

# Interne Dynamik mariner Ökosystemmodelle



Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt an der technischen Fakultät

der Christian-Albrechts Universität zu Kiel

von

Anna Heinle

Kiel 2013



1. Gutachter:

Prof. Dr. Thomas Slawig

2. Gutachter:

Prof. Dr. Andreas Oschlies

Datum der mündlichen Prüfung:

22. Mai 2013



# Zusammenfassung

Das marine Ökosystem stellt durch seine äußerst relevante Rolle im globalen Kohlenstoffkreislauf eine die Konzentration des atmosphärischen Kohlenstoffdioxids stark beeinflussende Komponente dar. Da diese Konzentration in den vergangenen Jahrzehnten von Menschen verursacht verstärkt gestiegen ist und mit bereits beobachteten und weiter zu erwartenden Klimaveränderungen einhergeht (Solomon et al., 2007), ist die Zukunft des atmosphärischen Kohlenstoffdioxidgehalts heute eine der aktuellsten Fragen.

Um dessen zukünftige Entwicklung unter verschiedenen Bedingungen zu untersuchen und entsprechende Konsequenzen einschätzen zu können, finden numerische Modelle Anwendung. Diese beinhalten für gewöhnlich einen Part, der eben dieses marine Ökosystem repräsentiert, dessen konkrete Modellierung aber sehr unterschiedlich aussehen kann. Dies betrifft sowohl die Übersetzung der realen Prozesse in die mathematische Sprache als auch die betrachtete Komplexität. Es wird viel darüber debattiert, welche Formulierung am besten geeignet ist um das marine Ökosystem realistisch wiederzugeben und genauso, welche Komplexität dafür notwendig ist.

Eine Gruppe von Modellen, die weit verbreitet genutzt werden und zu den Modellen mittlerer Komplexität gehören, ist die der NPZD Modelle. Durch die Simulation der vier für das marine Ökosystem relevanten Zustandsgrößen Nährstoffe, Phytoplankton, Zooplankton und Detritus haben sie ein gewisses Maß an Realitätsnähe und sind dabei gleichzeitig effektiv anwendbar. Die tatsächliche Aussagekraft des verwendeten NPZD Modells für ein gegebenes Problem aber hängt stark von seiner expliziten Formulierung und insbesondere der Wahl der darin enthaltenen Parameter ab, denn diese beiden Faktoren sind entscheidend für die von dem Modell beschriebene Dynamik.

Dadurch motiviert werden in der vorliegenden Arbeit NPZD Modelle numerisch und theoretisch auf die ihnen innewohnende Dynamik hin untersucht. Im numerischen Teil wird die Parameteroptimierung eines nulldimensionalen Modells beruhend auf der Formulierung von Oschlies and Garçon (1999) bezüglich zweier verschiedener Datensätze vorgestellt. Dabei wird insbesondere aufgezeigt, inwieweit das untersuchte Modell in der Lage ist, für das marine Ökosystem typische Daten wiederzugeben. Im zweiten, dem theoretischen Part dieser Arbeit, werden verwandte Modellformulierungen auf grundlegende mathematische Eigenschaften und ihre jeweils innewohnende Dynamik hin untersucht.

Dies geschieht mittels Methoden der qualitativen Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen. Die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der zu den Formulierungen gehörenden Anfangswertprobleme wird gezeigt, sowie stationäre Lösungen und deren Stabilitätsverhalten in Abhängigkeit von den gegebenen Modellparametern bestimmt.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse fördern grundlegend das Verständnis von Modellen des marinen Ökosystems und helfen die Relevanz ihrer jeweils spezifischen Dynamik zu erkennen. Das Wissen über die einem Modell innewohnende Dynamik ist insbesondere hilfreich, um die Wirkung externer Einflüsse auf das Modell einschätzen zu können und unterstützt die Identifikation eines zu einem gegebenen Problem passenden Modells sowie einer geeigneten Parameterkonfiguration.

# Abstract

The marine ecosystem strongly affects the concentration of carbon dioxide in the Earth's atmosphere. Since this concentration increased significantly in recent years and since the observed drastic climate changes are assumed to be related to this enhancement (Solomon et al., 2007), the future development and the associated consequences of this CO<sub>2</sub> increase are nowadays much debated.

Numerical models generate scenarios of this future development using various environmental initial conditions. As the marine ecosystem plays an important role in the global carbon cycle, it is usually represented in such models. The way the marine ecosystem is modelled thereby varies however. There are a lot of approaches on how to model the marine ecosystem, regarding both its formulation and the complexity considered.

NPZD models, which belong to the models of medium complexity, are frequently applied in climate research. Four state variables are simulated in these models, leading to a relatively realistic type of model which at the same time is computationally cost-effective. The actual capability of such models, however, strongly depends on their explicit formulation and especially on the choice of parameters involved. Those two facts determine the basic dynamics of a model.

This motivates the present work. The dynamics of NPZD models are numerically and analytically investigated. The numerical part of this study comprises the parameter optimization of a zero dimensional NPZD model, based on the formulation presented in Oschlies and Garçon (1999), with respect to two different data sets. The extent to which the model formulation is capable of reproducing data typical for the marine ecosystem is identified. In the subsequent, theoretical part of this study, basic mathematical properties of related model formulations are shown and their inherent dynamics are evaluated. The existence and uniqueness of solutions of the associated initial value problems is shown, and equilibrium solutions and their quality are determined as functions of the included parameters.

The results of this study help to improve our understanding of marine ecosystem models and their dynamics and facilitates their reasonable application in future tasks.





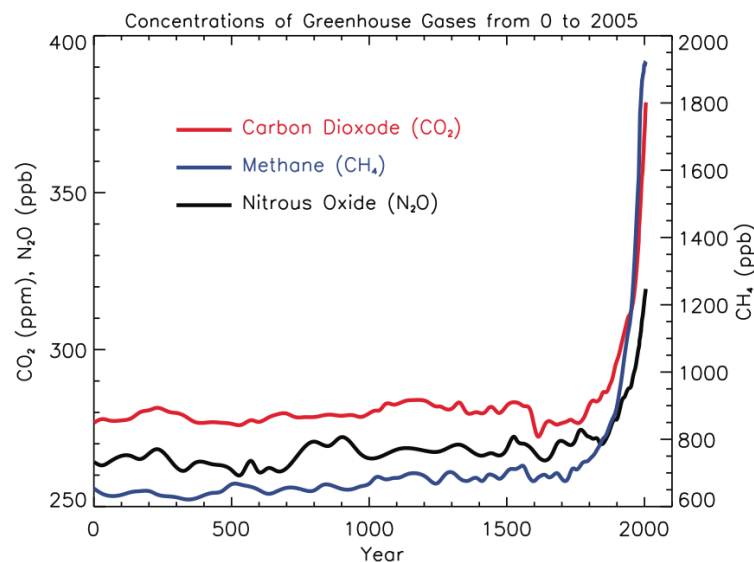
# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>V</b>
<b>Abstract</b>	<b>VII</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Mathematische Grundlagen</b>	<b>7</b>
<b>3 Parameter Optimierung</b>	<b>17</b>
<b>4 Theoretische Analyse</b>	<b>37</b>
<b>5 Zusammenfassung &amp; Ausblick</b>	<b>47</b>
<b>Anhang</b>	<b>51</b>
A. 1 Theoretical analysis and optimization of nonlinear ODE systems for marine ecosystem models . . . . .	53
A. 2 Internal dynamics of NPZD type ecosystem models . . . . .	65
A. 3 Impact of parameter choice on the dynamics of marine ecosystem models	77
A. 4 Ergänzungen . . . . .	91
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>95</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>97</b>
<b>Literatur</b>	<b>99</b>
<b>Danksagung</b>	<b>103</b>
<b>Erklärung</b>	<b>105</b>



# 1 Einleitung

Die Zukunft unserer Erde und ihres Klimas sind stark debattiert in den letzten Jahren. Über das vergangene Jahrhundert hinweg wurde ein signifikanter und anormaler Anstieg des Kohlenstoffdioxidgehalts in der Atmosphäre beobachtet. Besonders deutlich wird die Anomalität dieses Anstiegs, wenn man die Langzeitentwicklung des atmosphärischen  $\text{CO}_2$  über tausende von Jahre hinweg mit dessen Entwicklung in den vergangenen 100 Jahren vergleicht (siehe Abbildung 1.1). Verbunden mit dem starken Anstieg des  $\text{CO}_2$  in der Atmosphäre ist auch ein Anstieg der mittleren globalen Temperatur um  $\sim 0.8^\circ\text{C}$  im Verlauf des letzten Jahrhunderts beobachtet worden (Forster et al., 2007) sowie eine erhöhte Anzahl an Extremwetterereignissen in den letzten Jahren, wie zum Beispiel Stürme oder Dürren. Als Verursacher für diese Klimaveränderungen wird heute übereinstimmend der Mensch und in erster Linie die durch ihn seit der Industrialisierung drastisch gestiegenen Emissionen von Treibhausgasen angesehen (Solomon et al., 2007).



**Abbildung 1.1:** Konzentration wichtiger langlebiger Treibhausgase in der Atmosphäre über die letzten 2000 Jahre. Quelle: [ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar4/wg1/ar4-wg1-chapter2.pdf](http://ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar4/wg1/ar4-wg1-chapter2.pdf)

Diese Beobachtungen führen natürlich zu der Frage, wie sich die Situation in der nahen und fernen Zukunft weiter entwickeln wird. Zum Beispiel stellt sich die Frage, ob der

CO<sub>2</sub> Gehalt in der Atmosphäre weiter steigen wird und wenn ja, welche Auswirkungen ein solcher Anstieg auf die globale Temperatur und damit auf uns Menschen, auf die verschiedensten Ökosysteme und auf unsere Umwelt im Generellen hat. Damit verbunden ist die Frage, ob wir Menschen in der Lage sind, etwas gegen einen solchen potentiell fortschreitenden Anstieg zu machen, ob es Möglichkeiten gibt, diesen zu verhindern oder aufzuhalten.

Diesen und ähnlichen Fragen wird heute in der Wissenschaft unter anderem mit Hilfe von numerischen Modellen nachgegangen.

## Numerische Modelle

Um ein System oder einen Zustand bzw. Prozess systematisch zu untersuchen, werden numerische Modelle verwendet. Diese versuchen mithilfe der mathematischen Sprache das betrachtete System zu beschreiben. Man unterscheidet dabei zwischen statischen und dynamischen Modellen. Während statische Modelle Prozesse beschreiben, die sich intern nicht verändern, repräsentieren dynamische Modelle sich zeitlich und (oder) räumlich verändernde Systeme. Auf letztere wird im Folgenden eingegangen.

Dynamische Modelle beruhen meist auf Systemen von gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Diese beschreiben mathematisch die zeitliche und (oder) räumliche Entwicklung des betrachteten Systems. Teilweise sind solche Modelle analytisch lösbar, in vielen Fällen aber müssen sie numerisch gelöst werden. Dies trifft besonders auf Modelle zu, die hoch komplexe Systeme, wie zum Beispiel natürliche Prozesse unserer Umwelt, simulieren.

Allgemein sieht die Entwicklung eines numerischen Modells, ob statisch oder dynamisch, folgendermaßen aus: Basierend auf Experimenten und Beobachtungen wird die grundlegende Dynamik des wiederzugebenden Systems und die diese Dynamik bestimmenden Faktoren ermittelt. Aufbauend auf diesem Wissen wird das System und seine internen Prozesse mittels mathematischer Formeln und Gleichungen zu beschreiben versucht. Ist ein erster Modellansatz entwickelt, erfolgt dessen Verifikation. In dieser wird untersucht, ob das erstellte Modell tatsächlich die gewünschte Dynamik des Systems in ihren Grundzügen wiedergibt. Ist die Verifikation erfolgreich, kommt es zur Anwendung des Modells. Da allerdings die Art und der Zweck einer solchen Anwendung sehr unterschiedlich sein kann, kommt ein weiterer Schritt hinzu, nämlich der der Modellkalibrierung oder Modellvalidierung. Dabei wird das Modell an eine gegebene Aufgabenstellung 'angepasst' und auf diese Weise untersucht, ob die Verwendung des Modells für den angestrebten Zweck dienlich ist.

---

Da Modelle stets Unsicherheiten beinhalten, die auf die mit der Modellierung einhergehende, notwendige Vereinfachung des ursprünglichen Systems zurückzuführen sind, sind die genannten Punkte der Verifikation und der Validierung äußerst wichtig. Nur so kann die Aussagekraft der Modelle sichergestellt werden, denn im Verlauf einer Modellentwicklung ist es unumgänglich Entscheidungen zu treffen. Zum Beispiel ist es bei der mathematischen Beschreibung natürlicher Prozesse, für deren Verhalten eine Vielzahl von Faktoren relevant sind, unvermeidbar, einen Teil dieser Faktoren im Modell zu vernachlässigen, um dessen Komplexität in einem vertretbaren Rahmen zu halten. Natürliche Systeme sind meist zu groß, um das tatsächliche Ganze mathematisch zu erfassen. Somit muss vom Modellierer entschieden werden, welche der systeminternen Prozesse relevant und notwendig für dessen realistische Simulation sind, und welche nicht. Von letzteren wird angenommen, dass sie in der Modellierung ignoriert werden können. Dies ist der erste Punkt. Ein weiterer zu Unsicherheiten des Modells führender Punkt ist die Entscheidung, wie diese für relevant befundenen Prozesse modelliert werden. Die Wahl der beschreibenden mathematischen Terme und Gleichungen ist selten eindeutig, gleichzeitig aber ausschlaggebend für das Modellverhalten. Auch die Wertigkeit der in diesen Gleichungen und Termen enthaltenen Parameter spielt eine signifikante Rolle für das resultierende Modellergebnis.

## Das marine Ökosystem

Um Vorhersagen über die zukünftige Entwicklung des CO<sub>2</sub>-Gehalts in der Atmosphäre zu machen, ist die Betrachtung des marinen Ökosystems unbedingt erforderlich. Dieses spielt eine tragende Rolle im globalen Kohlenstoffkreislauf. Es besteht ein ständiger Austausch von Kohlenstoffdioxid zwischen Atmosphäre und den Ozeanen unserer Erde. Sobald die CO<sub>2</sub>-Konzentration im Wasser geringer ist als in der Luft, diffundiert Kohlenstoffdioxid aus der Atmosphäre in die oberen Wasserschichten des Ozeans und *vice versa*. Das im Wasser gelöste Kohlenstoffdioxid wird von Phytoplankton zur Photosynthese genutzt und dabei zum Teil fixiert. Ein Großteil dieses fixierten Kohlenstoffs wird mittels der marinen Nahrungskette zurück in Kohlenstoffdioxid umgewandelt, welches erneut von Phytoplankton zur Photosynthese verwendet werden kann oder zurück in die Atmosphäre gelangt. Ein nicht unwesentlicher Anteil des fixierten Kohlenstoffs aber sinkt auf den Meeresboden, zum Beispiel durch das Sterben von Meerestieren, wo er sich absetzen und über mehrere tausend Jahre hinweg verbleiben kann (Metz et al., 2005; Williams and Follows, 2011).

Dies bedeutet insbesondere, dass die Ozeane eine natürliche Senke für organischen Kohlenstoff darstellen. Diese Tatsache regt zusätzlich zur genauen Betrachtung des marinen

Ökosystem im Zusammenhang der zukünftigen Kohlenstoffdioxidentwicklung an. Es stellt sich die Frage, ob diese natürliche Eigenschaft des Ozeans als Senke für Kohlenstoff zu dienen, zu unseren Gunsten genutzt werden kann. Wenn es möglich ist die Produktion von Phytoplankton so stark anzuregen, dass verstärkt  $\text{CO}_2$  für Photosynthese genutzt wird und entsprechend mehr Kohlenstoff im Ozean gespeichert werden kann, so besteht die Chance, dass hierdurch die Gesamtkonzentration des sich global im Umlauf befindenden Kohlenstoffs reduziert werden kann. Damit könnte potentiell ein weiterer Anstieg der Konzentration von  $\text{CO}_2$  in der Atmosphäre verhindert oder zumindest verringert werden (Metz et al., 2005).

## Modellierung des marinen Ökosystems

Für die Modellierung des marinen Ökosystems existieren gegenwärtig zahlreiche, verschiedene Ansätze. Man unterscheidet entsprechend der betrachteten räumlichen Dimension zwischen nulldimensionalen, eindimensionalen und dreidimensionalen Modellen. Ein weiterer Unterschied der heute angewendeten Ansätze besteht in Anzahl und Art der explizit modellierten Komponenten des Systems sowie in der mathematischen Formulierung ihrer Beziehungen untereinander. Diese Interaktionen der modellierten Größen, wie beispielsweise fressen oder gefressen werden, werden hierbei gewöhnlich durch ein System gekoppelter, gewöhnlicher Differentialgleichungen repräsentiert, welches von einem zeitabhängigen, externen Antrieb, wie herrschende Lichtverhältnisse oder Temperaturen, abhängig sein kann. Die Anzahl der Gleichungen in dem System hängt ab von der Anzahl der explizit betrachteten Komponenten im Modell. Im einfachsten Fall können das zum Beispiel die beiden Größen Phytoplankton und Nährstoffe sein. Während nulldimensionale Modelle durch solche Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen bereits vollkommen beschrieben sind, erweitert sich das mathematische Problem durch die Modellierung einer zusätzlichen räumlichen Komponente, wie im Fall von ein- oder dreidimensionalen Modellen, zu einem System partieller Differentialgleichungen.

Vergleicht man die verschiedenen Ansätze, so lassen sich für alle sowohl Vor- als auch Nachteile finden. Modelle, die nur wenige Komponenten des marinen Ökosystems simulieren, sind zwar übersichtlich und klar definiert, haben allerdings den Nachteil das System sehr vereinfacht darzustellen. Mehr Zustandsgrößen und interne Prozesse beschreibende Modelle sind realistischer, enthalten aber viele Unsicherheiten (Duplisea, 2000; Fulton et al., 2003). Ähnlich konträr verhält es sich mit der räumlichen Komplexität der Modelle. Da in nulldimensionalen Modellen keinerlei horizontale Flüsse simuliert werden, gelten diese schnell als zu einfach für globale Betrachtungen. Sie haben jedoch den wertvollen Vorteil, dass durch ihre Einfachheit ein nur geringer Rechenaufwand gefordert ist, um das Mod-

ell numerisch auszuwerten. Ein- und dreidimensionale Modelle dagegen erzeugen durch ihre hinzukommende örtliche Auflösung eine zwar vermeindlich realistischere Simulation des marinen Ökosystems, vor allem der Dynamik in den Ozeanen, allerdings entstehen so erneut Unsicherheiten. Hinzukommend führt die Betrachtung einer örtlichen Komponente schnell zu exorbitanten Rechenkosten bei der Modellauswertung. So kann es selbst bei Verwendung von Großrechnern Stunden oder Tage dauern bis ein dreidimensionales Modell gelöst ist.

Ein generell anwendbares 'optimales' Modell gibt es bis heute nicht (vgl. auch Kriest et al., 2010) und die Frage, welches Modell für eine Anwendung geeignet ist, muss stets problemspezifisch beantwortet werden.

## NPZD Modelle

Eine Modellklasse, die im Rahmen der aktuellen CO<sub>2</sub> Forschung für die Simulation des marinen Ökosystems weit verbreitet angewendet wird, ist die der NPZD Modelle. Durch die Repräsentation der vier für die Dynamik des marinen Ökosystems relevanten Komponenten Nährstoffe, Phytoplankton, Zooplankton und Detritus bietet dieser Modelltyp einerseits Realitätsnähe, andererseits gewährleistet die Begrenzung auf diese vier Zustandsgrößen ein gewisses Maß an Übersichtlichkeit des Modells. Durch ihre mittlere Komplexität sind NPZD Modelle genauso geeignet, kleinskalige Ereignisse zu untersuchen, wie für den Einsatz in globalem Zusammenhang. Dabei werden sie entweder alleinstehend, als nulldimensionales Modell, verwendet oder gekoppelt an z.B. Ozeanzirkulationsmodelle, was zu ein- oder dreidimensionalen Modellen führt (vgl. z.B. Fasham, 1995; Denman and Peña, 1999; Fennel et al., 2001; Schartau and Oschlies, 2003; Kriest et al., 2010).

Die numerische Optimierung und theoretische Untersuchung solcher NPZD Modelle ist Thema der vorliegenden Arbeit. Motivation ist der signifikante Unterschied zwischen der Lösung des NPZD Modells nach Oschlies and Garçon (1999) und Observationen im Nordatlantik, insbesondere Daten der Bermuda Atlantic Time Series Study (BATS, 1989-1996). Das Modell konnte bislang weder durch Parameterkalibrierung noch durch Parameteroptimierung zufriedenstellend an besagte Daten angepasst werden (vgl. Schartau and Oschlies, 2003; Rückelt et al., 2010; Prieß, 2012). Die Ursache hierfür ist unklar. Liegt der Unterschied tatsächlich an den Parametern? Sind die bisher verwendeten Kalibrierungs- und Optimierungsmethoden nicht fähig, einen global optimalen Parametersatz - sofern es ihn gibt - zu finden? Sind die Messdaten zu ungenau? Oder ist die Modellformulierung selbst nicht passend? Stimmt also die dem Modell innewohnende Dynamik nicht mit der der Daten überein?

Diese Frage wird in der vorliegenden Arbeit untersucht. Nach einer Einführung in die relevanten mathematischen Grundlagen wird zunächst eine Parameteroptimierung des NPZD Modells nach Oschlies and Garçon (1999) in Bezug auf zwei verschiedene Datensätze vorgestellt (vgl. auch Anhang A.1). Dies sind zum einen die genannten BATS Daten, zum anderen Mesokosmendaten aus dem AQUASHIFT Projekt (vgl. Sommer and Lengfellner, 2008; Wohlers et al., 2009). In dieser Arbeit ist im Gegensatz zu dem von Oschlies and Garçon (1999) vorgestellten eindimensionalen Modell eine nulldimensionale Modellvariante betrachtet. Dadurch wird zum einen der für die Optimierung erforderliche Rechenaufwand signifikant reduziert und somit deren Effizienz und Aussagekraft erhöht, zum anderen hilft diese Dimensionsreduktion zu erkennen, in wie weit die Modellformulierung fähig ist die Dynamik des marinen Ökosystems wiederzugeben. Im Anschluss folgt die Präsentation einer durch die Parameteroptimierung angeregten theoretischen Analyse von NPZD Modellen. Dabei werden grundlegende Eigenschaften verschiedener Modellformulierungen aufgezeigt und insbesondere deren Dynamik anhand von Methoden der qualitativen Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen untersucht (vgl. auch Anhang A.2 und A.3).



## 2 Mathematische Grundlagen

Um die Fragestellungen und Ergebnisse der vorliegenden Arbeit nachvollziehen zu können, ist die Kenntnis bestimmter mathematischer Begriffe und grundlegender Resultate aus dem Bereich der Optimierung sowie dem Bereich der qualitativen Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen notwendig. Dieses Kapitel macht mit den relevanten Grundlagen vertraut.

### Notationen & Definitionen

Betrachtet wird in dieser Arbeit der endlich dimensionale Vektorraum  $(\mathbb{R}^n, \|\cdot\|)$  für ein  $n > 0$ , wobei die Norm  $\|\cdot\|$  aufgrund der Normäquivalenz im endlich dimensional nicht näher spezifiziert sei. Sofern nicht anders erklärt seien Elemente aus dem Raum  $(\mathbb{R}^n, \|\cdot\|)$  bezeichnet mit  $y := (y_1, \dots, y_n)$ .

Eine auf einer offenen Menge  $D \subset \mathbb{R}^n$ , welche im folgenden auch als Gebiet bezeichnet wird, definierte Funktion  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$  heißt

- *linear*, falls  $f(\lambda x + \mu y) = \lambda f(x) + \mu f(y)$  für  $x, y \in D$  und  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ .
- *stetig*, falls für alle  $x \in D$  und für alle  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  existiert, so dass für  $y \in D$  mit  $\|x - y\| < \delta$  folgt, dass  $\|f(x) - f(y)\| < \epsilon$ . Der Raum der stetigen Funktionen sei im Folgenden bezeichnet mit  $\mathcal{C}(D)$ .
- *lokal lipschitzstetig*, falls für alle  $x \in D$  eine Umgebung  $U_x$  existiert, so dass für alle  $y \in U_x$  ein  $L(x) > 0$  existiert, so dass  $\|f(x) - f(y)\| < L\|x - y\|$ . Ist  $U_x = D$ , so heißt  $f$  lipschitzstetig. Lipschitzstetige Funktionen sind zusammengefasst in dem Raum  $\mathcal{C}_0(D)$ .
- *quasipositiv*, falls  $m \geq n$  und für alle  $x \in D$  mit  $x \geq 0$  gilt, dass  $x_i = 0 \Rightarrow f_i(x) \geq 0$  für alle  $i \in 1, \dots, n$ .
- *stetig differenzierbar*, falls ihre partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} := \lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{f_i(x + he_j) - f_i(x)}{h}, \quad x \in D, \quad (2.1)$$

für alle  $i, j = 1, \dots, n$  existieren und diese stetig sind. Zusammengefasst sind diese Funktionen in dem Raum  $\mathcal{C}^1(D)$ .

Ist die Funktion  $f \in \mathcal{C}^1(D)$ , so sind ihre partiellen Ableitungen  $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$  zusammengefasst in der *Jacobi-Matrix*

$$J_f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

## Optimierung

In der Optimierung, im Speziellen in der hier vorgestellten Parameteroptimierung, geht es darum, ein gegebenes Modell beruhend auf mathematischen Gleichungen durch Veränderung der enthaltenen Parameter so zu konfigurieren, dass das zu simulierende System möglichst gut wiedergegeben wird. Dies geschieht meist durch Anpassung des Modells an das System repräsentierende Daten. Es wird eine *Ziel-* oder *Kostenfunktion*  $F$ , die den Abstand zwischen Modellergebnis und Daten beschreibt, in Hinsicht auf die im Modell enthaltenen Parameter minimiert. Da die Parameter meist Schranken haben oder an andere Bedingungen geknüpft sind, ist diese Aufgabe mathematisch gesehen ein nicht-lineares Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen,

$$\min_u F(u) \quad \text{unter} \quad \begin{cases} c_i(u) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(u) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases}. \quad (2.2)$$

Hierbei sind  $F : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$  die über den Parametervektor  $u \in \Omega \subset \mathbb{R}^k$  zu minimierende Kostenfunktion und die  $c_i$  repräsentieren die an die Parameter gestellten Gleich- und Ungleichheitsbedingungen. Die Menge der für die Optimierung zulässigen Punkte ist gegeben durch  $\mathcal{F} = \{u \in \mathbb{R}^k : c_i(u) = 0, i \in \mathcal{E}, c_i(u) \geq 0, i \in \mathcal{I}\}$ .

In der Praxis wird das Problem 2.2 unter Verwendung der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}(u, \lambda) := F(u) - \sum_i \lambda_i c_i(u), \quad (2.3)$$

mit *Lagrange-Multiplikatoren*  $\lambda_i$ , gelöst. Für diese entsprechen unter gewissen Regularitätsvoraussetzungen an die Funktionen  $F$  und die  $c_i$  die *Karush-Kuhn-Tucker* (KKT) Bedingungen den Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für das nichtlineare Problem 2.2 (vgl. Theorem 1).

**Theorem 1** (Optimalitätsbedingung erster Ordnung). *Ist  $u^*$  eine Lösung von 2.2 und sind die Funktionen  $F$  und  $c_i$  stetig differenzierbar sowie  $\{\nabla c_i(u^*) : i \in \mathcal{F}\}$  linear unabhängig, dann existieren Lagrange Multiplikatoren  $\lambda_i^*$ , so dass die Bedingungen*

$$\begin{aligned} \nabla_u \mathcal{L}(u^*, \lambda^*) &= 0 \\ c_i(u^*) &= 0, && \text{für alle } i \in \mathcal{E} \\ c_i(u^*) &\geq 0, && \text{für alle } i \in \mathcal{I} \\ \lambda^* &\geq 0, && \text{für alle } i \in \mathcal{I} \\ \lambda^* c_i(u^*) &= 0, && \text{für alle } i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \end{aligned} \quad (\text{KKT-Bedingungen})$$

erfüllt sind für  $(u^*, \lambda^*)$ .

*Beweis.* Siehe Nocedal and Wright (2006) Seite 320 ff. □

Da ein Großteil der in dieser Arbeit präsentierten Parameteroptimierung auf Trust-Region-Verfahren beruht, ist untenstehend beispielhaft ein Algorithmus des Trust-Region-Newton-Verfahrens gezeigt (vgl. Alt, 2002). Angefangen bei einem Startwert  $u^0$  wird dabei in jedem Iterationsschritt  $s$  des Newtonverfahrens unter Verwendung von Theorem 1 das Teilproblem

$$\min_d F^s(d) \text{ unter } \|d\| \leq \rho_s \quad (2.4)$$

gelöst, um die folgende Suchrichtung  $d$  zu bestimmen (vgl. Schritt 2 im Algorithmus).

Angemerkt sei, dass der Gradient  $\nabla F$  hierbei in der Praxis meist standardmäßig durch finite Differenzen approximiert wird. Um Approximationsfehler zu verhindern, kann dieser aber auch anders berechnet werden, zum Beispiel unter Verwendung des algorithmischen Differenzierens, auf welches in Kapitel 3 näher eingegangen wird.

**Algorithmus** (Trust-Region-Newton-Verfahren).

Gegeben seien  $0 < \delta_1 < \delta_2 < 1$ ,  $\sigma_1 \in (0, 1)$ ,  $\sigma_2 > 1$  und ein Radius  $\rho^0 > 0$ .

1. Wähle einen Startpunkt  $u^0 \in \mathbb{R}^k$ , berechne  $b^0 = \nabla F(u^0)$ ,  $A^0 = \nabla^2 F(u^0)$  und setze  $s := 0$ .
2. Berechne die globale Lösung  $d^k$  des Teilproblems 2.4.  
Ist  $F(u^s) = F^s(d^s) \implies \text{STOPP}$ .
3. Berechne

$$r^s = \frac{F(u^s) - F(u^s + d^s)}{F(u^s) - F(d^s)}.$$

Ist  $r^s \geq \delta_1$  (Iterationsschritt erfolgreich), dann

- setze  $u^{s+1} = u^s + d^s$ ,
  - berechne  $b^{s+1} = \nabla F(u^{s+1})$  und  $A^{s+1} = \nabla^2 F(u^{s+1})$ ,
  - aktualisiere  $\rho^s$ :
    - falls  $r^s \in [\delta_1, \delta_1)$ , wähle  $\rho^{s+1} \in [\sigma_1 \rho^s, \rho^s]$ ,
    - falls  $r^s \geq \delta_2$ , wähle  $\rho^{s+1} \in [\rho^s, \sigma_2 \rho^s]$ ,
  - setze  $s := s + 1$  und gehe zu 2.
4. Ist  $r^s < \delta_1$  (Iterationsschritt nicht erfolgreich), dann
- wähle  $\rho^{s+1} \in (0, \sigma_1 \rho^s]$ ,
  - setze  $u^{s+1} = u^s$ ,  $b^{s+1} = b^s$  und  $A^{s+1} = A^s$ ,
  - aktualisiere  $\rho^s$ ,
  - setze  $s := s + 1$  und gehe zu 2.
- 

## Anfangswertprobleme

Die Modelle, die in dieser Arbeit untersucht werden, sind mathematisch beschrieben durch Anfangswertprobleme, kurz AWP (oder IVP für engl.: initial value problem). AWP sind gegeben durch ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen (DGL oder ODE für engl.: ordinary differential equation), welches meist die zeitliche Entwicklung von  $n \geq 1$  zu untersuchenden Größen wiedergibt. Spezifiziert wird die Lösung eines solchen AWP durch dazugehörige Anfangswerte. In kurz und mathematisch formuliert ist ein AWP definiert als

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad (2.5)$$

wobei  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$  für  $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  als differenzierbar vorausgesetzt ist.

In dieser Arbeit werden AWP betrachtet, die auf Systemen von  $n > 1$  Differentialgleichungen beruhen, also einem System

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \dot{y}_2 &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \dot{y}_n &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n), \end{aligned}$$

wobei  $f_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  für  $i = 1, \dots, n$ . Zwei Spezialfälle von AWP sind für die vorliegende Arbeit relevant. Das sind zum einen autonome Anfangswertprobleme, zum anderen parameterabhängige AWP.

## Autonome Anfangswertprobleme

Unter autonomen Anfangswertproblemen versteht man AWP, bei denen die rechte Seite des Differentialgleichungssystems unabhängig ist von der veränderlichen Variable, hier der Zeit  $t$ . Kurz ist ein solches AWP gegeben durch

$$\dot{y}(t) = f(y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad (2.6)$$

worin  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$  für  $D \subset \mathbb{R}^n$ .

## Parameterabhängige Anfangswertprobleme

Parameterabhängig bezeichnet man solche AWP, deren rechte Seite zusätzlich zu der möglichen Abhängigkeit von  $t$  und  $y$  auch abhängen von weiteren Variablen, den Parametern  $u$ . Formal sind parameterabhängige AWP gegeben durch

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t), u), \quad y(t_0, u) = y_0. \quad (2.7)$$

Hierbei ist  $f : \Omega \times D_u \rightarrow \mathbb{R}^n$  und  $u \in D_u \subset \mathbb{R}^k$  ein Vektor, der die in der rechten Seite der Differentialgleichung enthaltenen  $k$  Parameter repräsentiert.

Eine hilfreiche Aussage, nämlich dass man sich oft auf die Betrachtung autonomer AWP beschränken kann, macht das folgende Lemma.

**Lemma 1.** *Das nicht autonome AWP 2.5 lässt sich in das autonome AWP*

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= f(y(t), s(t)), & y(t_0) &= y_0, \\ \dot{s}(t) &= 1, & s(t_0) &= 0 \end{aligned}$$

*umwandeln und das parameterabhängige AWP 2.7 in eines ohne Parameter, und zwar*

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= f(t, y(t), v(t)), & y(t_0) &= y_0, \\ \dot{v}(t) &= 0, & v(t_0) &= u. \end{aligned}$$

*Beweis.* Siehe Aulbach (2010) Seite 290 und analog. □

## Numerische Lösung

Oft sind Anfangswertprobleme analytisch nicht lösbar und numerische Verfahren müssen herangezogen werden. Das explizite Euler-Verfahren stellt hierbei das einfachste solcher Verfahren dar. Für einen Startwert  $y(0) = y_0$  und gegebene Schrittweite  $h$  folgt es der Iterationsvorschrift

$$y(s+1) = y(s) + h f(s, y(s)) ,$$

wobei  $s$  Zählindex der Iteration ist und die Schrittweite  $h$  fix oder gesteuert sein kann. Die  $m$ -stufigen Runge-Kutta Verfahren stellen eine Erweiterung dieses Verfahrens dar und sind gegeben durch die Vorschrift

$$y(s+1) = y(s) + h \sum_i \beta_i k_i$$

mit

$$k_i = f \left( s + \gamma_i h, y(s) + h \sum_l \alpha_{il} k_l \right).$$

Die  $\beta_i, \gamma_i$  und  $\alpha_{il}$  sind hierbei für das jeweilige Verfahren spezielle Koeffizienten (vgl. Deuffhard and Bornemann, 2008).

Lösungen zu Anfangswertproblemen müssen nicht notgedrungen existieren. Für analytisch nicht lösbare AWP's ist es hinzukommend schwer, Eigenschaften der Lösungen, wenn sie denn existieren, zu identifizieren. Im folgenden werden daher wichtige und grundlegende Resultate aus der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen vorgestellt, unter deren Zuhilfenahme die Existenz von Lösungen eines Anfangswertproblems untersucht werden kann und die eine Analyse derer Eigenschaften auch bei nicht analytisch vorliegenden Lösungen ermöglichen.

## Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen

Die Theoreme von Peano und Picard-Lindelöf befassen sich mit der Frage nach der Existenz und Eindeutigkeit von Anfangswertproblemen. Während das Theorem von Peano die Existenz einer Lösung zu einem gegebenen Anfangswertproblem im Falle eines stetigen  $f$  besagt, garantiert das Theorem von Picard-Lindelöf sogar dessen Eindeutigkeit, allerdings unter der stärkeren Forderung an die Funktion  $f$  Lipschitzstetig zu sein. Beide, sowie Folgerungen, seien im Folgenden vorgestellt.

**Theorem 2** (Peano). *Ist  $f$  auf einem Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  stetig, so existiert mindestens eine Lösung des AWP 2.5 auf einem kompakten Intervall  $[t_0, T]$  für ein  $T > 0$ .*

*Beweis.* Siehe Walter (1993) Seite 67 ff. bzw. Seite 99 ff.. □

**Theorem 3** (Picard-Lindelöf). *Ist  $f$  in einem Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  stetig und bezüglich dem zweiten Argument lokal Lipschitzstetig, dann besitzt das AWP 2.5 genau eine Lösung auf einem kompakten Intervall  $[t_0, T]$  für ein  $T > 0$ .*

*Beweis.* Siehe Walter (1993) Seite 56 ff. bzw. Seite 97 ff.. □

In praktischen Anwendungen ist es oft schwierig, die lokale Lipschitzstetigkeit der Funktion  $f$  direkt zu zeigen. Daher sei folgendes hilfreiches Resultat erwähnt, welches auf einer einfachen Anwendung des Mittelwertsatzes basiert.

**Lemma 2.** *Ist  $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  ein Gebiet und sind  $f$  und die partiellen Ableitungen  $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$  stetig, so ist  $f$  bezüglich  $y$  lokal lipschitzstetig in  $\Omega$ .*

*Beweis.* Siehe Walter (1993) Seite 97 ff. □

Zwar besagt Theorem 3, dass, sofern  $f$  lipschitzstetig ist, auf einem kompakten Intervall  $I = [t_0, T]$  eine eindeutige Lösung des Anfangswertproblems 2.5 existiert, wie groß dieses Intervall  $I$  sein kann, bleibt allerdings ungeklärt. Um diese Frage zu beantworten sei abschließend folgender, auf Theorem 3 beruhende Satz über die Existenz einer maximalen Lösung und deren Randverhalten genannt, welcher die Idee der Fortsetzbarkeit ausnutzt (vgl. Aulbach (2010) Seite 69 ff.).

**Theorem 4** (Globaler Existenz- und Eindeutigkeitsatz). *Ist  $f$  in einem Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  stetig und bezüglich dem zweiten Argument lokal lipschitzstetig, so existiert zu jedem  $(t_0, y_0)$  ein eindeutig bestimmtes,  $t_0$  enthaltendes maximales Existenzintervall  $I_{max} = (t_-, t_+)$ , auf welchem das AWP 2.5 genau eine Lösung hat. Für diese Lösung gilt eine der folgenden Aussagen:*

- (a)  $t_+ = \infty$
- (b)  $t_+ < \infty$  und  $\limsup_{t \rightarrow t_+} |y(t)| = \infty$
- (c)  $t_+ < \infty$  und  $\liminf_{t \rightarrow t_+} \rho(t, y(t)) = 0$ , wobei  $\rho(t, y(t))$  der Abstand von  $(t, y(t))$  zum Rand von  $\Omega$  ist.

*Beweis.* Siehe Walter (1993) Seite 61 ff. und 97 ff. □

Unter Verwendung der oben vorgestellten Resultate kann die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen eines AWP's theoretisch untersucht werden. In der Praxis ist es aber auch interessant, etwas über die Dynamik von existierenden Lösungen zu erfahren. Mit dieser beschäftigt sich die Qualitative Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen.

