung integriert. Die N-Aufnahme hängt positiv vom C-Vorrat der Pflanze und vom N-Gehalt des Bodens ab und negativ von der N-Konzentration in der Pflanze. Höhere N-Zufuhr bewirkt im Modell eine größere Spross- und eine geringere Wurzelmasse. Die Abbildung zeigt einen Screenshot von GroIMP aus einer Simulation mit einem spezifischen N-Regime (Chart). Die Kalibrierung des Modells im Hinblick auf die Organ-Abmessungen ist noch nicht abgeschlossen.

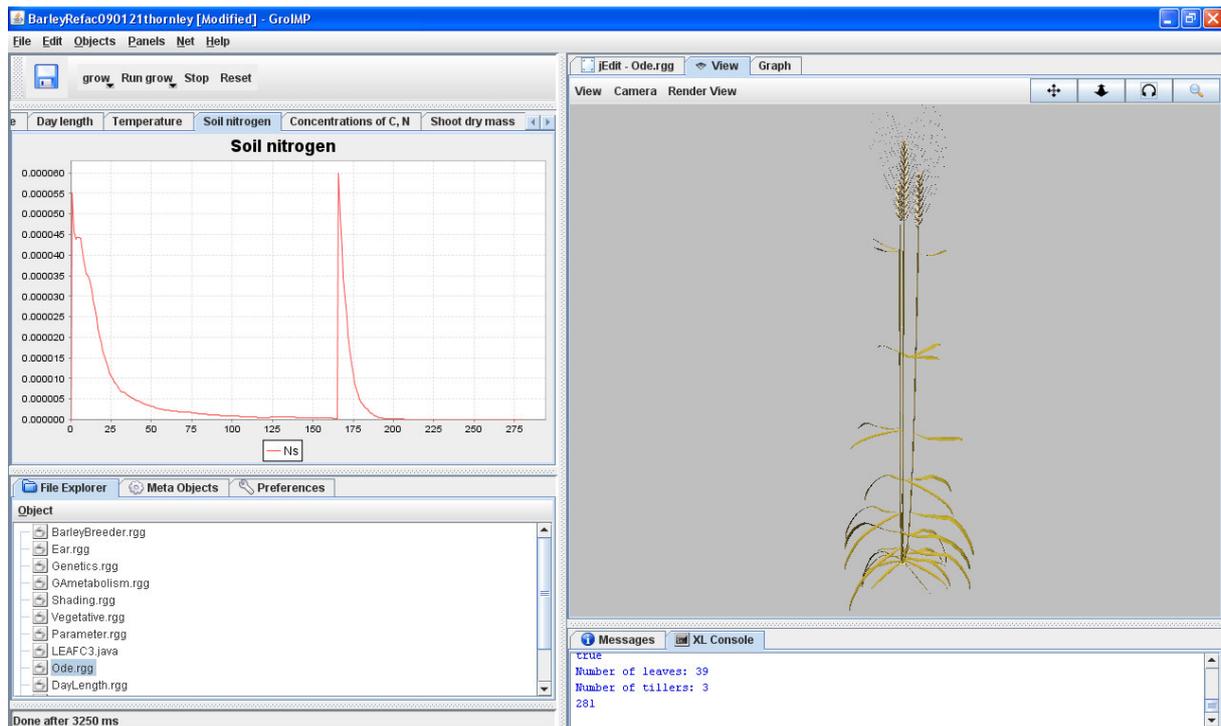


Abb.: GroIMP-Screenshot der aktuellen Version des ökophysiologischen Gerstenmodells, mit Berücksichtigung von N-Düngung (hier mit 2 Düngemaßnahmen, am Beginn und in der Mitte der Vegetationsperiode) – K. Smoleňová, noch nicht publiziert.

(7) Weitere Modelle

Ein oberirdisches Verzweigungsmodell für jüngere Buchen (*Fagus sylvatica* L.) berücksichtigt Strahlung, Photosynthese, Atmung und C-Transport und wurde zusammen mit einem einfacheren Fichtenmodell für eine Bestandessimulation mit emergenten Konkurrenzeffekten herangezogen. Das Modell ist nicht quantitativ validiert; es wurde als Beispiel für die skalenübergreifende Verwendbarkeit von GroIMP auf dem FSPM'07-Kongress präsentiert und publiziert (Hemmerling et al. 2008; s.a. Diss. Kniemeyer, S. 317ff.).

