

COMPUTERSIMULATIONEN - NEUE INSTRUMENTE DER WISSENSPRODUKTION

Transdisziplinarität und Heterogenität der Computational Science

Expertise im Rahmen des Themenfelds „Politik, Wissenschaft und Gesellschaft“ zum Themenbereich „Neue Formen der Wissensproduktion“

Eingereicht von

Dr. Gabriele Gramelsberger, Berlin

Mit Unterstützung von

Prof. Dr. Sybille Krämer und Prof. Dr. Jochen Brüning

Helmholtz-Zentrum für Kulturtechnik

Unter den Linden 6

10117 Berlin

1. EINLEITUNG	2
<i>Einsatz von Computern im Wissenschaftsalltag</i>	
2. SIMULATION ALS DRITTER WEG DER WISSENSCHAFTEN	
<i>Wandel der Arbeitsweise und Funktion der Wissenschaften aus Sicht der Computational Science</i>	
2.1 Zusammenfassung	4
2.2 Scientific Computing	5
2.3 Anwendungsfelder und Simulationsarten	8
2.4 Trace - Ein Beispiel aus der Geologie	12
2.5 Grenzen und Möglichkeiten der Computersimulation	13
2.6 Interdisziplinäre Ausbildung und Forschungslandschaft	18
2.7 Simulation als Produkt	21
2.8 Visualität als dominanter Faktor	22
2.9 Fazit: Wandel der Arbeitsweise und Funktion der Wissenschaften	25
3. SIMULATIONEN AN DER SCHNITTSTELLE ZWISCHEN MODE I UND II	
<i>Wandel der Wissenschaften im Übergang von Mode I in Mode II</i>	
3.1 Zusammenfassung	31
3.2 Veränderte Situation der Wissenschaften - Mode II	32
3.3 Semiotisierung der Wissenschaften	33
3.4 Simulationen als neue Formen der Wissensproduktion	35
3.5 Fazit: Simulationen an der Schnittstelle zwischen Mode I und II	39
4. FAZIT	
4.1 Relevante Themenfelder und Fragestellungen	41
4.2 Stand der Forschung	42

1. EINLEITUNG

Einsatz von Computern im Wissenschaftsalltag

Computer sind logische Maschinen, Number Cruncher, vernetzte Kommunikationsmedien, Simulationsapparate, multimediale Instrumente und vieles mehr. Von Supercomputern bis zu Bauteilen in Messapparaturen, von PCs bis zu verteilten Clustern sind alle erdenklichen Typen und Konstellationen in den Labors und Instituten zu finden. Sie werden in ebenso vielfältiger Form in den Wissenschaften verwendet wie sie Eigenschaften und Projektionen auf sich vereinen. Im Laufe der letzten fünfzig Jahre wurden Computer nicht nur von den Wissenschaften weiterentwickelt, sondern als das grundlegende Arbeitsinstrument in den wissenschaftlichen Alltag integriert. Dabei verändern sie mit ihrer zunehmenden Verwendung wissenschaftliche Arbeits- und Kommunikationsweisen: Wissenschaftliches Rechnen und Messen, wissenschaftliches Auswerten und Interpretieren, wissenschaftliches Publizieren und Archivieren.

Die Überführung ins Digitale sorgt nicht nur für ein einheitliches Format, sondern konstituiert das grundlegende Leitbild moderner Wissenschaft und ihrer Arbeitsweisen: Das Generieren und Verarbeiten von Daten als Material der Forschung. Die zunehmenden Verarbeitungs- und Speicherpotentiale erlauben es, die wissenschaftlichen Materialien - quantitative wie qualitative Daten - in immer größeren Massen zu erzeugen und zu bearbeiten. Die Frage, ob mehr Daten auch mehr Information und mehr Informationen mehr Wissen bedeutet, sei dahingestellt. Sicher lässt sich jedoch davon ausgehen, dass einige Aufgaben, die den Rechnern überantwortet werden durch ihre Leistungsfähigkeit neue Dimensionen erlangen und dass es Bereiche gibt, in welchen die wachsende Quantität einen qualitativen Niederschlag erzeugt.