## Stabilitätsanalyse

Ist ein Anfangswertproblem analytisch nicht lösbar, wie es in praktischen Anwendungen häufig vorkommt, so ist auch eine direkte Untersuchung derer Eigenschaften nicht möglich. In einem solchen Fall betrachtet man daher das Verhalten von den alternativ numerisch erhaltenen Lösungen  $y(t)$  für  $t \rightarrow \infty$ . Hierbei spielen die sogenannten

*stationären Lösungen* oder *Equilibria* des dem AWP zu Grunde liegenden Differentialgleichungssystems eine wichtige Rolle. Von nun an seien autonome Anfangswertprobleme 2.6 betrachtet (vgl. Lemma 1).

**Definition 1** (Stationäre Lösung). *Für ein AWP 2.6 heißt  $y^* \in \mathbb{R}^n$  eine stationäre Lösung, falls  $f(y^*) = 0$  ist.*

Die Stabilitätsanalyse geht nun der Frage nach, in welcher Weise eine solche stationäre Lösung Auswirkung auf die Lösung des betrachteten AWP's hat. Hierbei unterscheidet man grundlegend zwischen *stabilen* und *instabilen* Lösungen. Während stabile Lösungen attraktiv auf die Lösungen eines Differentialgleichungssystems wirken, bedeuten instabile Lösungen, dass sich die Lösungen von diesen entfernen. Die im Folgenden vorgestellte Definition geht auf den Mathematiker Lyapunov zurück.

**Definition 2** (Stabilität). *Eine stationäre Lösung  $y^* \in \mathbb{R}^n$  eines autonomen AWP's 2.6 heißt*

- (a) *stabil, wenn für jedes  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  existiert so dass für eine Lösung  $y$  mit  $y(t_0) \in U_\delta(y^*)$  für ein  $t_0 \in \mathbb{R}$  gilt, dass  $y(t) \in U_\epsilon(y^*)$  für alle  $t \geq t_0$ .*
- (b) *asymptotisch stabil, falls  $y^*$  stabil ist und für jede Lösung  $y$  gilt, dass  $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = y^*$ .*
- (c) *instabil, falls  $y^*$  nicht stabil ist.*

## Stabilität im linearen Fall

Im Folgenden sei kurz in die Stabilitätsanalyse von Lösungen linearer Differentialgleichungen, also Differentialgleichungen der Form

$$\dot{y}(t) = \mathbf{A}y(t), \tag{2.8}$$

wobei  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ , eingeführt. Die vorliegende Arbeit behandelt zwar Systeme von nichtlinearen Differentialgleichungen, jedoch sei bereits angemerkt, dass die Stabilitätsanalyse nichtlinearer Differentialgleichungen auf einer Analyse ihrer *Linearisierungen* beruhen kann, in dem Fall also lineare Systeme zu untersuchen sind.

Die Qualität von Lösungen linearer Differentialgleichungen 2.8 kann bestimmt werden anhand der Eigenwerte  $\lambda = \alpha + i\beta$  der Matrix  $\mathbf{A}$ , welche gegeben sind als die Nullstellen des charakteristischen Polynoms, also  $p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$ . Folgender Satz fasst die anhand dieser Eigenwerte möglichen qualitativen Unterscheidungen einer stationären Lösung  $y^*$  für lineare Probleme 2.8 zusammen.



**Satz 1** (Stabilität). *Sei ein System linearer Differentialgleichungen 2.8 mit regulärer Matrix  $\mathbf{A}$  und Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  gegeben. Dann ist eine stationäre Lösung  $y^*$*

- (a) *stabil, genau dann wenn  $\alpha_j \leq 0$  für alle  $j = 1, \dots, n$  ist,*
- (b) *asymptotisch stabil, genau dann wenn  $\alpha_j < 0$  für alle  $j = 1, \dots, n$  ist,*
- (c) *instabil, wenn  $\alpha_j > 0$  für mindestens ein  $j$  ist.*

*Beweis.* Siehe Aulbach (2010) Seite 331 ff.. □

### Stabilität im nichtlinearen Fall

Aufbauend auf Satz 1 lassen sich auch nichtlineare Differentialgleichungssysteme analysieren - zumindest lokal. Dies geschieht unter Verwendung der sogenannten *Linearisierungen*, deren Existenz in der Taylor-Reihen Entwicklung begründet liegt.

**Definition 3** (Linearisierung). *Sei  $y^*$  stationäre Lösung des autonomen AWP 2.6. Ist  $f$  in  $y^*$  differenzierbar, so existiert nach der Taylor-Reihen Entwicklung eine lineare Abbildung  $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  und ein  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  derart, dass für alle  $y \in U_\epsilon(y^*)$*

$$f(y) = Ay + g(y) \quad \text{und} \quad \lim_{y \rightarrow y^*} \frac{g(y)}{\|y\|} = 0. \quad (2.9)$$

*A ist hierbei die in  $y^*$  ausgewertete Jacobimatrix,  $J_f(y^*)$ , und das lineare System*

$$\dot{y} = J_f(y^*)y \quad (2.10)$$

*wird **Linearisierung** von 2.6 in  $y^*$  genannt.*

Die Eigenschaften von Linearisierungen entsprechen lokal den Eigenschaften des originalen, nichtlinearen Systems (vgl. Walter (1993) Seite 262 ff.) und es lässt sich folgendes aussagen.

**Satz 2** (Asymptotische Stabilität). *Gegeben sei ein autonomes System der Form  $\dot{y}(t) = \mathbf{A}y(t) + g(y)$  mit konstanter Matrix  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  und es gelte*

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{g(y)}{\|y\|} = 0 \quad \text{gleichmäßig für } 0 \leq t < \infty. \quad (2.11)$$

*Ist  $\alpha_i < 0$  für alle Eigenwerte  $\lambda_i$  von  $\mathbf{A}$ , so ist die Lösung  $y^* \equiv 0$  asymptotisch stabil.*

*Beweis.* Siehe Walter (1993) Seite 258 ff.. □

Angemerkt sei, dass ein entsprechender Satz auch die Instabilität von  $y^* \equiv 0$  besagt, im Falle, dass  $\alpha_i > 0$  für mindestens ein  $\lambda_i$  von  $\mathbf{A}$  (vgl. Walter (1993)). Ferner, dass Satz 2 nichts über die Stabilität des nichtlinearen Systems aussagt, wenn der Realteil des maximalen Eigenwerts 0 ist. In dem Fall hängt die Qualität der Lösung bezüglich des nichtlinearen Systems auch von der Funktion  $g$  ab und es sind weitere Untersuchungen notwendig.

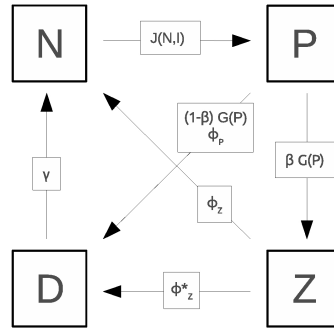
## 3 Parameter Optimierung

In diesem Kapitel wird die Parameteroptimierung eines nulldimensionalen NPZD Modells vorgestellt, welches auf der Formulierung von Oschlies and Garçon (1999) beruht. Dies geschieht bezüglich zweier Datensätze. Im ersten Teil bilden die Daten aus der Bermuda Atlantic Time-Series Study (BATS) das Zielobjekt (vgl. Schartau and Oschlies, 2003). Dies ist motiviert durch die Absicht, die untersuchte Modellformulierung für eine Repräsentation des marinen Ökosystems im Nordatlantik zu verwenden. Der zweite Teil betrifft die Anpassung des Modells an Daten aus dem AQUASHIFT Projekt (Sommer and Lengfellner, 2008; Wohlers et al., 2009). Dieser Teil dient insbesondere dazu die grundlegende Dynamik des Modells zu erkennen. Numerische Resultate sowie auftretende Probleme und entsprechende Lösungsansätze werden vorgestellt. Teile der hier vorgestellten Parameteroptimierung sind auch in Anhang A.1 zu finden.

### Modell MIN

Das in diesem Kapitel betrachtete Modell, im Folgenden Modell MIN genannt, beruht auf der Formulierung des in Oschlies and Garçon (1999) vorgestellten pelagischen, stickstoffbasierten Ökosystemmodell vom Typ NPZD. Abbildung 3.1 zeigt eine Übersicht der durch das Modell simulierten Stickstoffflüsse. Im Gegensatz zu dem in (Oschlies and Garçon, 1999) eingeführten eindimensionalen und damit eine Wassersäule im Ozean simulierenden Modell, wird in dieser Arbeit eine nulldimensionale Modellvariante betrachtet. Vorteil dieser Dimensionsreduktion ist die Senkung des für einen Modelldurchlauf erfordernten Zeitaufwands. Dies führt wiederum zu einer signifikanten Reduktion des für die Parameteroptimierung notwendigen Zeitaufwands und erhöht somit deren Effizienz (vgl. auch Prieß, 2012).

**Abbildung 3.1:** Schema der Stickstoffflüsse in Modell MIN zwischen den Komponenten Nährstoffe (N), Phytoplankton (P), Zooplankton (Z) und Detritus (D), deren Konzentration gegeben ist in  $\text{mmol N m}^{-3}$ . Pfeile zeigen den durch die entsprechenden Parameter gesteuerten Massenfluss (vgl. Tabelle 3.1).



Modell MIN ist beschrieben durch ein parameterabhängiges Anfangswertproblem 2.7 (vgl. Kapitel 1), welches auf einem System von vier gekoppelten, gewöhnlichen und insbesondere nichtlinearen Differentialgleichungen, und zwar

$$\begin{cases} \frac{\partial N}{\partial t} &= -J(\mu, N, P)P + \Phi_Z Z + \gamma D, \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= (J(\mu, N, P) - \Phi_P)P - G(\epsilon, g, P)Z, \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, P) - \Phi_Z - \Phi_Z^* Z)Z, \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= \Phi_P P + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_Z^* Z)Z - \gamma D - w_s D, \end{cases} \quad (3.1)$$

beruht, welches die zeitliche Entwicklung der vier modellierten Größen Nährstoffe (N), Phytoplankton (P), Zooplankton (Z) und Detritus (D) (in  $\text{mmol N m}^{-3}$ ) beschreibt. Einen Überblick über die Bedeutung und relevante Bereiche der in den Gleichungen enthaltenen Parameter gibt Tabelle 3.1. Die auftretenden Funktionen  $J$  und  $G$ , die zum einen das Wachstum von Phytoplankton in Abhängigkeit von Licht und Nährstoffen, zum anderen die Vermehrung von Zooplankton gemäß dem vorhandenen Nahrungsangebot darstellen, werden im Folgenden erläutert. Anzumerken sei, dass sowohl die generelle Formulierung als auch die enthaltenen Parameter und Funktionen denen in Oschlies and Garçon (1999) vorgestellten entsprechen.

**Phytoplanktonwachstum.** Phytoplankton braucht vor allem Nährstoffe um zu wachsen, sowie Licht um Photosynthese zu betreiben. Aus diesem Grund wird das Wachstum von Phytoplankton üblicherweise modelliert durch eine Funktion abhängig von den vorhandenen Nährstoffen und der gemäß den Lichtverhältnissen möglichen photosynthetischen Aktivität. Diese beiden limitierenden Faktoren werden häufig separat

**Tabelle 3.1:** Einheiten, relevante Bereiche und Definitionen der Modellparameter für Modell MIN (dieses Kapitel) sowie für die Modelle LLM, LQM und QQM (Kapitel 4).

Symbol	Wertebereich	Einheit	Erklärung
$C$	1.066	1	Wachstumskoeffizient von Phytoplankton
$c$	1	$^{\circ}\text{C}^{-1}$	Wachstumskoeffizient von Phytoplankton
$k_w$	0.04	$\text{m}^{-1}$	Lichtabnahme in Wasser
$f_{PAR}$	0.43	1	PAR Anteil der Einstrahlung
$\beta$	[0,1]	1	Assimilation von Zooplankton
$\nu$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Wachstumsrate von Phytoplankton
$\alpha$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^2 \text{W}^{-1} \text{d}^{-1}$	Anstieg PI-Kurve
$\Phi_Z$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Linearer Verlust von Zooplankton
$k_P$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^2 (\text{mmol N})^{-1}$	Lichtabnahme durch Phytoplankton
$\epsilon$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^6 (\text{mmol N})^{-2} \text{d}^{-1}$	Treffrate
$g$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Maximale Fressrate von Zooplankton
$\Phi_P$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Linearer Verlust von Phytoplankton
$\Phi_Z^*$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^3 (\text{mmol N})^{-1} \text{d}^{-1}$	Quadratischer Verlust von Zooplankton
$\gamma$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Remineralisationsrate von Detritus
$k_N$	$\mathbb{R}_+$	$\text{mmol N m}^{-3}$	Halbsättigungskonstante $\text{NO}_3$
$w_s$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m d}^{-1}$	Sinken von Detritus
$k_I$	$\mathbb{R}_+$	$\text{Watt m}^{-3}$	Halbsättigungskonstante Licht
$\Phi_P^*$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^3 (\text{mmol N})^{-1} \text{d}^{-1}$	Quadratischer Verlust von Phytoplankton

formuliert mittels nichtlinearer Funktionen  $f_N$  und  $f_I$  und ergeben verknüpft mit einer maximalen Wachstumsrate die Wachstumsfunktion  $J$ . In Modell MIN ist diese Wachstumsfunktion formuliert nach dem Minimumsprinzip nach Liebig (vgl. Fennel and Neumann, 2004). Dieses besagt, dass der auf das Wachstum von Phytoplankton stärker limitierend wirkende Faktor entscheidend ist. Formal ist dies beschrieben durch

$$J = V \cdot \min\{f_N, f_I\}, \quad (3.2)$$

wobei  $V = \mu C^{cT}$  die temperaturabhängige Wachstumsrate von Phytoplankton unter optimalen, das heißt gesättigten Bedingungen, und die Funktionen  $f_N$  und  $f_I$  die oben erwähnten nichtlinearen Funktionen sind. Für Modell MIN ist erstere definiert durch eine als Michaelis-Menten bekannte Funktion

$$f_N(N, k_N) = \frac{N}{k_N + N},$$

zweitere stellt die analytische Lösung nach Evans and Parslow (1985) des über Zeit und Raum integrierten Beschreibungsansatzes der photosynthetisch aktiven Strahlung von

Smith dar (vgl. Fasham, 1995; Rückelt et al., 2010) und ist gegeben durch

$$f_I(P, I, k) = \frac{1}{\hat{k}} \ln \left( \frac{I_0 + \sqrt{V^2 + I_0^2}}{I_z + \sqrt{V^2 + I_z^2}} \right).$$

Für die Einstrahlung  $I$ , welche abhängig von  $t$  sein kann, ist dabei  $I_0 = \alpha f_{PAR} I$  die photosynthetisch aktive Strahlung direkt unter der Ozeanoberfläche und  $I_z = I_0 e^{-\hat{k}z}$  die gemäß  $\hat{k} = [k_w + k_P P]z$  in der Tiefe  $z \in \mathbb{R}_+$  reduzierte Strahlung. Während in Oschlies and Garçon (1999)  $z = (z_k)_{k=1, \dots, r}$  die Tiefen der einzelnen Boxen repräsentiert, ist hier  $z$  die Tiefe der gemischten Schicht.

**Zooplanktonwachstum.** Das in diesem Modell betrachtete herbivore Zooplankton ernährt sich von Phytoplankton. Dieser Prozess lässt sich mittels verschiedener Ansätze modellieren, wobei häufig der Ansatz

$$G(\epsilon, g, P) = \frac{g\epsilon P^n}{g + \epsilon P^n},$$

verwendet ist (vgl. Fasham, 1995). Dabei ist  $g$  die maximale Fressrate des Zooplankton und  $\epsilon$  beschreibt die Häufigkeit des Aufeinandertreffens von Zooplankton und Phytoplankton (vgl. Tabelle 3.1). In Modell MIN ist  $n = 2$ , so dass  $G$  einer Holling Type III Funktion entspricht.

## Implementierung

Während das Modell von Oschlies and Garçon (1999) in der Sprache FORTRAN geschrieben ist und mittels eines einfachen expliziten Euler-Verfahrens gelöst wird, ist das oben vorgestellte nulldimensionale Modell in MATLAB<sup>1</sup> implementiert worden. Dies hat zum einen den Vorteil, dass zur Lösung des Modells einer der von MATLAB bereitgestellten Löser aus dem ODE Paket benutzt werden kann, zum anderen, dass die MATLAB internen Optimierungsroutinen ohne Kopplungsaufwand verwendet werden können. Der grundlegende Ansatz von MATLAB auf Matrizen und Vektoren zu rechnen garantiert insbesondere die Effektivität der verwendeten Methoden und sorgt so für einen respektablen Aufwand der vorgestellten Parameteroptimierungen.

Zur Lösung des Modells findet in der vorliegenden Arbeit der auf einem expliziten Runge-Kutta-Verfahren beruhende, numerischen Löser `ode45` Anwendung (vgl. Kapitel 2). Auf eine Vorstellung von Ergebnissen unter Verwendung eines anderen Löser des ODE Pakets wird verzichtet, da die Wahl des Löser bis auf Ausnahmen keine relevante Auswirkung auf das Ergebnis hat (vgl. Optimierung Teil 2 in diesem Kapitel).

<sup>1</sup> MATLAB ist eine Software des Unternehmens MathWorks, Inc., [mathworks.com](http://mathworks.com).

## Daten

Parameteroptimierung beruht auf der Minimierung der Differenz von Modellergebnis zu gegebenen Daten, welche das zu beschreibende System repräsentieren. In dieser Arbeit wird die Parameteroptimierung des NPZD Modells gegenüber zweier Datensätze vorgestellt.

### Bermuda Atlantic Time-Series Study

Das eingeführte Modell ist insbesondere darauf ausgelegt das marine Ökosystem im Nordatlantik wiederzugeben. Daher sind zunächst entsprechende Daten, nämlich Observationsdaten gewonnen während der *Bermuda Atlantic Time-Series Study* (BATS) für die Optimierung der im Modell enthaltenen Parameter gewählt (vgl. Schartau and Oschlies (2003); Rückelt et al. (2010)). Die BATS Daten umfassen sowohl für die Optimierung der simulierten Zustandsgrößen N, P, Z und D notwendige Referenzwerte als auch Daten, die in das Modell als realer physikalischer Antrieb eingehen. Da die Daten tiefenabhängig vorliegen, ist eine sinnvolle Mittelung erfordert um eine Parameteroptimierung des vorgestellten nulldimensionalen NPZD Modells durchzuführen. Dies geschieht in der vorliegenden Arbeit den Ansätzen von Fasham (1995) und Schartau and Oschlies (2003) folgend über die sogenannte 'durchmischte Schicht' des Ozeans, in welcher sich die modellierten Prozesse des marinen Ökosystems abspielen. Die jahreszeitlich variierende Dicke dieser Schicht (MLD für engl: mixed layer depth) wird dabei entweder anhand eines Temperaturunterschieds  $\Delta T$  von Ozeanoberfläche zu Tiefenwasser oder eines entsprechenden Unterschieds des Salzgehalts  $\Delta S$  geschätzt. Hier ist eine Temperaturdifferenz, und zwar  $\Delta T = 0.5^\circ C$ , gewählt.

### AQUASHIFT

Den zweiten Zieldatensatz bilden Mesokosmen Daten. Diese wurden im Verlauf eines 30-tägigen Experiments gewonnen, welches 2006 am Helmholtz Zentrum GEOMAR <sup>2</sup> im Rahmen des AQUASHIFT Projekts durchgeführt wurde (Wohlers et al., 2009). Im Vergleich zu den BATS Daten, haben die Mesokosmen Daten für die vorliegende Arbeit den klaren Vorteil, dass sie bereits nulldimensional vorliegen. Somit kann ein eventuell durch Mittelung der Daten erzeugter Fehler ausgeschlossen werden. Anhand der zeitlich höher aufgelösten Mesokosmen Daten lässt sich ferner besser erkennen, in wie weit das Modell fähig ist, die Dynamik des marinen Ökosystems wiederzugeben.

---

<sup>2</sup>damals: Leibniz-Institut IfM-GEOMAR

## Methode & Resultate

In diesem Abschnitt werden die Methodik und Ergebnisse der Parameteroptimierung bezüglich der BATS Daten sowie der Mesokosmen Daten vorgestellt. Da hinsichtlich der BATS Daten im Vergleich zu anderen durchgeführten Parameteroptimierungsstudien keine signifikante Verbesserung in der Datenwiedergabe erzielt werden konnte (vgl. Schartau and Oschlies, 2003; Rückelt et al., 2010), ist deren Vorstellung auf zwei beispielhafte Optimierungsläufe beschränkt. Die Parameteroptimierung hinsichtlich der Mesokosmen Daten ist aufschlussreicher, weshalb im Laufe dieser auch der Effekt von alternativen Methoden sowie von Modifikationen am Modell untersucht werden. Zwei ausgewählte Beispiele sind vorgestellt: Zum einen die Nutzung des algorithmischen Differenzierens um, alternativ zu der von MATLAB verwendeten Standardmethode der finiten Differenzen Approximation, den für die Optimierung wichtigen Gradienten der Kostenfunktion zu bestimmen, zum anderen der Effekt eines in das Modell eingefügten Zeitversatzes.

### Optimierungsmethode

Die in Modell MIN enthaltenen Parameter sind optimiert unter Verwendung der von MATLAB bereit gestellten Funktionen `lsqnonlin` und `fmincon`. Beide gehören zu der *Optimization Toolbox* von MATLAB und sind bestimmt für nichtlineare Optimierungsprobleme mit Nebenbedingungen. Es werden Ergebnisse präsentiert für Optimierungen mittels des 'Trust-Region' Algorithmus (vgl. Kapitel 2). Die Verwendung eines alternativ bereitgestellten Algorithmus, 'Interior-Point' oder 'Active-Set', führt zu keinem signifikant anderen Ergebnis. Als Kostenfunktion dient stets die auf dem Prinzip der kleinsten Quadrate beruhende Funktion

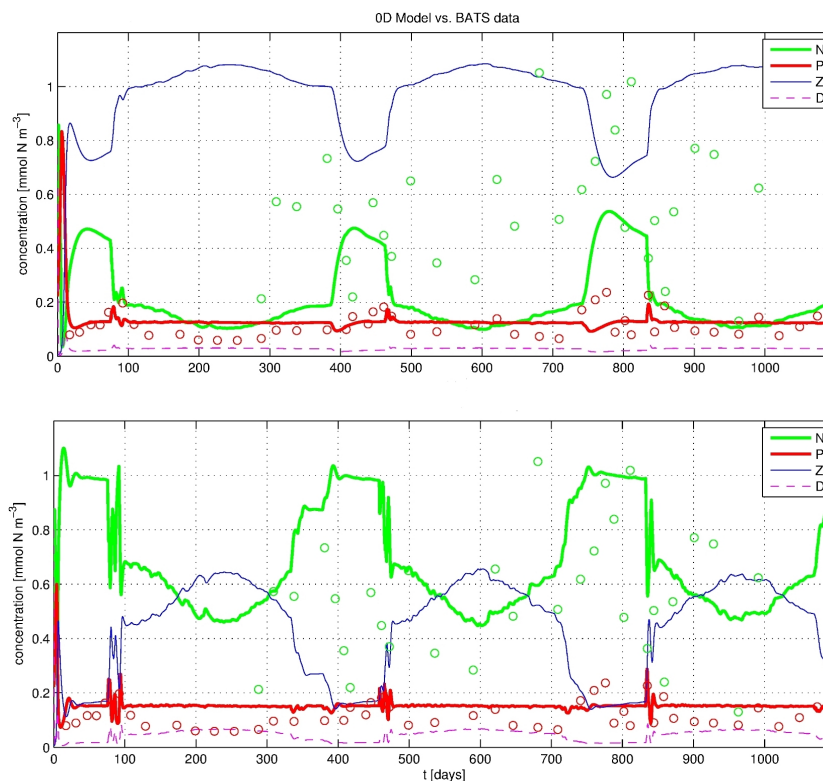
$$F(y) = \frac{1}{2} \sum_j \frac{1}{N_j \sigma_j^2} \sum_i (h(y_{ji}) - g(d_{ji}))^2 ,$$

wobei  $d_{ji}$  die Observationen sind und  $y_{ji}$  das entsprechende Modellergebnis. Der Index  $j$  steht für die jeweilige Vergleichsgröße, der Index  $i$  repräsentiert die einzelnen Datenpunkte und die Funktionen  $h$  und  $g$  transformieren die Daten gegebenenfalls in zueinander passende Größen.  $N_j$  ist die Gesamtanzahl der zur Zustandsgröße  $j$  vorhandenen Datenpunkte und  $\sigma_j$  die entsprechende Standardabweichung. Anzumerken sei, dass unter Verwendung der Optimierungsroutine `lsqnonlin` der Faktor  $1/N_j$  wegfällt, da in dieser Routine die Summe der Fehlerquadrate intern berechnet wird.

Eine gradientenbasierte Optimierung erfordert die Berechnung des Gradienten der bereitgestellten Kostenfunktion  $F$ . In den Funktionen `lsqnonlin` und `fmincon` wird dieser



**Abbildung 3.2:** Lösung des NPZD Modells (durchgezogene Linien) unter Verwendung des initialen Parametervektors  $u_b$  (oben) und des optimierten Vektors  $u_{lsq}$  (unten) für eine Optimierung über  $t = [733, 1098]$  und unter Verwendung der Kostenfunktion  $F(N, P)$ . Entsprechendfarbige Kreise stellen die zugehörigen Observations dar.



standardmäßig mittels finiter Differenzen approximiert. Es ist aber auch möglich der Optimierungsroutine einen alternativ berechneten Gradienten zur Verfügung zu stellen um die Güte der Optimierung zu verbessern oder auch deren Zeitaufwand zu reduzieren. Im Bezug auf die Mesokosmendaten wurde ein solcher Ansatz verfolgt und entsprechende Ergebnisse werden im Anschluss vorgestellt.

### Optimierung Teil 1 (BATS)

Da keine der beiden Routinen `lsqnonlin` und `fmincon` die andere in ihrer Fähigkeit ein Minimum der Funktion  $F$  zu finden übertrifft, sind hier beispielhaft Ergebnisse unter Verwendung von `lsqnonlin` vorgestellt. Abbildung 3.2 veranschaulicht einen Optimierungslauf in welchem intern der Algorithmus 'trust-region-reflective' Anwendung finden und die Parameter restringiert sind auf  $u \in (0, 1]$ . Die obere Grafik zeigt das Modellergebnis unter Verwendung des initialen Parametervektors  $u_b$ , die untere Grafik das Ergebnis unter Verwendung des erzielten optimalen Parametervektors  $u_{lsq}$  (siehe

**Tabelle 3.2:** Ergebnisse der Parameteroptimierung (BATS), Parametervektoren und verbundene Kosten. Links: Initialer Parametervektor  $u_b$  und optimierter Vektor  $u_{lsq}$  (vgl. Abb. 3.2). Rechts: Optimierte Parametersätze bei alternativer Initialisierung.

	$u_b$	$u_{lsq}$	$u_{lsq1}$	$u_{lsq2}$	$u_{lsq3}$
$\Phi_P$	0.0033	0.0002	0.0001	0.0005	0.00001
$\Phi_Z^*$	0.0008	0.0099	0.0060	0.0028	0.0127
$\gamma$	0.0833	0.1184	0.0883	0.2343	0.0630
$\beta$	0.5000	0.4481	0.3853	0.4401	0.7620
$\Phi_Z$	0.0008	0.00001	0.0027	0.0064	0.0109
$g$	0.0874	0.1964	0.2212	0.1702	0.1541
$\epsilon$	0.0833	0.4268	0.4483	0.4225	0.7455
$\nu$	0.0350	0.0250	0.0223	0.0277	0.0201
$k_N$	0.6242	0.6674	0.8793	0.9380	0.2582
$k_P$	0.0003	0.0001	0.0001	0.0001	0.0052
$F(y(u))$	22.354	0.3817	0.3437	0.3456	0.4728

Tabelle 3.2). Optimiert ist in dem hier gezeigten Beispiel über das dritte Jahr (Tag 733 – 1098 in Abbildung 3.2) und gegen die zwei Referenzdatentypen  $N$  und  $CHLa$ . Dabei ist  $CHLa$  der Transformation  $h(P)$ , entsprechend der Annahme eines fixen Verhältnisses  $CHLa/P = 1.59$ , gegenübergestellt. Dass weder gegen die Zustandsgröße Zooplankton noch Detritus optimiert wird, liegt daran, dass für Detritus keine direkten Referenzdaten vorliegen und für  $Z$  nur sehr wenige Observationen existieren<sup>3</sup>. Anzumerken sei ferner, dass der Parameter  $w_s$  in dieser Optimierung fest auf  $w_s = 0$  gesetzt ist, um den Massenerhalt im System zu gewährleisten. Wie Abbildung 3.2 zeigt, liefert die Optimierung mittels `lsqnonlin` einen Parametervektor, dessen Anwendung zu einer deutlich besseren Übereinstimmung von Modell und Daten führt. Auch die Kostenfunktion spiegelt dies wieder. Von anfänglich 22.35 sind die Kosten auf 0.38 reduziert. Betrachtet man allerdings die untere Grafik in Abbildung 3.2, so sind selbst für die in die Optimierung einbezogenen Größen  $N$  und  $P$  bleibende Defizite erkennbar. Die Nährstoffe werden unter Verwendung des optimierten Parametersatzes quantitativ weit besser wiedergegeben als unter Verwendung des initialen Parametervektors, qualitativ allerdings hat sich nicht viel verändert. Ferner hat sich die quantitative Passform von Phytoplankton verschlechtert und auch qualitativ ist das Ergebnis dieser Zustandsgröße nicht zufriedenstellend. So zeigt diese zum Beispiel gewisse 'Ausschläge' um den 100. Tag im Jahr, welche der Phytoplanktonblüte im Frühling zugeschrieben werden können,

<sup>3</sup>Es wurden auch Optimierungsläufe unter Hinzunahme von Zooplankton durchgeführt. Deren Ergebnisse unterscheiden sich aber nicht wesentlich von den hier vorgestellten.

allerdings sind diese weit davon entfernt dieses Phänomen realistisch wiederzuspiegeln. Insbesondere fehlt der simulierten Zustandsgröße  $P$  jegliche weitere Dynamik. Betrachtet man hinzukommend die nicht optimierten Zustandsgrößen  $Z$  und  $D$ , so zeigen diese ein ebenso wenig zufriedenstellendes Ergebnis. Zum Beispiel sind die erhaltenen Werte für  $Z$  im Vergleich zu realen Daten viel zu hoch im Modell ( $d_Z \ll 0.1$ , hier nicht gezeigt). Tabelle 3.2 zeigt einige weitere Beispiele optimierter Parametersätze unter Verwendung von  $u_b$  verschiedener Initialisierungen. Zugehörige Modelllösungen sind in Anhang A.4 veranschaulicht.

Betrachtet man diese Beispiele, so ist augenscheinlich, dass sich für verschiedene Initialisierungen die erhaltenen optimalen Parametersätze signifikant unterscheiden können, während die erzielten Werte der Kostenfunktion sowie die zugehörigen Modelllösungen keine sonderliche Differenz aufweisen. Insbesondere sind die Werte der Kostenfunktion, die im Verlauf der Optimierungen erreicht wurden, nicht zufriedenstellend (stets  $F > 0.3$ , vgl. Tabelle 3.2). Ähnliche Ergebnisse erhält man bei Variation von internen Einstellungen der Funktion `lsqnonlin` sowie unter Verwendung der Optimierungsroutine `fmincon` (siehe z.B. Anhang A.1, Variation der Nebenbedingungen in Bezug auf die Mesokosmendaten).

Diese Optimierungsstudie zeigt, dass die durch die BATS Daten beschriebene Dynamik des marinen Ökosystems von dem Modell weder unter Verwendung zufälliger noch mittels optimierter Parameter zufriedenstellend wiedergegeben wird. Vor allem werden zwei Punkte im Verlauf der durchgeführten Parameteroptimierung augenscheinlich:

- Es existieren viele lokale Minima.
- Das Modell hat gewisse Darstellungsgrenzen.

Während der erste Punkt es allgemein schwierig macht das globale Optimum, sofern es existiert, zu finden und zu identifizieren, verstärkt der zweite Punkt die Frage, inwieweit das Modell fähig ist die Dynamik des marinen Ökosystems wiederzugeben. Dieser Frage geht die folgende, zweite Optimierungsserie nach, deren Grundlage Mesokosmen Daten sind.

## Optimierung Teil 2 (AQUASHIFT)

Die Vorteile der Mesokosmosdaten aus dem Projekt AQUASHIFT für eine Parameteroptimierung des NPZD Modells im Vergleich zu den BATS Daten liegen auf der Hand. Zum einen liegen die Mesokosmosdaten skalar vor, das heißt, dass für jeden Zeitpunkt nur ein Datum pro gemessener Größe existiert, wodurch ein potentieller Fehler aufgrund von Datenmittelung von vornherein ausgeschlossen ist. Ein weiterer Vorteil beruht auf dem

Fakt, dass die Voraussetzungen für Messungen in einem abgeschlossenen Raum, wie dem eines Mesokosmos, weit besser sind als die für Messungen auf offener See - insbesondere bis in beträchtliche Wassertiefen. Messfehler treten bei Mesokosmenstudien folglich mit geringerer Wahrscheinlichkeit auf als bei Observationen im Freien. Der dritte Vorteil ist die höhere zeitliche Auflösung der Messungen im Rahmen des AQUASHIFT Projekts. Während bei den BATS Daten alle paar Tage, dafür über mehrere Jahre Observationen vorliegen, liefert die Mesokosmenstudie Daten für 30 aufeinanderfolgende Tage, wobei täglich Messungen vorliegen. Diese Fakten und Vorteile motiviert die Verwendung der AQUASHIFT Daten. Mittels Parameteroptimierung soll aufgedeckt werden, in wie weit das Modell grundlegend in der Lage ist die Dynamik des marinen Ökosystems wiederzugeben.

Da im ersten Teil dieses Kapitels Optimierungsläufe unter Verwendung der Routine `lsqnonlin` vorgestellt sind, sind hier solche unter Verwendung von `fmincon` gezeigt. Dies soll veranschaulichen, dass beide Routinen gleichermaßen für eine Parameteroptimierung des NPZD Modells verwendet werden können. Ein Vorteil der Funktion `fmincon` allerdings ist ihre größere Flexibilität bezüglich der verwendeten Kostenfunktion. Es sei angemerkt, dass hier der Parameter  $w_s$  im Gegensatz zur vorangestellten Optimierung hinsichtlich der BATS Daten mit optimiert ist. Eine Optimierung unter der Bedingung  $w_s = 0$  ist nicht aussagekräftig.

Um interne Abhängigkeiten der Zustandsgrößen voneinander aufzudecken, ist die Anzahl der in der eingangs eingeführten Kostenfunktion  $F$  betrachteten Zustandsgrößen variiert. Dadurch wird aufgezeigt, was passiert, wenn eine Zustandsgröße 'notgedrungen' auf die Optimierung einer anderen reagieren muss. Im Folgenden sind Optimierungsläufe unter Verwendung verschiedener Kostenfunktionen, und zwar  $F(N, P, Z, D)$ ,  $F(N, P, Z)$ ,  $F(N, P)$ ,  $F(P)$  und  $F(N)$ , präsentiert. Die restlichen Bedingungen sind gleich. Eine Optimierung gegen alle Zustandsgrößen erfordert eine Vergleichsgröße für die Komponente Detritus. Diese stellt der Datentyp PON (engl.: particular organic nitrogen) dar, welcher vergleichbar ist mit der Summe der drei modellierten Zustandsgrößen P, Z und D (vgl. Hanson et al., 2000).

Tabelle 3.3 zeigt den Initialisierungsvektor  $u_m$ , welcher dem optimalen Vektor in Schartau et al. (2001) entspricht, sowie die optimierten Parametersätze  $u_x$  gemäß verwendeter Kostenfunktion  $F(x)$  für  $x \in \{(N, P, Z, D), (N, P, Z), (N, P), P, N\}$ . Die dazugehörigen Modelllösungen sind veranschaulicht in Abbildung 3.3 und Abbildung 3.4.

Vergleicht man zunächst die Ergebnisse für die verschiedenen Kostenfunktionen, so weisen diese darauf hin, dass für eine Optimierung alle Zustandsgrößen miteinbezogen werden sollten. Es sei aber angemerkt, dass es auch vorkommt, dass unter einer restringierten Funktion, zum Beispiel  $F(N, P)$ , ein besseres Optimierungsergebnis erzielt

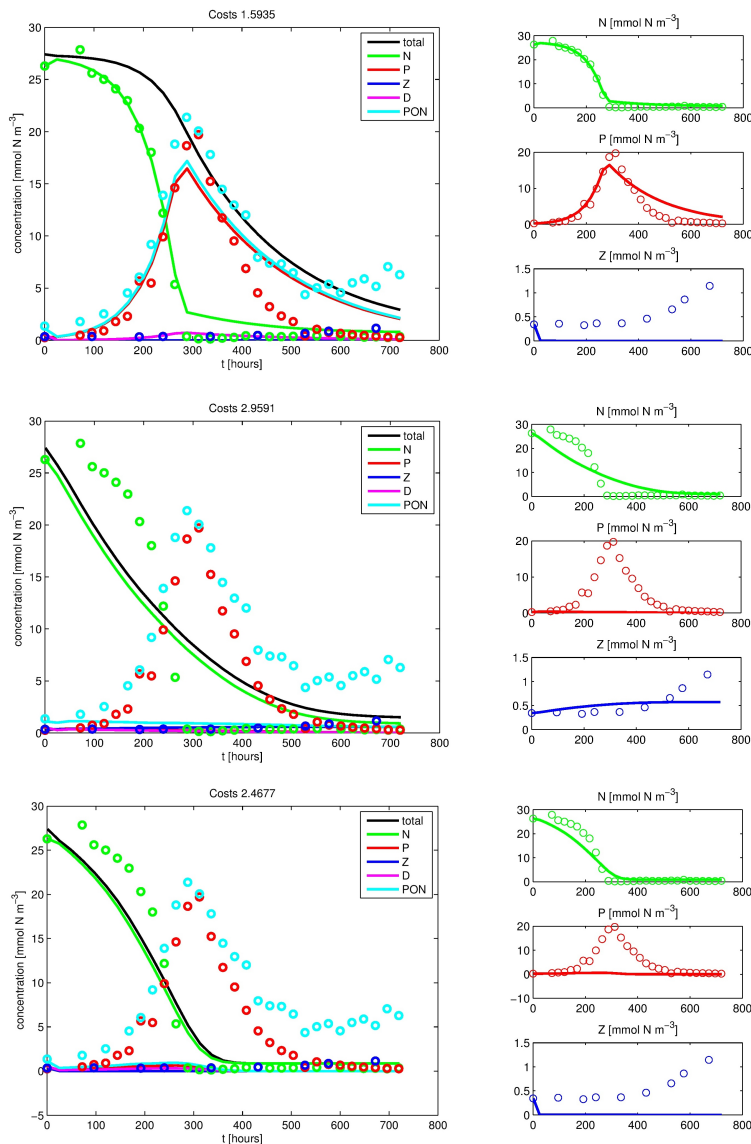
**Tabelle 3.3:** Ergebnisse der Parameteroptimierung (AQUASHIFT), Parametervektoren und verbundene Kosten. Initialer Parametervektor  $u_m$ , sowie optimierte Vektoren  $u_x$ ,  $x \in \{(N, P, Z, D), (N, P, Z), (N, P), P, N\}$  unter Verwendung der Kostenfunktion  $F(x)$ .