Ein Gegenstück zu diesem morphologisch präzisen Baummodell stellte die XL-Reimplementierung eines auf J. Pfreundt und B. Sloboda zurückgehenden, für Fichte parametrisierten Modells dar, in welchem die Krone nicht verzweigt repräsentiert wird, sondern vereinfachend aus der Überlagerung der Verteilungsfunktionen der Blattdichten für die verschiedenen Blattaltersstufen besteht. Das Lichtmodell verwendet hier den Beschattungskegel-Ansatz; auch hier sind Konkurrenzeffekte im Modell reproduzierbar (Diss. Lanwert; Publikation im Rahmen eines Lehrbuchs im Springer-Verlag für Sommer 2009 konkret geplant).

In der Dissertation Kniemeyer (S. 258ff. und 296ff.) wird eine Reihe weiterer, in XL realisierter Pflanzenmodelle vorgestellt. Diese belegen die Eignung der Sprache für eine Vielfalt unterschiedlicher Modellspezifikationen. Weitere Beispiele weiten das Einsatzfeld aus auf agentenbasierte Modelle, "Artificial Life"-Experimente und Gebäudearchitektur.

Tagungsreisen, Publikationen

1. Workshop "Functional-Structural Plant Modelling in Crop Production" im März 2006, Wageningen (NL). Teilnehmer aus der Arbeitsgruppe: O. Kniemeyer, G. Buck-Sorlin. Mitgliedschaft im Scientific Committee: G. Buck-Sorlin. Arbeit als Reviewer: O. Kniemeyer, W. Kurth, G. Buck-Sorlin. Zwei Vorträge und drei Kapitel im resultierenden Buch (siehe Publikationsliste).

2. Aufenthalt von G. Buck-Sorlin an der Zhejiang University, Hangzhou (V.R. China) als Gastprofessor am 985 Institute of Agrobiolgy and Environmental Sciences, Oktober/November 2006 (siehe separaten Abschlussbericht zum DFG-Reisemittelantrag Nr. 446 CHV 111/15/06). Dieser Aufenthalt diente hauptsächlich der Vermittlung von Grundkenntnissen und der Einführung von GroIMP in der dortigen Arbeitsgruppe. Weiterhin wurde durch die Cobetreuung der Doktorarbeit von Herrn Xu Lifeng seit Oktober 2006 der Grundstein für eine Zusammenarbeit gelegt, die sich mit der Anwendung der FSP-Modellierung in populationsgenetischen Modellen befassen wird. Das Thema der Doktorarbeit von Herrn Lifeng ist die Erstellung eines Reis-FSPM, unter besonderer Berücksichtigung der Modellierung der quantitativen Vererbung komplexer Merkmale wie Kornertrag. Ein Gastaufenthalt von Xu Lifeng in Göttingen ist kürzlich vom DAAD bewilligt worden.
3. Konferenz PMA06, November 2006, Beijing, V.R. China. Teilnehmer, Reviewer, Mitglied im Program Committee: G. Buck-Sorlin. Ein Vortrag, zwei Publikationen.
4. New Phytologist-Symposium "Systems Biology and the Biology of Systems", September 2007 (Einladung erfolgte jedoch noch während der Arbeit von Herrn Buck-Sorlin im Projekt, und Vortrag widmete sich der Darstellung von XL und GroIMP als Hilfsmittel zur Lösung systembiologischer Fragestellungen). Abstract plus resultierende Erwähnung von GroIMP in einem Editorial der Zeitschrift *New Phytologist* (<http://www.blackwell-synergy.com/doi/pdf/10.1111/j.1469-8137.2007.02315.x>).
5. Konferenz "Applications of Graph Transformations with Industrial Relevance" AGTIVE '07, Oktober 2007, Kassel. Teilnehmer aus der Arbeitsgruppe: O. Kniemeyer, W. Kurth, J. Dérer. 4 Vorträge, 5 Publikationen in *Lecture Notes in Computer Science*.
6. FSPM'07, November 2007, Napier, Neuseeland. Teilnehmer aus der Arbeitsgruppe: R. Hemmerling, J. Dérer, (G. Buck-Sorlin: zu diesem Zeitpunkt bereits in Wageningen angestellt). Mitgliedschaft im FSPM Program Committee: W. Kurth und G. Buck-Sorlin; zwei Vorträge und vier Poster, eine Publikation in *Functional Plant Biology*, eine andere noch in Überarbeitung.
7. "Spring Conference on Computer Graphics" SCCG08, April 2008, Budmerice, Slowakei. Teilnehmer aus der Arbeitsgruppe: R. Hemmerling, K. Smoleňová, Th. Huwe. Zwei Vorträge, zwei Publikationen im Tagungsband (eine davon befasst sich ausschließlich mit Computergrafik).