Die vorliegende Expertise versucht mit dem Thema der Computersimulation einen Beitrag zum Wandel der Wissenschaften zu geben. Mit der Etablierung der Computational Science und ihres Forschungsinstruments der Computersimulation entsteht nicht nur, neben Theorie und Experiment, ein dritter Weg der Wissenschaften mit einer interdisziplinären Forschungslandschaft, sondern mit der Visualisierung der enormen Datenmengen erhält eine Bildlichkeit Einzug in die Wissenschaften wie nie zuvor. Gerade die Visualität aber auch die Anwendungsorientierung der Simulationen prädestinieren die Computersimulation zu einem wichtigen Vermittlungsinstrument zwischen Wissenschaft, Gesellschaft, Wirtschaft und Politik. Dabei ist darauf hinzuweisen, dass nicht zuletzt die sozialwissenschaftlichen Simulationen des Club of Rome in den 70er Jahren die soziale Aufmerksamkeit und heute

selbstverständliche Sensitivität der Gesellschaft gegenüber Wissenschaftsthemen hervorbrachten. Mittlerweile ist die mediale Wirkung der animierten Simulationsbilder unübersehbar und nahezu in jeder der zahlreichen Wissenschaftssendungen gehören Simulationen zum Erklärungsinstrumentarium wissenschaftlicher Themen.

Doch Simulationen leisten einiges mehr. Zum einen eröffnen sie einen Zugang zu Bereichen, die für herkömmliche Experimente zu klein oder zu groß, zu schnell oder zu langsam, zu gefährlich oder zu teuer sind. Zum anderen werden Simulationsprogramme für spezifische Problemstellungen in der Wirtschaft wie in der Verwaltung genutzt und stellen ein marktwirtschaftliches Produkt der Wissenschaften dar. Dabei zeichnet sich ein wachsendes Marktpotential ab. Durch die steigenden Rechen- und Visualisierungskapazitäten integrieren Simulationen mehr und mehr kontextsensitive Faktoren für anwendungsorientierte Problemstellungen und machen diese anschaulich.

Bisher ist der Versuch einer wissenschaftstheoretischen Rekonstruktion der Computersimulation als neues Instrument der Wissensproduktion sowie einer wissenschaftssoziologischen Studie der Computational Science noch kaum unternommen worden.¹ Die vorliegende Expertise stellt daher einen ersten Überblick zum Thema *Scientific Computing* dar, in der Hoffnung, Computersimulationen im Themenfeld „(Neue) Formen der Wissensproduktion“ als lohnende Objekte aktueller Forschung zu etablieren. Ziel ist es, das weite Feld der Computersimulation zu skizzieren und relevante Themenfelder für weitere Projekte zu identifizieren.

¹ Die Expertise basiert auf theoretischen Arbeiten der Autorin sowie auf einer Reihe von Interviews, die zwischen 1995 und 1999 mit Wissenschaftlern folgender Einrichtungen geführt wurden: Forschungszentrum Jülich, Forschungszentrum Karlsruhe, Fraunhofer-Institut für Graphische Datenverarbeitung Darmstadt, Max-Planck-Institut für Hirnforschung Frankfurt, Max-Planck-Institut für extraterrestrische Physik Garching, TH Darmstadt, TU Berlin, Universität Augsburg.

2. SIMULATION ALS DRITTER WEG DER WISSENSCHAFTEN

Wandel der Arbeitsweise und Funktion der Wissenschaften aus Sicht der Computational Science

2.1. Zusammenfassung

Seit den 60er Jahren setzt sich in den Wissenschaften die numerische Simulation als neues Instrument der Erkenntnisgewinnung durch. Wissenschaftliches Rechnen (Scientific Computing) erfordert einerseits die interdisziplinäre Zusammenarbeit von Mathematik, Informatik und der jeweiligen Anwenderdisziplin, andererseits entsprechende Rechnerkapazitäten wie sie in den Rechenzentren der Universitäten und Forschungsinstitutionen zur Verfügung stehen. Die Entwicklung von seriellen Rechnern, Vektorrechnern und schließlich Parallelrechnern spielt für das Scientific Computing eine ebenso große Rolle, wie die Entwicklung leistungsfähiger Algorithmen. Computergestützte Simulationen lassen sich in einer ersten Verortung als numerische Lösungen formalisierter Theorien (theory-as-program) und/oder als numerische Computerexperimente beschreiben. Die Steigerung der Verarbeitungskapazitäten erlaubt es, zunehmend komplexere Simulationen durchzuführen, die die Hoffnung nähren, die modellierten Phänomene *realitätsnah* darstellen zu können. Damit verbunden ist ein entsprechender Anspruch bezüglich der Leistungsfähigkeit computergestützter Wissenschaften, den es kritisch zu hinterfragen gilt.