	$u_m$	$u_{NPZD}$	$u_{NPZ}$	$u_{NP}$	$u_P$	$u_N$
$\Phi_P$	0.0400	0.0271	0.0907	0.1587	0.0087	0.1403
$\Phi_Z^*$	0.3400	0.4264	0.00001	0.2566	0.1950	0.2076
$\gamma$	0.0480	0.5218	0.0186	0.0508	0.4951	0.0668
$\beta$	0.9250	0.2861	0.0214	0.9044	0.8597	0.9219
$\Phi_Z$	0.0100	0.0306	0.00001	0.0900	0.0751	0.0300
$g$	1.5750	0.3097	0.6926	0.9758	0.5196	0.7800
$\epsilon$	1.6000	0.7483	0.3717	0.9778	0.1323	0.8221
$\nu$	0.2700	0.0527	0.1862	0.1984	0.0255	0.1763
$k_N$	0.7000	0.7401	0.8740	0.4991	0.5728	0.4071
$k_I$	0.0470	0.0470	0.0470	0.0470	0.0467	0.0470
$w_s$	18.000	0.2865	0.6327	0.8847	1.0000	0.6961
$F(y(u))$	6.7309	1.5935	2.9591	2.4677	1.2348	0.0984

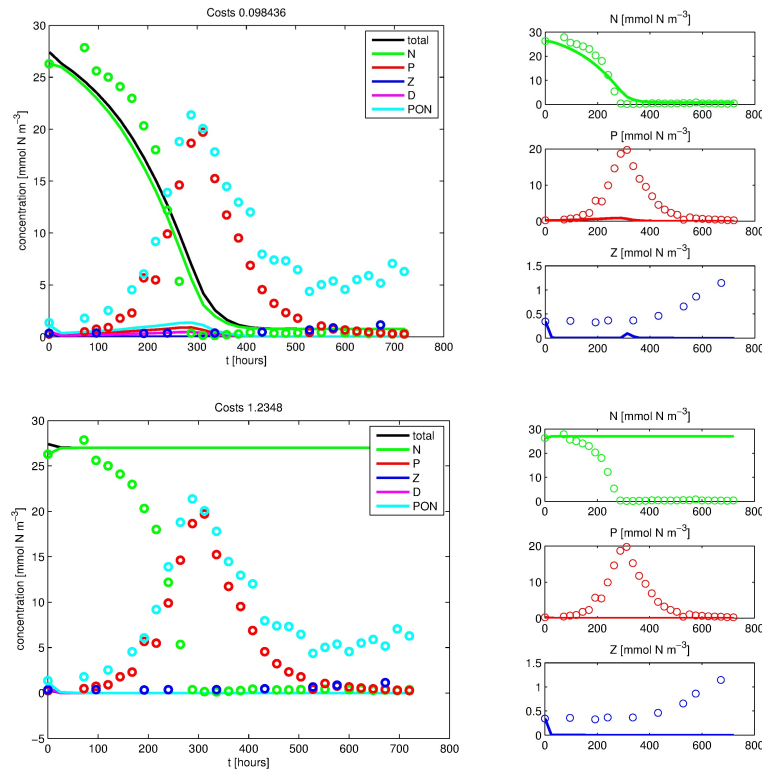
wird als unter Verwendung der Kostenfunktion  $F(N, P, Z, D)$ . Die Entscheidung der Kostenfunktion sollte somit individuell getroffen werden und abhängig von der Vorlage der Daten, insbesondere derer Glaubwürdigkeit. Um nun die Parametervektoren zu betrachten, zeigt sich, dass wie bereits bei der Parameteroptimierung bezüglich der BATS Daten zu beobachten ist, im Verlauf einer Optimierung sehr unterschiedliche Parametersätze gefunden werden, welche allesamt lokale Minima der jeweiligen Kostenfunktion darstellen. Betrachtet man die zugehörigen Abbildungen, so ist ferner zu erkennen, dass die Zustandsgrößen stets eine sehr spezifische Dynamik zeigen. Besonderes ersichtlich ist dies bei Betrachtung des Verhaltens von Zooplankton in den einzelnen Grafiken (jeweils rechts unten in den Grafiken in Abbildungen 3.3 und 3.4). Für  $t \rightarrow \infty$  ist entweder  $Z \rightarrow 0$ , Zooplankton stirbt also sozusagen aus, oder der Zustand von Zooplankton ist variabel mit der Zeit. Auffallend ist auch der Zustand von Phytoplankton. Unter Verwendung eines optimierten Parametersatzes gilt entweder  $P \sim 0$  für bereits kleine  $t$  oder es zeigt sich eine recht gute Übereinstimmung von Daten und Modell (vgl. Abbildung 3.3, oben). Dies allerdings ist verbunden mit erklärtem 'Aussterben' von Zooplankton.

Betrachtet man die jeweils untere Grafik in Abbildung 3.3 bzw. 3.3, fällt noch etwas ganz anderes auf, und zwar das Auftreten von negativen Werten der Zustandsgrößen. Da reale und somit nicht-negative Konzentrationen simuliert werden durch das Modell, sollten diese generell nicht auftreten. Insbesondere sollten diese nicht durch die Modellformulierung verschuldet sein (vgl. *Quasipositivität* in Kapitel 2 und 4). Die Verwendung

**Abbildung 3.3:** Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells zur Mesokosmenstudie für verschiedene Kostenfunktionen, und zwar  $F(N, P, Z, D)$  (oben),  $F(N, P, Z)$  (mitte) und  $F(N, P)$  (unten). Die großen Grafiken zeigen die modellierten Größen  $N, P, Z$  und  $D$ , sowie die Vergleichsgröße  $PON = P + Z + D$  und die Gesamtmasse im System, bezeichnet mit  $total$ . Die kleinen Grafiken zeigen die Größen  $N, P$  und  $Z$  in Detail. Kreise stellen die entsprechenden Observations dar.



**Abbildung 3.4:** Fortsetzung Abb. 3.3. Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells zur Mesokosmenstudie für verschiedene Kostenfunktionen, und zwar  $F(P)$  (oben) und  $F(N)$  (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.3.



eines anderen Lösers aus dem ODE Paket unter sonst gleichen Bedingungen zeigt hier allerdings bereits, dass die negativen Werte numerischen Ursprungs sind.

Die vorgestellte Optimierungsreihe verdeutlicht, dass das untersuchte Modell in der Lage ist die internen Beziehungen der Variablen  $N$ ,  $P$  und  $D$  wieder zu geben, die Repräsentation der Größe  $Z$  allerdings ist nicht zufriedenstellend. Dies, zusammen mit den auftretenden negativen Werten, führt zu der im nachfolgenden Kapitel vorgestellten theoretischen Untersuchung der Modellgleichungen. Dabei soll zum einen aufgedeckt werden, welche internen Zusammenhänge zwischen den Variablen herrschen und deren jeweils mögliche Dynamik, zum anderen sollen Parameterkonstellationen und Terme identifiziert werden, die diese Dynamik beeinflussen. Bevor allerdings mit der Theorie begonnen wird, sollen noch zwei interessante und viel versprechende Ansätze das Optimierungsergebnis zu verbessern vorgestellt werden.

## Algorithmisches Differenzieren

Für die Minimierung der Kostenfunktion  $F$  mittels Gradienten basierter Verfahren wird die partielle Ableitung  $\frac{\partial y}{\partial u}$  benötigt. Diese wird in den von MATLAB gegebenen Funktionen `lsqnonlin` und `fmincon` standardmäßig mittels finiter Differenzen berechnet bzw. approximiert. Beide Funktionen ermöglichen aber auch die Benutzung eines alternativ berechneten Gradienten. Sofern der Gradient zum Beispiel analytisch berechnet werden kann, kann eine Approximation, und damit eine entstehende Fehlerquelle in der Methode, vermieden werden. Im vorliegenden Fall ist eine analytische Berechnung des Gradienten  $\frac{\partial y}{\partial u}$  nicht möglich, allerdings kann das *algorithmische Differenzieren* verwendet werden um nichtsdestotrotz einen exakten Gradienten zu bestimmen (siehe Griewank, 2000; Deuffhard and Bornemann, 2008).

Algorithmisches Differenzieren (AD) basiert auf den grundlegenden Ableitungsregeln und funktioniert ähnlich dem Vorgehen beim symbolischen Differenzieren. In der Praxis wird AD häufig umgesetzt, indem die elementaren Operatoren und Funktionen in der verwendeten Programmiersprache *überladen* werden. Das heißt, es wird ein neuer Datentyp erzeugt, dessen Verwendung dazu führt, dass neben der eigentlichen Funktionsauswertung auch die zugehörige Ableitung der Funktion Schritt für Schritt berechnet wird. Eine alternative Methode AD in der Praxis umzusetzen, ist die *Quelltexttransformation*. Dabei wird komplett neuer Quelltext generiert, der dann die Funktion und deren Ableitung berechnet.

Die Motivation für die Verwendung von AD in der hier vorgestellten Optimierung sind die folgenden Fragen. Zum einen möchte man gerne wissen, ob mittels einer exakten Lösung des Gradienten ein besseres Ergebnis erzielt werden kann als unter Verwendung der Approximation durch finite Differenzen. Zum anderen die Frage, ob die Nutzung von AD zu einer Reduktion des Zeitaufwands einer Optimierung führen kann. Die Verwendung von finiten Differenzen erfordert nämlich eine  $k + 1$ -malige Modellauswertung pro Iterationsschritt, während AD nur eine Modellauswertung pro Iterationsschritt benötigt.

In der vorliegenden Arbeit findet das für MATLAB entwickelte kommerzielle AD Tool ADMAT Verwendung. Dieses beruht auf dem Überladen von elementaren Operatoren. Die Definition einer Variablen des zu ADMAT gehörigen Datentyps *deriv* führt dazu, dass die entsprechenden überladenen Funktionen anstelle der in MATLAB eingebauten Funktionen benutzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, parallel zu der Berechnung einer Lösung von Modell MIN  $y$  auch den Gradienten  $\frac{\partial y}{\partial u}$  explizit zu berechnen, welcher im Anschluss der Funktion `lsqnonlin` oder `fmincon` übergeben werden kann.

Angemerkt sei, dass nicht notwendigerweise auf eine kommerzielle Software zurückgegriffen werden muss um AD zu nutzen. Viele Programmiersprachen arbeiten heute ob-



jektorientiert, was es ermöglicht ein solches Tool eigenständig zu kreieren. Im Zuge eines Studienprojekts wurde für die lizenzfreie, MATLAB verwandte Sprache OCTAVE dies unter meiner Anleitung durchgeführt. Ein kleiner Einblick in das Vorgehen und die Anwendung eines solchen Tools ist in Anhang A.4 gegeben.

In Bezug auf die vorgestellte Parameteroptimierung führte die Durchführung zahlreicher vergleichender Optimierungsläufe letztendlich zu folgenden Antworten auf die eingangs genannten Motivationsfragen.

- Eine weitere Reduzierung der Kostenfunktion unter Verwendung von AD konnte nicht erreicht werden. Somit scheint die Verwendung eines durch finite Differenzen approximierten Gradienten keinen negativen Einfluss auf das Ergebnis der Optimierung zu haben.
- Die Rechenzeiten einer Optimierung mittels finiter Differenzen bzw. mittels algorithmischen Differenzierens unterscheiden sich kaum. Dies hat zur Ursache, dass für die gemeinsame Verwendung eines von MATLAB bereitgestellten ODE Löser und dem AD Tool eine interne Konvertierung des Datentyps notwendig ist. Die ODE Löser von MATLAB können nur mit Standarddatentypen wie zum Beispiel `double` umgehen. Dies erfordert die Einführung einer Konvertierungsfunktion, in welcher der für den ODE Löser benutzte Datentyp in den AD Typ `deriv` umgewandelt wird und *vice versa*. Zusammen mit der intern erhöhten Anzahl an Operationen durch die gleichzeitige Berechnung der Ableitungsfunktion ergibt sich im vorliegenden Fall ein Effizienzverlust durch die Verwendung von AD, der die erhöhte Anzahl an Modellauswertungen bei Verwendung der finite Differenzen Approximation ausgleicht.

Das algorithmische Differenzieren bringt somit für den vorliegenden Fall keinen nennenswerten Vorteil, kann aber bei vielen anderen Problemen zu positiven Effekten führen, insbesondere wenn keine Datenkonvertierung erforderlich ist.

### Modell mit Zeitversatz

Neben dem beschriebenen Versuch das Optimierungsergebnis durch Eingreifen in den Optimierungsprozess zu verbessern, wurden auch Ansätze verfolgt die Daten durch Modellmodifikationen besser wiedergeben zu können. Dies betrifft sowohl eine Variation der in den Modellgleichungen enthaltenen Terme, wie zum Beispiel das Hinzufügen weiterer Quellen und Senken, als auch die Einarbeitung eines Zeitversatzes (engl.: delay). Letzteres stellt ein aktuelles Thema im Bereich der Räuber-Beute-Simulation dar (vgl. z.B. Zhao, 2011; Avila-Vales et al., 2008; Xu and Li, 2012), denn mithilfe eines Zeitversatzes lässt sich die Verweildauer einer Zustandsgröße in dem System steuern.

Die bisher vorgestellten Optimierungsergebnisse bezüglich der AQUASHIFT Daten zeigen, dass sowohl die Nährstoffe als auch Phytoplankton gut wiedergegeben werden durch Modell MIN, die Repräsentation von Zooplankton und Detritus dabei jedoch unzureichend ist. Da insbesondere Zooplankton die beiden typischen Verläufe  $Z \rightarrow 0$  für  $t \rightarrow \infty$  oder aber eine Art Schwingung zeigt, deren Periode jedoch nicht zu den Daten passt (vgl. Abbildung 3.3, mitte links), ist ein positiver Effekt durch die Einführung eines Zeitversatzes in dessen Wachstum zu erwarten. Dabei wird die Wachstumsfunktion  $G$  in Modell MIN ersetzt durch eine Funktion  $\widehat{G}$ , welche gegeben ist als

$$\widehat{G}(\epsilon, g, P)(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{g\epsilon P(t)^2}{g + \epsilon P(t)^2} + \frac{g\epsilon P(t + \tau)^2}{g + \epsilon P(t + \tau)^2} \right) .$$

Der Parameter  $\tau$  repräsentiert hierbei die zeitliche Verzögerung und ist im Folgenden variiert von einer Stunde bis zu 20 Tagen.

Für die Lösung eines Modells mit Zeitversatz sind die MATLAB Löser aus dem ODE Paket nicht geeignet. MATLAB bietet aber auch einen Löser für Anfangswertprobleme mit Zeitversatz, und zwar die Routine `dde23`. Diese beruht wie der ODE Löser `ode45` auf einem expliziten Runge-Kutta-Verfahren.

Tabelle 3.4 zeigt den für die vorgestellte Optimierung verwendeten initialen Parametervektor  $u_d$  zusammen mit den optimierten Vektoren  $u_x$ , wobei der Index  $x$  hier die Zeitverzögerung in Stunden angibt. Die in  $u_{480}^*$  resultierende Optimierung ist initialisiert mit  $u_m$  (vgl. Tabelle 3.3). Die Abbildungen 3.5 und 3.6 zeigen die entsprechenden Modelllösungen, und zwar das optimierte Ergebnis berechnet ohne Zeitversatz unter Verwendung des Lösers `ode45` (oben), sowie die Ergebnisse der Optimierungen des Modells mit Zeitversatz  $\tau \in \{1, 240, 480\}$  Stunden. Ebenfalls ist exemplarisch das Ergebnis bei Initialisierung mit dem im vorigen Abschnitt vorgestellten Vektor  $u_m$  für  $\tau = 480$  Stunden gezeigt (siehe Tabelle 3.3 und Abbildung 3.6).

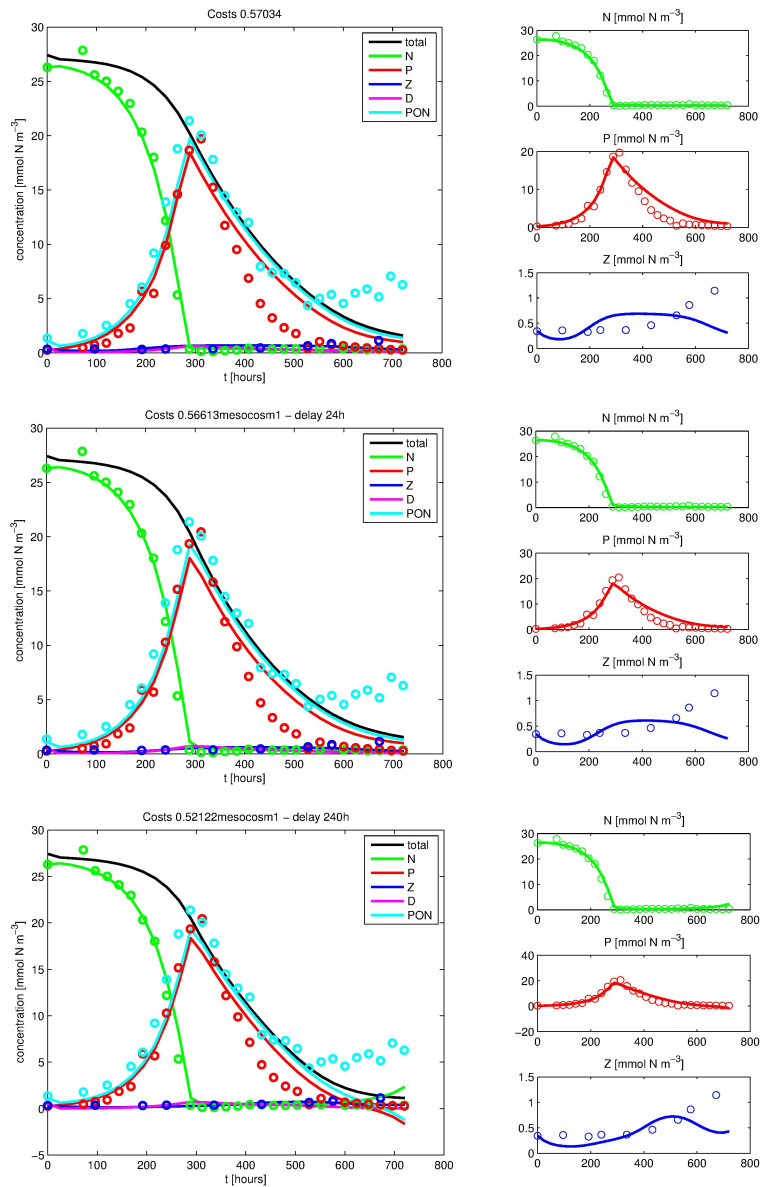
**Tabelle 3.4:** Ergebnisse der Parameteroptimierung unter Verwendung eines Zeitversatzes (AQUASHIFT), Parametervektoren und verbundene Kosten. Initialer Parametervektor  $u_d$  sowie optimierte Vektoren  $u_\tau$  für einen verwendeten Zeitversatz  $\tau \in \{0, 1, 240, 480\}$  (in Stunden). Kostenfunktion ist  $F(N, P, Z, D)$ .

	$u_d$	$u_0$	$u_1$	$u_{240}$	$u_{480}$	$u_{480}^*$
$\Phi_P$	0.0070	0.0062	0.0078	0.0087	0.0064	0.0233
$\Phi_Z^*$	0.0040	0.0022	0.0039	0.0039	0.0059	0.2548
$\gamma$	0.1000	0.1018	0.0981	0.0990	0.0970	0.4289
$\beta$	0.5000	0.4843	0.4925	0.4898	0.5427	0.9561
$\Phi_Z$	0.0400	0.0394	0.0390	0.0388	0.0435	0.0543
$g$	0.0500	0.0615	0.0576	0.0716	0.1374	0.8428
$\epsilon$	0.0200	0.0261	0.0205	0.0251	0.0193	0.9753
$\nu$	0.0300	0.0304	0.0299	0.0303	0.0285	0.2465
$k_N$	0.6000	0.5908	0.6062	0.6093	0.6340	0.6517
$k_I$	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0470
$w_s$	0.3000	0.3157	0.2958	0.3021	0.3086	0.8478
$F(y(u))$	0.6342	0.5703	0.5661	0.5212	0.5081	6.1394

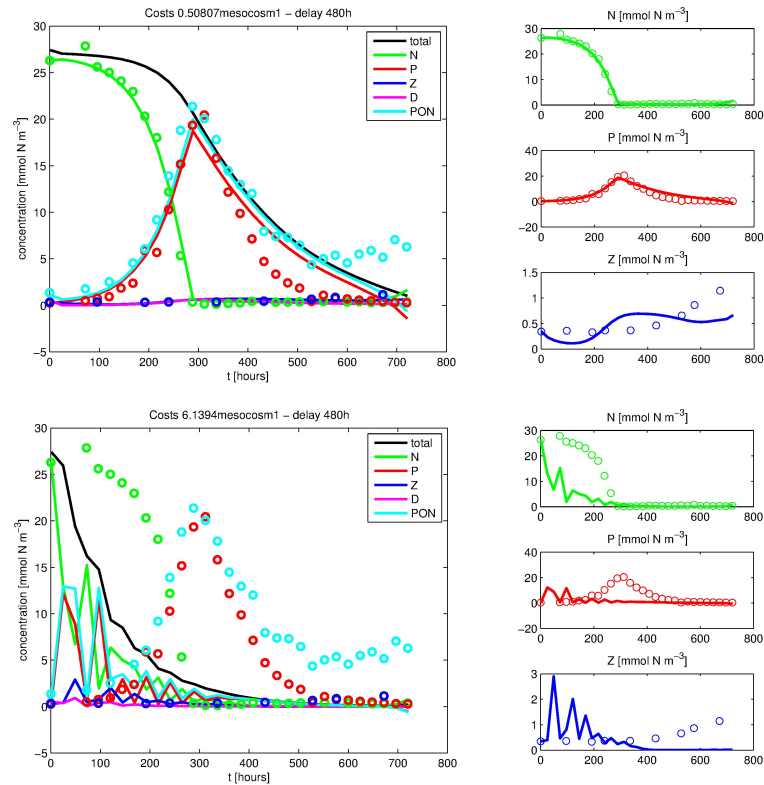
Vergleicht man die Modelllösungen, so erkennt man eine flexiblere Dynamik von Zooplankton für das Modell mit Zeitverzögerung im Gegensatz zu  $\tau = 0$ . Die Größen Nährstoffe und Phytoplankton werden sowohl für  $\tau = 0$  als auch  $\tau > 0$  gut wiedergegeben. Besagte Flexibilität von Zooplankton führt insbesondere zu einer zu den Daten hin generell positiven Verschiebung seines Zustands, was sich anhand der Kostenfunktionen der einzelnen Modelllösungen in Tabelle 3.4 erkennen lässt. Es zeigt sich sogar, dass  $F(y(u_{\tau_1})) < F(y(u_{\tau_2}))$  für  $\tau_1 > \tau_2$  gilt. Betrachtet man die Parameterwerte, so fällt auf, dass die Einfügung eines Zeitversatzes auch eine Veränderung der lokalen Parameteroptima mit sich bringt (vgl. Tabelle 3.4). Sie unterscheiden sich allerdings nur um maximal eine Nachkommastelle.

Abbildung 3.6, unten, zeigt das Ergebnis unter Verwendung des optimierten Parameteratzes  $u_{480}^*$ . Ein sehr 'zackiges' Verhalten der Zustandsgrößen ist zu erkennen, welches zunächst als Ergebnis überrascht, sich jedoch mithilfe der im nachfolgenden Kapitel präsentierten theoretischen Untersuchung von NPZD Modellen erklären lässt. Ursache dieser Dynamik ist ein Stabilitätswechsel der Gleichgewichtszustände. Modelllösungen streben stets einen Zustand im Gleichgewicht an, welcher durch einen stationären Punkt aber auch durch periodische Lösungen gegeben sein kann. Diese Zustände und deren Stabilität sind meist abhängig von der Masse im System, teils auch von einzelnen Zuständen. Das hier beobachtete Verhalten der Modelllösung ist verursacht durch ein angestrebtes

**Abbildung 3.5:** Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells unter Verwendung eines Zeitversatzes  $\tau$  (in Stunden), initialisiert mit  $u_d$ , für  $\tau = 0$  (oben),  $\tau = 24$  (mitte) und  $\tau = 240$  (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.3.



**Abbildung 3.6:** Fortsetzung Abb. 3.5. Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells unter Verwendung eines Zeitversatzes  $\tau = 480$  (in Stunden) für Initialisierung mit  $u_d$  (oben) und Initialisierung mit  $u_m$  (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.5.



Gleichgewicht, das zunächst instabil ist, ab einem gewissen Punkt aber stabil wird aufgrund der monotonen Abnahme der Gesamtmasse im System (vgl. 'total' in Abbildung 3.6, unten).

Diesen Abschnitt zusammenfassend lässt sich sagen, dass unter Einbeziehen zeitverzögerten Zooplanktonwachstums eine bessere Datenanpassung erzielt werden kann. Die Idee der Zeitverzögerung sollte somit für zukünftige Modellmodifikationen und Modellentwicklungen in Betracht gezogen werden.



## 4 Theoretische Analyse

Die im Folgenden untersuchten Modellformulierungen basieren wie Modell MIN auf dem in Oshlies and Garçon (1999) vorgestellten NPZD Modell. Wie bisher sind nulldimensionale Modelle betrachtet, die auf einem System von vier nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen beruhen. Im Gegensatz zu Modell MIN sind hier allerdings einzelne Modifikationen in der Formulierung vorgenommen.

In diesem Kapitel sind die Zustandsgrößen  $N$ ,  $P$ ,  $Z$  und  $D$  durch den Vektor  $y = (N, P, Z, D) \in \mathbb{R}_{+0}^4$  repräsentiert, wobei  $\mathbb{R}_{+0}^n := \{y \in \mathbb{R}^n : y \geq 0\}$ .

### Modelle

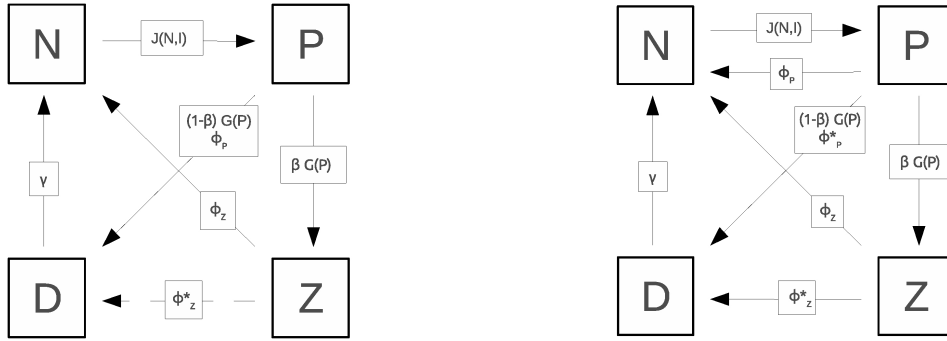
Die drei im Folgenden vorgestellten Modelle LLM, LQM und QQM unterscheiden sich von Modell MIN hauptsächlich darin, dass die das Phytoplanktonwachstum beschreibende Funktion  $J$  (vgl. Kapitel 3) ersetzt ist durch eine differenzierbare Funktion  $\hat{J}$ . Bis auf diese Modifikation entspricht Modell LQM Modell MIN. Modell QQM baut auf der in Schartau and Oshlies (2003) vorgestellten Formulierung auf. Diese ähnelt stark der von Oshlies and Garçon (1999), bezieht aber hinzukommend einen quadratischen Phytoplanktonverlust ein. Daraus resultieren weitere geringfügige Abweichungen in der Formulierung.

Modell LQM und Modell QQM sind beide zu komplex, als dass eine vollständige analytische Untersuchung der jeweiligen Modelldynamik möglich wäre. Daher wird zusätzlich das aus Modell LQM abgeleitete Modell LLM eingeführt, für welches dies durchführbar ist.

### Modell LLM und Modell LQM

Das Differentialgleichungssystem, auf welchem die beiden Modelle LLM und LQM beruhen, gleicht dem von Modell MIN, enthält aber intern geringfügige Modifikationen. Die in Modell MIN verwendete Funktion  $J$ , die dort das Wachstum von Phytoplankton beschreibt, ist ersetzt durch die Funktion  $\hat{J}$ . Diese ermöglicht neben ihrer Eigenschaft der Differenzierbarkeit auch die explizite Berechnung von Gleichgewichtszuständen für Modell LLM,

**Abbildung 4.1:** Schema der Modelle LLM, LQM (links) und QQM (rechts). Beschreibungen wie in Abbildung 3.1.



da sie unabhängig von dem Zustand des Phytoplankton ist (siehe unten). Mit besagten Modifikationen ergibt sich das Modell LLM und Modell LQM zu Grunde liegende Differentialgleichungssystem zu

$$f_{LM}(y) := \frac{\partial y}{\partial t} = \begin{cases} \frac{\partial N}{\partial t} &= -\widehat{J}(N, I)P + \Phi_Z Z + \gamma D \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= \left(\widehat{J}(N, I) - \Phi_P\right)P - G(\epsilon, g, P)Z \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, P) - \Phi_Z - \Phi_Z^* Z)Z \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= \Phi_P P + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_Z^* Z)Z - \gamma D \end{cases}$$

Der Unterschied zwischen Modell LLM und Modell LQM liegt dabei in dem quadratischen Term  $\Phi_Z^* Z^2$ . Während in Modell LQM  $\Phi_Z^* \neq 0$  vorausgesetzt ist, gilt für Modell LLM  $\Phi_Z^* = 0$ . Für Erklärungen der enthaltenen Parameter siehe Tabelle 3.1 im vorangehenden Kapitel.

**Phytoplanktonwachstum.** Während in Modell MIN das Wachstum von Phytoplankton dem Minimumsprinzip von Liebig folgend modelliert ist, bestimmen in den hier präsentierten Modellen LLM, LQM und QQM nicht das Minimum, sondern das Produkt der beiden limitierenden Faktoren das Phytoplanktonwachstum. Dies ist eine ebenfalls typische Methode Licht- und Nährstoffbegrenzungen des Phytoplanktonwachstums zu modellieren (vgl. Fennel and Neumann, 2004). Ein weiterer Unterschied ist die explizite Modellierung der Lichtlimitierung. Während diese in Modell MIN durch  $f_I$ , einer von der Einstrahlung  $I$ , Tiefe  $z$  und dem Zustand von Phytoplankton  $P$  abhängigen Funktion beschrieben ist, ist sie hier beschrieben durch die Funktion  $\widehat{f}_I$ , welche nur von  $I$  abhängt (vgl. Löptien, 2011). Diese ist wie die Nährstofflimitierung formuliert nach Michaelis



Menten (vgl. Kapitel 3)

$$\hat{f}_I = \frac{I}{k_I + I}. \quad (4.1)$$

Wie in Modell MIN kann hierbei  $I$  konstant oder eine Funktion  $I(t)$  sein, welche die Modellierung eines Tagesgangs oder jahreszeitlicher Variationen in der Einstrahlung zulässt. Die resultierende Wachstumsfunktion für die in diesem Kapitel betrachteten Modelle ist somit gegeben durch

$$\hat{J}(N, I) = V \cdot f_N(N) \cdot \hat{f}_I(I), \quad (4.2)$$

wobei  $V$  und  $f_N$  gemäß Kapitel 3.

### Modell QQM

Im Gegensatz zu den beiden zuvor eingeführten Modellen, beruht Modell QQM auf der in Schartau and Oschlies (2003) vorgeschlagenen Modellformulierung. Diese nimmt neben einer linearen, zusätzlich eine quadratische Phytoplanktonabnahme an. Das Modell QQM zu Grunde liegende Differentialgleichungssystem ergibt sich somit zu

$$f_{QM}(y) := \frac{\partial y}{\partial t} = \begin{cases} \frac{\partial N}{\partial t} &= \left(-\hat{J}(N, I) + \Phi_P\right) P + \Phi_Z Z + \gamma D \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= \left(\hat{J}(N, I) - \Phi_P - \Phi_P^* P\right) P - G(\epsilon, g, P) Z \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, P) - \Phi_Z - \Phi_Z^* Z) Z \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= \Phi_P^* P^2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_Z^* Z) Z - \gamma D \end{cases}.$$

Wie in Modell LLM und Modell LQM ist die in Modell MIN auftretende Funktion  $J$  ersetzt durch die differenzierbare Funktion  $\hat{J}$ . Auftretende Parameter sind erklärt in Tabelle 3.1 im vorausgegangenen Kapitel.

## Resultate

In den folgenden Untersuchungen ist jegliche externe Beeinflussung der Modelle vernachlässigt um explizit die jeweils interne Dynamik der Modelle zu erfassen. Insbesondere bedeutet dies, dass die Lichtlimitierung des Phytoplanktonwachstums, repräsentiert durch die Funktion  $\widehat{f}_I$ , als konstant angesehen wird<sup>1</sup> und sich die Modelle als parameterabhängige, autonome Anfangswertprobleme

$$\dot{y}(t) = f(y(t), u), \quad y(0) = y_0 \quad (4.3)$$

beschreiben lassen. Dabei ist  $f \in \{f_{LM}, f_{QM}\}$  und  $u \in \mathbb{R}_+^k$  steht für die jeweils enthaltenen Parameter. Im Folgenden gelte stets  $y_0 > 0$  und mit  $S$  sei die Summe  $S = \sum_i y_0^i$  bezeichnet. Ferner sei o.B.d.A  $t_0 = 0$ .

Mithilfe der in Kapitel 2 vorgestellten Theoreme wird im Folgenden die Existenz von eindeutigen Lösungen der drei eingeführten Modelle gezeigt. Dafür werden die Modelle zunächst auf wichtige Eigenschaften hin untersucht (vgl. auch Anhang A.1). Im Anschluss folgt die Präsentation stationärer Lösungen dieser Modelle und eine Analyse derer Stabilität. Anhand dieser lassen sich Parameterabhängigkeiten erkennen und Konstellationen identifizieren, die zu einer bestimmten Art von Lösung führen.

### Existenz & Eindeutigkeit von Lösungen

Um die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Modelle unter Verwendung der eingangs vorgestellten Theoreme zu zeigen, ist zunächst zu überprüfen, ob die Modelle den geforderten Voraussetzungen genügen. Im Folgenden sei  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}_{+0}^4 \times \mathbb{R}_+^k$  eine offene Menge, wobei  $k$  die Anzahl der Modellparameter ist und  $\mathbb{R}_+^n = \{y \in \mathbb{R}^n : y > 0\}$ .

**Lemma 3** (Stetigkeit). *Die Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  sind stetig in  $y$  und  $u$  auf  $\mathcal{D}$ .*

*Beweis.* Die Komponenten der Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  sind sowohl bezüglich  $y$  als auch bezüglich  $u$  Hintereinanderausführungen auf  $\mathcal{D}$  definierter und stetiger Funktionen. Dies gilt insbesondere für die internen Funktionen  $\widehat{J}$  und  $G$ . □

**Lemma 4** (Lokale Lipschitzstetigkeit). *Die Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  sind lokal Lipschitzstetig in  $y$  auf  $\mathcal{D}$ .*

*Beweis.* Unter Zuhilfenahme von Lemma 2 genügt es zu zeigen, dass die Funktionen  $f_{LM}$  sowie  $f_{QM} \in C^1(D)$  sind. Dies aber lässt sich leicht nachrechnen. □

<sup>1</sup>Eine Übertragung der Ergebnisse auf eine nicht konstante Funktion  $\widehat{f}_I$  ist leicht möglich.

**Lemma 5** (Quasipositivität). *Die Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  sind quasipositiv auf  $\mathcal{D}$ .*

*Beweis.* Sei zunächst  $f_{LM}$  betrachtet und  $t \geq t_0$ . Dann ist für  $u > 0$  und  $y := y(t) \geq 0$

$$\begin{aligned} f_{LM}^1(y) &= \Phi_P P + \Phi_Z Z + \gamma D \geq 0 && \text{falls } N = 0, \\ f_{LM}^2(y) &= 0 && \text{falls } P = 0, \\ f_{LM}^3(y) &= 0 && \text{falls } Z = 0, \\ f_{LM}^4(y) &= \Phi_P^* P^2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_Z^* Z) Z \geq 0 && \text{falls } D = 0. \end{aligned}$$

Für  $f_{QM}$  gilt dies analog, wobei in Gleichung 4 der positive Term  $\Phi_P^* P^2$  hinzukommt.  $\square$

Es sei angemerkt, dass das Zeichen  $\geq$  sich zu  $>$  verstärkt im Fall  $y > 0$  sowie, dass aus der Quasipositivität der Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  auf  $\mathcal{D}$  die positive Invarianz der Menge  $\mathcal{D}$  bezüglich des AWP 4.3 folgt.

Die vorgestellten Eigenschaften von  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  ermöglichen es die Existenz von eindeutigen Lösungen des jeweils zugehörigen AWP 4.3 zu zeigen.

**Theorem 5.** *Sei  $y_0 \geq 0$  und  $S$  die Summe der Komponenten  $y_0^i$ . Dann besitzt das parameterabhängige AWP 4.3 sowohl für  $f_{LM}$  als auch für  $f_{QM}$  eine eindeutig bestimmte Lösung  $y$ , die auf ganz  $\mathbb{R}$  existiert. Insbesondere ist  $y(t) \in [0, S]^4$  für alle  $t > t_0$ .*

*Beweis.* Betrachte das zu 4.3 äquivalente parameterunabhängige Anfangswertproblem

$$\dot{z}(t) = \begin{cases} \dot{y}(t) &= f(t, y(t)) \\ \dot{v}(t) &= 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad z(t_0) = \begin{cases} y(t_0) &= y_0 \\ v(t_0) &= u \end{cases}.$$

Für dieses existiert nach Theorem 4 eine eindeutig bestimmte Lösung  $z$ , die auf einem maximalen Intervall  $I_{max}$  existiert. Diese Lösung ist auch Lösung des parameterabhängigen AWP 4.3 und insbesondere stimmen deren Existenzintervalle überein (vgl. Aulbach (2010) Seite 290 ff.). Setze  $y := z$ . Da die durch  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  repräsentierten Differentialgleichungssysteme Masse erhaltend und die beiden Funktionen  $f_{LM}$  und  $f_{QM}$  quasipositiv sind, ist  $y$  beschränkt durch  $S$ . Insbesondere gilt für alle  $t \geq t_0$ , wenn  $y(t) \geq 0$ , dann

$$\begin{aligned} f_{LM}^1(y) &= 0 && \text{falls } N = S, \\ f_{LM}^2(y) &= -\Phi_P S \leq 0 && \text{falls } P = S, \\ f_{LM}^3(y) &= -(\Phi_Z + \Phi_Z^* S) S \leq 0 && \text{falls } Z = S, \\ f_{LM}^4(y) &= -\gamma S \leq 0 && \text{falls } D = S, \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 f_{QM}^1(y) &= 0 && \text{falls } N = S, \\
 f_{QM}^2(y) &= -(\Phi_P + \Phi_P^* S) S \leq 0 && \text{falls } P = S, \\
 f_{QM}^3(y) &= -(\Phi_Z + \Phi_Z^* S) S \leq 0 && \text{falls } Z = S, \\
 f_{QM}^4(y) &= -\gamma S \leq 0 && \text{falls } D = S.
 \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass  $y \in [0, S]^4$  für alle  $t > t_0$  sowie nach Theorem 4, dass  $I_{max} = \mathbb{R}$ , da weder  $\limsup_{t \rightarrow t_+} |y(t)| = \infty$  noch  $\liminf_{t \rightarrow t_+} \rho(t, y(t)) = 0$ .  $\square$

## Qualität der Lösungen

Um die Dynamik der Modelllösungen zu verstehen ist es sinnvoll, sich die stationären Lösungen des zu Grunde liegenden Differentialgleichungssystems anzuschauen. Diese geben die Verhaltensmöglichkeiten wieder, welche das ungestörte Modell für  $t \rightarrow \infty$  zeigen kann. Die Qualität einer solchen Lösungen sagt ferner aus, auf welche Weise die Lösung relevant für das Modellergebnis ist.

Nachfolgend ist eine Zusammenfassung der Ergebnisse, welche in Anhang A.2 und A.3 präsentiert sind, gegeben. Für Details sei auf diese verwiesen.