Weitere Publikationen siehe Publikationsliste unter 1.

Erfüllung der unter 2.1 genannten Ziele

- (a) wurde weitgehend, aber nicht ganz in der geplanten Form für Gerste erreicht; bei der Stickstoffnutzungseffizienz fehlt im aktuellen Gerstenmodell der Anschluss an die Genom- und Metabolismus-Ebene. Es fehlte hier an adäquaten Datensätzen; zu den Gründen siehe 2.2.
- (b) wurde leider nur sehr punktuell erreicht. Zur längerfristigen, engen Kooperation von Experimentatoren und Modellierern scheint ein gemeinsames Verbundprojekt mit von vornherein klaren Verbindlichkeiten zum Daten- und Modellaustausch förderlich zu sein; dies war nach dem Ende der FG "Virtual Crops" nicht mehr gegeben.
- (c) musste aus Zeitmangel und aus Gründen der Schwierigkeit der Aufgabe zunächst aufgeschoben werden; es wurde lediglich ein 2D-Modell einer Meristemoberfläche in XL realisiert (ohne Anbindung ans Gerstenmodell).
- (d) und (e) wurden voll erfüllt.

Geplante Folgeuntersuchungen

Der Aufbau und die Validierung eines einheitlichen, in XL implementierten FSPM, das die Spanne von der Genom- über die metabolische, Organ- und Individuen- bis zur Bestandesebene abdeckt, steht weiterhin auf der Agenda. Hierfür ist eine Beteiligung an einem größeren Verbundprojekt unter Einbeziehung von Molekularbiologen geplant, wobei von vornherein "Tandemlösungen" von eng kooperierenden Experimentatoren und Modellierern innerhalb der einzelnen Arbeitsgruppen in der Projektstruktur vorgesehen werden sollten. Als Voraussetzung hierfür soll als nächstes die Dokumentation von XL entscheidend verbessert werden.

In einem ersten Schritt wird hierfür zur Zeit in Göttingen ein Webportal mit einer kommentierten Sammlung von Beispielmodellen aufgebaut. – Im übrigen sind die Voraussetzungen für eine derart umfassende Anwendung von XL und GroIMP nach den in diesem Projekt erfolgten Verbesserungen inzwischen sehr viel besser als 2005.

Ein wichtiger, klassischer Modellformalismus in Biologie, Chemie und Physik sind Differentialgleichungen. Durch eine gezielte Erweiterung von XL und durch Einbindung vorhandener Numerik-Bibliotheken soll in einem bereits begonnenen Promotionsvorhaben den Anwendern ermöglicht werden, passende Solver für Anfangswertaufgaben, wie sie etwa bei Diffusions-, Transport- oder biomechanischen Problemen auftreten, auf einfache Weise aus XL-Programmen heraus aufzurufen. Eine weitere, potenzielle Erweiterung von XL zielt auf selbstreferenzielle Regelanwendung: Durch Regeln, die Regelsysteme umschreiben, ließen sich insbesondere Evolutionsprozesse simulieren. Außerdem bleibt die adäquate Spracherweiterung zur Modellierung volumenbasierter 3D-Strukturen, insbesondere für Gewebemodelle, ein offenes Problem.

Aus Anwendersicht wäre schließlich eine noch stärkere Modularisierung von XL-Programmen wünschenswert, etwa derart, dass für ein neues Pflanzenmodell lediglich aus vorhandenen, parametrisierbaren Struktur- und Funktions-"Bausteinen" ausgewählt werden muss. Ein geplantes Folgeprojekt soll einen solchen "Baustein-Katalog" erarbeiten und zugleich (im softwaretechnischen Sinne) "Entwurfsmuster" für regelbasierte Programme konzipieren bzw. anpassen und testen.