Der vorliegende Abschnitt skizziert die Entwicklung, Verwendung und Institutionalisierung der Computersimulation und diskutiert ihre Möglichkeiten und Grenzen. Die Relevanz der Thematik ergibt sich aus der zunehmenden Verwendung computergestützter Simulationen als Mittel wissenschaftlicher Erkenntnisgewinnung. Dies führt zur Frage, welche Art des *Verstehens* mit diesen Instrumenten möglich ist. Schließlich wird die These eines *Funktionswandels* der Wissenschaften formuliert, der (auch) auf dem Wandel der *Arbeitsweise* durch den Einsatz von Rechnern beruht, und der sich in der Abhängigkeit von entsprechend notwendigen Rechnerkapazitäten zeigt.

2.2 Computational Science

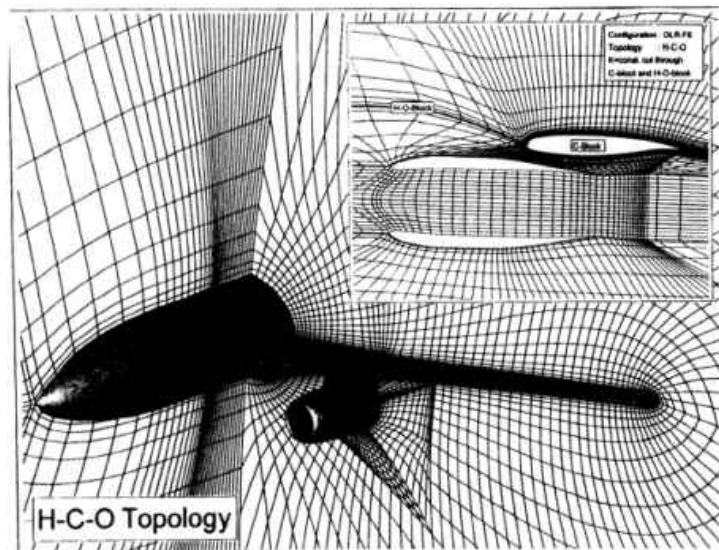
Der Vorteil computergestützter Simulationen liegt auf der Hand. Statt wie noch in den 70er Jahren Modelle aus Draht und Plastik zu bauen, um sich ein Bild über ein Prozessgeschehen anhand simultaner Beobachtungen mehrerer Variablen zu machen, schreibt man nun ein Computerprogramm, das auf Basis formalisierter Gesetze das Prozessgeschehen für einen ausgewählten Parameterbereich simuliert. Für die Simulation eines Unwetters beispielsweise, basierend auf den Gleichungen kompressibler Gasströme und der Phasengesetze von Wasser, berechnet der Computer das Verhalten von Wasser und Gas für verschiedene Variablen wie Luftdruck, Windgeschwindigkeit oder Temperatur für aufeinanderfolgende Zeitpunkte innerhalb eines definierten Berechnungsrasters. Die graphische Umsetzung der berechneten Werte erzeugt einzelne *Bilder*, die durch Aneinanderreihung einen animierten Ablauf des Prozessgeschehens geben. Statt eines statischen Drahtmodells zur Fixierung einiger Schritte der Prozessdynamik, erlauben computergestützte Simulationen komplexere Prozesse detaillierter und umfangreicher in Bildern darzustellen, deren schnelle Abfolge den Eindruck eines kontinuierlichen Prozessgeschehens vermitteln.

Vorleistungen: Modell, Algorithmus, Programm

Um Prozesse mit Hilfe von Rechnern zu simulieren, bedarf es zahlreicher Vorleistungen. Mathematische Modellierung, wissenschaftliche Berechnung (Scientific Computing) und Visualisierung (Scientific Visualization) sind Disziplinen der Angewandten Mathematik, die für die Erstellung einer Computersimulation von Nöten sind. Mathematische Modelle - kontinuierliche Grundgleichungen zur Beschreibung von Prozessen - müssen computergerecht aufbereitet werden, d.h. sie werden als diskrete Gleichungen *simuliert*, indem sie auf einen Satz von Berechnungspunkten angewendet werden. Algorithmen geben dann Vorschriften an, um (näherungsweise) Lösungen für die vorgegebenen Punkte zu errechnen. Ein Raum-Zeit-Raster entsteht, innerhalb dessen sich die Simulation in Abhängigkeit von den Rand- und Anfangsbedingungen abspielt. Randbedingungen beschreiben die räumliche Ausdehnung des zu modellierenden Ausschnitts und des Verhaltens der Daten am Gitterrand,² Anfangsbedingungen bestimmen die Startwerte der Variablen. Da eine Simulation eine Approximation der exakten Lösung ist, bedarf es geeigneter Abbrückkriterien für die Berechnungen. Schließlich werden die Simulationsresultate visuell umgesetzt, um einen, für den menschlichen Betrachter zugänglichen Output zu schaffen. Am Ende des Scientific

² Beispielsweise definieren die Dirichletrandbedingungen feste Werte für die Randgitterpunkte, während die Neumannrandbedingungen die Normalableitung senkrecht zum Rand vorgeben.