## Stationäre Lösungen

Für alle drei in diesem Kapitel vorgestellten Modelle können drei stationäre Lösungen identifiziert werden die positive und reelle Werte aufweisen. Allgemein betrachtet sind dies

$$E_1 = (N^*, 0, 0, 0), \quad E_2 = (N^*, P^*, 0, D^*) \quad \text{und} \quad E_3 = (N^*, P^*, Z^*, D^*).$$

Während die erste stationäre Lösung für alle drei Modelle übereinstimmt, stimmt  $E_2$  für Modell LLM und Modell LQM überein, die entsprechende Lösung für Modell QQM aber unterscheidet sich.  $E_3$  ist individuell für jedes Modell. Angemerkt sei, dass alle stationären Lösungen von der Gesamtmasse im System, also der Summe  $S = \sum_i y_0^i$  abhängen, nicht aber von den einzelnen Anfangswerten  $y_0^i$ . Dies gilt sowohl für Modell LLM, als auch für die Modelle LQM und QQM.

Per Hand und unter Zuhilfenahme der symbolischen Toolbox von MATLAB, sowie dem eingebundenen Tool MUPAD (Multi Processing Algebra Data), sind explizite Darstellungen dieser Modell spezifischen Lösungen ermittelt. Da es in der Regel nur für Polynome vom Grad  $< 5$  möglich ist analytische Lösungen zu finden, es bei der Berechnung der stationären Lösungen aber oft zu Polynomen höherer Ordnung kommt, können entsprechend

nicht alle Lösungen explizit präsentiert werden.

**Modell LLM.** Für Modell LLM sind alle drei Lösungen analytisch berechenbar und sind gegeben durch

$$E_{LLM_1}^* = (N^*(S), 0, 0, 0), \quad (4.4)$$

$$E_{LLM_2}^* = \left( \frac{k\Phi_m^P}{\mu_m - \Phi_m^P}, P_2^*(S, u), 0, \frac{\Phi_m^P}{\gamma} P_2^*(S, u) \right) \quad (4.5)$$

$$E_{LLM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)) \quad (4.6)$$

wobei

$$P_2^*(S, u) = \frac{S - \frac{k\Phi_m^P}{\mu_m - \Phi_m^P}}{\frac{\Phi_m^P}{\gamma} + 1} \quad \text{und} \quad P_3^*(u) = \sqrt{\frac{\Phi^Z g}{\epsilon(\beta g - \Phi^Z)}}.$$

Die stationären Zustände von  $N$ ,  $Z$  und  $D$  der Lösung  $E_3$  sind sehr verschachtelt, weshalb für deren explizite Präsentation auf Anhang A.2 verwiesen sei. Bemerkbar ist hier, dass in Lösung 4.5 der stationäre Zustand von  $N^*$  sowie in Lösung 4.6 der stationäre Zustand von  $P^*$  unabhängig sind von  $S$  und somit diese beiden alleinig durch die Parameterwahl bestimmt sind.

**Modell LQM.** Da Modell LQM sich nur in dem quadratischen Term  $\Phi_Z^* Z^2$  von Modell LLM unterscheidet und in den ersten beiden stationären Lösungen  $Z^* = 0$  gilt, sind  $E_{LQM_1}^*$  und  $E_{LQM_2}^*$  ebenfalls gegeben durch die Lösungen 4.4 bzw. 4.5. Die dritte Lösung hingegen unterscheidet sich von oben vorgestellter und ist gegeben durch

$$E_{LQM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(S, u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)). \quad (4.7)$$

Für Modell LQM hängt somit auch der stationäre Zustand  $P_3^*$  von  $S$  ab und ist somit nicht konstant für gegebene Parameter, wie es für Modell LLM der Fall ist.

**Modell QQM.** Modell QQM basiert auf einem zu dem von Modell LLM und LQM verschiedenen Differentialgleichungssystem, weshalb sich auch dessen stationäre Lösungen von den zuvor präsentierten unterscheiden. Allein die erste Lösung bleibt gleich, da diese unabhängig von der Formulierung den Massenerhalt im System darstellt (vgl. Lösung 4.4). Die anderen beiden Lösungen sind gegeben durch

$$E_{QQM_2}^* = \left( N_2^*(S, u), P_2^*(S, u), 0, \frac{\Phi_P^*}{\gamma} P_2^*(S, u)^2 \right), \quad (4.8)$$

wobei

$$N_2^*(S, u) = \frac{k(\Phi_P^m + \Phi_P^* P_2^*(S, u))}{\mu_m - (\Phi_P^m + \Phi_P^* P_2^*(S, u))}$$

und

$$E_{QQM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(S, u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)). \quad (4.9)$$

Die expliziten Darstellungen 4.5 und 4.8 der zweiten Lösung, sowie die des Zustandes  $P_3^*$  in Lösung 4.6 lassen erkennen, unter welchen Bedingungen diese positiv und reell sind. Ausführungen zu Abhängigkeiten der Lösungen von  $S$  sind in Anhang A.2 gegeben, Abhängigkeiten der Lösungen von  $u$  sind in Anhang A.3 untersucht.

### Stabilitätsanalyse

Die hier vorgestellte Stabilitätsanalyse beruht auf einer Untersuchung von Linearisierungen in den zuvor präsentierten stationären Lösungen. Anhand dieser, welche lineare Approximationen des Modells in den jeweiligen stationären Lösungen darstellen, können lokale Aussagen auch über das Verhalten des nichtlinearen Modells getroffen werden (vgl. Kapitel 2). Eine andere Methode der Stabilitätsanalyse, welche auch globale Aussagen zulässt, folgt der Lyapunov Theorie. Diese erfordert allerdings das Finden einer sogenannten Lyapunov-Funktion, welches in der Praxis oft nicht trivial ist. Auch hier führte ein entsprechender Ansatz nicht zum Erfolg.

Für eine Stabilitätsanalyse anhand besagter Linearisierungen müssen die Eigenwerte  $\lambda$  der jeweiligen Jakobi Matrix  $J_{f_{LM}}$  bzw.  $J_{f_{QM}}$  bestimmt werden. Dabei steht man vor einem ähnlichen Problem wie bei der Berechnung der stationären Zustände. Polynome können im Allgemeinen nur bis zum Grad 4 analytisch bestimmt werden. Für Polynome höheren Grades, welche bei der Berechnung der Eigenwerte schnell auftauchen, gibt es keine allgemein gültige Formel. Aus diesem Grund sind auch hier teils explizite Ergebnisse vorgestellt, zum Großteil aber mittels der MATLAB Routine `eig` erhaltene Ergebnisse numerischer Berechnungen.

Die Eigenwerte zu der Linearisierung  $J_{f_{LM}}(E_{LLM_1})$ , welche der in  $E_{LQM_1}^*$  und  $E_{QQM_1}^*$  entspricht, können analytisch bestimmt werden und sind gegeben durch

$$\lambda_{LLM_1} = \left( 0, -\Phi_Z^m, -\gamma, -\frac{k\Phi_P^m - \mu_m S + \Phi_P^m S}{k + S} \right). \quad (4.10)$$

Ebenso sind die Eigenwerte der Linearisierung  $J_{f_{LM}}(E_{LLM_2})$ , welche denen für  $E_{LQM_2}^*$  entsprechen (vgl.  $Z^* = 0$ ), analytisch berechenbar. Für diese allerdings sei aufgrund ihrer Komplexität auf Anhang A.2 verwiesen. Alle weiteren Eigenwerte sind nur numerisch zu erhalten.

**Tabelle 4.1:** Klassifikation der stationären Lösungen von Modell LLM in Abhängigkeit kritischer Parameterkonstellationen. Gegeben sind Lösungen, die unter den gegebenen Umständen stabil sein können. '-' existiert nicht für  $S > 0$ .

$\mu > \Phi_P$	$S > k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$	$S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$
$\beta g > \Phi_Z$	$E_{LLM_2}^*$ or $E_{LLM_3}^*$	$E_{LLM_1}^*$
$\beta g \leq \Phi_Z$	$E_{LLM_2}^*$	$E_{LLM_1}^*$
$\mu \leq \Phi_P$	$S > k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$	$S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$
$\beta g > \Phi_Z$	$E_{LLM_1}^*$	–
$\beta g \leq \Phi_Z$	$E_{LLM_1}^*$	–

Aus den analytischen Ergebnissen für Modell LLM, sowohl in Bezug auf deren stationäre Lösung als auch der entsprechenden Stabilitätsanalyse, lässt sich eine Klassifizierung der Lösungen und ihrer Stabilität herleiten (siehe Tabelle 4.1). Diese ist für die Linearisierungen von Modell LLM gültig. Für Modell LLM können keine direkten Schlussfolgerungen gezogen werden, da der maximale Eigenwert der jeweils stabilen Lösung stets 0 ist. Basierend auf dieser Klassifikation aber können numerische Untersuchungen vorgenommen werden, um auch die Stabilität der nichtlinearen Modelle aufzudecken. Hierfür siehe insbesondere Anhang A.3.

Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse geben einen Einblick in die jedem Modell innewohnende spezifische Dynamik. Übereinstimmungen und Unterschiede resultierend aus der jeweiligen Formulierung sind aufgezeigt und eine Klassifizierung in Abhängigkeit relevanter Parameterkonstellation ist vorgestellt. Die Ergebnisse zeigen, dass interessante und hilfreiche Schlüsse aus der Betrachtung von zunächst vereinfachten Modellen gezogen werden können. Diese Möglichkeit sollte nicht außer Acht gelassen werden, da basierend auf dem so erhaltenen Wissen über stabile, stationäre Lösungen weitere Untersuchungen durchgeführt werden können, wie zum Beispiel der Einfluss externer 'Störungen'.





## 5 Zusammenfassung & Ausblick

In dieser Arbeit wurden verschiedene Modellformulierungen vom Typ NPZD auf ihre interne und modelleigene Dynamik hin untersucht. Eine zunächst durchgeführte Parameteroptimierung der Modellformulierung nach Oschlies and Garçon (1999) lieferte einen ersten Einblick in die Fähigkeiten des Modells, reale Daten des marinen Ökosystems wiederzugeben. Dies geschah am Beispiel zweier verschiedener Datensätze: Zum einen an den räumlich und zeitlich aufgelösten BATS Daten, zum anderen an den nur zeitlich aufgelösten Mesokosmosdaten aus dem AQUASHIFT Projekt. Da nulldimensionale Modelle betrachtet wurden, um die durch interne Wechselwirkungen der modellierten Zustandsgrößen hervorgerufene Dynamik des Modells herauszufiltern, war für die Anwendung des ersten Datensatzes eine Mittelung notwendig. Dies geschah über die für das marine Ökosystem relevante durchmischte Schicht des Ozeans. Da die entsprechenden Optimierungsläufe zu keinem zufriedenstellenden Ergebnis führten, dies aber möglicherweise zurückzuführen ist auf die Daten oder gar deren erforderte Mittelung, wurde eine zweite Studie durchgeführt. Dabei wurde untersucht, inwieweit das Modell generell in der Lage ist, die die Dynamik des marinen Ökosystems repräsentierende Daten wiederzugeben. Es zeigte sich, dass das untersuchte Modell die generelle Dynamik der Zustandsgrößen Nährstoffe und Phytoplankton zwar gut wiedergeben kann, allerdings auf Kosten einer realistischen Repräsentation von Zooplankton und Detritus. Es stellte sich als unmöglich heraus, Parameter zu finden, die eine zufriedenstellende Wiedergabe der Dynamik dieser beiden Größen ermöglicht.

Ausgehend von diesem Ergebnis wurde die Dynamik des Modells aus theoretischer Sicht untersucht. Dazu wurde zunächst die Modellformulierung auf grundlegende mathematische Eigenschaften hin analysiert, die für eine weitere theoretische Analyse notwendig sind. Daraus resultierend wurden hilfreiche Modifikationen in der Formulierung vorgenommen, die zu den drei Modellen LLM, LQM und QQM führten. Für diese konnte zum einen die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen gezeigt, zum anderen stationäre Lösungen und deren Stabilität bestimmt werden. Letztere sind entscheidend für die Modell spezifische Dynamik. Während für Modell LLM alle stationären Lösungen analytisch berechnet und somit spezifische Parameterabhängigkeiten herausgestellt werden können, lässt die Komplexität von Modell LQM und Modell QQM dies nur in Teilen zu.

Um die Stabilität dieser Lösungen zu untersuchen, wurden deren Linearisierungen betrachtet. Sofern möglich wurde dies symbolisch, ansonsten auf numerischen Ergebnissen beruhend durchgeführt. Da die sich ergebenden Linearisierungen stets einen Eigenwert  $\lambda = 0$  aufweisen, lassen sich keine theoretisch begründeten Schlüsse für das nichtlineare System ziehen. Daher wurden auch hier numerische Experimente durchgeführt, welche zeigten, dass bis auf geringfügige Einschränkungen sich die Ergebnisse der Linearisierungen dennoch auf die nichtlinearen Probleme übertragen lassen.

Die vorliegende Arbeit bietet kein 'Rezept' für ein Modell, welches das marine Ökosystem perfekt darstellt. Sie liefert aber wichtige theoretische Grundlagen, die notwendig sind um ein solches, oder zumindest eines, welches das marine Ökosystem hinsichtlich einer gegebenen Fragestellung zufriedenstellend wiedergibt, zu kreieren. Das Wissen über stationäre Lösungen kann sowohl dem Modellierer als auch dem Anwender helfen, die grundlegende Dynamik des betrachteten Modells besser zu verstehen und die Modellergebnisse besser interpretieren zu können. Ferner können Einflüsse externer Faktoren, wie zum Beispiel die Einbeziehung variabler Licht- oder Temperaturverhältnisse, besser abgeschätzt und eingeschätzt werden.

Die Methode, die in der vorliegenden Arbeit präsentiert wird, sowohl deren numerischer als auch theoretischer Anteil, kann ohne große Umstände auf andere Modelle übertragen werden. Durch eine Parameteroptimierung können auch in anderen Fragestellungen nicht nur geeignete Parameter identifiziert werden, es können auch Defizite im Modell erkannt und entsprechend in Angriff genommen werden. Ferner ist das algorithmische Differenzieren, welches hier im Rahmen der Parameteroptimierung eingesetzt wurde, eine viel versprechende Methode, die bei anderen Problemen zu einer signifikanten Verbesserung der Ergebnisse führen kann. Insbesondere sei auf den zeitlichen Aspekt hingewiesen, da bei Problemen mit großer Zahl unbekannter Parameter die Zeitersparnis durch die reduzierte Anzahl notwendiger Modellauswertungen ausschlaggebend sein kann. Ebenfalls sollte die Idee des Zeitversatzes nicht aus den Augen verloren werden. Selbst wenn hinsichtlich des NPZD Modells kein zufriedenstellendes Ergebnis erzielt werden konnte, zeigt die Einfügung eines Zeitversatzes einen positiven Effekt. Einen solchen Versatz in dieses oder auch andere Modelle einzubauen, ist daher ein erfolgversprechender Ansatz, natürliche Systeme realistischer wiedergeben zu können.

Der theoretische Part dieser Arbeit zeigt zum einen, dass es lohnenswert ist, auch Modelle analytisch zu untersuchen, die zunächst zu komplex für eine solche Betrachtung erscheinen. Selbst wenn man auf eine reduzierte Variante des Modells zurückgreifen muss, sind meist Schlussfolgerungen auf das ursprüngliche Modell möglich und grundlegende Eigenschaften dessen können aufgedeckt werden. Zum anderen ermöglicht es die hier

vorgestellte Identifikation von stationären Lösungen und deren Qualität in Abhängigkeit von kritischen Parameterkonstellationen dem Anwender, Parameter sinnvoll zu wählen und so die Aussagekraft seines Modells zu garantieren. Der Vergleich verschiedener, jedoch verwandter Modelle deckt überdies den Einfluss einzelner Parameter und Terme auf das Modell auf. Diesen Einfluss einschätzen zu können, hilft ein zu einem Problem passendes Modell zu finden - oder ein solches zu entwickeln.

Hinsichtlich der Theorie seien hier noch weiterführende viel versprechende und interessante Untersuchungsfelder genannt. Dies sind die in dieser Arbeit nur am Rande erwähnten periodischen Lösungen sowie Bifurkationen, welche in dieser Arbeit als kritische Punkte bezeichnet sind. In Bezug auf die Modelldynamik sind dies lohnende Forschungsfelder der qualitativen Theorie nichtlinearer Differentialgleichungen, sowohl in theoretischer als auch in praktischer Hinsicht. Mit dem Auftreten von Bifurkationen kann, wie gezeigt, eine grundlegende Veränderung der Modelldynamik einhergehen. Diese Punkte und ihre Konsequenzen explizit zu kennen, bedeutet die Dynamik des betrachteten Modells in Abhängigkeit von kritischen Parameterkonstellationen bestimmen zu können. Periodische Lösungen hingegen können oszillierende Modelllösungen verursachen. Zu wissen, ob ein Modell diese aufweist und wenn ja, unter welchen Umständen, hilft das Modellverständnis zu erweitern und die Interpretation von Modelllösungen zu vereinfachen.

Schlussfolgernd lässt sich sagen, dass ein fundiertes theoretisches wie praktisches Wissen über die einem Modell innewohnende Dynamik sowohl für den Anwender als auch für den Modellierer von großem Nutzen sein kann und insbesondere die Aussagekraft von Modellen und deren Nutzen in der Praxis maßgeblich erhöht.



# Anhang

**A.1 Theoretical analysis and optimization of nonlinear ODE systems for marine ecosystem models**

**A.2 Internal dynamics of NPZD type ecosystem models**

**A.3 Impact of parameter choice on the dynamics of marine ecosystem models**

**A.4 Ergänzungen**



## A.1

Theoretical analysis and optimization of  
nonlinear ODE systems for marine  
ecosystem models

# Theoretical analysis and optimization of nonlinear ODE systems for marine ecosystem models

Anna Heinle and Thomas Slawig <sup>\*</sup>

Institute for Computer Science  
Cluster “The Future Ocean”, Christian-Albrechts Universität zu Kiel, Germany  
`{ahe,ts}@informatik.uni-kiel.de`

**Abstract.** We present the investigation of a biogeochemical marine ecosystem model used as part of the climate change research focusing on the enhanced carbon dioxide concentration in the atmosphere. Numerical parameter optimization has been performed to improve representation of observational data using data assimilation techniques. Several local minima were found but no global optimum could be identified. To detect the actual capability of the model in simulating natural systems, a theoretical analysis of the model equations is conducted. Here, basic properties such as continuity and positivity of the model equations are investigated.

**Keywords:** Climate models, Marine ecosystem models, Parameter optimization, Ordinary differential equations

## 1 Introduction

An important part of climate change research is the investigation of biogeochemical processes occurring in the oceans. The Earth’s carbon cycle, one of the main climate drivers, is highly dependent on the marine ecosystem and its interactions due to primary carbon producers such as phytoplankton. For this reason, scenarios of the climate’s future are commonly created from numerical models, including a submodel to simulate the marine ecosystem. These submodels range from conceptually simple models, like the FDM model by Fasham [1], to highly complex models simulating numerous components of the marine ecosystem such as different types of plankton or multiple nutrients (see e.g. [2–4]).

In this work, we consider a model of mid-complexity used at GEOMAR, Kiel studying the  $CO_2$  uptake of the ocean. Four components of the marine ecosystem, namely nitrogen (N), phytoplankton (P), zooplankton (Z) and detritus (D) are simulated in this model. The model, hereafter called NPZD model, depicts the main interactions and feedbacks of the marine ecosystem. However, its feasibility to reproduce real observed data is limited (see e.g. [5, 6]). Currently, the reason for this fact is unclear and is the motivation for this study.

---

<sup>\*</sup> In cooperation with Andreas Oschlies, GEOMAR, Kiel, Germany.

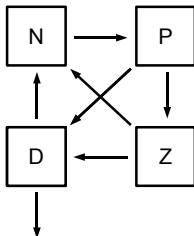


We introduce two methods used. Numerical parameter optimization is conducted to assess the influence of different parameter combinations on the model outcome and to detect whether optimal parameters exist reproducing a given observational data set. Further, the theoretical framework of the model is analysed. The knowledge of basic properties of the model as well as the demonstration of particular dependencies of model parameters may yield a better understanding and assessment of the model dynamics.

The paper is structured as follows: In Section 2, we introduce the ecosystem model considered. Biological definitions as well as a mathematical formulation of the model are provided. In Section 3 we show an extract of the numerical experiments conducted focusing on the variability of model outcomes. Theoretical findings regarding the mathematical framework of the NPZD model are subsequently presented in Section 4. A final discussion and an outlook of future work conclude the paper in Section 5.

## 2 Model

We study the behaviour of a marine ecosystem model of NPZD type developed by Oschlies and Garçon [7]. This model simulates the concentration (in  $\text{mmol Nm}^{-3}$ ) of four geobiochemical components (also named *tracers* in the following) in the atlantic ocean, namely dissolved inorganic nitrogen (N), phytoplankton (P), zooplankton (Z) and detritus (D). The interactions of the four tracers among each other control the dynamics of the model (see below and Fig. 1).



**Fig. 1.** Scheme of the coupling between the model variables N, P, Z and D. Arrows indicate a nitrogen flux from one to another component.

Aside from light, phytoplankton needs nutrients to photosynthesize and to grow. In the model, these nutrients are represented by the nitrogen component N. Zooplankton graze on phytoplankton and fecal particles of zooplankton as well as other organic, sinking material are summarized in the component detritus. A part of the detritus sinks down to the bottom of the system, another part is recycled by bacteria and comes back to the nitrogen component.

## 2.1 Mathematical formulation

The model is directly defined by the interactions of the four tracers N, P, Z and D, in the following denoted by  $\mathbf{y} = (y_i)_{i=1,\dots,4} = (N, P, Z, D)$ .

A system of coupled, nonlinear ordinary differential equations (ODEs), in detail given by

$$\begin{cases} \frac{\partial y_1}{\partial t} &= -J(\mu, U)y_2 + \Phi_m^Z y_3 + \gamma_m y_4, \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} &= (J(\mu, U) - \Phi_m^P)y_2 - G(\epsilon, g)y_3, \\ \frac{\partial y_3}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g) - \Phi_m^Z - \Phi_Z^* y_3)y_3, \\ \frac{\partial y_4}{\partial t} &= \Phi_m^P y_2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g) + \Phi_Z^* y_3)y_3 - (\gamma_m + w_s)y_4 \end{cases}, \quad (1)$$

describes these interactions.  $J$  and  $G$  are nonlinear functions representing the growth of phytoplankton respectively the grazing of zooplankton on phytoplankton. Parameters appearing in the equations as well as in functions  $J$  and  $G$  are nonnegative and signify for example growth and mortality rates. Table 1 gives a summary of all parameters. Characteristic, environmental conditions are taken into account by an additional extrinsic physical forcing.

We want to note, that due to our focus on the model specific representation of the interactions of the four tracers this forcing is not further regarded in this work.

**Table 1.** Model parameters. Units and definitions of the parameters are given together with their value resp. the biological, significant range. Parameters with an index in the first column are included in the optimization processes.

Index	Symbol	Value	Unit	Defintion
	$C_{ref}$	1.066	1	Growth coefficient of phytoplankton
	$c$	1	$^{\circ}\text{C}$	Growth coefficient of phytoplankton
	$k_{water}$	25	$\text{m}^{-1}$	PAR extinction length
	$f_{PAR}$	0.43	1	PAR fraction of insolation
1	$\beta$	[0,1]	1	Assimilation efficiency of zooplankton
2	$\nu_m$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Phytoplankton growth rate
3	$\alpha$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^2 \text{W}^{-1} \text{d}^{-1}$	Slope of photosynthesis vs light intensity
4	$\Phi_m^Z$	[0,1]	$\text{d}^{-1}$	Zooplankton linear loss rate
5	$k_P$	[0, 1]	$\text{m}^2 (\text{mmol N})^{-1}$	Light attenuation by phytoplankton
6	$\epsilon$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^6 (\text{mmol N})^{-2} \text{d}^{-1}$	Grazing encounter rate
7	$g$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	Maximum grazing rate
8	$\Phi_m^P$	[0,1]	$\text{d}^{-1}$	Phytoplankton linear mortality
9	$\Phi_Z^*$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^3 (\text{mmol N})^{-1} \text{d}^{-1}$	Zooplankton quadratic mortality
10	$\gamma$	[0,1]	$\text{d}^{-1}$	Detritus remineralization rate
11	$k_N$	$\mathbb{R}_+$	$\text{mmol N m}^{-3}$	Half saturation for NO3 uptake
12	$w_s$	[0,1]	$\text{m d}^{-1}$	Detritus sinking

### Light and nutrient limited growth rate of phytoplankton

Biologically, the growth of phytoplankton, in the model represented by  $J$ , is limited by two factors, light and nutrients. Here, this limitation is modeled using Liebig's law of the minimum (see Eq. (2)). The temperature weighted maximum growth rate  $V_p(t) = \mu_m C^T(t)$  is multiplied by the minimum of two functions, function  $\mu$ , describing the light limitation (Eq. (3)) and function  $U$ , mirroring the nutrient limitation (Eq. (4)).

$$J(\mu(I, y_2, t), U(y_1, t)) = V_p(t) \min\{\mu(I, y_2, t), U(y_1, t)\} . \quad (2)$$

The function  $\mu$ , given by

$$\mu(I, y_2, t) = \frac{1}{k_{to}(t)z} \ln \left( \frac{I_0(t) + \sqrt{V_p(t)^2 + I_0(t)^2}}{I_z(t) + \sqrt{V_p(t)^2 + I_z(t)^2}} \right) , \quad (3)$$

$$I_0(t) = \alpha I_{in}(t) ,$$

$$I_z(t) = I_0(t) e^{-k_{to}z(t)} ,$$

$$k_{to}(t) = k_w(t) + k_P(t)y_2 ,$$

is based on the Smith's curve [8] and describes the relationship between photosynthesis and light for phytoplankton. The motivation for this function is to enable the integration of variable insolation, for example due to seasonal influences or in case a daily cycle is to be simulated.

The nutrient limitation  $U$  is described by a so called Holling type II function,

$$U(y_1, t) = \frac{y_1}{k_N + y_1} . \quad (4)$$

Holling type functions describe the reproduction of a consumer as a function of food density, here as a function of nutrients  $y_1$ . Obviously,  $U$  is monotonically increasing and ranges in the interval  $[0, 1]$  for  $k_N > 0$  and  $y_1 \in \mathbb{R}_+^0$ .

### Zooplankton growth rate

The growth of zooplankton is dependent on the phytoplankton availability and is given by a Holling type III function,

$$G(\epsilon, g, y_2) = \frac{g\epsilon y_2^2}{g + \epsilon y_2^2} . \quad (5)$$

Such as  $U$ ,  $G$  is monotonically increasing, but ranges in the interval  $[0, g]$  for  $g, \epsilon > 0$  and  $y_2 \in \mathbb{R}_+^0$ .

### 3 Numerical Optimization

We show an extract of the experiments conducted in the course of the parameter optimization of the ecosystem model introduced in Section 2. Two observational data sets are used to optimize the parameters of the model by data assimilation techniques (see below). In both cases, a cost function of least-squares type,

$$\min_{u \in \mathbb{R}_+^k} J(y(u)) := \|y(u) - y_d\|^2 \text{ s.t. } lb \leq u \leq ub, \quad (6)$$

is applied. Reference data is denoted by  $y_d$ , the model output is given by  $y(u)$  and  $u \in \mathbb{R}_+^k$  is the parameter vector to be optimized, componentwise within the constraints  $lb$  and  $ub$ .

#### 3.1 Data

The following two data sets are used for parameter optimization of the NPZD model.

- D1** The Bermuda Atlantic Time Series (BATS): Vertical profiles obtained during the US JGOFS project. This data is frequently used within optimization approaches of marine ecosystem models, among others the one dimensional version of the NPZD model (see e.g. [9, 6, 12]). For this study, each profile is vertically averaged from the surface to the respective “mixed layer depth” which is fixed by a temperature decline of more than 0.5 °C (for details see [10]).
- D2** Indoor-mesocosm data obtained during the AQUASHIFT project: A 30 day mesocosm experiment performed at GEOMAR, Kiel investigating the impact of ocean warming on the phytoplankton spring bloom in the North Atlantic (for details see [11]).

Since parameter optimization with respect to D1 is subject of [12], we here focus on the optimization using data set D2.

#### 3.2 Results with respect to D2

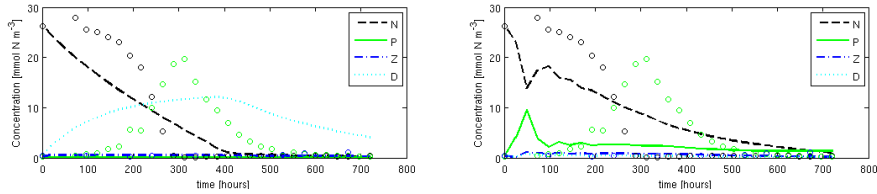
In the following we show a cut-out of the numerical optimization experiments. Note, that we show individual examples instead of statistics to highlight specific issues. Table 2 and Figure 2 demonstrate the impact of varying upper bounds of the parameters (E1), Table 3 and Figure 3 provide the results of an initial value experiment (E2).

All results shown are obtained operating an optimization algorithm of SQP (sequential quadratic programming) type. Initial values are taken from literature as well as chosen randomly. The optimization runs include the indexed parameters presented in Table 1.

**Table 2.** Variation of the upper bounds. Initial values and upper bounds of the parameters according to [6] (*left*), resp. modified (*right*).

	$lb$	$ub$	$u^{ini}$	$u^*$	$ub_1$	$\tilde{u}^{ini}$	$\tilde{u}^*$
$\Phi_P$	0.0001	1	0.001	0.0021	1	0.001	0.0205
$\Phi_Z$	0.0001	10	0.202	0.1631	1	0.202	0.4179
$\gamma$	0.0001	1	0.092	0.0044	1	0.092	0.9051
$\beta$	0.0001	1	1.000	0.9484	1	0.8	0.9365
$\Phi_Z$	0.0001	1	0.025	0.0087	1	0.025	0.4074
$g$	0.0001	100	20.00	20.457	1	0.8	0.9761
$\epsilon$	0.0001	100	5.446	4.6083	1	0.8	0.3319
$\nu_m$	0.0001	10	1.076	1.1482	1	0.8	0.1696
$k_N$	0.0001	10	1.827	1.1982	1	0.8	0.5867
$w_s$	0.0001	1	0.230	0.0085	1	0.8	0.3761
$\alpha$	0.0001	100	0.107	0.0217	1	0.107	0.2462
$k_P$	0.0001	1	0.026	0.8503	1	0.026	0.0130
<b>Cost</b>				<b>3.4240</b>			<b>3.8091</b>

**E1** In the first experiment, optimal parameter values found by Rückelt et al. [6] are used to initialize the model. Table 2 shows the parameters to be optimized, their initial values  $u^{ini}$ , optimized values  $u^*$  and the bounds  $lb$  and  $ub$  for two examples. Replacing the upper bounds as given in [6] by a vector of ones<sup>1</sup>, the cost function can be decreased less ( $J = 3.8091$ ) in contrast to final costs using the original setting ( $J = 3.4240$ ). One might assume that narrowing the constraints may yield to worse optimization results. However, the values do not differ so much, and, as visible in Figure 2, both parameter sets result in an unsatisfying model outcome.

**Fig. 2.** Simulations of N, P, Z and D for a 30 day period, according to the length of the mesocosm study, using parameter values  $u^*$  (*left*) and  $\tilde{u}^*$  (*right*) as presented in Table 2. Circles depict data points.

**E2** The second experiment addresses the influence of initial values on the optimized parameter vector. Table 3 displays the results of four, randomly initialized optimization runs, where  $u_{1,2}^{ini} \in [0, 1]^{12}$  and  $u_{3,4}^{ini}$  are within the constraints (see Tab. 3). While the optimization started at  $u_1^{ini}$  reaches costs  $J$  near 1, the optimization process initialized with  $u_2^{ini}$  gets stuck, just reaching a cost function of  $J \simeq 6$ . Similar results are obtained for  $u_3^{ini}$  and  $u_4^{ini}$  indicating the independence of the optimization on the initial values. Further,

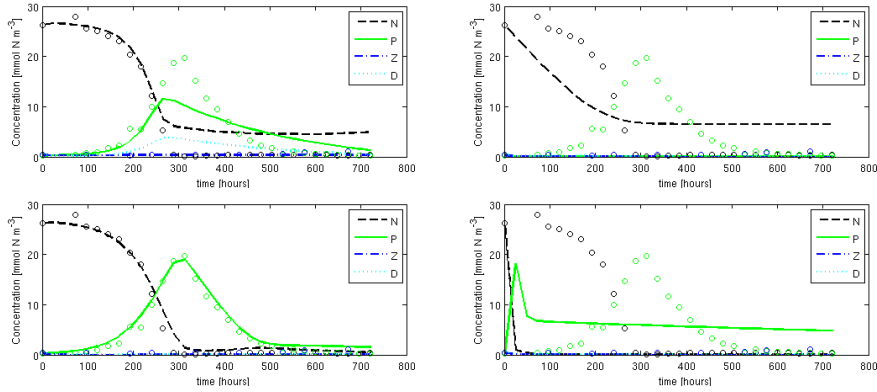
<sup>1</sup> Consequently, the initial values of some parameters are modified as well.

although the cost function reaches values in the same ranges, the outcomes as well as the final parameter sets  $u_i^*, i = 1, \dots, 4$  differ noticeably and we deduce the existence of multiple distinctive, local minima (see Tab. 3 and Fig. 3).

**Table 3.** Impact of different, random initial values  $u^{ini}$ . Upper and lower bounds are fix ( $lb = (0.0001)^{12}$  and  $ub_i = 1.0$  for  $i = 1, 3, 4, 5, 12$ ,  $ub_j = 10.0$ ,  $j \neq i$ ).  $u^*$  are the optimized values.

	$u_1^{ini}$	$u_1^*$	$u_2^{ini}$	$u_2^*$	$u_3^{ini}$	$u_3^*$	$u_4^{ini}$	$u_4^*$
$\Phi_P$	0.8147	0.0585	0.6787	0.5547	0.1146	0.0036	0.4551	0.0005
$\Phi_Z^*$	0.9058	0.0660	0.7577	1.7077	3.5730	8.8814	3.7551	3.3658
$\gamma$	0.1270	0.1883	0.7431	0.9756	0.0947	0.6833	0.0095	0.1377
$\beta$	0.9134	0.7945	0.3922	0.4261	0.0942	0.2343	0.2697	0.1882
$\Phi_Z$	0.6324	0.0035	0.6555	0.2604	0.0476	0.5000	0.1297	0.9283
$g$	0.0975	0.0361	0.1712	3.4484	7.0978	3.4276	6.3543	7.9393
$\epsilon$	0.2785	0.7821	0.7060	1.1090	0.9482	1.3885	2.4897	0.2272
$\nu_m$	0.5469	0.1146	0.0318	0.7970	0.6744	0.0297	4.2283	4.6502
$k_N$	0.9575	3.0715	0.2769	1.8394	6.6350	6.5590	1.3252	2.2505
$w_s$	0.9649	0.0458	0.0462	0.3040	9.7396	9.2367	4.8159	5.7531
$\alpha$	0.1576	9.9534	0.0971	0.1138	5.8376	5.8376	2.1038	2.2880
$k_P$	0.9706	0.6453	0.8235	0.9280	0.0162	0.0162	0.5233	0.5997
<b>Cost</b>	<b>1.109</b>		<b>5.925</b>		<b>1.390</b>		<b>5.670</b>	

These two experiments demonstrate the general challenge of finding an optimal parameter set in the context of ecosystem modeling. The experiments performed for the NPZD model indicate the existence of numerous local minima which make the numerical detection of a global minimum - as far as it exists - virtually impossible. Thus, we proceed with a second approach to gain information on the feasibility of the model.



**Fig. 3.** Simulations created by  $u_1^*$  (top left),  $u_2^*$  (top right),  $u_3^*$  (bottom left) and  $u_4^*$  (bottom right). Notations are the same as in Figure 1.

## 4 Theoretical analysis

In the following, we consider the initial value problem (IVP)

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 > 0 \text{ and } t \in I = [t_0, t_0 + a], \quad (7)$$

where  $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$  is given by the right-hand side of

$$\begin{cases} \frac{\partial y_1}{\partial t} &= -J(U)y_2 + \Phi_m^Z y_3 + \gamma_m y_4, \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} &= (J(U) - \Phi_m^P)y_2 - G(\epsilon, g)y_3, \\ \frac{\partial y_3}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g) - \Phi_m^Z - \Phi_Z^* y_3)y_3, \\ \frac{\partial y_4}{\partial t} &= \Phi_m^P y_2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g) + \Phi_Z^* y_3)y_3 - \gamma_m y_4 \end{cases} . \quad (8)$$

In contrast to system (1), we here assume that the ODE system is mass conserving (equivalent to  $w_s = 0$  in system (1)) and the limitation of phytoplankton growth due to light is ignored.

To reveal fundamental characteristics of the model dynamics, basic properties of the model equations have to be checked at first. From now on, the differential equations  $\frac{\partial y_i}{\partial t}$  are denoted by  $f_i(\mathbf{y})$ ,  $i = 1, \dots, 4$  and the model parameters are summarized in the vector  $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1, \dots, 12}$ .

**Remark 1** *The equations  $f_i, i = 1, \dots, 4$  in (8) are continuous in  $\mathbf{y}$  and  $\mathbf{u}$  for positive  $\mathbf{y}$  resp.  $\mathbf{u}$ .*

This is obvious since the equations are compositions of continuous functions in both,  $\mathbf{y}$  and  $\mathbf{u}$ , that especially holds for the functions  $J$  and  $G$ .

Next, we consider the range of  $\mathbf{f}$ . Concentrations, as simulated in our model, are assumed to be nonnegative. To ensure this, we check an important preliminary to investigate this property. The following definition is used.

**Definition 1** A function  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  is called *quasipositive* if for  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  with  $y_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ , for all  $k \in 1, \dots, n$ ,  $t \geq t_0$  and  $y_k = 0$  hold  $f_k(t, \mathbf{y}) \geq 0$ .

**Proposition 1** *The equations  $f_i, i = 1, \dots, 4$  in (8) are quasipositive given any parameter vector  $\mathbf{u} \geq 0$ .*

*Proof.* Let  $\mathbf{u} \geq 0$  and  $\mathbf{y} = (y_i)_{i=1, \dots, 4} \geq 0$ . Then

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{y}) &= \Phi_m^Z y_3 + \gamma_m y_4 \geq 0 \text{ for } y_1 = 0, \\ f_2(\mathbf{y}) &= 0 \text{ for } y_2 = 0, \\ f_3(\mathbf{y}) &= 0 \text{ for } y_3 = 0, \\ f_4(\mathbf{y}) &= \Phi_m^P y_2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g) + \Phi_Z^* y_3)y_3 \geq 0 \text{ for } y_4 = 0. \end{aligned}$$

□

To investigate the existence and uniqueness of solutions of an IVP, Lipschitz continuity plays a main role. We want to recall the following, well-known Lemma.

**Lemma 1** Let  $\mathcal{D}$  be a domain in  $\mathbb{R}^n$  and  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ . If  $f$  and its partial derivatives  $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$  are continuous in  $\mathcal{D}$ , then  $f$  is locally Lipschitz continuous in  $\mathcal{D}$ .

Now, for parameters in the range  $[0, 1]$ , the local Lipschitz continuity of functions  $f_i, i = 1, \dots, 4$  can be shown providing a good base for further analyses regarding the uniqueness of solutions.