International gibt es bereits eine Folgeanwendung von GroIMP als Modellplattform für das Projekt "Virtual Roses", das die Vorhersage der Qualität und Quantität von Schnittrosen aus holländischer Gewächshausintensivkultur zum Ziel hat. Geplante Produkte für die beteiligten Rosenproduzenten sind ein Decision-Support-Werkzeug (Optimierung von Treibhausparametern) sowie ein Visualisierungstool für die Anleitung von Erntehelfern (Folgen von Eingriffen wie Ernte, Zurückschneiden, Biegen von Sprossen, auf die verbleibende Struktur und zukünftige Erntequalität).

Laut Aussage von Dr. Bruno Andrieu (INRA Grignon, Frankreich) besitzt GroIMP ein erhebliches strategisches Potenzial, da es im Gegensatz zum Konkurrenzprodukt LStudio (Arbeitsgruppe Prusinkiewicz, University of Calgary, Kanada) ein europäisches Projekt ist. Hiermit ergeben sich seiner Meinung nach exzellente Möglichkeiten für weiterführende FSPM-Initiativen auf europäischer Ebene. Das Potenzial von GroIMP hat sich inzwischen dank des informellen Austausches mit INRA-Gruppen in Frankreich weiter herumgesprochen; hieraus ergab sich, dass vor allem Anwendungsperspektiven und Folgeuntersuchungen in den Bereichen Zierpflanzenzüchtung und -anbau abzusehen sind, da es hier auf die realistische Darstellung des "Produktes" sowie auf dessen zeitliche Dynamik ankommt.

2.4 Stellungnahme, ob Ergebnisse des Vorhabens wirtschaftlich verwertbar sind

(s.a. unter 2.3:) GroIMP wird derzeit im Rahmen des von der niederländischen STW (Stiftung für Wissenschaften) und der Productschap Tuinbouw (niederländischer Gartenbauverband) geförderten Projektes "Virtual Roses" zur Erstellung eines FSPM für die Modellierung der Qualität von Schnittrosen verwendet. Sollte dieses Folgeprojekt, das auf den Ergebnissen des hier referierten Projekts aufbaut, erfolgreich abgeschlossen werden (Projektende April 2011), so ist mit mindestens einem potenziell kommerziell verwendbaren Modell zu rechnen. – Ferner gab es eine Anfrage von einem Computerspiele-Entwickler zur Verwendung von GroIMP. Zur Zeit ist noch unklar, ob hier eine Kooperation zustande kommt.

2.5 Wer hat zu den Ergebnissen des Projekts beigetragen?

ProjektmitarbeiterInnen:

Ole Kniemeyer: Mathematische Fundierung der relationalen Wachstumsgrammatiken, Sprachentwurf (XL), Implementation von GroIMP, Erstellung von Beispielmodellen (insbes. Buchenmodell), Beratung, Betreuung von Graduierungsarbeiten und Praktika.

Gerhard Buck-Sorlin: Beratung in biologischen Fragen, Mitwirkung bei der Spracherweiterung und beim Design von GroIMP, Softwaretests, biologische Modellierung, Leitung von Kursen und Praktika, internationale Kontakte.

Reinhard Hemmerling: Beteiligung am Sprachentwurf und an der GroIMP-Implementation (Schwerpunkt Visualisierung), Modellerstellung, Betreuung von Seminaren, Praktika und Graduierungsarbeiten.

Katarína Smoleňová: Modellerstellung in XL (Erweiterung des Gerstenmodells).

Jan-Anton Dérer (wiss. Hilfskraft): Beteiligung an der GroIMP-Implementation (Import- und Exportfilter, Analysefunktionen).

Uwe Mannl (stud. Hilfskraft): Beteiligung an der GroIMP-Implementation (Import- und Exportfilter, Kooperation mit Arbeitsgruppe OpenALEA, Montpellier).

ferner weitere studentische Hilfskräfte; siehe auch 2.6.

Kooperationspartner:

Benno Burema (Wageningen UR): Erstellung des Arabidopsis-Modells in XL mit angebundenem Lichtqualitäts- und Phytochrommodell.

Christophe Godin und *Christophe Pradal* (INRIA / CIRAD, Montpellier): Schnittstelle zwischen GroIMP und OpenALEA.

Heiko Becker (Universität Göttingen): Bereitstellung physiologischer und phänologischer Rapsdaten, Mitbetreuung einer Diplomarbeit.

Branislav Sloboda (Universität Göttingen): Ermöglichung des Gaststatus für Ole Kniemeyer in Göttingen, Bereitstellung baummorphologischer Daten.

Dirk Lanwert (Universität Göttingen): Erstellung eines XL-Baum- und Bestandesmodells, Einsatz in E-Learning-Projekt.

Tully Yates (Rothamsted Research, Harpenden, UK): Kopplung von GroIMP mit metabolischem Netzwerkmodell.

Verschiedene Mitglieder der internationalen FSPM-Community haben durch Diskussionen, Vortragseinladungen, Workshops etc. wichtige Anregungen gegeben, die in die Entwicklung der Sprache XL, der Software GroIMP und exemplarischer Modelle eingeflossen sind. Hier sind insbesondere zu nennen: Jan Vos, Pieter deVisser, Jochem Evers (alle WUR, Wageningen, NL), Jan Kim (MU Lübeck, später Univ. of East Anglia, Norwich, UK), Loïc Pagès (INRA, Avignon), Jun Zhu (Zhejiang Univ. Hangzhou, China), Philippe de Reffye und Paul-Henry Cournède (Ecole Centrale, Paris), Hans-Jörg Kreowski und Caroline von Toth (Univ. Bremen), Matthias Langensiepen (HU Berlin), Axel Hoppe (MediaDesign-Hochschule, Berlin), Falk Schreiber (IPK Gatersleben / Univ. Halle), Günter Barczik (Fak. für Architektur und Städtebau, BTU Cottbus), Sandra Müller (MPI für Biogeochemie, Jena).

2.6 Qualifikation des wissenschaftlichen Nachwuchses im Zusammenhang mit dem Projekt

- Dr. rer. nat. Ole Kniemeyer hat im Rahmen des Projekts seine Promotion durchgeführt. Seine Stelle wurde vom 1. 10. 2006 bis 31. 3. 2008 aus Projektmitteln finanziert. Seine mit dem Prädikat "*summa cum laude*" ausgezeichnete Dissertation war ein herausragendes Ergebnis des Projekts; sie deckt in ungewöhnlicher Breite die theoretischen Grundlagen, den Sprachentwurf, die Implementation des Softwarewerkzeugs sowie die Modellierung ab. Zahlreiche von ihm (co-)betreute Arbeiten befassten sich mit Teilaspekten der Sprache XL (siehe Tabelle unten).

- Dr. forest. Dirk Lanwert wurde zwar aus einem anderen Projekt (ELAN – E-Learning Academic Network Niedersachsen) finanziert, wesentliche Teile seines abgeschlossenen Promotionsvorhabens wurden aber aus diesem Projekt heraus betreut.
- Dipl.-Inf. Reinhard Hemmerling begann im Rahmen des Projektes sein Promotionsvorhaben (von April bis September 2006), seitdem verfolgt er es auf Mitarbeiterstellen der BTU Cottbus bzw. der Universität Göttingen weiter.
- Katarína Smoleňová, M.Sc. (Mathematik und Biologie), wurde vom 3. 12. 2007 bis 30. 4. 2008 aus Projektmitteln finanziert und verfolgt weiter ihre Promotion am Lehrstuhl Ökoinformatik, Biometrie und Waldwachstum (inzwischen im Rahmen von Stipendien).
- Dipl.-Inf. (FH) Jan Dérer, M.Sc., hat ein eigenfinanziertes Promotionsvorhaben im fachlichen Zusammenhang mit dem Projekt begonnen.
- Dr. rer. nat. Gerhard Buck-Sorlin war vom 15. 12. 2005 bis 30. 4. 2007 als Postdoc im Projekt tätig und wechselte dann ins Ausland.

Dissertationen, Graduiierungs- und Studienarbeiten im Rahmen des Projekts (Übersicht):