**Proposition 2** Let  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}_+^4$  be a domain and  $\mathbf{u} \in [0, 1]^{12}$ . Then, the equations  $f_i, i = 1, \dots, 4$  in (8) are locally Lipschitz continuous in  $\mathbf{y}$ .

*Proof.* As noted before, the functions  $f_i$  are continuous for all  $i$ . We do not show the calculations in detail, but  $\frac{\partial f_i}{\partial y_j} \in \mathcal{C}^1(\mathcal{D})$  for  $i, j = 1, \dots, 4$ . Hence,  $f \in \mathcal{C}^1(\mathcal{D})$  and the preliminaries of corollary 1 are fulfilled. The local Lipschitz continuity of  $f$  follows.  $\square$

**Remark 2** The global Lipschitz continuity of  $f_i, i = 1, \dots, 4$  is not necessarily given. For demonstration, we here give a short counterexample.

**Example:** Let  $L > 0$  and a parameter vector  $\mathbf{u} \in [0, 1]$ . We distinguish 2 cases.

1.  $\beta g \leq \beta g^2 + 2\Phi_Z^* + \Phi_Z$ .

Choose  $\mathbf{y} := (y_1, \sqrt{\frac{1-g}{\epsilon}}, 1, y_4)$  and  $\bar{\mathbf{y}} := (y_1, \sqrt{\frac{1-g}{\epsilon}}, 1 + \frac{L+\delta}{\Phi_Z^*}, y_4)$  for a  $\delta > 0$ . Then

$$\begin{aligned} \|f_3(\mathbf{y}) - f_3(\bar{\mathbf{y}})\| &= (L + \delta) \left\| \frac{\Phi_Z}{\Phi_Z^*} + 2 + \frac{L + \delta}{\Phi_Z^*} - \frac{\beta g(1-g)}{\Phi_Z^*} \right\| \\ &> L \frac{L + \delta}{\Phi_Z^*} = L \|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}\|. \end{aligned}$$

2.  $\beta g > \beta g^2 + 2\Phi_Z^* + \Phi_Z$ .

Choose  $\mathbf{y} := (y_1, \sqrt{\frac{1-g}{\epsilon}}, 1, y_4)$  and  $\bar{\mathbf{y}} := (y_1, \sqrt{\frac{1-g}{\epsilon}}, 1 - \frac{L}{\Phi_Z^*}, y_4)$ . Then

$$\begin{aligned} \|f_3(\mathbf{y}) - f_3(\bar{\mathbf{y}})\| &= L \left\| \frac{\Phi_Z}{\Phi_Z^*} + 2 + \frac{L}{\Phi_Z^*} - \frac{\beta g(1-g)}{\Phi_Z^*} \right\| \\ &> L \frac{L}{\Phi_Z^*} = L \|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}\| \end{aligned}$$

## 5 Conclusions & Outlook

An extract of the numerical and theoretical investigation of a marine ecosystem model is presented. Parameter optimization and numerical experiments are



conducted to get an insight of the model variability. Two examples are shown addressing the influence of different parameter settings. We demonstrate that the model is highly variable and numerous local minima exist, making the determination of a global optimum by numerical methods virtually impossible. The theoretical part of this study focus on basic properties of the model equations. Continuity and quasipositivity of the equations are established and conditions for local Lipschitz continuity are presented. These first findings facilitate the ongoing investigation of theoretical characteristics of the model making the model and its application in climate research more meaningful.

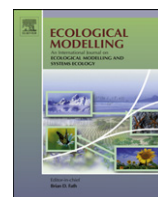
## References

1. Fasham M.J.R., Ducklow, H.W., McKelvie, S.M.: A nitrogen-based model of plankton dynamics in the oceanic mixed layer. *J. Mar. Res.* 99, 591–639 (1990)
2. Bissett, W.P., Walsh, J.J., Dieterle, D.A., Carder, K. L.: Carbon cycling in the upper waters of the Sargasso Sea: I. Numerical simulation of differential carbon and nitrogen fluxes. *Deep-Sea Res. I* 46, 205–269 (1999)
3. Moore, J.K., Doney, S.C., Kleypas, J.A., Glover, D.M., Fung, I.Y.: An intermediate complexity marine ecosystem model for the global domain. *Deep-Sea Res. II* 49, 403462. (2002)
4. Lancelot, C., Spitz, Y.H., Gypens, N., Ruddick, K., Becquevort, S., Rousseau, V., Billen, G.: Modelling diatom-Phaeocystis blooms and nutrient cycles in the Southern Bight of the North Sea: the MIRO model. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* 289, 63–78 (2005)
5. Schartau, M., Oschlies, A.: Simultaneous data-based optimization of a 1d-ecosystem model at three locations in the north atlantic: Part I - method and parameter estimates. *J. Mar. Res.* 61, 765–793 (2003)
6. Rückelt, J., Sauerland, V., Slawig, T., Srivastav, A., Ward, B., Patvardhan, C.: Parameter optimization and uncertainty analysis in a model of oceanic CO<sub>2</sub>-uptake using a hybrid algorithm and algorithmic differentiation. *Nonlinear Anal. Real, Online* (2010)
7. Oschlies, A., Garçon, V.: An eddy-permitting coupled physical-biological model of the north atlantic. 1. Sensitivity to advection numerics and mixed layer physics. *Global Biogeochem. Cy.* 13, 135–160 (1999)
8. Jassby, A.D., Platt, T.: Mathematical formulation of the relationship between photosynthesis and light for phytoplankton. *Limnol. Oceanogr.* 21, 540–547 (1976)
9. Spitz, Y.H., Moisan, J.R., Abbott, M.R.: Configuring an ecosystem model using data from the Bermuda Atlantic time series (BATS). *Deep-Sea Res. II* 48, 1733–1768 (2001)
10. Fasham, M.J.R., Evans, G.T.: The use of optimisation techniques to model marine ecosystem dynamics at the JGOFS station at 473N 203W. *Philos. T. Roy. Soc. B* 348, 206–209 (1995)
11. Sommer, U., Lengfellner, K.: Climate change and the timing, magnitude, and composition of the phytoplankton spring bloom. *Glob. Change Biol.* 14, 1199–1208 (2008)
12. El Jarbi, M., Slawig, T.: Introducing Periodic Parameters in a Marine Ecosystem Model using Linear Quadratic Optimal Control, In: Proceedings of the 25th IFIP TC7 Conference on System Modeling and Optimization (2012)



## A.2

### Internal dynamics of NPZD type ecosystem model



## Internal dynamics of NPZD type ecosystem models

A. Heinle\*, T. Slawig

Cluster "The Future Ocean", Institute of Computer Science, Christian-Albrechts University, 24098 Kiel, Germany

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 20 September 2012

Received in revised form 8 January 2013

Accepted 11 January 2013

#### Keywords:

Marine ecosystem

Model

Dynamics

Equilibria

Quality

### ABSTRACT

The marine ecosystem is an essential part of the Earth's carbon cycle. Therefore, to create model-based scenarios of the future of the Earth's climate, it is inevitable to consider the relevant processes of this system within numerical simulations. In the last two decades, a wide range of submodels of varying complexity have been established representing the marine ecosystem. Their specific behaviour and characteristic responses to, e.g., external forcings, however, are only merely understood. In this study, we present a mathematical method to assess the fundamental behaviour of such models. Three marine ecosystem models of NPZD type, varying in their formulation of phytoplankton loss and zooplankton loss, are analyzed. Following the qualitative theory of dynamical systems, model specific behaviours as well as similarities of the individual models are revealed. For each model, three equilibria are detected and their stability properties are analyzed. Parameters that significantly affect the model solutions are pointed out. Parameter constellations and initial values that cause characteristic model behaviours are determined and discussed. The results obtained provide the basic, theoretical knowledge which is essentially needed to use models in an effective and appropriate way.

© 2013 Elsevier B.V. All rights reserved.

### 1. Introduction

The future of the Earth's climate is of main interest in research and policy, at least since it has been realized that industrial processes and other anthropogenic interventions cause non-natural changes. A key factor affecting the climate is the greenhouse gas carbon dioxide (CO<sub>2</sub>). Its concentration in atmosphere and ocean has significantly changed during the last decades and its prospective development in the near and remote future is much debated.

In climate science, numerical models are used to generate scenarios simulating the effects of various environmental conditions on the development of the Earth's climate. Among others, the impact of increasing CO<sub>2</sub> concentrations on biosphere and individual ecosystems in atmosphere and oceans is investigated since those significantly affect the Earth's carbon cycle. For example, the marine ecosystem is treated in many numerical models since primary production of marine phytoplankton is a main driver of the CO<sub>2</sub> cycle.

Nowadays numerous models simulating the relevant processes in the marine ecosystems exist. They range from very simple ones, that calculate the concentrations of two or three components, to highly complex models that include, e.g., multiple nutrients and various plankton types (Moore et al., 2002; Gregg et al., 2003;

Gibson et al., 2005; Fasham et al., 2006; Hinckley et al., 2009). One of the medium complex models is the NPZD type model. Due to its rather simple framework and simultaneously quite realistic representation of the marine ecosystem this type of model is frequently applied in climate research.

NPZD models simulate the interactions of the four variables nutrients (N), phytoplankton (P), zooplankton (Z) and detritus (D). The mathematical formulation of the internal fluxes varies in kind and complexity. For example, the growth of phytoplankton can be modelled to be limited by nutrients only, to be limited additionally by light or even by more factors (Denman and Peña, 1999; Oschlies and Garçon, 1999; McCreary et al., 2001; Fennel et al., 2001; Kawamyko, 2002; Spitz et al., 2003; Losa et al., 2006; Pahlow et al., 2008). Further terms varying in their formulation and known to be highly relevant for the model outcome are the closing terms of phytoplankton and zooplankton. Often, they are modelled by linear functions like in the model of Denman and Peña (1999). Other authors opine that this is not realistic enough and that more complex formulations are necessary, such as quadratic closing terms or terms of even higher order (Fennel et al., 2001; Edwards, 2001; Losa et al., 2006). A detailed discussion on several closing terms of zooplankton in the use of more simple models is found in Murray and Parslow (1999).

The large variety of ecosystem models and their formulations makes it extremely difficult to find the model best, or at least well, suited to address a specific problem. Data assimilation is a common method used to check whether a model is meaningful for a given task or not. Therein, the coincidence of model results and data,

\* Corresponding author. Tel.: +49 431 880 7338; fax: +49 431 880 7618.

E-mail address: [ahe@informatik.uni-kiel.de](mailto:ahe@informatik.uni-kiel.de) (A. Heinle).

URL: <http://www.informatik.uni-kiel.de/co2> (A. Heinle).

mostly observational data, is analyzed using optimization techniques (e.g., Fennel et al., 2001; Schartau and Oschlies, 2003; Fan and Lvsham, 2009; Rückelt et al., 2010). While this approach is reasonable, it does not provide an understanding of the model itself and its internal dynamics. For example, in case unsatisfying optimization results are obtained it is not clear what might have caused them and whether the model is unreliable at all, or whether a small modification would lead to a significant improvement. Further, data assimilation techniques are computationally expensive. Due to the need of several model runs in an optimization process, these costs particularly increase significantly with increasing model complexity. Thus, to keep data assimilation techniques efficiently, especially in case complex models should be evaluated, restrictions on the parameter space and on the initial values might be helpful.

To overcome this gap, we follow a more theoretical approach to analyze the feasibility of a model to be used for a certain objective. Focusing on equilibrium states of the modelled variables, the basic dynamics of a model can be exposed. Limits of the model framework considered as well as information on the respective parameter space can be obtained. In particular, parameter and initial value dependencies can be identified.

In this study we investigate three marine ecosystem models of NPZD type. They are all based on the same mathematical framework following the model formulation of Oschlies and Garçon (1999), but differ in their representation of phytoplankton and zooplankton loss. Analyzing this three model versions, we aim to identify characteristics of each closing term. Limits of the individual formulations, caused by parameter or initial value restrictions, are pointed out. We mainly focus on the impact of varying initial values in this study. A detailed parameter survey is done as well, but its presentation exceeds the scope of this paper.

The paper is structured as follows: In Section 2 a general formulation of the three NPZD models is given and the processes included, together with their corresponding mathematical expressions, are explained. This is followed by a separate elucidation of the individual models. In Section 3 the equilibrium solutions, separately determined for each model, are presented. In Section 4, the stability properties of the individual equilibria are analyzed and discussed. A summary and conclusions of the results complete the study in Section 5.

## 2. Models

Three marine ecosystem models of NPZD type are analyzed in this study. NPZD type models simulate the concentrations of the following four marine ecosystem components: Dissolved inorganic nitrogen (N), phytoplankton (P), zooplankton (Z) and detritus (D) given in mmolN m<sup>-3</sup>. All three models are defined by an initial value problem (IVP) that is generally defined by

$$y' = f(y, t) \quad \text{with} \quad y(t_0) = y_0. \tag{1}$$

In our case, the state variables  $N, P, Z$  and  $D$  are represented by the vector  $y = (N, P, Z, D)$ . Their initial values are summarized in  $y_0$  and are chosen in accordance to measured data. In our models, Eq. (1) represents a system of coupled, nonlinear ordinary differential equations (ODEs) that describe the internal dynamics of the variables. The difference between the three models presented in the following are in these ODE systems, in particular in the loss terms of zooplankton and phytoplankton. While the first model, model LLM, assumes a linear mortality of both, phytoplankton and zooplankton, the second model, model LQM, contains an additional, quadratic loss term of zooplankton. The third model, model QQM, finally considers linear and quadratic mortalities of both variables. Schemes of the individual model setups are shown in Fig. 1.

### 2.1. Models LLM and LQM

The dynamics of the first two models, models LLM and LQM, are described by Eq. (2). They just differ in the setting of the parameter  $\Phi_z^*$ . In model LLM the quadratic loss of zooplankton is neglected, thus it holds  $\Phi_z^* = 0$ . The second model, model LQM, in contrast postulates  $\Phi_z^* > 0$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t} &= -J(N, I)P + \Phi_z Z + \gamma_m D, \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= (J(N, I) - \Phi_p)P - G(\epsilon, g, P)Z, \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, P) - \Phi_z - \Phi_z^* Z)Z, \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= \Phi_p P + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_z^* Z)Z - \gamma_m D. \end{aligned} \tag{2}$$

All parameters appearing in Eq. (2) are defined and explained in Table 1. Except those, two nonlinear functions arise in system (2),  $J = J(N, I)$  and  $G = G(\epsilon, g, P)$ . They are elucidated below. The parameters therein are found in Table 1 as well.

#### 2.1.1. Modelling of phytoplankton growth

The growth of phytoplankton is dependent on the light ( $I$ ) and the amount of nutrients ( $N$ ) available. In our models, this is expressed by the function  $J = J(N, I)$  occurring in the first two equations of the ODE systems given in Eqs. (2) and 3. Function  $J$  is composed of two monotonously increasing functions  $f_I$  and  $f_N$  that are formulated according to Michaelis–Menten and that describe the present light and nutrient conditions separately. In case capacity limited processes are modelled, as in the present case, Michaelis–Menten formulations are frequently found (López-Fidalgo and Wong, 2002). A maximum growth rate is weighted by one or more saturation terms. In our models, those are the two terms representing the current nutrient and light limitation,

$$f_N(N) = \frac{N}{k_N + N} \quad \text{and} \quad f_I(I) = \frac{I}{k_I + I}.$$

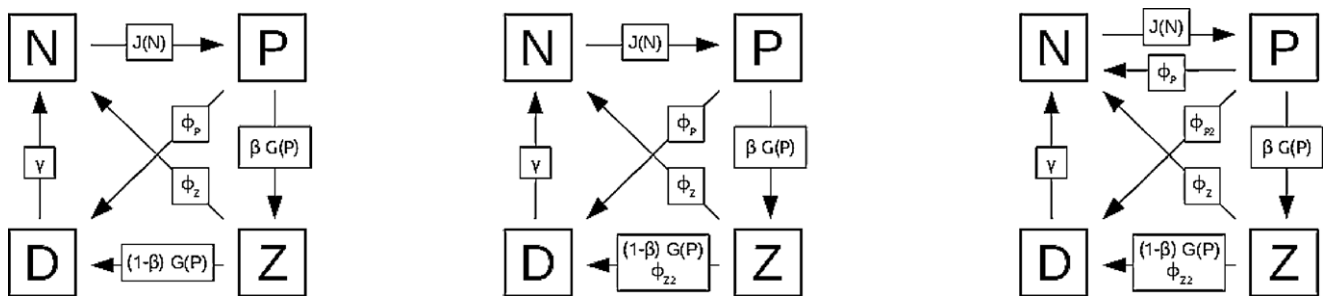


Fig. 1. Schemes of the coupling between the model variables  $N, P, Z$  and  $D$  for model LLM (left), model LQM (middle) and model QQM (right). Arrows indicate a nitrogen flux from one to another component.

**Table 1**

Model parameters. Units and definitions are given as well as the parameter set  $u^*$  exemplary used for illustrations in this study.

Symbol	Value/range	Unit	$u^*$	Definition
$C_{ref}$	1.066	1		Growth coefficient of phytoplankton
$c$	1	°C		Growth coefficient of phytoplankton
$\beta$	[0, 1]	1	0.925	Assimilation efficiency of zooplankton
$\alpha$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^2 \text{W}^{-1} \text{d}^{-1}$	0.256	Slope of photosynthesis vs. light intensity
$\mu_m$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	0.270	Phytoplankton growth rate
$\Phi_P$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	0.040	Phytoplankton linear mortality
$\Phi_P^*$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	0.025	Phytoplankton quadratic loss rate
$\epsilon$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^6 (\text{mmol N})^{-2} \text{d}^{-1}$	1.600	Grazing encounter rate
$g$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	1.575	Maximum grazing rate
$\Phi_Z$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	0.010	Zooplankton linear loss rate
$\Phi_Z^*$	$\mathbb{R}_+$	$\text{m}^3 (\text{mmol N})^{-1} \text{d}^{-1}$	0.340	Zooplankton quadratic mortality
$\gamma_m$	$\mathbb{R}_+$	$\text{d}^{-1}$	0.048	Detritus remineralization rate
$k_N$	$\mathbb{R}_+$	$\text{mmol N m}^{-3}$	0.700	Half saturation constant for $\text{NO}_3$ uptake
$k_I$	$\mathbb{R}_+$	$\text{W m}^{-3}$		Half saturation constant for light

The final growth rate  $J(N, I)$  is then the product of the maximum growth rate of phytoplankton,  $\mu_m$ , and the two functions presented above,

$$J(N, I) = \mu_m \cdot f_N(N) \cdot f_I(I).$$

Note, technically, the present light, given by  $I$ , is a function itself that includes the parameters  $C_{ref}$ ,  $c$  and  $\alpha$ . In our analysis, however, these parameters are constant and therefore, they are not discussed in detail. For more information and alternative formulations of the light limitation (see e.g., Schartau and Oschlies, 2003).

### 2.1.2. Modelling of zooplankton grazing

As for the growth of phytoplankton there are various formulations depicting the grazing of zooplankton on phytoplankton. In this study, a Holling type III function (see Fasham, 1995) is applied, given by

$$G(\epsilon, g, P) = \frac{g\epsilon P^2}{g + \epsilon P^2}.$$

For an explication of the parameters see Table 1.

### 2.2. Model QQM

In addition to the quadratic loss of zooplankton in model LQM, model QQM contains a quadratic loss of phytoplankton. This additional loss can be considered as a parameterization of various processes as aggregation of phytoplankton cells and immediate, viral infection with subsequent cell lysis, grazing by herbivores, etc. (see Kriest et al., 2010). To keep the additional parameterization consistent with the real world, in particular with the pathways of nitrogen in the marine ecosystem, a modification of the governing ODE system is necessary. The linear loss of phytoplankton is no more added to the compartment of detritus, but to the section of nutrients. Detritus instead gains mass by the quadratic loss of phytoplankton. The resulting ODE system is given in Eq. (3).

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t} &= (-J(N, I) + \Phi_P)P + \Phi_Z Z + \gamma_m D, \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= (J(N, I) - \Phi_P - \Phi_P^* P)P - G(\epsilon, g, P)Z, \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, P) - \Phi_Z - \Phi_Z^* Z)Z, \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= \Phi_P^* P^2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, P) + \Phi_Z^* Z)Z - \gamma_m D. \end{aligned} \quad (3)$$

Except for the variations mentioned, model QQM is based on the same mathematical assumptions as the first two models, models LLM and LQM. Thus, the mathematical formulation of the non-constant growth and grazing rates explained above and the

parameter constraints given in Table 1 are valid for model QQM as well.

### 3. Equilibrium solutions

To analyze the dynamics of the models presented and to point out individual model characteristics, methods of the qualitative theory of ordinary differential equations are used. The detection of equilibria and the analysis of their stability properties are one of the basic and most important methods to gain insight in the dynamics of an ODE system and thus in our models.

In our context, we define equilibria as temporally steady states of the four state variables  $N$ ,  $P$ ,  $Z$  and  $D$ . They are obtained by setting the left hand side of the related governing ODE system (Eqs. (2) and (3)) to 0. Negative and complex solutions are ignored in our analyzes, because concentrations, as simulated by our models, are naturally positive and real-valued. Moreover, the light limiting term appearing in the ODE systems is not explicitly treated. It represents a constant factor that easily can be added afterwards in the results presented.

The solutions detected are dependent on the parameters in the ODE systems and the initial values  $y_0$ . For model LLM, analytic results are obtained, that in particular motivates its separate analysis. The equilibrium solutions presented for models LQM and QQM are in part numerically based.

#### 3.1. Model LLM

For model LLM, there are three real-valued and non-negative solutions analytically identifiable (Eqs. (4)–(6)). Ignoring the quadratic term  $\Phi_Z^* \cdot Z^2$ , ODE system (2) includes only the non-linearities caused by the functions  $J$  and  $G$  and the resulting mathematical problem of four differential equations in four variables is solvable by analytic methods.

The first equilibrium is the solution

$$E_{LLM_1}^* = (N_1^*(S), 0, 0, 0), \quad (4)$$

where  $N_1^*$  is a function of the sum of the four initial values  $S := \sum y_0$  where  $y_0$  is assumed to be positive. The other states equal 0. Since the ODE system given by Eq. (2) is mass conserving, which means that no external source or sink of nitrogen in any kind exists,  $N_1^*$  is simply the accumulated mass of the initial concentrations (see Fig. 2, top). Note, especially, that solution  $E_{LLM_1}^*$  is independent of the model parameters.

This solution describes the realistic situation that due to low insolation or due to a low initial nutrient concentration no phytoplankton bloom arises, and consequently neither zooplankton nor detritus reach a significant amount. The lifecycle breaks down

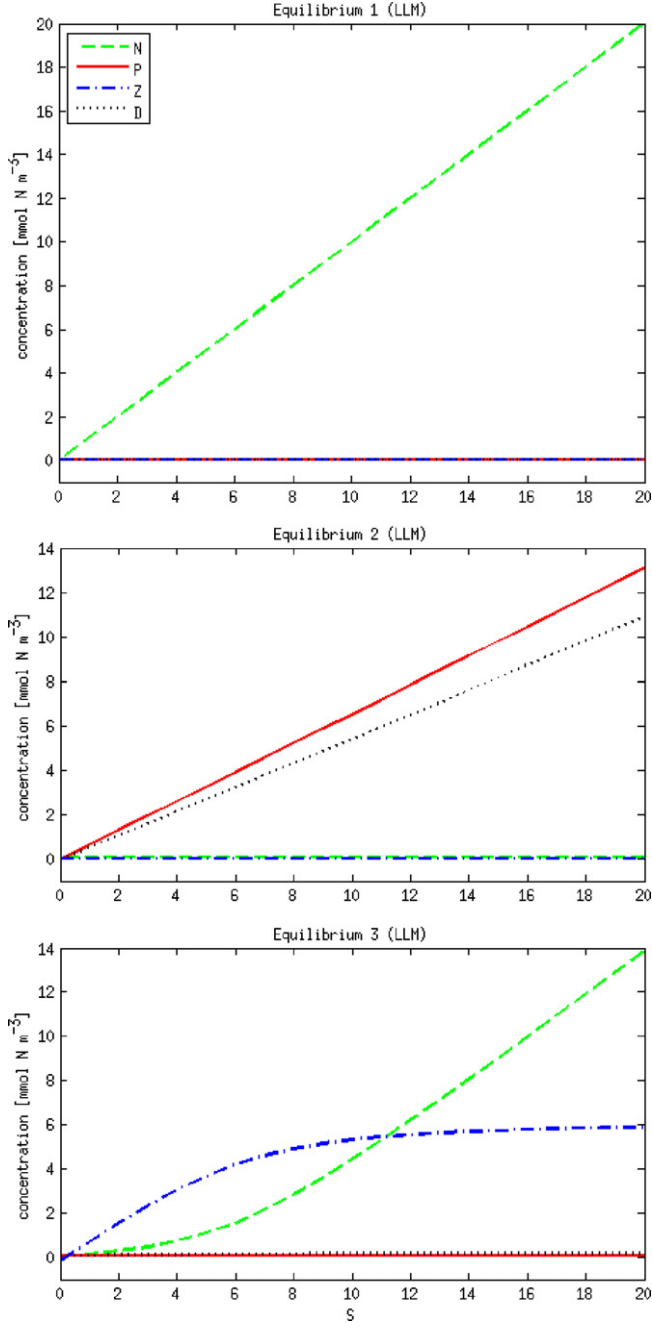


Fig. 2. Equilibrium solutions for model LLM calculated analytically and presented as functions of initial mass  $S$ . Parameters are chosen according to Table 1.

resulting in a constant load of free nutrients in the water that is equivalent to the initial mass of the system.

Further reasonable equilibria of system (2) are solutions representing the coexistence of three, or of all four ecosystem components. They are given by

$$E_{LLM2}^* = \left( \frac{k\Phi_P}{\mu_m - \Phi_P}, P_2^*(S, u), 0, \frac{\Phi_P}{\gamma_m} P_2^*(S, u) \right) \quad (5)$$

and

$$E_{LLM3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)), \quad (6)$$

where  $u \in \mathbb{R}^m$  represents the  $m$  parameters included in the model.

$E_{LLM2}^*$  describes a balanced situation between the three states  $N$ ,  $P$  and  $D$ . In this case,  $D_2^*$  is proportional to  $P_2^*$  by a factor  $\Phi_P/\gamma_m$ .

The state of  $N_2^*$  is no longer dependent on the initial mass, but on the parameter values chosen, in particular on the parameters  $k$ ,  $\Phi_P$  and  $\mu_m$ . Due to the mass conserving property of ODE system (2) mentioned above, the states of phytoplankton and detritus consequently must rely upon the initial mass and an explicit characterization of  $P_2^*(S, u)$ , due to their relation also of  $D_2^*(S, u)$ , is obtainable that is given by

$$P_2^*(S, u) = \frac{S - (k\Phi_P/(\mu_m - \Phi_P))}{(\Phi_P/\gamma_m) + 1}. \quad (7)$$

From Eq. (5) the necessary condition  $\mu_m > \Phi_P$  is derived to guarantee the non-negativity of solution  $E_{LLM2}^*$ . In the opposite situation where the loss of phytoplankton is higher than its growth, phytoplankton would decrease in reality and consequently detritus would disappear. This case is already represented by  $E_{LLM1}^*$ .

$E_{LLM3}^*$  describes the situation where all four variables co-exist. All states, except  $P_3^*$ , are dependent on the initial mass of nitrogen and on the parameter values chosen. Since the explicit formulations of the three parameter-dependent states are quite long they are given in Appendix A and we restrict our discussion to the state of phytoplankton.

In contrast to the other states,  $P_3^*$  is, similar to  $N_2^*$ , only dependent on the parameter values chosen and is defined by

$$P_3^*(u) = \sqrt{\frac{\Phi_Z g}{\epsilon(\beta g - \Phi_Z)}}. \quad (8)$$

Obvious is the fact that due to the positivity of all parameters the condition  $\beta g > \Phi_Z$  must be met in order to obtain real values for  $P_3^*$ . Further, for the fixed parameters  $\Phi_Z$ ,  $g$ ,  $\epsilon$  and  $\beta$  the steady state of  $P$  is a constant function in  $S$ . Hence, highly variable outcomes of type  $E_{LLM3}^*$  can occur for one initial masses  $S$ . Since  $P_3^*$  is fixed by the parameters, there are masses  $S$  resulting in solutions in which the compartments of nutrients and detritus dominate, as well as masses that result in solutions where all states range in a similar domain. Even the case that phytoplankton prevails over the other states can be represented by  $E_{LLM3}^*$  for a certain amount of nitrogen  $S$ .

Illustrations of equilibria  $E_{LLM2}^*$  and  $E_{LLM3}^*$  are given in the center and on the bottom of Fig. 2, again as functions of initial mass. Here, the equilibrium solutions are computed based on the 'optimal' parameter set found by Schartau and Oschlies (2003) and given in Table 1. The dependencies of the different states among each other are clearly visible. In  $E_{LLM2}^*$ , the states of phytoplankton and detritus are dependent on  $S$ , increase linearly and are proportional to each other. The states of  $N$  and  $Z$  are constant with  $S$ . In  $E_{LLM3}^*$ ,  $P_3^*$  is constant while the other three states increase with  $S$ . More precisely, zooplankton and detritus converge to a maximum, non-zero value. The compartment of nutrients increases at first exponentially, and for higher values of  $S$  almost linearly.

Finally it has to be pointed out that the equilibria presented in this study are all independent on the initial distribution of nitrogen. Dependence on  $S$  definitely signifies a sole dependence on the accumulated mass of nitrogen in the system, here represented by the sum  $S$  of initial values.

### 3.2. Model LQM

Due to the quadratic closing term of zooplankton included in model LQM, in contrast to model LLM, for this model analytic solutions of the equilibria are assessable only in part. Assuming  $Z^* = 0$ , analytic results are still obtained and thus, presented and discussed in the following. The explicit solution of the co-existence equilibrium in which all states are non-zero, however cannot be presented any more. Rational functions of high order, arising as a consequence

of the quadratic loss term added, inhibit explicit calculations of the states. For that reason, the dynamics of this equilibrium solution are analyzed numerically. Individual experiments are performed as well as comparative studies that involve all three models. The latter in particular supports the identification of model characteristics.

As for model LLM, three non-negative and real-valued equilibrium solutions are detected. The first two equilibria of model LQM fully equal the ones of model LLM,

$$E_{LQM_1}^* := E_{LLM_1}^* \quad \text{and} \quad E_{LQM_2}^* := E_{LLM_2}^*, \quad (9)$$

because the models only differ in their formulation of zooplankton loss and in these solutions the state of zooplankton equals 0.

The third equilibrium describes the co-existence of all four marine ecosystem components as it does in model LLM. Caused by the quadratic loss term of zooplankton which is added to this model, explicit expressions of the individual states are not computable any more. More precisely, while in model LLM the state of  $P_3^*$  was independent of  $S$ , now all four variables are related to each other which results in mathematically complex terms that only can be treated by introducing further parameters.

A general description of the co-existence solution is given by

$$E_{LQM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(S, u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)). \quad (10)$$

Since explicit expressions of the states cannot be determined, numerical calculations are presented in the following. In particular, results that mirror the effect of initial value variations on the co-existence solution are shown. Comparative experiments of all three models are presented as well to point out individual model characteristics.

Dependent on the initial mass  $S$ , the left plot in Fig. 3 depicts numerical calculations of  $E_3^*$  for models LLM and LQM. As before, parameter set  $u^*$  given in Table 1 is exemplarily used. Both models show a nearly linear increase in nutrient concentration from a certain concentration on ( $S \approx 8 \text{ mmol N m}^{-3}$  in model LLM and  $S \approx 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  in model LQM). Comparing the other states of the two models, however, qualitative differences become obvious. Except  $N$ , all states converge asymptotically to a non-zero value with increasing  $S$ . But while  $P_3^*$  increases with  $S$  in model LQM, it remains constant in model LLM (cp. Section 3.1). Moreover, the states of zooplankton and detritus are almost swapped for this parameter setting for given  $S$ . While zooplankton gains significant mass with rising  $S$  in model LLM, detritus is the dominant sink of enhanced initial mass in model LQM. Another characteristic of model LQM that arises using parameter set  $u^*$  is a rapid change in solution  $E_{LQM_3}^*$  at  $S' \approx 160 \text{ mmol N m}^{-3}$  (see Fig. 4). For initial

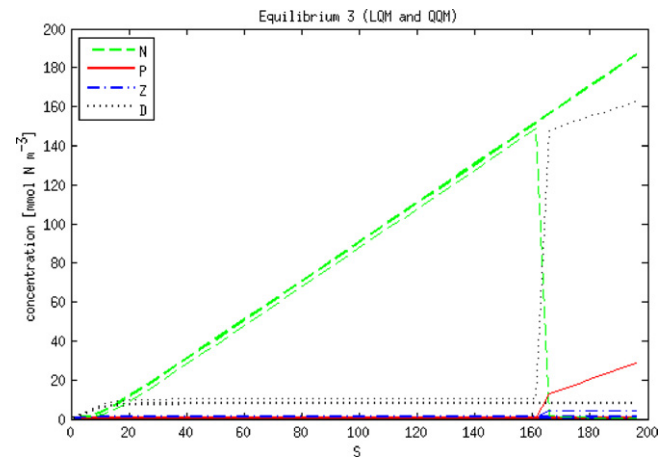


Fig. 4. Numerical calculation of equilibrium  $E_3^*$  for model LQM (thin lines) and model QQM (thick lines). In model LQM a drastic qualitative change occurs at  $S \approx 160 \text{ mmol N m}^{-3}$  in the solution for parametrization  $u^*$ .

masses  $S < S'$ , the compartment of  $N$  contains most of the mass, for  $S > S'$  detritus is the mass dominating compartment. Moreover, with respect to  $S$  the slope of  $P_3^*$  increases significantly after this point. For the parameter setup given, this critical point is within a range of nitrogen concentration that is barely interesting for natural applications. By parameter modifications, however, this point may shift towards a realistic range of nitrogen concentrations and hence it may become relevant for model applications.

### 3.3. Model QQM

Three non-negative and real-valued equilibrium solutions are found for model QQM as well. Since the ODE system given in Eq. (3) is mass conserving just like the system governing the other two models, the first equilibrium of model QQM is equivalent to the first equilibrium of the other models, where  $N_1^*$  is the sum  $S$  of the initial masses and  $P_1^* = Z_1^* = D_1^* = 0$  (see Eq. (4)). The other two equilibrium solutions differ from the ones presented above. The alteration of the source and sink compartments of phytoplankton and zooplankton entails modified formulations of these solutions. For equilibrium  $E_{QQM_2}^*$  parameterized solutions are presented, whereas  $E_{QQM_3}^*$  is introduced in a general form.

The second equilibrium of model QQM resembles the one of the other two models. Due to the additional quadratic loss term of

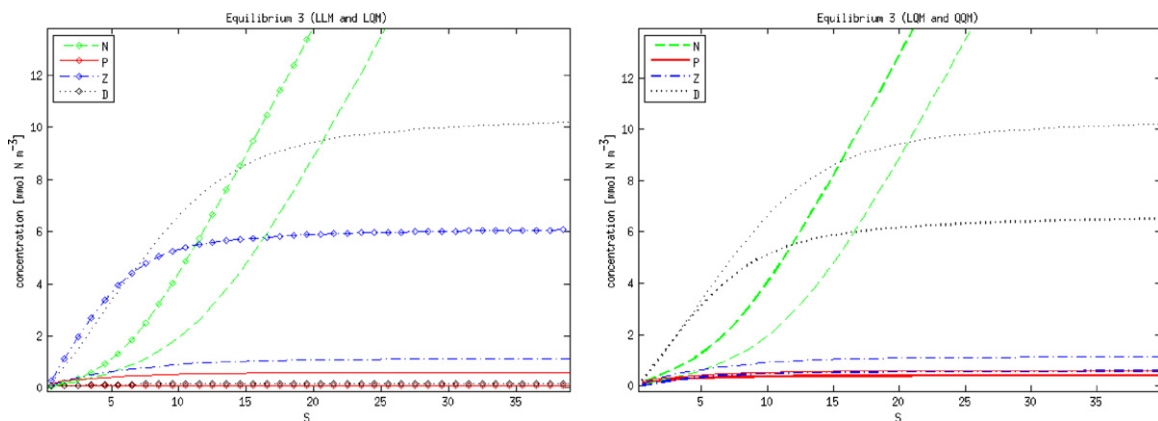


Fig. 3. Numerical calculation of equilibrium  $E_3^*$  given as function of  $S$  for model LLM (diamonds) and model LQM (thin lines) on the left, and for models LQM and QQM (thick lines) on the right. Parameter setting as in Fig. 2.



phytoplankton, its formulation however differs and is now given by

$$E_{QQM_2}^* = \left( N_2^*(S, u), P_2^*(S, u), 0, \frac{\Phi_P^*}{\gamma_m} P_2^*(S, u)^2 \right) \quad (11)$$

with

$$N_2^*(S, u) := \frac{k(\Phi_P + \Phi_P^* P_2^*(S, u))}{\mu_m - (\Phi_P + \Phi_P^* P_2^*(S, u))}.$$

In contrast to the other models, for model QQM  $N_2^*$  is dependent on the parameters  $u$  as well as on the initial values  $S$ . Furthermore, now  $D_2^*$  is proportional to the square of  $P_2^*$ . In model LQM,  $P_2^*$  and  $D_2^*$  are linearly related to each other. These facts cause relations of higher order between the three non-zero states  $N_2^*$ ,  $P_2^*$  and  $D_2^*$ , that inhibit their explicit representation here.

As for model LQM, the third equilibrium, in which all states are nonzero, cannot be determined analytically. It is described by the same general formulation as  $E_{LQM_3}^*$  (see Eq. (10)). All equilibrium states vary with both,  $u$  and  $S$ , and parameter dependent solutions cannot be given any more. Consequently, and similar to model LQM, numerical methods are used to point out characteristics of this solution.

The right plot in Fig. 3 shows numerical solutions of the individual equilibria  $E_3^*$  for models LQM and QQM, again, using parameter set  $u^*$ . In contrast to the other two models shown on the left, those two solutions show a qualitatively similar behaviour. Differences are only merely quantitative. For larger initial masses, that are beyond the range shown in Fig. 3, the curves remain close to each other until model LQM shows its change in  $E_{LQM_3}^*$ . From then on, the solutions differ significantly (see Fig. 4). Particularly, it has to be pointed out that during the experiments described here, neither in the range of  $S$  here illustrative presented, nor in any other range, a similar, significant change in solution  $E_{QQM_3}^*$  has been detected.

#### 4. Stability of equilibria

The determination of the stability properties of the individual equilibria enables the assessment of model dynamics in dependence of specific parameter settings and initial values. Stability analysis of nonlinear systems is based either on linearizations or on so-called Lyapunov functions. Because in this study the former approach is applied, a brief introduction in the methodology of linearization is given below. For further mathematical details, preconditions required and theorems used, see e.g., Amann (1990). Results with respect to the equilibria presented in the previous section are given subsequently.

**Linearization.** Given an autonomous, nonlinear IVP (cp. Section 2) with continuously differentiable function  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ , its linearization at an equilibrium point  $y^*$  is defined by

$$\bar{y}' = J_f(y^*)\bar{y}(t), \quad (12)$$

where  $J_f(y^*)$  is the Jacobian of  $f$  evaluated at  $y^*$ . The resulting linearized system approximates the original, nonlinear system around the equilibrium point. Consequently, statements with respect to the linearization are only locally proven for the original system. From the qualitative theory of linear equations it is known that the dynamics of the system described by Eq. (12) are related to the eigenvalues  $\lambda = \alpha + i\beta$  of  $J_f(y^*)$ . For linear systems, two main qualitative distinctions can be made based on the eigenvalues' real parts  $\alpha$  (see below).

- In case  $\alpha \leq 0$  for all  $\lambda$ , the linear system tends towards the equilibrium solution  $y^*$  and  $y^*$  is termed stable.<sup>1</sup>
- In case  $\alpha > 0$  for at least one  $\lambda$ , the linear system drifts away from the equilibrium solution  $y^*$  and  $y^*$  is termed unstable.

This criterion is denoted by (C) in the following. Provided that the eigenvalues of  $J_f(y^*)$  meet either the first case and in particular  $\alpha < 0$  holds, or the second case, the corresponding stability statement can be directly transferred from the linearization to the original, nonlinear model (cp. Amann, 1990). However, in case  $\alpha \leq 0$  for all  $\lambda$  and  $\alpha = 0$  for at least one  $\lambda$ , further analyses are necessary to evaluate the quality of  $y^*$  in the original system.

In the following, we refer to the linearizations of the ODE systems presented in Section 2 at an equilibrium solution  $y^*$  as  $J_L(y^*)$  for models LLM and LQM and  $J_Q(y^*)$  for model QQM. The existence of these linearizations is ensured through the continuous differentiability of both ODE systems. For  $i = 1, 2, 3$ , the eigenvalues of the respective linearization are summarized in the vector  $\lambda_{<model>i} := (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$ .

##### 4.1. Model LLM

The Jacobian of system (2),  $J_L$ , is evaluated at the three equilibrium solutions  $E_{LLM_i}^*$ ,  $i = 1, 2, 3$  presented in the previous section. The eigenvalues of  $J_L(E_{LLM_1}^*)$  and  $J_L(E_{LLM_2}^*)$  are calculated analytically, whereas the eigenvalues  $\lambda_{LLM_3}$  are computed numerically.

For  $J_L(E_{LLM_1}^*)$ , the eigenvalues are given by

$$\lambda_{LLM_1} = \left( 0, -\Phi_Z, -\gamma_m, -\frac{k\Phi_P - \mu_m S + \Phi_P S}{k + S} \right). \quad (13)$$

It becomes obvious that  $\lambda_1$  is zero and  $\lambda_2$  and  $\lambda_3$  are negative for every parameter setting and all initial values. Only  $\lambda_4$  can be either negative or positive, dependent on the amount of nitrogen in the system and the parameters chosen. Looking at Eq. (13), it can be seen that in particular only parameters that are related to phytoplankton growth, namely  $k$ ,  $\Phi_P$  and  $\mu_m$ , affect the quality of solution  $E_{LLM_1}^*$ . Further, explicit parameter conditions can be derived from Eq. (13) that specify the quality of  $E_{LLM_1}^*$ .

The eigenvalues belonging to the solutions  $E_{LLM_2}^*$  and  $E_{LLM_3}^*$  are presented in a more general way. For  $\lambda_{LLM_2}$  explicit results are obtained, but they are lengthy and not instructive any more (see Appendix A). The eigenvalues  $\lambda_{LLM_3}$  are not analytically calculable any more. To identify nonetheless initial value and parameter conditions that predetermine the quality of the two latter equilibria, numerical experiments were conducted for different parameter settings  $u$ . First of all, it has to be remarked that in both,  $\lambda_{LLM_2}$  and  $\lambda_{LLM_3}$  one eigenvalue generally equals 0, just as in  $\lambda_{LLM_1}$ . Thus, the eigenvalue sets  $\lambda_{LLM_2}$  and  $\lambda_{LLM_3}$  are represented by

$$\lambda_{LLM_i} = (0, \lambda_2(S, u), \lambda_3(S, u), \lambda_4(S, u)) \quad (14)$$

for  $i = 2, 3$ . To determine the domains in which the equilibria are stable or unstable, numerical calculations of the eigenvalues of the linearizations are compared for various initial masses  $S$ . Table 2 shows the eigenvalues' real parts for linearization  $J_L(E_{LLM_1}^*)$ ,  $J_L(E_{LLM_2}^*)$  and  $J_L(E_{LLM_3}^*)$ . Parameters are chosen according to Table 1. Following criterion (C), equilibrium  $E_{LLM_1}^*$  is unstable for all initial masses except  $S = 0$ . The model does not simulate the sole existence of free nitrogen. For  $E_{LLM_2}^*$  and  $E_{LLM_3}^*$ , there are initial masses resulting in the negativity of all eigenvalues except  $\lambda_1$ , but also initial masses ensuring the instability of the respective solution.

<sup>1</sup> Note, that there is a mathematical distinction between stability and asymptotical stability. Here, we claim only the former.

**Table 2**

Real parts of the eigenvalues for model LLM calculated analytically ( $\lambda_{LLM_1}$  and  $\lambda_{LLM_2}$ ) and numerically ( $\lambda_{LLM_3}$ ) for varied initial masses  $S$  and fixed parameters according to Table 1.

$S$	$\lambda_{LLM_1}$			$\lambda_{LLM_2}$			$\lambda_{LLM_3}$					
0	0	-0.0100	-0.0480	-0.0400	0	-0.0095	-0.0585	0.0313	0	-0.0757	-0.0757	0.0285
0.1	0	-0.0100	-0.0480	0.0666	0	-0.0081	-0.0438	-0.0438	0	-0.0721	-0.0721	0.0123
0.2	0	-0.0100	-0.0480	0.1496	0	0.0020	-0.0740	-0.0740	0	-0.0694	-0.0694	-0.0018
0.3	0	-0.0100	-0.0480	0.2159	0	0.0204	-0.1042	-0.1042	0	-0.0684	-0.0684	-0.0127
1	0	-0.0100	-0.0480	0.4618	0	0.3103	-0.5352	-0.0959	0	-0.0881	-0.0881	-0.0350
5	0	-0.0100	-0.0480	0.7083	0	1.2745	-2.9573	-0.0892	0	-0.4336	-0.0669	-0.0384
10	0	-0.0100	-0.0480	0.7573	0	1.3999	-5.9773	-0.0886	0	-0.6644	-0.0241	-0.0487
20	0	-0.0100	-0.0480	0.7842	0	1.4349	-12.0163	-0.0883	0	-0.7405	-0.0211	-0.0481
40	0	-0.0100	-0.0480	0.7984	0	1.4439	-24.0937	-0.0881	0	-0.7641	-0.0208	-0.0480

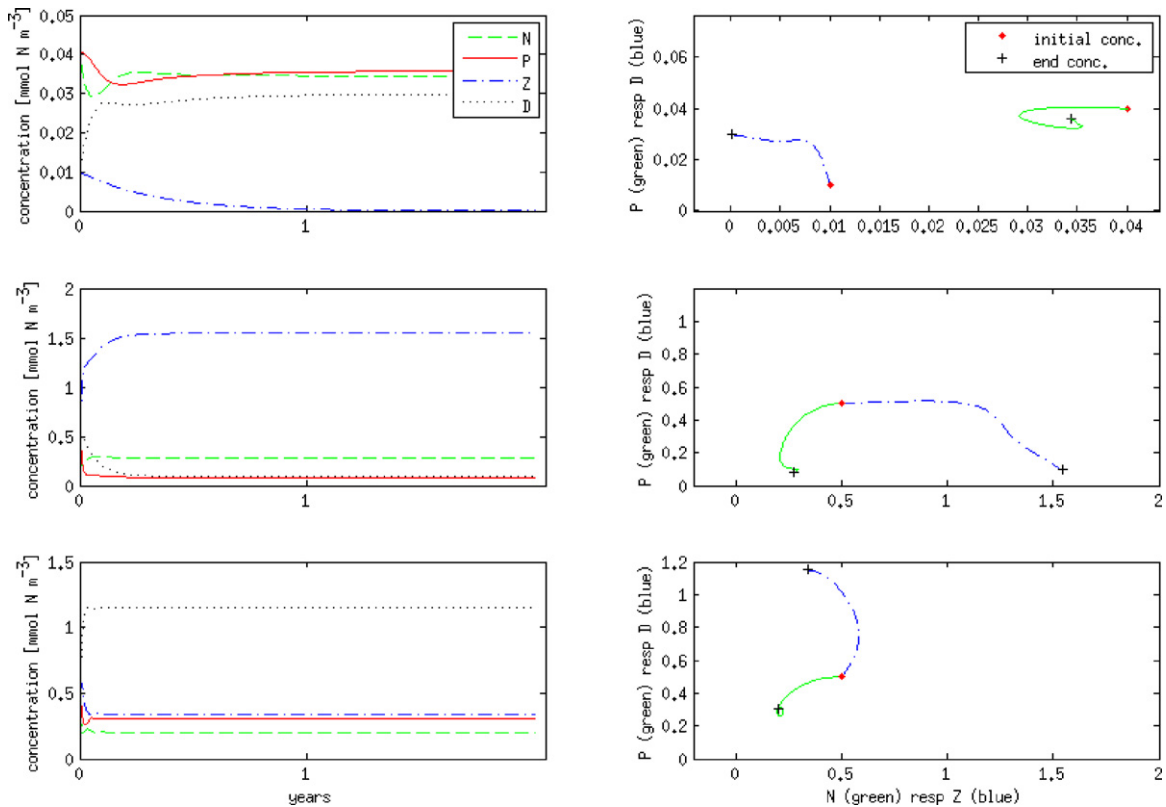
Using parameter set  $u^*$  for example,  $E_{LLM_3}^*$  is unstable for small initial masses, while  $E_{LLM_2}^*$  is unstable for larger masses of nitrogen  $S$ .

Looking at the eigenvalues of all three linearizations, it is conspicuous that for given  $S$  two linearizations have a positive eigenvalue. Thus, following criterion (C), two of the three equilibria considered are unstable relating to their linearization as well as relating to the original, nonlinear system. The largest eigenvalue of the remaining linearization equals 0. In this case, criterion (C) only makes a statement referring to the linearization, but not referring to the original, nonlinear system. The quality of the solution in the latter case is thus further analyzed numerically.

Fig. 5 shows the output of two simulation runs of model LLM for initial mass  $S_1 = 0.1 \text{ mmol N m}^{-3}$  (top) and for initial mass  $S_2 = 2.0 \text{ mmol N m}^{-3}$  (center).  $S_1$  represents the stable domain of  $E_{LLM_2}^*$  in the linearized system,  $S_2$  is representative for the stable

range of  $E_{LLM_3}^*$ . On the left, the simulation is shown over time, and phase curves  $N$  vs.  $P$  and  $Z$  vs.  $D$  are given on the right. For  $S_1$  the model asymptotically tends towards  $E_{LLM_2}^*$ . It is well recognizable that the state of zooplankton converges to zero whereas the other states converge to a non-zero value. Equally to its behaviour in the linearized system, solution  $E_{LLM_2}^*$  shows stable behaviour in the original system for small initial masses. Initializing the model with a higher mass of nitrogen ( $S_2$ ), all variables converge to non-zero values. Thus, a similar situation appears as before, but with respect to  $E_{LLM_3}^*$ .

Other numerical experiments performed (not shown here) indicate a smooth transition from one to another equilibrium with increasing  $S$ , which is investigated for the linearized system as well as for the original, nonlinear system. Moreover, it seems likely that from a certain threshold  $S_T$  on, for all  $S \geq S_T$  the model dynamics are determined by the co-existence equilibrium  $E_{LLM_3}^*$ .



**Fig. 5.** Simulation of model LLM (top, middle) and LQM (bottom) for initial mass  $S_1 = 0.1 \text{ mmol N m}^{-3}$  (top) and initial mass  $S_2 = 2.0 \text{ mmol N m}^{-3}$  (middle, bottom). On the left, the simulations over time, on the right, phase portraits of  $N$  vs.  $P$  (green, solid line) and  $Z$  vs.  $D$  (blue, dash-dotted line). Initial concentrations are marked by a red dot, end concentrations are marked by a black cross. (For interpretation of colour in the artwork, the reader is referred to the web version of the article.)

### 4.2. Model LQM

For model LQM we gained results similar to the results for model LLM. Since  $E_{LLM_i}^* = E_{LQM_i}^*$  for  $i = 1, 2$  and both solutions imply  $Z = 0$ , the respective eigenvalues agree. The eigenvalues of  $E_{LQM_3}^*$  differ from the ones associated to model LLM and have to be calculated numerically.

$$\lambda_{LQM_1} = \lambda_{LLM_1} \quad \text{and} \quad \lambda_{LQM_2} = \lambda_{LLM_2}. \tag{15}$$

The eigenvalues of  $E_{LQM_3}^*$  can only be calculated numerically.

For parameter set  $u^*$ , results are exemplary given in Fig. 5 Consistent to our analytic results, model LQM returns the same outcome as model LLM when initialized with mass  $S_1$ . Thus, its graph coincides with the graph shown at the top left of Fig. 5. The initialization with  $S_2$  results in an outcome distinct to the outcome presented for model LLM. But as for model LLM, this initialization clearly engenders a convergence towards the co-existence solution  $E_3^*$  (see Fig. 5, bottom).

### 4.3. Model QQM

Equilibrium  $E_{QQM_1}^*$  equals the first equilibrium of the other two models and the respective linearizations agree as well. Consequently, the corresponding eigenvalues are the same.

The other equilibria detected for model QQM, however, differ from the ones discussed above. In contrast to the second equilibrium of the first models, all states of  $E_{QQM_2}^*$  already depend on both, the parameters  $u$  and initial mass  $S$ . For models LLM and LQM this is true only for the co-existence solution. Furthermore, in  $E_{QQM_2}^*$  an internal, quadratic dependence of the states appears. Both facts together lead to a complicated explicit formulation of the states in  $E_{QQM_2}^*$  making an analytic calculation of the respective eigenvalues for the second equilibrium unfeasible.

Thus, to assess the stability domains of the equilibrium solutions  $E_{QQM_i}^*$ ,  $i = 2, 3$  without any knowledge of the analytic formulation of the eigenvalues, numerical experiments with respect to variations in  $S$  are performed. Comparative experiments with model LLM and model LQM are conducted as well to check the models on dynamic similarities. Subject to initial mass  $S$ , Fig. 6 illustrates the transition from one equilibrium to another, on the left shown for models LLM and LQM, on the right for model QQM. Vertical lines constitute critical values  $S^*$  where the quality of an equilibrium changes. The smooth transition between the stable states pictured is attributed to numerics.

For models LLM and LQM the critical values could be identified analytically by calculating the zeros of the explicit expressions of  $\lambda_{LLM_i}$ ,  $i = 1, 2$ . Using parameter set  $u^*$  the stability of  $E_1^*$  and  $E_2^*$  changes at  $S_1^* = 0.0344 \text{ mmol N m}^{-3}$ . For  $S < S_1^*$  the former is stable while for larger  $S$ ,  $E_2^*$  is stable. A second critical value that is related to a stability transition from  $E_2^*$  to  $E_3^*$  appears at

$S_2^* = 0.1857 \text{ mmol N m}^{-3}$ . Further stability changes are not detected for this parameter setting, thus  $E_3^*$  is stable for all  $S > S_2$ . However, other parameter combinations (not explicitly presented here) show a further quality change in  $E_3^*$ . A third critical value  $S_3^*$  is found where the quality of  $E_3^*$  turns back from stable to unstable. This event however does not result in the stability of another equilibrium, as it does at the critical values previously described, but to oscillations around  $E_3^*$  that are stable. For details on this phenomenon, called limit sets, see e.g., Amann (1990).

The eigenvalues  $\lambda_{QQM_1}$  coincide with the eigenvalues of  $J_L$  evaluated at the first equilibrium of the other two models. Thus, for model QQM the first transition occurs at  $S_1^* = 0.0344 \text{ mmol N m}^{-3}$  as well. The second critical value could not be detected precisely for model QQM since neither  $\lambda_{QQM_2}$  nor  $\lambda_{QQM_3}$  could be calculated analytically. Numerical experiments indicate a transition from the second to the third equilibrium at  $S \in [0.25, 0.3] \text{ mmol N m}^{-3}$ , in Fig. 6 marked by a dashed, vertical line.

## 5. Discussion

The basic dynamics of three models of the marine ecosystem are analyzed mathematically using the qualitative theory of dynamical systems. Equilibria and their stability dependent on initial values and parameters are determined. From this, parameter conditions as well as ranges of initial values are identified that lead to a specific quality of the model output. In addition, comparative studies are conducted that support the identification of model characteristics caused by their distinct formulations of phytoplankton loss and zooplankton loss.

For each model, three non-negative and real equilibrium solutions are determined. The first equilibrium solution,  $E_1^*$ , is the same for all three models. It represents a situation where nutrients are available in the system, but there is no organism using them. Its range of stability depends on the initial mass  $S$  as well as on the parameters  $k$ ,  $\Phi_p$  and  $\mu_m$ . In case the mortality rate of phytoplankton is larger than its growth rate,  $\Phi_p > \mu_m$ , this state is stable for all masses of nitrogen  $S$ . In case  $\Phi_p < \mu_m$  a critical value  $S^*$  exists, that for all initial masses  $S > S^*$  this solution is unstable and another equilibrium solution of the respective model is targeted. For the parameter set exemplarily used in this study, solution  $E_2^*$  of the models become stable from this point. It has to be remarked, however, that for other parameter setups, e.g., in case equilibrium  $E_2^*$  does not have a positive and real-valued solution due to parameter relations (compare Section 3), the models show a different behaviour.

Equilibrium  $E_2^*$  depicts a balanced situation between nutrients, phytoplankton and detritus for all three models. Zooplankton does not survive in this solution. The explicit expression of  $E_2^*$  depends on the underlying ODE system. For models LLM and LQM the expressions equal since they are based on the same ODE system and  $Z = 0$  holds in this equilibrium. In this equilibrium, the states of  $P_2^*$  and  $D_2^*$  are functions of initial mass  $S$  and of the parameters

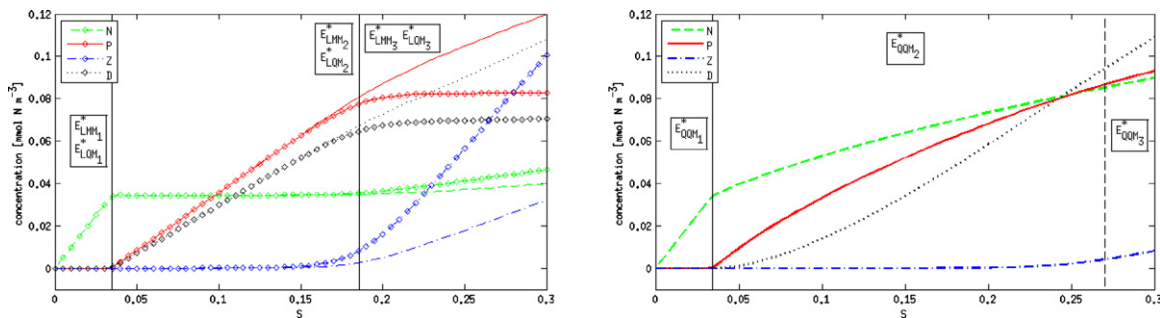


Fig. 6. Numerically computed, stable equilibria  $E_{LLM}^*$  and  $E_{LQM}^*$  on the left, and  $E_{QQM}^*$  on the right, as functions of initial mass  $S$ . Critical values  $S^*$  are marked by vertical lines (solid = analytically calculated, dashed = numerically estimated).

$k$ ,  $\Phi_p$ ,  $\mu_m$  and  $\gamma_m$ . Both states increase linearly with  $N$  and thus, with  $S$ . For model QQM, the states  $P_2^*$  and  $D_2^*$  are dependent on the variables mentioned as well, but are additionally dependent on the quadratic mortality parameter  $\Phi_p^*$ . Furthermore, in contrast to models LLM and LQM, there are quadratic interrelations between the single states that result in elusive state expressions and pointing out definite parameter relations is not practical anymore.

For models LLM and LQM the stable domains of the second equilibria can be computed analytically. Explicit parameter and initial value dependencies however are not presented since the internal coherencies are too complex to allow instructive statements. Instead, numerical experiments are conducted and exemplary results for parameter set  $u^*$  are presented. As mentioned above, the results show that  $E_2^*$  becomes stable the moment  $E_1^*$  becomes unstable. For model QQM the same behaviour is found. For very small values of  $S$ ,  $E_{QQM_2}^*$  is unstable and  $E_{QQM_1}^*$  is stable. At a critical mass of nitrogen  $S_1^*$  specified by the parameters  $k$ ,  $\Phi_p$  and  $\mu_m$ , the quality of  $E_{QQM_2}^*$  changes and the solution becomes stable. At a point  $S_2^*$  the solution becomes unstable again and from here, the third equilibrium determines the model outcome.

The expression of the third equilibrium is specific for each model. Analytic solutions are obtained only for model LLM, the other co-existence equilibria are investigated numerically. Most conspicuous is the fact that for model LLM the state  $P^*$  is constant with varying initial masses  $S$  in  $E_3^*$ . This is in contrast to the more complex models, models LQM and QQM, wherein all states, in particular  $P^*$ , are related to  $S$ . Furthermore, for model LLM the condition  $\beta g > \Phi_Z$  is revealed that is required to obtain real-valued solutions of type  $E_3^*$ .

Due to the constant state  $P^*$  for various  $S$  in model LLM the outcome differs significantly from the outcome of the models LQM and QQM in case the co-existence of all four variables is simulated. All three models show a nearly linear increase of nutrients and an asymptotical increase of the states  $Z$  and  $D$  as soon as solution  $E_3^*$  is responsible for the model outcome. Simultaneously however,  $P$  is constant in model LLM, while it increases asymptotically with increasing mass in models LQM and QQM. Moreover, in model LLM the compartment of zooplankton dominates over the states of phytoplankton and detritus. In the other two models, models LQM and QQM, detritus prevails.

The range of stability of solution  $E_3^*$ , related to initial mass  $S$ , is similar for all models. While the solution is unstable for small values of  $S$  and instead  $E_1^*$  or  $E_2^*$  are stable, at a certain value  $S^*$  its quality changes from unstable to stable. From this point, solution  $E_3^*$  either keeps stable or it becomes the center of a stable limit set, dependent on the parameter set chosen. For the exemplary parameter set  $u^*$  the former case occurs. One restriction has to be pointed out regarding model LLM. As mentioned above, the condition  $\beta g > \Phi_Z$  must be met to ensure the reasonability of solution  $E_{LLM_3}^*$ . Appropriately, the stability of  $E_{LLM_3}^*$  is related to this inequality as well. Once the condition is satisfied, the quality of  $E_{LLM_3}^*$  is as described above. Otherwise,  $E_{LLM_3}^*$  is unstable for all  $S$  and instead,  $E_{LLM_2}^*$  keeps stable also for higher values of  $S$ . For the other two models we did not find a similar feature.

## 6. Conclusions

Knowing the basic dynamics of a model, depicted by its equilibrium solutions, it is possible to determine the model's behaviour under specific conditions. According to the results presented here, qualitatively high differences in the equilibrium solutions can occur due to simple modifications of the governing equations (cp. model LLM and model LQM). However, it is also possible that this kind of modifications do not affect the quality of the solutions significantly (cp. models LQM and QQM). We thus conclude that a general

transfer of results regarding the model behaviour from one model formulation to another is not possible. The analysis of a model's framework, however, helps to understand the potential differences of the model results and enables the deduction of specific model characteristics. In particular, our findings help to restrict the parameter space in the course of data assimilation and to reveal limits of the model to reproduce certain data sets. Moreover, conclusions on the impact of external forcings, such as nutrient supply due to the modelling of a seasonal varying mixed layer depth, are enabled.

## Appendix A.

A1. The equilibrium states of nutrients, zooplankton and detritus in solution  $E_{LLM_3}^*$  are explicitly given by

$$\begin{aligned} N_3^*(S, u) &= -[\theta_1 - ((\theta_1 + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S)^2 \\ &\quad + 4\gamma_m k \Phi_Z (\gamma_m \Phi_Z S - \gamma_m \Phi_Z \theta_2 + \beta \gamma_m \Phi_p \theta_2 - \beta \Phi_p \Phi_Z P_3^*))^{1/2} \\ &\quad + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S] \cdot [2\gamma_m \Phi_Z]^{-1}, \\ Z_3^*(S, u) &= \frac{\beta(\Phi_p + [\mu_m \theta_2] \cdot [2\gamma_m \Phi_Z (k - (\theta_2 / 2\gamma_m \Phi_Z))]^{-1}) P_3^*}{\Phi_Z}, \\ D_3^*(S, u) &= \frac{(\beta \Phi_p + [\mu_m (\beta - 1) \theta_2] \cdot [2\gamma_m \Phi_Z (k - (\theta_2 / 2\gamma_m \Phi_Z))]^{-1}) P_3^*}{\gamma_m}, \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \theta_1 &= P_3^* (\gamma_m \Phi_Z + \Phi_Z \mu_m - \beta \gamma_m \Phi_p + \beta \gamma_m \mu_m + \beta \Phi_p \Phi_Z - \beta \Phi_Z \mu_m), \\ \theta_2 &= \theta_3 + \gamma_m \Phi_Z (k - \gamma_0) - ((\theta_3 + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S)^2 \\ &\quad + 4\gamma_m k \Phi_Z (\gamma_m \Phi_Z S - \gamma_m \Phi_Z P_3^* + \beta \gamma_m \Phi_p P_3^* - \beta \Phi_p \Phi_Z P_3^*))^{1/2}, \\ \theta_3 &= P_3^* \cdot (\gamma_m \Phi_Z + \Phi_Z \mu_m - \beta \gamma_m \Phi_p + \beta \gamma_m \mu_m + \beta \Phi_p \Phi_Z - \beta \Phi_Z \mu_m), \end{aligned}$$

and  $P_3^*$  as presented in Section 3.1.

A2. The non-zero eigenvalues of  $\lambda_{LLM_2}$  are quite elusive and we only write down the simplest one,  $\lambda_2$ , in detail. The explicit depiction of the other two eigenvalues is not reasonable.

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= -[g \Phi_p^4 \Phi_Z + 2g \gamma_m \Phi_p^3 \Phi_Z - 2g \Phi_p^3 \Phi_Z \mu_m \\ &\quad + g \gamma_m^2 \Phi_p^2 \Phi_Z + g \gamma_m^2 \Phi_Z \mu_m^2 + g \Phi_p^2 \Phi_Z \mu_m^2 \\ &\quad + \epsilon \gamma_m^2 k^2 \Phi_p^2 \Phi_Z + \epsilon \gamma_m^2 \Phi_p^2 \Phi_Z S^2 + \epsilon \gamma_m^2 \Phi_Z \mu_m^2 S^2 \\ &\quad + 2g \gamma_m \Phi_p \Phi_Z \mu_m^2 - 4g \gamma_m \Phi_p^2 \Phi_Z \mu_m - 2g \gamma_m^2 \Phi_p \Phi_Z \mu_m \\ &\quad - \beta \epsilon \gamma_m^2 \mu_m^2 S^2 + 2\epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p^2 \Phi_Z S - 2\epsilon \gamma_m^2 \Phi_p \Phi_Z \mu_m S^2 \\ &\quad - \beta \epsilon \gamma_m^2 k^2 \Phi_p^2 - \beta \epsilon \gamma_m^2 \Phi_p^2 S^2 - 2\beta \epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p^2 S \\ &\quad + 2\beta \epsilon \gamma_m^2 \Phi_p \mu_m S^2 - 2\epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p \Phi_Z \mu_m S \\ &\quad + 2\beta \epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p \mu_m S] / [\epsilon \gamma_m^2 k^2 \Phi_p^2 \\ &\quad + 2\epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p^2 S - 2\epsilon \gamma_m^2 k \Phi_p \mu_m S + \epsilon \gamma_m^2 \Phi_p^2 S^2 + g \gamma_m^2 \Phi_p^2 \\ &\quad - 2\epsilon \gamma_m^2 \Phi_p \mu_m S^2 - 2g \gamma_m^2 \Phi_p \mu_m + \epsilon \gamma_m^2 \mu_m^2 S^2 + g \gamma_m^2 \mu_m^2 \\ &\quad + 2g \gamma_m \Phi_p^3 - 4g \gamma_m \Phi_p^2 \mu_m + 2g \gamma_m \Phi_p \mu_m^2 + g \Phi_p^4 \\ &\quad - 2g \Phi_p^3 \mu_m + g \Phi_p^2 \mu_m^2]. \end{aligned}$$

## References

- Amann, H., 1990]. Ordinary Differential Equations: An Introduction to Nonlinear Analysis. Walter de Gruyter.
- Denman, K.L., Peña, M.A., 1999]. A coupled 1-D biological/physical model of the northeast subarctic Pacific Ocean with iron limitation. In: Deep Sea Research II, vol. 46, pp. 2877–2908.

- Edwards, A.M., 2001]. Adding detritus to a nutrient–phytoplankton–zooplankton model: a dynamical approach. *Journal of Plankton Research* 23, 389–413.
- Fan, W., Lvasham, X., 2009]. Data assimilation in a simple marine ecosystem model based on spatial biological parameterizations. *Ecological Modelling* 220, 1997–2008.
- Fasham, M.J.R., 1995]. Variations in the seasonal cycle of biological production in subarctic oceans: a model sensitivity analysis. In: *Deep Sea Research I*, vol. 42, pp. 1111–1149.
- Fasham, M.J.R., Flynn, K.J., Pondaven, P., Anderson, T.R., Boyd, P.W., 2006]. Development of a robust marine ecosystem model to predict the role of iron in biogeochemical cycles: a comparison of results for iron-replete and iron-limited areas, and the SOIREE iron-enrichment experiment. In: *Deep Sea Research I*, vol. 53, pp. 333–366.
- Fennel, K., Losch, M., Schröter, J., Wenzel, M., 2001]. Testing a marine ecosystem model: sensitivity analysis and parameter optimization. *Journal of Marine Research* 28, 45–63.
- Gibson, G.A., Musgrave, D.L., Hinckley, S., 2005]. Non-linear dynamics of a pelagic ecosystem model with multiple predator and prey types. *Journal of Plankton Research* 27, 427–447.
- Gregg, W.W., Ginoux, P., Schopf, P.S., Casey, N.W., 2003]. Phytoplankton and iron: validation of a global three-dimensional ocean biogeochemical model. In: *Deep Sea Research II*, vol. 50, pp. 3143–3169.
- Hinckley, S., Coyle, K.O., Gibson, G., Hermann, A.J., Dobbins, E.L., 2009]. A biophysical NPZ model with iron for the Gulf of Alaska: reproducing the differences between an oceanic HNLC ecosystem and a classical northern temperate shelf ecosystem. In: *Deep Sea Research II*, vol. 56, pp. 2520–2536.
- Kawamyko, M., 2002]. Numerical model approaches to address recent problems on pelagic ecosystems. *Journal of Oceanography* 58, 365–378.
- Kriest, I., Khaliwala, S., Oschlies, A., 2010]. Towards an assessment of simple global marine biogeochemical models of different complexity. *Progress in Oceanography* 86, 337–360.
- López-Fidalgo, J., Wong, W.K., 2002]. Design issues for the Michaelis–Menten model. *Journal of Theoretical Biology* 215, 1–11.
- Losa, S.N., Vézina, A., Wright, D., Lu, Y., Thompson, K., Dowd, M., 2006]. 3D ecosystem modelling in the North Atlantic: relative impacts of physical and biological parameterizations. *Journal of Marine System* 61, 230–245.
- McCreary, J.P., Kohler, K.E., Hood, R.R., Smith, S., Kindle, J., Fischer, A.S., Weller, R.A., 2001]. Influences of diurnal and intraseasonal forcing on mixed-layer and biological variability in the central Arabian Sea. *Journal of Geophysical Research* 106, 7139–7155.
- Moore, J.K., Doney, S.C., Glover, D.M., Fung, I.Y., 2002]. Iron cycling and nutrient-limitation patterns in surface waters of the World Ocean. In: *Deep Sea Research II*, vol. 49, pp. 463–507.
- Murray, A.G., Parslow, J.S., 1999]. The analysis of alternative formulations in a simple model of a coastal ecosystem. *Ecological Modelling* 119, 149–166.
- Oschlies, A., Garçon, V., 1999]. An eddy-permitting coupled physical–biological model of the North Atlantic. 1. Sensitivity to advection numerics and mixed layer physics. *Global Biogeochemical Cycles* 13, 135–160.
- Pahlow, M., Vézina, A.F., Casaul, B., Maass, H., Malloch, L., Wright, D., Lu, Y., 2008]. Adaptive model of plankton dynamics for the North Atlantic. *Progress in Oceanography* 76, 151–191.
- Rückelt, J., Sauerland, V., Slawig, T., Srivastav, A., Ward, B., Patvardhan, C., 2010]. Parameter optimization and uncertainty analysis in a model of oceanic CO<sub>2</sub> uptake using a hybrid algorithm and algorithmic differentiation. *Nonlinear Analysis: Real World Applications* 11, 3993–4009.
- Schartau, M., Oschlies, A., 2003]. Simultaneous data-based optimization of a 1D-ecosystem model at three locations in the North Atlantic: Part I. Method and parameter estimates. *Journal of Marine Research* 61, 765–793.
- Spitz, Y.H., Newberger, P.A., Allen, J.S., 2003]. Ecosystem response to upwelling off the Oregon coast: behavior of three nitrogen-based models. *Journal of Geophysical Research* 108, 3062.



## A.3

Impact of parameter choice on the dynamics of marine ecosystem models

# Impact of parameter setting on the internal dynamics of NPZD type ecosystem models

A. Heinle, T. Slawig

Cluster "The Future Ocean", Institute of Computer Science, Christian-Albrechts University, 24098 Kiel, Germany

---

## Abstract

Marine ecosystem models of NPZD type are analyzed to identify model specific dynamics in dependence on the parameter setting used. It is shown that detecting the equilibria of a model and computing the eigenvalues of its linearizations it is possible to completely determine its dynamics. Three related model formulations are analyzed this way. Based on analytical computations for the simplest formulation, a theoretical classification of the occurrence of specific dynamics is presented. Its significance for all three model formulations is examined using numerical methods. Further, dynamical characteristics arising from the enhancement of complexity in the model formulation are examined. Similarities and differences of the three models are pointed out. The most significant discrepancy is that the simplest model formulation shows limit cycles while this feature does not appear in the other two models. The results presented in this study show that knowing the basic dynamics of a model its valid application can be ensured.

*Keywords:* Marine ecosystem models, Parameters, Quality of solutions, Limit cycles

---

## 1. Introduction

The concentration of carbon dioxide ( $CO_2$ ) in the Earth's atmosphere significantly increased in recent years. There is good evidence that this increase is caused by human actions and that it affects the Earth's climate in an unnatural way (Forster et al., 2007; Solomon et al., 2007). Drastic changes of environmental conditions as well as an increase of extreme weather events worldwide have been observed over the last decades. To analyze these changes and to make predictions of future developments under various environmental conditions, numerical models are used. As an essential part of the Earth's carbon cycle, the marine ecosystem must be considered in such models. However, the currently only limited biological knowledge of the internal processes and relevant factors complicates the investigation for a reasonable mathematical representation of this system.

Several approaches exist nowadays trying to simulate the marine ecosystem. The complexity of these models as well as their explicit mathematical formulation vary strongly. There are models considering only two or three basic components of the marine ecosystem, but there are also models including a number of state variables (see e.g. Oschlies and Garçon, 1999; Moore et al., 2002; Gregg et al., 2003; Fasham et al., 2006). While the former are easy to solve, the latter are probably more realistic. However, the increase in realism goes along with an increase in the model's complexity. This concerns the required computer resources quickly reaching large scales, but also the number of parameters included. Regarding the marine ecosystem, many of these numerous parameters are unknown and have to be estimated, which results in model uncertainties. Thus, the

more parameters are included in a model, the more uncertainties must be tolerated which finally leads to the question about the suitability of a model formulation and its complexity to be used for the creation of future scenarios.

To determine whether a model is suitable for a given task or not, data assimilation techniques are frequently applied (Fennel et al., 2001; Schartau and Oschlies, 2003; Rückelt et al., 2010; Kidston et al., 2011). The model parameters are tuned or optimized to the effect that the model outcome fits observational data. One drawback of this method however is obvious. The model to data misfit may be reduced by such methods, but nothing is gained regarding the model's general behaviour. The question, whether the model depicts the actual dynamics of the system considered, is not addressed this way. This however is the most important feature a model must have. In case a model does not simulate the dynamics of the system considered, the validity of future scenarios based on this model are questionable. Thus, it is of supreme importance to know the basic and inherent dynamics of a model to guarantee its legitimate application.

In this study we present a theoretical approach to reveal these basic dynamics. Model dynamics are determined by its mathematical framework. In marine ecosystem modelling, such a framework is usually given by a system of coupled ordinary or partial differential equations which describe the temporal development of the modelled components (Fennel and Neumann, 2004). As the mathematical theory of differential equations, especially the theory of ordinary differential equations (ODEs), is well-established, this theory can be used for a theoretical investigation of the dynamics of marine ecosystem models.

In the following, NPZD type models are analyzed. They belong to the marine ecosystem models of medium complexity, simulating the concentrations of four major components of ma-

---

*Email address:* ahe@informatik.uni-kiel.de (A. Heinle)



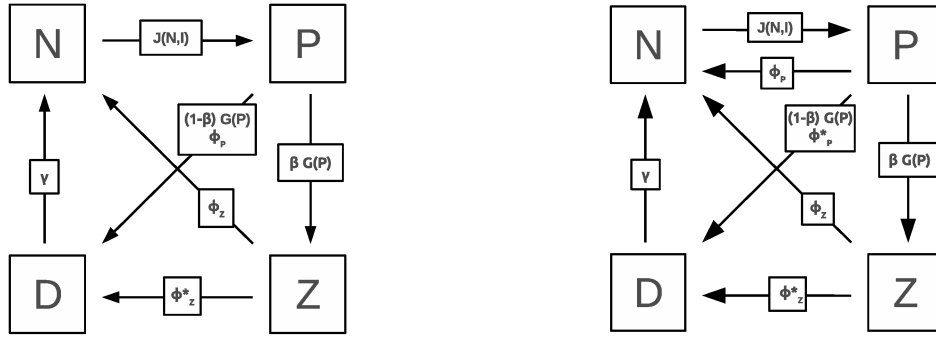


Figure 1: Schemes of the coupling between the model variables N, P, Z and D for model LLM, model LQM (left) and model QQM (right). Arrows indicate a nitrogen flux from one to another component. In model LLM the flux from Z to D is neglected.

rine ecosystems, namely nutrients, phytoplankton, zooplankton and detritus. The consideration of these four variables has the benefit that on the one hand, a certain amount of realism is ensured, on the other hand, the number of parameters included, thus, the degrees of freedom in the model, is restricted to some extent. The actual complexity of the model, of course, depends on its explicit mathematical formulation.

To study the effect of some small variations, three hierarchically structured model formulations are analyzed. The difference between the single formulations are in their individual representation of phytoplankton and zooplankton loss. The simplest model, named LLM, simulates linear loss of phytoplankton and zooplankton. The other two models, model LQM and QQM, both take an additional quadratic loss of zooplankton into account. On top of this, model QQM includes a quadratic loss of phytoplankton. Except for these variations the models are based on the mathematical framework published by Oschlies and Garçon (1999). In their study, a one-dimensional model of the North Atlantic, given by a system of partial differential equations, is introduced. Since the aim of this study is to detect how the internal dynamics of the marine ecosystem are simulated by the model formulations, our attention is restricted to the model part describing these dynamics. Thus, systems of ODEs are considered in this work. In addition, compared to the governing equations presented by Oschlies and Garçon (1999), the equations analyzed in this study have some minor simplifications incorporated to enable the proposed theoretical investigation.

The model formulations considered here are also discussed in a previous study (Heinle and Slawig, 2013). There, the equilibria of the model formulations are introduced and first results are presented regarding the effect of diverse amounts of nitrogen in the system. In this study, the effect of parameter variations is examined and constellations are exposed whose knowledge allows a more controlled usage of the models.