Name	Studiengang	Thema	Abgabedatum
<i>Dissertationen</i>			
Lanwert, Dirk	Forstwissenschaften und Waldökologie (Ph.D.)	Funktions-/strukturorientierte Pflanzenmodellierung in E-Learning-Szenarien	17. 4. 2007
Kniemeyer, Ole	Informatik (Ph.D.)	Design and Implementation of a Graph Grammar Based Language for Functional-Structural Plant Modelling	21. 11. 2008
<i>Diplomarbeiten</i>			
Zhao, Dexu	Informatik	Simulation und Visualisierung der Struktur und Dynamik metabolischer Netzwerke mit relationalen Wachstumsgrammatiken	22. 1. 2006
Schneider, Sören	Informatik	Konzeption eines Subsystems für die GroIMP-Plattform sowie eines zugrunde liegenden XML-Datenformats zum Austausch graphbasierter, multiskalierter Strukturen	30. 10. 2006
Groer, Christian	Informatik	Dynamisches 3D-Modell der Rapspflanze (<i>Brassica napus</i> L.) zur Bestimmung optimaler Ertragskomponenten bei unterschiedlicher Stickstoffdüngung	5. 12. 2006
Henke, Michael	Informatik	Entwurf und Implementation eines Baukastens zur 3D-Pflanzenvisualisierung in GroIMP mittels Instanzierungsregeln	21. 12. 2006
Fonkeng, Birka	Informatik	Layout- und Filterverfahren zur Graphdarstellung in GroIMP	9. 6. 2007
Lobe, Sandy	Informatik	Simulation ausgewählter Varianten von Ersetzungssystemen durch relationale Wachstumsgrammatiken in der Sprache XL	(steht kurz vor Abschluss)
<i>Masterarbeiten</i>			
Burema, Benno	Theoretical and Mathematical Biology	„ <i>Arabidopsis silicana</i> “, shade avoidance responses in a virtual model plant	1. 11. 2007
Mannl, Uwe	Informatik	Ausbau der 3D-Plattform GroIMP durch Interpolationsmöglichkeiten und dynamische Animation	(steht kurz vor Abschluss)
<i>Bachelorarbeiten</i>			
Bischof, Udo	Informatik	Anbindung der Programmiersprache XL an die 3D-Modelliersoftware Maya über ein Plugin	13. 9. 2006
Mannl, Uwe	Informatik	Anbindung der Programmiersprache XL an die 3D-Modelliersoftware 3dsMax über ein Plugin	13. 9. 2006
Rogge, Stephan	Informations- und Medientechnik	Generierung von Baumdarstellungen in VRML für den Branitzter Park	14. 12. 2007
Huwe, Thomas	Informations- und Medientechnik	Stochastischer GPU-Strahlenverfolger für GroIMP	16. 1. 2008
<i>Studienarbeiten</i>			
Gräber, Bernd	Informatik	Vergleich von Java und XL anhand des Agentenmodells "Sugarscape"	14. 9. 2006
Klöß, Daniel	Informatik	Realisierung eines erweiterten Sugarscape-Modells in XL	30. 11. 2006
Tauer, Michael	Informatik	Implementation eines Raytracers innerhalb der 3D-Plattform GroIMP	14. 12. 2006
Kopsch, Ralf	Informatik	Erweiterung des bestehenden Raytracers von GroIMP um Photon-Mapping und Radiosity	14. 4. 2008
Steidelmüller, Hagen	Informatik	Erweiterung des bestehenden Raytracers von GroIMP um stochastische Verfahren	20. 9. 2008

Literaturangaben (außer den Publikationen aus dem Projekt):

siehe www.uni-forst.gwdg.de/~wkurth/bericht06_lit.pdf.

3. Zusammenfassung

In den letzten 15 Jahren sind in der Biologie und in den Agrar- und Forstwissenschaften sogenannte Funktions-Struktur-Modelle von Pflanzen (*Functional-structural plant models*, FSPMs) auf Interesse gestoßen, die metabolische und ökophysiologische Prozesse auf der einen Seite und die ontogenetische Entwicklung der dreidimensionalen Architektur von Pflanzen auf der anderen Seite in ihrer wechselseitigen Abhängigkeit abzubilden versuchen. Daran knüpfen sich Hoffnungen auf ein besseres Systemverständnis der Pflanze, auf die Überwindung von Skalensprüngen im Modell (Genom - Metabolismus - Organ - Individuum - Bestand) und auch auf verbesserte Möglichkeiten der Prognose und Optimierung von Pflanzenfunktionen (z.B. Ertragsleistung). Solche FSPMs sind jedoch naturgemäß komplex; ihre Implementation als Simulationsprogramme in einer der gängigen Allzweck-Programmiersprachen führt in der Regel zu Intransparenz des Codes (besonders hinsichtlich der Modellierung dreidimensionaler Strukturodynamik) und schränkt die Reproduzierbarkeit und Vergleichbarkeit von Simulationsergebnissen ein.

Ziel des Projekts war daher die Entwicklung einer Modellspezifikations-Programmiersprache, die besonders für FSPMs geeignet ist und eine hohe Transparenz und Wiederverwendbarkeit von Code gewährleistet – und die Entwicklung einer Software, die diese Sprache "versteht", eingegebene Programme in Simulationen umsetzt und die Ergebnisse nach Bedarf grafisch und tabellarisch ausgibt. Diese neuen Werkzeuge sollten an einem FSPM für die Gerstenpflanze erprobt werden. Die zu schaffende Sprache sollte aber für möglichst viele Modelltypen einsetzbar sein und keine bestimmte Art von Modell vorschreiben – geschweige denn auf bestimmte Pflanzenspezies eingeschränkt sein.

Ausgangspunkt für die Programmiersprache waren die Lindenmayer-Systeme (L-Systeme), die sich in der Modellierung der Dynamik von Pflanzenarchitekturen bewährt hatten. Von diesen Zeichenketten umformenden Regelsystemen (Grammatiken) sind wir zu Regelsystemen übergegangen, die Graphen umformen (mathematische Strukturen aus Knoten und sie verbindenden, gerichteten Kanten unterschiedlichen Typs), um auch Netzwerke abbilden zu können. Die neue Sprache XL (eXtended L-system language) wurde zugleich als Erweiterung der Programmiersprache Java konzipiert, um zusätzlich zur regelhaften Abarbeitung der Graphgrammatik auch objektorientierte und auf klassische Weise rechnende Unterprogramme einbinden zu können. Die Knoten unserer Graphen stehen z.B. für Substrate, pflanzliche Organe oder geometrische Transformationen, die Kanten für Abhängigkeiten, räumliche Nachbarschaft oder "Bestandteil von"-Beziehungen. Parallel zur Entwicklung von XL wurde die Software GroIMP geschaffen (Growth-grammar related Interactive Modelling Platform), die eine XL-Entwicklungsumgebung (mit Compiler), interaktive Werkzeuge für manuelle Eingriffe während der Simulations-Laufzeit, 2- und 3-dimensionale Visualisierungsfenster mit verschiedenen Renderern, Ausgabemöglichkeiten für Tabellen, Charts und Dateien sowie eine Web-Schnittstelle auf http-Basis enthält. GroIMP ist ein Open-Source-Projekt und unter <http://sourceforge.net/projects/groimp> zum Download verfügbar. Die Software gehört inzwischen zu den führenden regelbasierten Modellierungswerkzeugen in der internationalen FSPM-Community und steht hinsichtlich Effizienz und Skalierbarkeit anderen Graphtransformationstools nicht nach.

Neben zahlreichen anderen Modellen zum Testen von XL und GroIMP wurde ein Modell der Gerstenpflanze entwickelt, das die morphologische Entwicklung, die Lichtaufnahme, die Photosynthese sowie ein Biosynthese- und Signaltransduktionsnetzwerk für das Pflanzenhormon Gibberellinsäure (mit Wirkung auf das Spross-Streckungswachstum) berücksichtigt. In einer anderen Variante des Modells (und in einem Rapsmodell) wird der Einfluss von Stickstoffzufuhr (etwa durch Düngung) auf Photosynthese und Kohlenstoffallokation berücksichtigt. Aufgrund fehlender konsistenter Datensätze war es bisher nicht möglich, die Stickstoffnutzungseffizienz im Modell mit genetischen Markern und metabolischen Netzwerken auf niedriger Skalenebene zu verknüpfen. Dafür entstanden Modelle für die Baumarten Buche und Fichte, die den Skalensprung Individuum - Bestand (emergente Lichtkonkurrenz-Effekte) beinhalteten. Alle diese Modelle sind bisher "proof-of-concept"-Modelle, die qualitativ korrekte Ergebnisse liefern, aber nicht quantitativ validiert sind. Dies lag an den verfügbaren Daten und der verfügbaren Zeit, nicht am Modellierungswerkzeug. Ein frei zugänglicher Beispieldatensatz (<http://www.grogra.de>) stellt anderen Arbeitsgruppen eine Grundlage für weiterführende, eigene Modelle zur Verfügung. Auch die Dissertation von Herrn Dr. Kniemeyer, die die Konzeption von XL beschreibt, ist frei verfügbar (www.uni-forst.gwdg.de/~wkurth/kniemeyer.pdf).