In the following section, the three model formulations are introduced. Section 3 then shows the results that can be achieved by the proposed theoretical analysis. This comprises equilibria of the ODE systems as well as some stability statements. Especially for model LLM, crucial parameter constellations are

pointed out and dependent on those, a classification of the solutions stability is presented. In section 4 these analytic results are expanded by numerical calculations. For all three models, the effect of parameter variations is figured out using numerical methods. Comparative calculations are performed to highlight differences and similarities of the individual model formulations. Together with some suggestions for further research, a summary is given in Section 5.

## 2. Models

There are several approaches to model the marine ecosystem. Here, three NPZD type models are analyzed. These three models depict the concentration of nutrients (N), phytoplankton (P), zooplankton (Z) and detritus (D) in  $[\text{mmol N} / \text{m}^{-3}]$  and are based on the formulation introduced by Oschlies and Garçon (1999). Since zero-dimensional models are considered, they are mathematically represented by an initial value problem (IVP)

$$y' = f(y, t), y(t_0) = y_0, \quad (1)$$

where  $f$  is a system of coupled nonlinear ODEs describing the temporal evolution of the four state variables N, P, Z and D, and  $y_0$  is a vector representing the initial values of those. In the following, the specific ODE systems that are analyzed in this study are briefly introduced. For more details see Heinle and Slawig (2013).

### 2.1. Models LLM and LQM

Model LLM and model LQM are both based on the ODE system given in Equation 2 and differ only in the parameter of zooplankton loss  $\Phi_Z^*$ .

Table 1: Units and definitions of the variable model parameters.

Symbol	Range	Unit	$u_t$	$u_{opt}$	Definition
$\beta$	[0,1]	1		0.925	Assimilation efficiency of zooplankton
$\mu_m$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		0.270	Phytoplankton growth rate
$\Phi_P$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		0.040	Phytoplankton linear mortality
$\Phi_P^*$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		0.025	Phytoplankton quadratic loss rate
$\epsilon$	$\mathbb{R}_+$	$m^6 (mmol N)^{-2} d^{-1}$		1.600	Grazing encounter rate
$g$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		1.575	Maximum grazing rate
$\Phi_Z$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		0.010	Zooplankton linear loss rate
$\Phi_Z^*$	$\mathbb{R}_+$	$m^3 (mmol N)^{-1} d^{-1}$		0.340	Zooplankton quadratic mortality
$\gamma_m$	$\mathbb{R}_+$	$d^{-1}$		0.048	Detritus remineralization rate
$k_N$	$\mathbb{R}_+$	$mmol N m^{-3}$		0.700	Half saturation constant for NO3 uptake
$k_I$	$\mathbb{R}_+$	$W m^{-3}$			Half saturation constant for light

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial y_1}{\partial t} &= -J(y_1, I)y_2 + \Phi_Z^m y_3 + \gamma_m y_4 \\
 \frac{\partial y_2}{\partial t} &= (J(y_1, I) - \Phi_P^m)y_2 - G(\epsilon, g, y_2)y_3 \\
 \frac{\partial y_3}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, y_2) - \Phi_Z^m - \Phi_Z^* y_3)y_3 \\
 \frac{\partial y_4}{\partial t} &= \Phi_P^m y_2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, y_2) + \Phi_Z^* y_3)y_3 - \gamma_m y_4
 \end{aligned} \tag{2}$$

We refer to model LLM when  $\Phi_Z^* = 0$ , and to model LQM in case  $\Phi_Z^* > 0$ . Note that this means that Model LLM treats only a linear loss of zooplankton. The parameters occurring in Equation 2 are introduced in Table 1. The two functions  $J = J(N, I)$  and  $G = G(\epsilon, g, P)$  are explained below. For illustration of the nitrogen fluxes represented by Equation 2 see Figure 1 on the left.

*Modelling of phytoplankton growth.* The growth of phytoplankton is modelled in accordance with the Michaelis Menthen kinetics (Fennel and Neumann, 2004). Half saturation functions are used to represent a limitation of phytoplankton growth by light ( $f_I$ ) as well as a limitation caused by the amount of nutrients available ( $f_N$ ). The actual growth rate of phytoplankton,  $J = J(I, N)$ , is the product of a maximum growth rate  $\mu_m$  and these two functions,  $f_I$  and  $f_N$  (see below and compare (Löptien, 2011)).

$$J(N, I) = \mu_m \cdot f(N) \cdot f(I),$$

with

$$f(N) = \frac{N}{k_N + N} \quad \text{and} \quad f(I) = \frac{I}{k_I + I}.$$

Note that the present light conditions, represented by  $I$ , are frequently functions of time. For simplification of the following analysis, however,  $I$  is assumed to be constant. Thus, the introduced IVP 1 turns into an autonomous IVP,

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0,$$

where the right hand side is independent of  $t$  (cp. Amann, 1990).

*Modelling of zooplankton grazing.* The grazing of zooplankton on phytoplankton is modelled by a Holling type III function in our models (see Fasham, 1995). A maximum grazing rate  $g$  is weighted by an encounter rate of zooplankton and phytoplankton,  $\epsilon$ , and the amount of phytoplankton in the system. The explicit formulation is

$$G(\epsilon, g, P) = \frac{g\epsilon P^2}{g + \epsilon P^2}.$$

## 2.2. Model QQM

In contrast to the other two models, model QQM includes a linear and a quadratic loss of both zooplankton and phytoplankton. This requires some minor modifications of the source and sink compartments of the individual tracers to keep the model conform to reality. In contrast to the previously introduced models, the linear loss of phytoplankton is added to the nutrient component and detritus gains mass by the quadratic loss of phytoplankton instead. The resulting system of ODEs is given in Equation 3.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial y_1}{\partial t} &= (-J(y_1, I) + \Phi_P^m)y_2 + \Phi_Z^m y_3 + \gamma_m y_4 \\
 \frac{\partial y_2}{\partial t} &= (J(y_1, I) - \Phi_P^m - \Phi_P^* y_2)y_2 - G(\epsilon, g, y_2)y_3 \\
 \frac{\partial y_3}{\partial t} &= (\beta G(\epsilon, g, y_2) - \Phi_Z^m - \Phi_Z^* y_3)y_3 \\
 \frac{\partial y_4}{\partial t} &= \Phi_P^* y_2^2 + ((1 - \beta)G(\epsilon, g, y_2) + \Phi_Z^* y_3)y_3 - \gamma_m y_4.
 \end{aligned} \tag{3}$$

On the right, Figure 1 illustrates the respective nitrogen fluxes.

## 3. Analytical calculations

In this chapter, the analytical results of our work are presented. At first, the parameter and initial value dependent equilibrium solutions of the three models LLM, LQM and QQM are shown, followed by a presentation of linearization based stability statements of these solutions. Crucial parameter and initial value constellations are figured out. Based on these results, a classification of the solutions occurrence for the linearization of model LLM is introduced whose relevance for the original nonlinear model is shown in chapter 4.

### 3.1. Equilibrium solutions

The qualitative characteristics of a model can be revealed by determining the equilibrium solutions of the underlying ODE system and a stability analysis of them. These equilibrium solutions define the fundamental, possible dynamics a model can show and, knowing their stability, the actual behavior of the model under certain conditions can be identified.

For all three models, three non-negative and real-valued equilibrium solutions, subsequently also termed *reasonable solutions*, are detected. Each describes a specific situation. The first equilibrium depicts simply the availability of nutrients in the water. The second equilibrium represents a situation where phytoplankton is in the system, but too little to serve as a food source for zooplankton. Thus, this equilibrium has a non-zero state for nutrients, phytoplankton and detritus, while the state of zooplankton is 0. The third equilibrium describes the existence of all four state variables and is called co-existence equilibrium in the following. While this interpretation holds for all three models, the explicit formulations of the equilibria are determined by the respective ODE system underlying the model.

The calculations presented in the following are in part obtained using the Symbolic Math Toolbox of the software MATLAB<sup>1</sup>. Hereafter, the following notations are used and assumptions are made. The initial values of nutrients, phytoplankton, zooplankton and detritus are labeled as  $y_0^i$ ,  $i = 1, \dots, 4$ . Each  $y_0^i$  is assumed to be positive. Since in our analysis the sum of these four initial values is relevant, an extra variable  $S = \sum y_0^i$  is introduced. When speaking about the parameters included in ODE system 2 and 3, respectively, we refer to the vector  $u \in \mathbb{R}^m$  in both cases. Hereby,  $m$  is the number of parameters included in the respective ODE system. When a specific parameter is addressed, its symbol in accordance with Table 1 is used.

*Model LLM.* Model LLM has the three real-valued and non-negative equilibrium solutions

$$E_{LLM_1}^* = (N^*(S), 0, 0, 0), \quad (4)$$

$$E_{LLM_2}^* = \left( \frac{k\Phi_m^P}{\mu_m - \Phi_m^P}, P_2^*(S, u), 0, \frac{\Phi_m^P}{\gamma} P_2^*(S, u) \right) \quad (5)$$

with

$$P_2^*(S, u) = \frac{S - \frac{k\Phi_m^P}{\mu_m - \Phi_m^P}}{\frac{\Phi_m^P}{\gamma} + 1} \quad (6)$$

and

$$E_{LLM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)) \quad (7)$$

with

$$P_3^*(u) = \sqrt{\frac{\Phi^Z g}{\epsilon(\beta g - \Phi^Z)}}. \quad (8)$$

While the first solution,  $E_{LLM_1}^*$ , is independent of the model parameters and thus, solely dependent on the initial values, the

two other equilibria are dependent on both parameters and initial values. These co-occurring dependencies make the expressions of  $E_{LLM_2}^*$  and  $E_{LLM_3}^*$  highly complicated and here, we only notate  $E_{LLM_2}^*$  as well as the state of phytoplankton of  $E_{LLM_3}^*$  explicitly. The complete state expressions of  $E_{LLM_3}^*$  are given in the Appendix. Note that all three equilibria of model LLM are analytically calculable.

From equation 6 and 8 it is clear that some necessary conditions must hold to guarantee the reasonability of the states  $P_2^*$  and  $P_3^*$ . For the former, these are  $\mu_m > \Phi_m^P$  as well as  $S > \frac{k\Phi_m^P}{\mu_m - \Phi_m^P}$ . For the latter,  $\beta g > \Phi^Z$  must hold. Further necessary conditions might be derived looking at the other state expressions of  $E_{LLM_3}^*$  (see Appendix). But, as these states are highly convoluted, we ignore them for the moment and focus on the conditions mentioned above.

*Model LQM.* In contrast to model LLM, the equilibria of model LQM are only in part analytically computable. Under assumption  $Z = 0$ , analytic solutions are obtained, which equal the ones for model LLM (see Equation 4 and 5). The co-existence equilibrium of model LQM, however, differs from the one presented and is only numerically computable. The quadratic loss term  $\Phi^Z Z^2$  added in this formulation leads to the mathematical problem of solving polynomials of order  $n > 4$ . This is analytically unfeasible (Stewart, 2004). For that reason, the co-existence equilibrium of model LQM is only given in a general form (Equ. 9). In contrast to model LLM, all four variables are dependent on both, the initial mass  $S$  and the parameters  $u$  (cp. Equ. 7).

$$E_{LQM_3}^* = (N_3^*(S, u), P_3^*(S, u), Z_3^*(S, u), D_3^*(S, u)). \quad (9)$$

*Model QQM.* For model QQM, there are also three reasonable equilibrium solutions. The first one equals the one of the other two models and, hence, is described by Equation 4. The other two equilibria differ from the ones previously presented. While the second equilibrium of model QQM is defined as

$$E_{QQM_2}^* = \left( N^*(S, u), P^*(S, u), 0, \frac{\Phi_P^*}{\gamma} P^*(S, u)^2 \right), \quad (10)$$

with

$$N_2^*(S, u) := \frac{k(\Phi_P^m + \Phi_P^* P^*(S, u))}{\mu_m - (\Phi_P^m + \Phi_P^* P^*(S, u))}, \quad (11)$$

the third equilibrium of model QQM is described by the same general formulation as  $E_{LQM_3}^*$  (see Equ. 9).

Caused by the quadratic loss of phytoplankton in this model, a quadratic dependence on the state  $P$  appears in solution  $E_{QQM_2}^*$  in contrast to solution  $E_{LLM_2}^*$ . Furthermore, solution  $E_{QQM_2}^*$  is additionally influenced by the new parameter  $\Phi_P^*$ . Apart from that, the analytic expression of  $E_{QQM_2}^*$  resembles the second equilibrium of model LLM. Looking at Equation 11, a condition similar to the one for solution  $E_{LLM_2}^*$  is noticeable that must be satisfied to ensure its reasonability. As for model LLM, the growth rate of phytoplankton must be higher than its mortality, in particular  $\mu_m > \Phi_P^m + \Phi_P^* P^*(S, u)$ .

<sup>1</sup> MATLAB is a registered trademark of The MathWorks, Inc., mathworks.com

### 3.2. Quality of equilibria

The quality of an equilibrium solution in terms of its stability properties determines the way the solution influences the systems behavior. While stable solutions are attractive, meaning the system tends towards this solution, the system drifts away from unstable solutions. In this section, the quality of the previously introduced equilibrium solutions subject to critical parameters is presented. As far as possible analytical calculations are done (cp. Section 3.1), otherwise numerical methods are used.

*Quality analysis of nonlinear systems.* There are two main approaches to analyze the quality of nonlinear systems. One is based on the *Lyapunov theory*, the other one is based on linearizations. A clear advantage of the Lyapunov theory is its global validity. Statements based on linearizations are in contrast only locally validated. In practice, however, it is often difficult to use the former because it requires the creation of so-called Lyapunov functions, a task, highly challenging for the most realistic applications and sometimes even impossible. For that reason, the linearization approach is applied in this study.

Given a differentiable function  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  and an equilibrium  $y^*$ , the *linearization* of a nonlinear autonomous ODE system  $y' = f(y)$  in  $y^*$  is given by

$$\bar{y}' = J_f(y^*) \bar{y}(t), \quad (12)$$

where  $J_f(y^*)$  is the Jacobian of  $f$  evaluated at the point  $y^*$ . This linearization has locally the same quality properties as the original nonlinear ODE system (Amann, 1990). For linear systems the quality of an equilibrium is determined by the eigenvalues  $\lambda = \alpha + i\beta$  of the governing matrix, in the case of linearizations, by the eigenvalues of the matrix  $J_f(y^*)$ . In case all eigenvalues  $\lambda$  have negative real parts, the equilibrium solution  $y^*$  is called stable. In case the real part of at least one eigenvalue is positive, the equilibrium solution  $y^*$  is called to be unstable. Note that these are global statements with respect to the linearized system 12, but local statements with respect to the nonlinear system. In case the real part of the maximum eigenvalue is 0, there are theoretical statements about the solutions quality for the linearized system, but nothing can be concluded on its quality in the nonlinear system.

In the following we call a solution  $y^*$  *linearized stable (unstable)* if the solution is stable (unstable) with respect to its linearization.

*Quality statements.* The quality of equilibrium solution  $E_{LLM_1}^*$  (Equ. 4), which is the same for all three models, as well as the quality of solution  $E_{LLM_2}^*$  (Equ. 5) can be analyzed analytically. The other solutions are too complicated to allow for analytic computations (cp. Section 3.1). In this section we mostly refer to model LLM, but all results with respect to solution  $E_{LLM_1}^*$  are equally valid for model LQM and model QQM (cp. Section 3.1) because the linearizations in  $E_{LLM_1}^*$  are independent of the underlying ODE System (cp.  $J_{QQM}$  in Appendix A).

The linearizations of model LLM are determined by the Jacobian of Equation 2 with  $\Phi_Z^* = 0$ ,

$$J_{LLM} = \begin{pmatrix} -\frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & -\frac{V_P N}{k_N + N} & \Phi_Z & \gamma \\ \frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & \frac{V_P N}{k_N + N} - \Phi_P - \frac{2g^2 \epsilon P Z}{(g + \epsilon P^2)^2} & -\frac{g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} & 0 \\ 0 & \frac{\beta 2g^2 \epsilon P Z}{(g + \epsilon P^2)^2} & \frac{\beta g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} - \Phi_Z & 0 \\ 0 & \frac{(1-\beta)2g^2 \epsilon P Z}{(g + \epsilon P^2)^2} + \Phi_P & \frac{(1-\beta)g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} & -\gamma \end{pmatrix}.$$

Integrating  $E_{LLM_1}^*$  in  $J_{LLM}$  provides the constant matrix

$$J_{LLM}(E_{LLM_1}^*) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{V_P S}{k_N + S} & \Phi_Z & \gamma \\ 0 & \frac{V_P S}{k_N + S} - \Phi_P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Phi_Z & 0 \\ 0 & \Phi_P & 0 & -\gamma \end{pmatrix},$$

which has the eigenvalues

$$\lambda_{LLM_1} = \left( 0, -\Phi_Z^m, -\gamma, -\frac{k\Phi_P^m - \mu_m S + \Phi_P^m S}{k + S} \right). \quad (13)$$

In our models,  $u > 0$  is postulated. Thus, the real parts of the second and third eigenvalues of Equation 13,  $\lambda^2$  and  $\lambda^3$ , are negative given any initial mass  $S$  and parameter setting  $u$ . The fourth eigenvalue, however, can be positive or negative.

Based on the real part of the maximum eigenvalue, the following statement can be derived for equilibrium  $E_{LLM_1}^*$ .

**Proposition 1** If  $\mu > \Phi_P$ , then  $E_{LLM_1}^*$  is locally unstable for all initial masses  $S > \frac{k\Phi_P}{\mu - \Phi_P}$ .

As the maximum eigenvalue has zero real part in case  $\lambda^4 < 0$ , an equivalent direct statement on the local stability of solution  $E_{LLM_1}^*$  can not be deduced. For linear systems, however, an equilibrium solution is proven to be stable also when the real part of the maximum eigenvalue equals zero and the multiplicity of this eigenvalue is one (cp. Amann, 1990). This is true in the present case and we state the following.

**Proposition 2** If  $\mu \leq \Phi_P$ , then  $E_{LLM_1}^*$  is stable for all initial masses  $S$  with respect to its linearized system.

Criteria for the quality of the other two equilibria can not be obtained since the expressions of the respective eigenvalues are too nested to support constructive conclusions. However, the eigenvalues of the linearization in  $E_{LLM_2}^*$

$$J_{LLM}(E_{LLM_2}^*) = \begin{pmatrix} -\Psi_1 & -\Phi_P & \Phi_Z & \gamma \\ \Psi_1 & 0 & -g + \Psi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \beta g - \Phi_Z - \beta \Psi_2 & 0 \\ 0 & \Phi_P & (1-\beta)g - (1-\beta)\Psi_2 & -\gamma \end{pmatrix},$$

where

$$\Psi_1 = \frac{\gamma(\Phi_P - V_P)(k_N \Phi_P + \Phi_P S - V_P S)}{k_N V_P (\gamma + \Phi_P)}$$

and

$$\Psi_2 = \frac{g^2}{g + \frac{\epsilon \gamma^2 \left( S + \frac{k_N \Phi_P}{\Phi_P - V_P} \right)^2}{\Phi_P^2 \left( \frac{\gamma}{\Phi_P} + 1 \right)^2}},$$

are still symbolically computable and as for  $\lambda_{LLM_1}$ , one of these eigenvalues equals zero (cp. Equ. 13).

Table 2: Classification of the equilibrium solutions for model LLM. Shown are the potentially stable solutions according to our analytical findings. On the left, the constellations given  $\mu > \Phi_P$  are shown (A), on the right for  $\mu \leq \Phi_P$  (B). The combination  $\mu \leq \Phi_P$  and  $S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$  results in a contradiction to  $S > 0$ , marked by '-'.

A			B		
$\mu > \Phi_P$	$S > k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$	$S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$	$\mu \leq \Phi_P$	$S > k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$	$S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$
$\beta g > \Phi_Z$	$E_{LLM_2}^*$ or $E_{LLM_3}^*$	$E_{LLM_1}^*$	$\beta g > \Phi_Z$	$E_{LLM_1}^*$	-
$\beta g \leq \Phi_Z$	$E_{LLM_2}^*$	$E_{LLM_1}^*$	$\beta g \leq \Phi_Z$	$E_{LLM_1}^*$	-

### 3.2.1. Classification

From the analytical expressions detected and presented, explicit parameter and initial value constellations are derived that decide on the reasonability and quality of the equilibrium solutions. For model LLM, critical parameter constellations are exposed for all three equilibria  $E_{LLM_1}^*$ ,  $E_{LLM_2}^*$  and  $E_{LLM_3}^*$ . This enables the introduction of a classification of the solutions occurrence dependent on these constellations which is shown in Table 2. On the left, the possible combinations with  $\mu > \Phi_P$  are posed, on the right the ones including  $\mu \leq \Phi_P$ . As a co-occurrence of  $\mu \leq \Phi_P$  and  $S \leq k\Phi_P/(\mu - \Phi_P)$  is in contradiction to  $S > 0$ , this case is marked by '-'.

In this classification, all analytical findings are integrated. Especially proposition 2, which is a statement with respect to the linear approximation of model LLM, contributes to the decision whether  $E_{LLM_1}^*$  or one of the other equilibria occurs in some cases (cp. Table 2, B). Consequently, the classification presented is theoretically founded for the linearized system and not for model LLM itself (cp. the previous section). Thus, to identify its significance with respect to model LLM, numerical experiments are conducted.

## 4. Numerical computations

To identify the stability properties of model LLM, LQM and QQM and especially, to see how far these properties coincide with the ones presented above for the linear approximation of model LLM, numerical computations are done. Since the analytical results indicate the primary importance of the parameters  $k, \mu$  and  $\Phi_P$ , but also of the parameters  $\Phi_Z, \beta, g$  and  $\Phi_P^*$  for the equilibrium solutions of the models and their stability, we present computations where these parameters are varied. In particular, results are presented for variations of a parameter setting introduced by Schartau and Oschlies (2003), their 'optimal' parameter set, which is identified by  $u_{opt}$  in this study (see Table 1). This is assumed to be a reasonable basic parameter setting for our investigations since the model considered by the authors is similar to model LQM. The individual variations comprise

- the linear mortality rate of phytoplankton  $\Phi_P \in [0, 1]$ ,
- the linear mortality rate of zooplankton  $\Phi_Z \in (0, 2]$ ,
- the maximum growth rate of phytoplankton  $\mu \in [0, 1]$ ,
- the half saturation constant  $k \in [0, 10]$ .

For model QQM, various settings of  $\Phi_P^*$  are additionally analyzed, namely  $\Phi_P^* \in [0, 1]$ . The remaining parameters mentioned above as well as the initial mass  $S$  are taken into account by the introduction of 'critical values' which are defined to be the roots of the inequalities presented in Table 2 (cp. also Section 4.2). Since effects of variations in the initial mass are topic of Heinle and Slawig (2013), here, the initial mass  $S$  is assumed to be constant  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$ .

### 4.1. Coincidence of analytical and numerical computations

To show the significance of the results presented in this section, the coincidence of equilibrium solutions obtained from numerical model integrations and analytical calculations is shown at first. Therefore, the models are numerically solved using a Runge-Kutta method for 5 model years to reach equilibrium state. Then, the linearizations in these equilibrium states are determined and the eigenvalues are numerically computed using the MATLAB built-in function `eig`. These eigenvalues are compared with analytically computed eigenvalues. Those are also obtained by the routine `eig`, but for symbolic expressions.

Table 3 shows the real parts  $\alpha$  of the analytically computed non-zero eigenvalues of the linearizations  $J_{LM}(E_{LLM_1}^*)$ ,  $J_{LM}(E_{LLM_2}^*)$  and  $J_{LM}(E_{LLM_3}^*)$  as well as the eigenvalues real parts of the linearization  $J_{LM}(E_{LLM_{num}})$  where  $E_{LLM_{num}}$  are the numerically obtained equilibrium states. Looking at those, it can be seen that the numerically computed eigenvalues  $\lambda_{LLM_{num}}$  always coincide with one of the analytical eigenvalues  $\lambda_{LLM_i}$ ,  $i \in 1, 2, 3$ . For small values of  $\Phi_P$ , the numerically based eigenvalues equal the ones calculated for the analytical solution  $E_{LLM_3}^*$ . For values  $\Phi_P$  larger than  $\Phi_P \sim 0.811$ , the numerical eigenvalues confirm the ones of the analytic linearization in  $E_{LLM_2}^*$  for a short period, and from values around  $\Phi_P \sim 0.815$  up to the maximum value of  $\Phi_P$  considered in this study, the numerical based eigenvalues coincide with the ones of the linearization  $J_{LM}(E_{LLM_1}^*)$ .

For model LQM and model QQM, the coincidence of analytical - as far as they exist - and numerical computations is checked in the same way.

### 4.2. Dynamics of model LLM

The classification presented in Table 2 is theoretically based for the linearizations of model LLM, but not for the nonlinear system underlying model LLM. Therefore, numerical experiments are conducted to estimate the extent to which the properties stated in this classification hold for the original nonlinear system.

Table 3: Real parts of the non-zero eigenvalues for model LLM for initial mass  $S = 15\text{mmol N m}^{-3}$  and parameter set  $u_{opt}$ , where parameter  $\Phi_P$  is varied.  $\lambda_{LLM_1}$ ,  $\lambda_{LLM_2}$  and  $\lambda_{LLM_3}$  are the analytically calculated eigenvalues,  $\lambda_{LLM_{num}}$  is calculated for the equilibrium solution obtained solving the model numerically.

	$\Phi_P$	$\alpha$		
$\lambda_{LLM_1}$	0	-0.010000	-0.048000	0.815052
	0.2	-0.010000	-0.048000	0.615052
	...			
	0.8	-0.010000	-0.048000	0.015052
	0.81	-0.010000	-0.048000	0.005052
	0.812	-0.010000	-0.048000	0.003052
	0.814	-0.010000	-0.048000	0.001052
	0.816	-0.010000	-0.048000	-0.000948
	...			
	0.85	-0.010000	-0.048000	-0.034948
0.9	-0.010000	-0.048000	-0.084948	
$\lambda_{LLM_2}$	0	1.440529	-18.280441	-0.048000
	0.2	1.290550	-1.812290	-0.279708
	...			
	0.8	0.078265	-0.024595	-0.024595
	0.81	0.005526	-0.041739	-0.006581
	0.812	-0.003758	-0.044640	-0.003544
	0.814	-0.009182	-0.046956	-0.001105
	0.816	-0.009263	-0.048857	0.000909
	...			
	0.85	1.431156	-0.050542	0.002694
0.9	0.977659	-0.026653	-0.026653	
$\lambda_{LLM_3}$	0	-0.758001	-0.021711	-0.048131
	0.2	-0.567228	-0.021575	-0.048411
	...			
	0.8	-0.008174	-0.008174	-0.042657
	0.81	-0.043421	-0.004403	-0.000520
	0.812	-0.043536	-0.008052	0.005183
	0.814	-0.043646	-0.009668	0.008847
	0.816	-0.043750	0.011991	-0.010770
	...			
	0.85	0.050745	-0.016337	-0.044939
0.9	0.102012	-0.018200	-0.045837	
$\lambda_{LLM_{num}}$	0	-0.758001	-0.021711	-0.048131
	0.2	-0.567228	-0.021575	-0.048411
	...			
	0.8	-0.008174	-0.008174	-0.042657
	0.81	-0.043421	-0.004403	-0.000520
	0.812	-0.044640	-0.003544	-0.003758
	0.814	-0.001105	-0.046956	-0.009182
	0.816	-0.000948	-0.048000	-0.010000
	...			
	0.85	-0.034948	-0.048000	-0.010000
0.9	-0.084948	-0.048000	-0.010000	

The equilibria and eigenvalues for model LLM, presented in Section 3, are computed for given parameter and initial value settings using the software MATLAB and MUPAD. As long as analytical expressions exist, this is done symbolically to prevent rounding errors and to enable the detection of critical values. Otherwise, equilibria that are numerically computed serve as a base for the computations. Results are presented for variations of parameter set  $u_{opt}$  as introduced in Section 4. The variation in  $\Phi_P$  and the variation in  $\Phi_Z$  are discussed in more detail, while the results with respect to the variations in  $\mu$  and  $k$  are only briefly mentioned, because they do not show new characteristic dynamics.

*Variation in  $\Phi_P$ .* Figure 2 shows the results of the variation in  $\Phi_P$ . At the top, the concentrations of the states in equilibrium, obtained from numerical integrations, are illustrated. Below, the real parts of the corresponding maximum eigenvalues  $\lambda^{max}$  are shown. In all three plots, critical points  $C(\Phi_P)$  that are derived from Table 2 are marked by vertical lines. In particular, the dash-dotted line corresponds to the critical point  $C_1(\Phi_P)$  determined by the equation  $\frac{k\Phi_P}{\mu-\Phi_P} - S = 0$  (cp. Equation 4). The dashed line corresponds to the critical point  $C_2(\Phi_P)$  at which  $\mu - \Phi_P = 0$  (cp. Equ. 5). A third critical point  $C_3(\Phi_P) \sim 0.811$ , marked by a dotted line, is only shown in the bottom plot due to its proximity to  $C_2(\Phi_P)$ . This point is not taken from Table 2, but is related to the eigenvalues of linearization  $J_1(E_{LLM_2}^*)$ . Due to the high interlacing of those eigenvalues, an explicit expression of  $C_3(\Phi_P)$  can not be given, its analytical calculation however is possible.

Looking at the top plot of Figure 2, it can be seen that the equilibrium state of each variable changes continuously with varying phytoplankton mortality rate  $\Phi_P$ . Not visible in that plot, but noticeable in the plot at the bottom, a first change of the solutions quality occurs at the critical point  $C_3(\Phi_P)$ . For  $\Phi_P \leq C_3(\Phi_P)$  numerical solutions converge to  $E_{LLM_3}$ . From then on, numerical solutions end in solution  $E_{LLM_2}$  for a short period and at  $C_1(\Phi_P)$ , the solutions quality changes again and  $E_{LLM_1}^*$  is stable for all  $\Phi_P > C_1(\Phi_P)$  as indicated by our classification. The critical value  $C_2(\Phi_P)$  is not crucial for the presented parameter and initial value setting.

Looking at the two bottom plots of Figure 2, that show the maximum eigenvalues of the three equilibrium solutions, it is obvious that for all linearizations, the maximum eigenvalue  $\lambda^{max}$  is positive or zero. Particularly, always one linearization shows  $\lambda^{max} = 0$ , while the others have at least one eigenvalue  $\lambda > 0$ . The latter implies the instability of the associated solution with respect to the linearization as well as with respect to the original nonlinear system. For the former however, nothing can be concluded from the theory. But comparing the two top plots of Figure 2, it is obvious, that numerical solutions converge to the equilibrium whose linearization has  $\lambda^{max} = 0$  and thus, this solution is stable with respect to the nonlinear system as well.

*Variation in  $\Phi_Z$ .* The variation in  $\Phi_Z$  shows a new characteristic of model LLM. Some parameter constellations result in

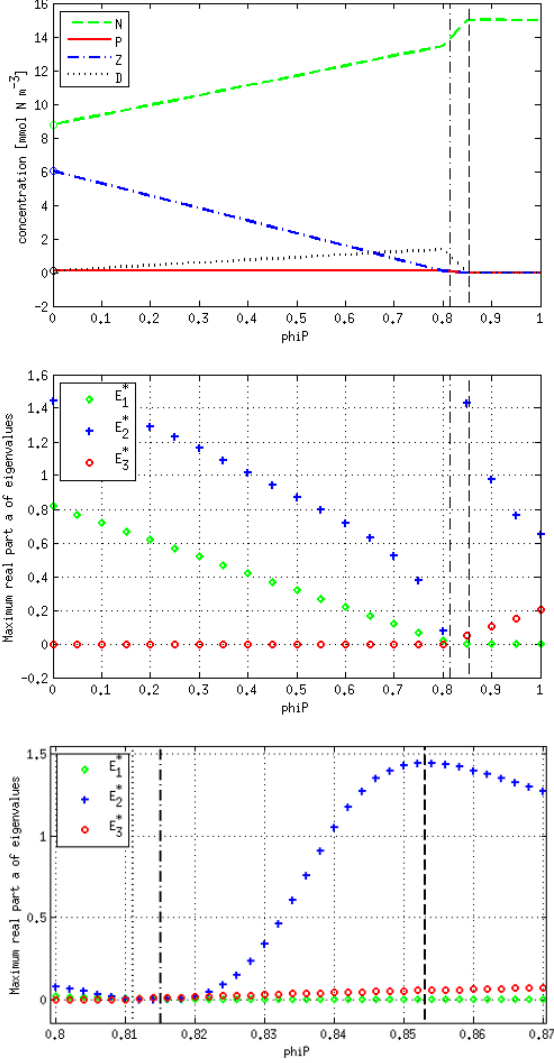


Figure 2: Concentrations in equilibrium for model LLM (top) and the eigenvalues highest real part of the linearizations  $J_1(E_{LLM_1}^*)$ ,  $J_1(E_{LLM_2}^*)$  and  $J_1(E_{LLM_3}^*)$  (center and bottom) for initial mass  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  and parameter set  $u_{opt}$ , plotted as functions of the linear mortality rate of phytoplankton  $\Phi_P$ . Vertical lines mark the critical points determined in accordance to analytical findings. Concentrations are obtained running the model for 5 model years. Eigenvalues are symbolically calculated.

periodic solutions, so-called limit cycles. An example, a limit-cycle with period 2, is shown in Figure 3, obtained for  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  and  $u_{opt}$  with  $\Phi_Z = 0.75$ . The upper plot shows the periodic behavior over time, the lower plot shows the corresponding phase curves N vs. P and Z vs. D.

The whole variation in  $\Phi_Z$  is illustrated in Figure 4, which is similar to Figure 2. While the top plot illustrates the equilibrium solutions, the bottom plot shows the real parts of the maximum eigenvalues of the respective linearizations in  $E_{LLM_i}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , but here as functions of  $\Phi_Z$ . Looking at the bottom plot, it can be seen, that for  $\Phi_Z$ , in contrast to the variation previously discussed, a domain  $D_{cycle}$  exists where all three linearizations have an eigenvalue with a positive real part  $\alpha$ . This means that all three equilibria are unstable as  $\Phi_Z \in D_{cycle}$ , which especially holds for both, the linearizations and model

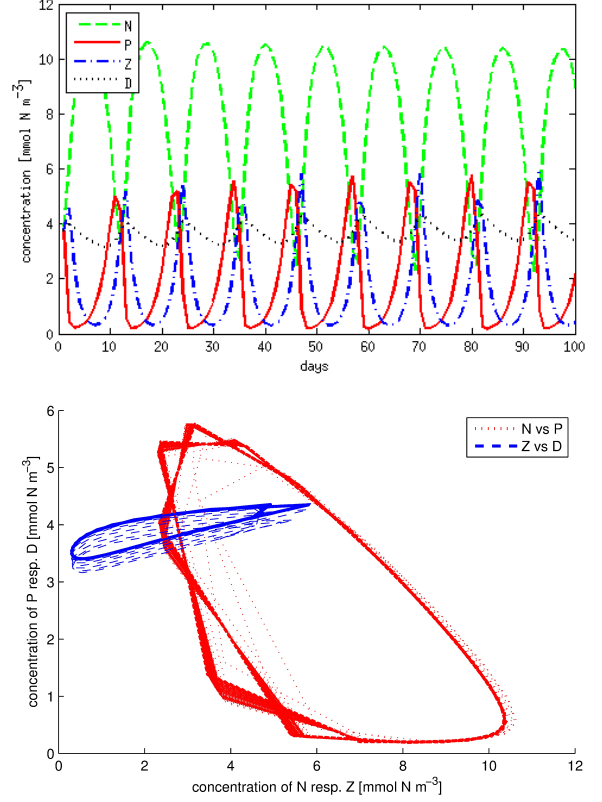


Figure 3: Solution of model LLM for initial mass  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  and parameter set  $u_{opt}$  with  $\Phi_Z = 0.75$ . All three equilibria presented in Section 3.1 are unstable and instead, a stable limit cycle occurs around  $E_{LLM_3}^*$ . The top plot shows the states of N, P, Z and D over time, the bottom plot shows the phase curves N vs. P and Z vs. D.

LLM and that results in the above mentioned limit cycles. In the upper plot, lines depict the equilibrium states in the range of  $\Phi_Z \notin D_{cycle}$ , where numerical solutions converge to these states. In the range the model does not converge to one of the equilibrium solutions presented in Section 3.1, crosses mark analytically computed solutions of  $E_{LLM_3}^*$  because the arising limit cycles oscillate around this equilibrium (cp. Figure 3).

The critical points, on the one hand the value of  $\Phi_Z$  where equilibrium  $E_{LLM_3}$  becomes unstable and the model solution starts to oscillate around  $E_{LLM_3}$  and on the other hand, the point where the limit cycle breaks down and solution  $E_{LLM_3}$  becomes stable again, are not exactly determinable. These critical points depend solely on the eigenvalues of linearization  $J_1(E_{LLM_3}^*)$ , whose symbolic expressions are not detectable. Two other critical points are explicit detectable, namely  $C_1(\Phi_Z)$ , marked by a dashed line in Figure 4 and resulting from the equality  $\Phi_Z - \beta g = 0$  (cp. Equation 8) and  $C_2(\Phi_Z)$  which arises from one of the eigenvalues  $\lambda_{LLM_2}$  (cp. variation in  $\Phi_P$ ) and which is marked by a solid line in 4. While in the present example  $C_1(\Phi_Z)$  has no effect on the solution of model LLM, a quality shift from solution  $E_{LLM_3}$  to solution  $E_{LLM_2}$  occurs at  $C_2(\Phi_Z) \sim 1.4357$  (cp. Figure 4). The maximum eigenvalue of  $\lambda_{LLM_1}$  is constant because these eigenvalues are not effected by  $\Phi_Z$ .

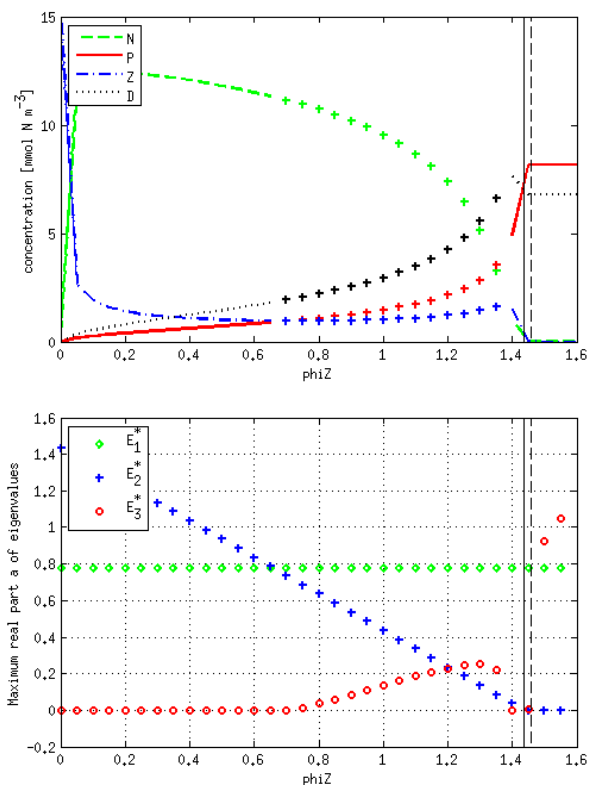


Figure 4: Concentrations in equilibrium for model LLM (top) and the eigenvalues highest real part of the linearizations  $J_1(E_{LLM_1}^*)$ ,  $J_1(E_{LLM_2}^*)$  and  $J_1(E_{LLM_3}^*)$  (bottom) for initial mass  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  and parameter set  $u_{opt}$ , plotted as functions of the linear mortality rate of zooplankton  $\Phi_Z$ . Vertical lines mark the critical points determined in accordance to analytical findings. Crosses in the top plot mark analytically determined equilibrium solutions in the range no equilibrium is stable. Lines depict the range numerical equilibrium solutions are obtained after 5 model years. Eigenvalues are symbolically calculated.

*Variations in  $k$  and  $\mu$ .* Parameter variations of  $u_{opt}$  in  $k$  and  $\mu$  show similar results as presented for  $\Phi_P$ . A variation in  $k$  does not lead to a quality change of the three solutions. Using  $u_{opt}$ ,  $E_{LLM_3}$  is stable up to very high values of  $k$  ( $k > 100$ ). Variations in  $\mu$  show that equilibrium  $E_{LLM_1}^*$  is stable for very small values of  $\mu$ , while from  $C_1(\mu) \sim 0.042$ , derived from the equation  $\frac{k\Phi_P}{\mu - \Phi_P} - S = 0$ , equilibrium  $E_{LLM_3}$  is stable.

Given any situation, the results of numerical experiments for model LLM are in accordance with the classification introduced in Table 3. This is also true when using other parameter settings as a base and thus, it is indicated that the classification holds for the non-linear system 2. The numerical investigations showed additionally that limit cycles can occur around solution  $E_{LLM_3}^*$ , a feature that is analytically not detectable.

#### 4.3. Dynamics of model LQM and model QQM

For model LQM and model QQM we have less analytical results than for model LLM. In particular, we do not have explicit solutions for the equilibrium solutions  $E_{LQM_3}^*$ ,  $E_{QQM_2}^*$  and  $E_{QQM_3}^*$ . But the analytical results presented for model LLM are appropriate to be used as a base for the investigation of the dynamics of model LQM. That is because the models differ only

in a term that includes the state of  $Z$  and it holds  $Z = 0$  in two of the three reasonable equilibria. Model QQM is not that related to model LLM, but nevertheless, the analytical results obtained for model LLM are used as a base for numerical investigations for model QQM. Results are again illustratively shown for parameter set  $u_{opt}$  and initial mass  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$ .

*Model LQM.* The first two equilibrium solutions of model LQM, solutions  $E_{LQM_1}^*$  and  $E_{LQM_2}^*$ , are equal to the ones of model LLM. By implication, the corresponding linearizations and the associated eigenvalues coincide and thus, respective results presented for model LLM hold also for model LQM.

Figure 5 shows the equilibria to which numerical solutions of model LQM converges to, at the top for varied parameter  $\Phi_P$ , at the bottom for varied parameter  $\Phi_Z$ . Notations and critical values are as in Figure 2 and 4, respectively. Caused by the lack of an analytic expression for solution  $E_{LQM_3}^*$ , symbolic computations of the associated eigenvalues are not possible. The other eigenvalues coincide with the ones for model LLM as mentioned (see Figure 2 and 4).

Looking at the top plots in Figure 5 and Figure 2, it is clear that the stable domains of the respective equilibria with respect to the parameter  $\Phi_P$  are the same for both models. This means in particular that the critical points, where the quality of the solutions change, are the same. A first stability shift, from  $E_{LQM_3}^*$  to  $E_{LQM_2}^*$ , occurs at  $C_3(\Phi_P)$ . A second shift happens at  $C_1(\Phi_P)$  and  $E_{LQM_1}^*$  is stable for all  $\Phi_P > C_1(\Phi_P)$  (cp. Section 4.2).

The variation in  $\Phi_Z$  also shows similarities of the solutions stability for both models. Looking at the bottom plot in Figure 5, a quality shift from solution  $E_{LQM_3}$  to solution  $E_{LQM_2}$  is observed at the critical point  $C_2(\Phi_Z)$ , which is observed for model LLM as well (cp. Figure 4). However, in contrast to model LLM, limit cycles do not appear in model LQM.

Similar to model LLM, variations in  $\mu$  and  $k$  do not show remarkable new characteristics of the solutions. Furthermore, the stable ranges of the individual solutions coincide again for model LLM and model LQM. The co-existence solution is stable for all settings of  $k$  and the variation in  $\mu$  shows that equilibrium  $E_{LQM_1}$  is stable for very small values of  $\mu$ , while equilibrium  $E_{LQM_3}$  is stable for values  $\mu > C_1(\mu) \sim 0.042$ .

The described observations can be explained as follows: On the one hand, the similarities are explained by the fact that the first two equilibria of the two models are equally defined. Thus, the third equilibrium is related to the quality of the other two equilibria which especially explains the simultaneous quality shifts of both models. On the other hand, the two models can differ in features that are independent of the first two solutions, because solution  $E_3^*$  is specific for each model. This concerns for example the occurrence of limit cycles. While for model LLM there is a range of  $\Phi_Z$  where limit cycles occur, for model LQM limit cycles do not occur in the same situation. However, one can see that the classification presented for model LLM in Table 2 holds for model LQM as well.

*Model QQM.* The model QQM underlying formulation differs from the one of model LLM and LQM. Thus, it is not clear whether the classification presented in Table 2 is relevant for



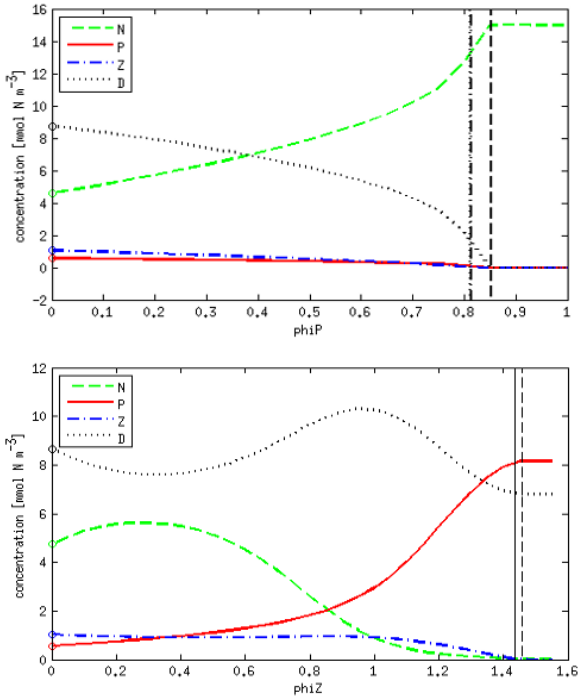


Figure 5: Concentrations in equilibrium for model LQM for an initial mass  $S = 15 \text{ mmol N m}^{-3}$  and parameter set  $u_{opt}$ , plotted as a function of the linear mortality rate of phytoplankton  $\Phi_P$  (top) and as function of the linear mortality rate of zooplankton  $\Phi_Z$  (bottom). Vertical lines mark the critical values  $C(\Phi_P)$  and  $C(\Phi_Z)$  in accordance to Figure 2. Equilibria are obtained running the model for 5 model years.

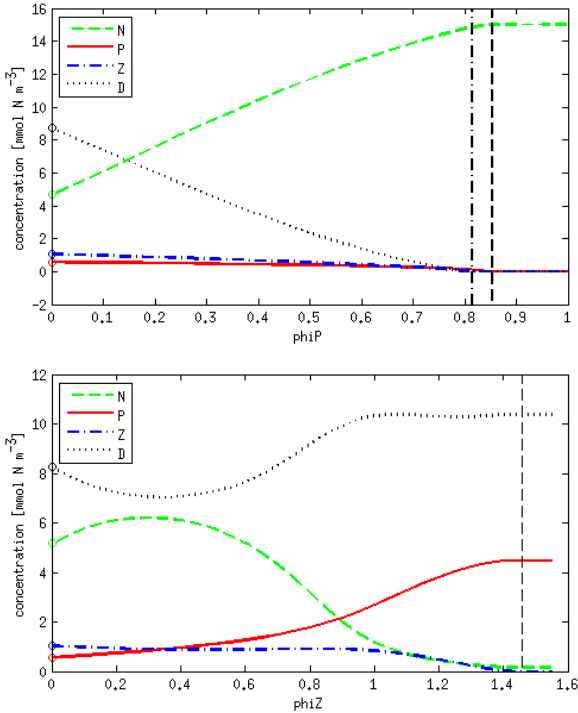


Figure 6: As Figure 5 for model QQM. The vertical lines mark the critical values  $C(\Phi_P)$  and  $C(\Phi_Z)$ , respectively, that are detectable for model QQM.

model QQM as well. However, since the first equilibrium of model QQM coincides the one of the other two models and further, the respective formulations differ just slightly (cp. Equ. 2 and 3), it is expected that model QQM shows some similar dynamical behavior. To see to what extent model QQM resembles the dynamics of the other two models, comparative numerical experiments are conducted.

Figure 6 shows the equilibrium solutions of model QQM, for varying  $\Phi_P$  at the top and varying  $\Phi_Z$  at the bottom. Comparing these two plots with the plots in Figure 5, it is conspicuous that the solutions of model LQM and model QQM are similar for large parameter ranges of  $\Phi_P$  and  $\Phi_Z$ . Especially, the stability domains of the individual equilibria seem to agree for both models. Considering, e.g., the variation in  $\Phi_P$ , there are similar stability shifts from  $E_{QQM_3}^*$  to  $E_{QQM_2}^*$  and from  $E_{QQM_2}^*$  to  $E_{QQM_1}^*$  as observed for the other two models. The only difference is that the former shift does not occur at the critical point  $C_3(\Phi_P)$ , introduced for model LLM, but at a point nearby. The critical value  $C_3(\Phi_P)$  is related to the eigenvalues arising from linearization  $J_1(E_{LLM_2}^*)$  which do not agree with the ones of  $J_2(E_{QQM_2}^*)$ . A slight shift of the critical value from  $C_3(\Phi_P)$  to  $C'_3(\Phi_P) \sim 0.8128$  is the result.

The detected critical values with respect to  $k$  and  $\mu$  are obtained from Equation 13. Thus they are valid for model QQM as well and experiments for  $k$  and  $\mu$  consequently show that the stability domains of the equilibria coincide with the ones for model LQM while varying these parameters. Further critical values, that could cause nevertheless a quality change, seem not to exist, at least not when using the parameter setting  $u_{opt}$ . Finally, the variation in the for model QQM specific parameter  $\Phi_P$  does not show a specific dynamical behavior or stability shifts. Independent of  $\Phi_P$ , solution  $E_{QQM_3}^*$  is stable.

Thus, the biggest difference between model LQM and model QQM seems not to be in the stability ranges, but more in the respective solutions. As shown in Heinle and Slawig (2013) for variable initial masses, the individual solutions of model LQM and model QQM here also show interesting similarities and differences in the distribution of the individual tracer quantities. E.g., looking at the bottom plots of Figure 5 and Figure 6, both models converge to their co-existence equilibrium for a wide range of  $\Phi_Z$ . For around  $\Phi_Z \in (0, 1)$ , the solutions are even similar in their respective quality and quantities. For  $\Phi_Z > 1$ , the discrepancy between the solutions increases. The co-existence solution of each model converges continuously to the respective second equilibrium and, at least for parameter set  $u_{opt}$ , those two solutions differ significantly. While in model LQM the state of  $P$  exceeds the state of  $D$ , in model QQM it is the other way around. For varying  $\mu$  and  $k$  the solutions of the two models differ only slightly.

## 5. Summary & conclusions

A classification of the dynamics of a typical marine ecosystem model formulation depending on crucial parameter and initial value constellations is introduced. This classification is theoretically based on analytical computations of the equilibria of the model as well as on a stability analysis of those using the

linearization approach. As one eigenvalue of these linearizations is constantly 0, the absolute validity of the classification for the model itself is not given. To identify its reasonability for the nonlinear model, model LLM, as well as to examine its significance for related model formulations, model LQM and QQM, numerical methods are used.

The analytical computations that enable the introduction of the classification indicate the main significance of the parameters  $\Phi_P, \mu, k, \beta, g$  and  $\Phi_Z$  for the dynamics of model LLM. Those determine whether an equilibrium is reasonable and stable, and thus significant for the model solution and its dynamics. In accordance to these analytical findings, numerical experiments are performed for variations of the mentioned parameters which show that the classification holds for the nonlinear model. Furthermore, the experiments revealed that limit cycles can occur for model LLM. Explicit conditions for their appearance, however, can not be given since the appearance of this feature is related to the quality of the co-existence equilibrium, which is analytically not examinable.

Numerical experiments with respect to the related model formulations, model LQM and QQM, showed that

- the classification presented for model LLM is true for model LQM as well,
- model LQM and model QQM do not show limit cycles,
- the difference of the model formulations do not result in significant differences of the stability ranges of the individual equilibrium solutions, but in quantitative differences between the model solutions,
- it is meaningful to use analytical statements obtained for simplified models as a base for an investigation of models that are too complex for an analytical approach.

The results presented show once more the importance of knowing the basic dynamics of a model. Knowing them, it is possible to confidently decide whether a model is appropriate for a target purpose or not. Furthermore, identifying the dynamics of a model it is possible to compare those with the dynamics of other, potentially simpler models. This study shows that differences in the model formulation do not necessarily imply completely different dynamics of the respective solutions. It is not necessary to use a complex model, when a simpler one can show the same dynamics.

The method presented in this study is easily transferable to other models, which is not restricted to marine ecosystem models. A confident application of a model is ensured in almost every domain knowing the dynamics of the model and their dependence on the formulation and parameters included.

## References

- Amann, H., 1990. Ordinary Differential Equations: An Introduction to Nonlinear Analysis. Walter de Gruyter.
- Fasham, M. J. R., 1995. Variations in the seasonal cycle of biological production in subarctic oceans: A model sensitivity analysis. In: Deep Sea Research I. Vol. 42. pp. 1111–1149.
- Fasham, M. J. R., Flynn, K. J., Pondaven, P., Anderson, T. R., Boyd, P. W., 2006. Development of a robust marine ecosystem model to predict the role of iron in biogeochemical cycles: A comparison of results for iron-replete and iron-limited areas, and the SOIREE iron-enrichment experiment. In: Deep Sea Research I. Vol. 53. pp. 333–366.
- Fennel, K., Losch, M., Schröter, J., Wenzel, M., 2001. Testing a marine ecosystem model: sensitivity analysis and parameter optimization. In: Journal of Marine Research. Vol. 28. pp. 45–63.
- Fennel, W., Neumann, T. e., 2004. Introduction to the modelling of marine ecosystems (Elsevier oceanography series 72). Elsevier.
- Forster, P., Ramaswamy, V., Artaxo, P., Bernsten, T., Betts, R., Fahey, D. W., Haywood, J., Lean, J., Lowe, D. C., Myhre, G., Nganga, J., Prinn, R., Raga, G., Schulz, M., Van Dorland, R., 2007. Changes in Atmospheric Constituents and in Radiative Forcing. In: [Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Chen, Z., Marquis, M., Averyt, K. B., Tignor, M., Miller, H. L. e. . (Eds.), Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Gregg, W. W., Ginoux, P., Schopf, P. S., Casey, N. W., 2003. Phytoplankton and iron: validation of a global three-dimensional ocean biogeochemical model. In: Deep Sea Research II. Vol. 50. pp. 3143–3169.
- Heinle, A., Slawig, T., 2013. Internal dynamics of NPZD type ecosystem models. In: Ecological Modelling. Vol. 254. pp. 33–42.
- Kidston, M., Matear, R., Baird, M. E., 2011. Parameter optimisation of a marine ecosystem model at two contrasting stations in the Sub-Antarctic ZoneT. In: Deep Sea Research II. Vol. 58. pp. 2301–2315.
- Löptien, U., 2011. Steady states and sensitivities of commonly used pelagic ecosystem model components. In: Ecological Modelling. Vol. 222. pp. 1376–1386.
- Moore, J. K., Doney, S. C., Glover, D. M., Fung, I. Y., 2002. Iron cycling and nutrient-limitation patterns in surface waters of the World Ocean. In: Deep Sea Research II. Vol. 49. pp. 463–507.
- Oschlies, A., Garçon, V., 1999. An eddy-permitting coupled physical-biological model of the North Atlantic. 1. Sensitivity to advection numerics and mixed layer physics. In: Global Biogeochemical Cycles. Vol. 13. pp. 135–160.
- Rückelt, J., Sauerland, V., Slawig, T., Srivastav, A., B., W., Patvardhan, C., 2010. Parameter optimization and uncertainty analysis in a model of oceanic CO<sub>2</sub> uptake using a hybrid algorithm and algorithmic differentiation. In: Nonlinear Analysis: Real World Applications. Vol. 11. pp. 3993–4009.
- Schartau, M., Oschlies, A., 2003. Simultaneous data-based optimization of a 1d-ecosystem model at three locations in the north atlantic: Part I - method and parameter estimates. In: Journal of Marine Research. Vol. 61. pp. 765–793.
- Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Chen, Z., Marquis, M., Averyt, K., Tignor, M., Miller, H. E., 2007. Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Stewart, I., 2004. Galois Theory, Third Edition. Chapman and Hall/CRC.

## Appendix

A1. The expressions for the equilibrium states of nutrients, zooplankton and detritus in solution  $E_{LLM_3}^*$  are

$$N_3^*(S, u) = - \left[ \theta_1 - \left( (\theta_1 + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S)^2 + 4\gamma_m k \Phi_Z \left( \gamma_m \Phi_Z S - \gamma_m \Phi_Z \theta_2 + \beta \gamma_m \Phi_P \theta_2 - \beta \Phi_P \Phi_Z P_3^* \right) \right)^{1/2} + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S \right] \cdot [2\gamma_m \Phi_Z]^{-1},$$

$$Z_3^*(S, u) = \frac{\beta \left( \Phi_P + [\mu_m \theta_2] \cdot \left[ 2\gamma_m \Phi_Z \left( k - \frac{\theta_2}{2\gamma_m \Phi_Z} \right) \right]^{-1} \right) P_3^*}{\Phi_Z},$$

$$D_3^*(S, u) = \frac{\left( \beta \Phi_P + [\mu_m (\beta - 1) \theta_2] \cdot \left[ 2\gamma_m \Phi_Z \left( k - \frac{\theta_2}{2\gamma_m \Phi_Z} \right) \right]^{-1} \right) P_3^*}{\gamma_m},$$

where

$$\theta_1 = P_3^* (\gamma_m \Phi_Z + \Phi_Z \mu_m - \beta \gamma_m \Phi_P + \beta \gamma_m \mu_m + \beta \Phi_P \Phi_Z - \beta \Phi_Z \mu_m),$$

$$\theta_2 = \theta_3 + \gamma_m \Phi_Z (k - y_0) - \left( (\theta_3 + \gamma_m k \Phi_Z - \gamma_m \Phi_Z S)^2 + 4\gamma_m k \Phi_Z \left( \gamma_m \Phi_Z S - \gamma_m \Phi_Z P_3^* + \beta \gamma_m \Phi_P P_3^* - \beta \Phi_P \Phi_Z P_3^* \right) \right)^{1/2},$$

$$\theta_3 = P_3^* \cdot (\gamma_m \Phi_Z + \Phi_Z \mu_m - \beta \gamma_m \Phi_P + \beta \gamma_m \mu_m + \beta \Phi_P \Phi_Z - \beta \Phi_Z \mu_m).$$

A2. The Jacobian of ODE system 2 for model LQM is given by

$$J_{LQM} = \begin{pmatrix} -\frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & -\frac{V_P N}{k_N + N} & \Phi_Z & \gamma \\ \frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & \frac{V_P N}{k_N + N} - \Phi_P - \frac{2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} & -\frac{g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} & 0 \\ 0 & \frac{\beta 2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} & \frac{\beta g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} - \Phi_Z - 2\Phi_Z^* Z & 0 \\ 0 & \frac{(1-\beta) 2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} + \Phi_P & \frac{(1-\beta) g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} + 2\Phi_Z^* Z & -\gamma \end{pmatrix}.$$

A3. The Jacobian of ODE system 3 is given by

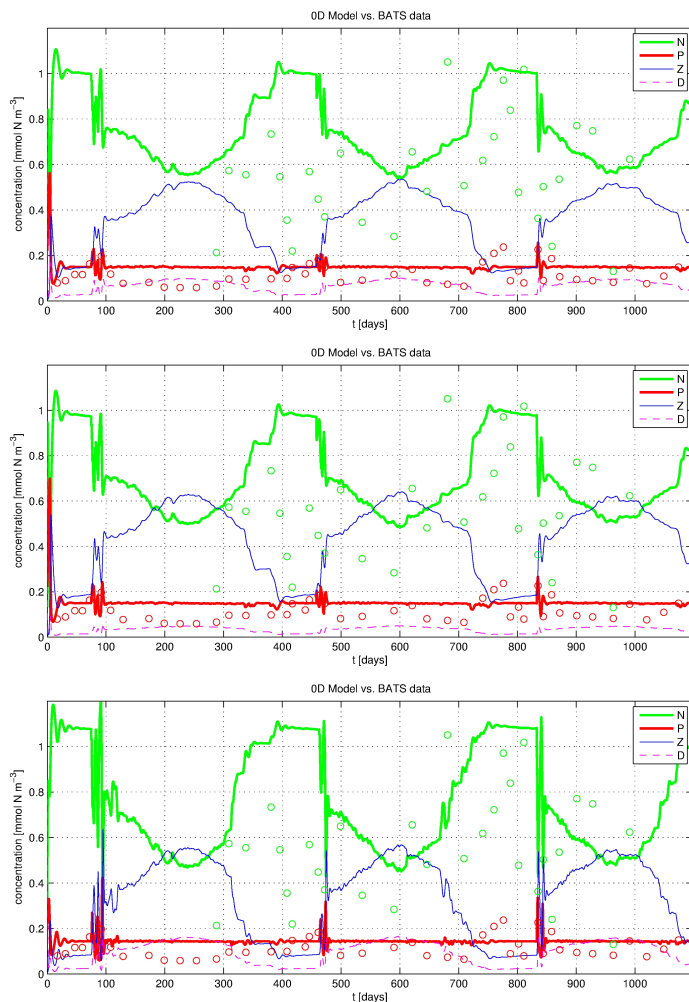
$$J_{QOM} = \begin{pmatrix} -\frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & \Phi_P - \frac{V_P N}{k_N + N} & \Phi_Z & \gamma \\ \frac{V_P k_N P}{(k_N + N)^2} & \frac{V_P N}{k_N + N} - \Phi_P - 2\Phi_P^* P - \frac{2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} & -\frac{g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} & 0 \\ 0 & \frac{\beta 2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} & \frac{\beta g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} - \Phi_Z - 2\Phi_Z^* Z & 0 \\ 0 & \frac{(1-\beta) 2g^2 \epsilon PZ}{(g + \epsilon P^2)^2} + 2\Phi_P^* P & \frac{(1-\beta) g \epsilon P^2}{g + \epsilon P^2} + 2\Phi_Z^* Z & -\gamma \end{pmatrix}.$$



A.4

Ergänzungen

## Ergänzungen zu Optimierung Teil 1 (BATS)



**Abbildung 5.1:** Lösung des NPZD Modells (durchgezogene Linien) für 3 Modelljahre unter Verwendung der optimierten Parametersätze  $u_{lsq1}$  (oben),  $u_{lsq2}$  (mitte) und  $u_{lsq3}$  (unten) (vgl. Tabelle 3.2). Entsprechendfarbige Kreise stellen die zugehörigen Observations dar. Die Parametersätze sind erhalten unter Verwendung der Routine `lsqnonlin`.

## Ein Tool für Algorithmisches Differenzieren

Um einen Einblick in die praktische Umsetzung von AD zu liefern, wird hier die Funktionsweise des im Verlauf eines Studienprojekts erstellten AD Tools für Octave, 'AD', vorgestellt.

Das Tool *AD* basiert auf der Methode des Operatorüberladens. Die elementaren Operatoren der Sprache Octave, zum Beispiel `plus`, `minus`, `plot`, ... , sind überladen in der Art, dass beim Aufruf eines solchen Operators für ein Objekt vom Datentyp `AD` neben der eigentlichen Funktionsauswertung, auch die entsprechende Ableitung mit bestimmt wird. Eine Funktion

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto y \quad (5.1)$$

wird also zu einer Funktion

$$\hat{f} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \times \mathbb{R}, (x_1, x_2) \mapsto (y_1, y_2), \quad (5.2)$$

wobei  $x_1 = x$  und  $x_2$  die zugehörige Ableitung ist. Die Berechnung der Ableitung beruht dabei auf der Kettenregel (vgl. Griewank, 2000), einem wichtigen und grundlegenden Resultat aus dem Gebiet der Differentialrechnung.

Anhand eines einfachen Beispiels ist das Vorgehen und die Anwendung des AD Tools erläutert. Mittels eines *Konstruktors* wird bei einem Aufruf

```
obj = AD(x, y)
```

ein Objekt des neuen Datentyps, hier `AD`, erzeugt. Dieser besteht im Gegensatz zu Typen wie `double` aus zwei Variablen, und zwar aus dem Funktionswert `val` und der Ableitung `deriv`. Dabei ist  $x \in \mathbb{R}$  der beliebige Funktionswert, an dem eine Funktion ausgewertet werden soll und  $y \in \mathbb{R}^n$  die sogenannte *Seed-Matrix* welche aus 0en und 1en besteht und die Richtung der Ableitung angibt. Ist nun eine Funktion gegeben, hier sei das der Einfachheit halber die Addition zweier Zahlen `a` und `b`, so sieht die Anwendung von `AD` folgendermaßen aus. Der Aufruf der Funktion

```
function y = add(a,b)
    y = a + b
end ,
```

der für zum Beispiel einen Datentyp `double` die Summe der Zahlen `a` und `b` ausgibt

```
> y = add(2,4)
    y = 6 ,
```

liefert unter Verwendung von Objekten des `AD` Typs

```
> y = add(AD(2, [1]), AD(4, [1]))
y =
  | v: 6 d: 2 | .
```

Hierbei sind `AD(2, [1])` und `AD(4, [1])` zwei Objekte vom Typ `AD` mit Funktionswerten `val = 2` bzw. `4` und jeweils einer Seed-Matrix `deriv = 1`. Das Ergebnis besteht dann zum einen aus dem Funktionswert `v: 6` und zum anderen die Ableitung `d: 2` der Funktion `add` in dem Tupel `(2,4)`.

Damit dies funktioniert müssen wie gesagt die elementaren Operatoren überladen sein. Dies kann für die in obigem einfachen Beispiel notwendige Funktion `plus` folgendermaßen aussehen.

```
function y = plus(a,b)
    val = value(a) + value(b);
    deriv = derivate(a) + derivate(b);
    y = AD(val, der);
end
```

Neben einfachen Funktionen wie der hier vorgestellten Addition zweier Zahlen, kann das entwickelte AD Tool `AD` aber auch für weit komplexere Funktionen eine exakte Ableitung berechnen. Voraussetzung ist nur, dass der Quellcode der Funktion vorliegt und eine hinreichende Differenzierbarkeit der Funktion gewährleistet ist.



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Konzentration wichtiger langlebiger Treibhausgase in der Atmosphäre über die letzten 2000 Jahre. Quelle: <a href="http://ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar4/wg1/ar4-wg1-chapter2.pdf">ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar4/wg1/ar4-wg1-chapter2.pdf</a> . . . . .	1
3.1	Schema der Stickstoffflüsse in Modell MIN zwischen den Komponenten Nährstoffe (N), Phytoplankton (P), Zooplankton (Z) und Detritus (D), deren Konzentration gegeben ist in $\text{mmol N m}^{-3}$ . Pfeile zeigen den durch die entsprechenden Parameter gesteuerten Massenfluss (vgl. Tabelle 3.1).	18
3.2	Lösung des NPZD Modells (durchgezogene Linien) unter Verwendung des initialen Parametervektors $u_b$ (oben) und des optimierten Vektors $u_{lsq}$ (unten) für eine Optimierung über $t = [733, 1098]$ und unter Verwendung der Kostenfunktion $F(N, P)$ . Entsprechendfarbige Kreise stellen die zugehörigen Observations dar. . . . .	23
3.3	Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells zur Mesokosmenstudie für verschiedene Kostenfunktionen, und zwar $F(N, P, Z, D)$ (oben), $F(N, P, Z)$ (mitte) und $F(N, P)$ (unten). Die großen Grafiken zeigen die modellierten Größen $N, P, Z$ und $D$ , sowie die Vergleichsgröße $PON = P + Z + D$ und die Gesamtmasse im System, bezeichnet mit $total$ . Die kleinen Grafiken zeigen die Größen $N, P$ und $Z$ in Detail. Kreise stellen die entsprechenden Observations dar. . . . .	28
3.4	Fortsetzung Abb. 3.3. Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells zur Mesokosmenstudie für verschiedene Kostenfunktionen, und zwar $F(P)$ (oben) und $F(N)$ (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.3. . . . .	29
3.5	Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells unter Verwendung eines Zeitversatzes $\tau$ (in Stunden), initialisiert mit $u_d$ , für $\tau = 0$ (oben), $\tau = 24$ (mitte) und $\tau = 240$ (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.3. . . . .	34

3.6	Fortsetzung Abb. 3.5. Optimierte Lösungen (durchgezogene Linien) des NPZD Modells unter Verwendung eines Zeitversatzes $\tau = 480$ (in Stunden) für Initialisierung mit $u_d$ (oben) und Initialisierung mit $u_m$ (unten). Grafiken und Beschriftungen wie in Abbildung 3.5. . . . . .	35
4.1	Schema der Modelle LLM, LQM (links) und QQM (rechts). Beschreibungen wie in Abbildung 3.1. . . . . .	38
5.1	Lösung des NPZD Modells (durchgezogene Linien) für 3 Modelljahre unter Verwendung der optimierten Parametersätze $u_{lsq1}$ (oben), $u_{lsq2}$ (mitte) und $u_{lsq3}$ (unten) (vgl. Tabelle 3.2). Entsprechendfarbige Kreise stellen die zugehörigen Observationen dar. Die Parametersätze sind erhalten unter Verwendung der Routine <code>lsqnonlin</code> . . . . . .	92

# Tabellenverzeichnis

3.1	Einheiten, relevante Bereiche und Definitionen der Modellparameter für Modell MIN (dieses Kapitel) sowie für die Modelle LLM, LQM und QQM (Kapitel 4). . . . .	19
3.2	Ergebnisse der Parameteroptimierung (BATS), Parametervektoren und verbundene Kosten. Links: Initialer Parametervektor $u_b$ und optimierter Vektor $u_{lsq}$ (vgl. Abb. 3.2). Rechts: Optimierte Parametersätze bei alternativer Initialisierung. . . . .	24
3.3	Ergebnisse der Parameteroptimierung (AQUASHIFT), Parametervektoren und verbundene Kosten. Initialer Parametervektor $u_m$ , sowie optimierte Vektoren $u_x$ , $x \in \{(N, P, Z, D), (N, P, Z), (N, P), P, N\}$ unter Verwendung der Kostenfunktion $F(x)$ . . . . .	27
3.4	Ergebnisse der Parameteroptimierung unter Verwendung eines Zeitversatzes (AQUASHIFT), Parametervektoren und verbundene Kosten. Initialer Parametervektor $u_d$ sowie optimierte Vektoren $u_\tau$ für einen verwendeten Zeitversatz $\tau \in \{0, 1, 240, 480\}$ (in Stunden). Kostenfunktion ist $F(N, P, Z, D)$ . . . . .	33
4.1	Klassifikation der stationären Lösungen von Modell LLM in Abhängigkeit kritischer Parameterkonstellationen. Gegeben sind Lösungen, die unter den gegebenen Umständen stabil sein können. '·' existiert nicht für $S > 0$ . . . . .	45



# Literaturverzeichnis

- Alt, W. (2002). *Nichtlineare Optimierung: Eine Einführung in Theorie, Verfahren und Anwendung*, Vieweg.
- Aulbach, B. (2010). *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Spektrum.
- Avila-Vales, E., Estrella, A. G. and Hernandez-Pinzon, J. A. (2008). Asymptotic behavior of a delay predator-prey system with stage structure and variable coefficients, *Electronic Journal of Differential Equations*, Vol. 140.
- Denman, K. L. and Peña, M. A. (1999). A coupled 1-D biological / physical model of the northeast subarctic Pacific Ocean with iron limitation, *Deep Sea Research II*, Vol. 46, pp. 2877–2908.
- Deuffhard, P. and Bornemann, F. (2008). *Numerische Mathematik 2 - Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Walter de Gruyter.
- Duplisea, D. E. (2000). The ecological hierarchy, model complexity, predictive ability and robust management., *Report on the Young Scientists Conference on Marine Ecosystem Perspectives, ICES Cooperative Research Report No. 240*, pp. 59–60.
- Evans, G. T. and Parslow, J. S. (1985). A model of annual plankton cycles, *Biological Oceanography*, Vol. 3, pp. 328–347.
- Fasham, M. J. R. (1995). Variations in the seasonal cycle of biological production in subarctic oceans: A model sensitivity analysis, *Deep Sea Research I*, Vol. 42, pp. 1111–1149.
- Fennel, K., Losch, M., Schröter, J. and Wenzel, M. (2001). Testing a marine ecosystem model: sensitivity analysis and parameter optimization, *Journal of Marine Research*, Vol. 28, pp. 45–63.
- Fennel, W. and Neumann, T. e. (2004). *Introduction to the modelling of marine ecosystems (Elsevier oceanography series)*, Vol. 72, Elsevier.

- Forster, P., Ramaswamy, V., Artaxo, P., Berntsen, T., Betts, R., Fahey, D. W., Haywood, J., Lean, J., Lowe, D. C., Myhre, G., Nganga, J., Prinn, R., Raga, G., Schulz, M. and Van Dorland, R. (2007). Changes in Atmospheric Constituents and in Radiative Forcing, *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Fulton, E. A., Smith, A. D. M. and Johnson, C. R. (2003). Effect of complexity on marine ecosystem models, *Marine Ecological Progress Series*, Vol. 253, pp. 1–16.
- Griewank, A. (2000). *Evaluating Derivatives - Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*, Siam.
- Hanson, R. B., Ducklow, H. W. and Field, J. G. e. (2000). *The Changing Ocean Carbon Cycle: A Midterm Synthesis of the Joint Global Ocean Flux Study*, Cambridge University Press.
- Kriest, I., Khatiwala, S. and Oschlies, A. (2010). Towards an assessment of simple global marine biogeochemical models of different complexity, *Progress in Oceanography*, Vol. 86, pp. 337–360.
- Löptien, U. (2011). Steady states and sensitivities of commonly used pelagic ecosystem model components, *Ecological Modelling*, Vol. 222, pp. 1376–1386.
- Metz, B., Davidson, O., de Coninck, H., Loos, M. and Meyer, L. E. (2005). *IPCC special report on carbon dioxide capture and storage*, Cambridge University Press, New York, NY, US.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*, Springer.
- Oschlies, A. and Garçon, V. (1999). An eddy-permitting coupled physical-biological model of the North Atlantic. 1. Sensitivity to advection numerics and mixed layer physics, *Global Biogeochemical Cycles*, Vol. 13, pp. 135–160.
- Prieß, M. (2012). Surrogate-Based Optimization for Marine Ecosystem Models. Dissertation.
- Rückelt, J., Sauerland, V., Slawig, T., Srivastav, A., B., W. and Patvardhan, C. (2010). Parameter optimization and uncertainty analysis in a model of oceanic CO<sub>2</sub> uptake using a hybrid algorithm and algorithmic differentiation, *Nonlinear Analalysis: Real World Applications*, Vol. 11, pp. 3993–4009.

- Schartau, M. and Oschlies, A. (2003). Simultaneous data-based optimization of a 1d-ecosystem model at three locations in the north atlantic: Part I - method and parameter estimates, *Journal of Marine Research*, Vol. 61, pp. 765–793.
- Schartau, M., Oschlies, A. and Willebrand, J. (2001). Parameter estimates of a zero-dimensional ecosystem model applying the adjoint method, *Deep Sea Research II*, Vol. 48, pp. 1769–1800.
- Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Chen, Z., Marquis, M., Averyt, K., Tignor, M. and Miller, H. E. (2007). *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change.*, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Sommer, U. and Lengfellner, K. (2008). Climate change and the timing, magnitude, and composition of the phytoplankton spring bloom, *Global Change Biology*, Vol. 14, pp. 1199–1208.
- Walter, W. (1993). *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Springer.
- Williams, R. G. and Follows, M. J. (2011). *Ocean Dynamics and the Carbon Cycle: Principles and Mechanisms*, Cambridge University Press.
- Wohlers, J., Engel, A., Zöllner, E., Breithaupt, P., Jürgens, K., Hoppe, H., Sommer, U. and Riebesell, U. (2009). Changes in biogenic carbon flow in response to sea surface warming, Vol. 106, pp. 7067–7072.
- Xu, C. and Li, P. (2012). Dynamical Analysis in a Delayed Predator-Prey Model with Two Delays, *Discrete Dynamics in Nature and Society*, Vol. 2012, pp. 2877–2908.
- Zhao, M. (2011). Multiple periodic solution of a multi-delay predator-prey system with non-monotonic functional response, *Information and Computing (ICIC)*, 2011 Fourth International Conference on, pp. 400–403.





## Danksagung

Bedanken möchte mich in erster Linie bei meinen beiden Betreuern, Prof. Dr. Thomas Slawig und Prof. Dr. Andreas Oschlies. Sie standen mir stets mit Rat zur Seite, hatten wertvolle Ideen, ließen mir gleichzeitig aber auch die Freiheit, eigene Ideen zu entwickeln und diese umzusetzen. Wie meine beiden Betreuer sorgte meine Arbeitsgruppe stets für ein sehr angenehmes Arbeitsumfeld, wofür ich allen sehr dankbar bin. Besonders danken möchte ich Jarek und Joscha, aber auch Willi Burmeister und Peter Pichol, die mich stets mit Geduld unterstützen, wenn der Rechner und ich mal wieder keine Freunde waren.

Ein herzlicher Dank geht auch an all meine Freunde, die die letzten Jahre so schön und abwechslungsreich haben sein lassen wie sie waren und die mich stets für meine Arbeit motivierten und mich unterstützten. Besonderer Dank gilt dabei meiner guten Freundin Franziska, die mich aufmunterte, wenn es mal nicht ganz rund lief und die auf auftauchende sprachliche Fragen im Verlauf meiner Arbeit immer eine Antwort wusste. Ebenso danke ich der Mensa Crew für die immer lustigen und motivierenden Mittagspausen. In dem Zuge möchte ich auch allen Korrekturlesern danken, die sich im Verlauf meiner Arbeit das ein oder andere, mal mehr, mal weniger fertige Manuskript angeschaut haben: Franziska, Jarek, Johannes, meinen zwei Annas und meinen Eltern sowie meinem Bruder.

Zu guter letzt geht ein ganz herzlicher Dank an meine Familie. Ohne meine Eltern wäre sowieso all dies nicht möglich gewesen und meinem Bruder verdanke ich viel von meinem heutigen biologischen Verständnis, welches für die Entwicklung dieser Arbeit grundlegend war. Für all das danke ich allen ganz herzlich!



## Erklärung

Hiermit bestätige ich,

1. dass die vorliegende Abhandlung nach Inhalt und Form meine eigene Arbeit ist,
2. dass die vorliegende Arbeit weder in gleicher noch ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde zuvor vorgelegen hat und
3. dass diese Arbeit unter Einhaltung der Regeln guter wissenschaftlicher Praxis der Deutschen Forschungsgemeinschaft entstanden ist.

Ferner erkläre ich, dass Teile dieser Arbeit bereits an anderer Stelle veröffentlicht bzw. zur Veröffentlichung eingereicht sind. Im Detail sind das

- Theoretical analysis and optimization of nonlinear ODE systems for marine ecosystem models, in: *System Modelling and Optimization*, 501-510 (2013)
- Internal dynamics of NPZD type ecosystem models, in: *Ecological Modelling*, 254, 33-42 (2013)
- Impact of parameter choice on the dynamics of marine ecosystem models in: *Ecological Modelling* (eingereicht)