Computing stehen Bilder abstrakter oder durch gestaltete Berechnungsgitter in Form gebrachter Prozesse, die zur Modellvalidierung, zur Überprüfung theoretischer Annahmen oder zur Prognose dienen. Die Arbeitsschritte umfassen in einem interdisziplinären Prozess ausgehend von der Modellierung, Diskretisierung und Implementierung, die Simulation, Visualisierung und schließlich Validierung.



1 Strukturiertes Simulationsgitter der Umgebung eines Flugzeugs, SCAI-Report 1998, S. 16

Interdisziplinarität als Praxis

Charakteristisch für die Realisierung von Computersimulationen ist die interdisziplinäre Zusammenarbeit der Anwenderdisziplinen mit der Angewandten Mathematik und der Informatik. Dabei liefert die Mathematik die numerischen Verfahren zur computergestützten Lösung der Modelle, während die Informatik für die Nutzbarmachung der verschiedenen Rechnerarchitekturen für die computergestützte Bearbeitung der Modelle durch effiziente Algorithmen und Programme verantwortlich ist. Die Anwenderdisziplin definiert den relevanten Kontext für das Modell und seine Simulation. Simulationen zur Optimierung technischer Anwendungen, zur Modellierung naturwissenschaftlicher oder sozialwissenschaftlicher Systeme und zur Untersuchung mathematischer Probleme markieren die wichtigsten Einsatzgebiete. Nutzer finden sich in der Vielteilchen- und Elementarteilchenphysik, Chemie, Strömungsforschung, Astrophysik, Nichtlinearen Dynamik und anderen Gebieten.³

³ Im Bericht des Höchstleistungsrechenzentrums von DESY, GMD, Forschungszentrum Jülich werden für die Jahre 1992 und 1993 81 Projekte aus der Vielteilchenphysik, 25 Projekte aus der Elementarteilchen-

Motivation der numerischen Simulation: Komplexität

Die Geschichte der Computersimulation beginnt mit dem Wunsch, komplexe Modelle einer wissenschaftlichen Erforschung zugänglich zu machen. John von Neumann präsentierte 1946 in seinem Positionspapier *On the Principles of Large Scale Computing Machines* sein Konzept einer numerischen Hydrodynamik, welche die Stagnation in der analytischen Behandlung nichtlinearer Probleme mit Hilfe der numerischen Methode des Digitalrechners zu überwinden suchte. Er entwickelte die Differenzenmethode für die numerische Simulation partieller Differentialgleichungen und schuf damit die erste Version einer computergestützten Simulation. Computersimulationen erlauben die Untersuchung von komplexen Systemen, für die kein analytisches Lösungsverfahren bekannt ist oder existiert. Damit erweitert sich das Instrumentarium zur Prozessbeschreibung erheblich, allerdings um den Preis exakter Lösungen an deren Stelle die Approximationen und Heuristiken der Simulation treten.

Die Von-Neumann-Methode lässt sich als mathematisches Verfahren beschreiben, das durch numerische Einsetzungen in die Variablen und Konstanten eines Gleichungssystems, dieses für spezifische Rand- und Anfangsbedingungen approximativ berechnet. Die Rand- und Anfangsbedingungen resultieren dabei aus ermittelten Messdaten oder aus theoretisch postulierten Werten. Da es sich einerseits mathematisch gesehen um Approximationen handelt, andererseits die formalen Modelle hypothetischen Charakter aufweisen, ist die Prognosekraft von Simulationen begrenzt. Dennoch setzen sich Computersimulationen zunehmend durch, da sie einen experimentellen Zugang zu Bereichen schaffen, die für herkömmliche Experimente zu groß oder zu klein, zu schnell oder zu langsam oder zu gefährlich sind.

Im Prinzip lassen sich numerische Simulationen auf dem Papier durchführen und für einfache Modelle und ein grobes Berechnungsraster ist dies auch in akzeptabler Zeit möglich.⁴ Doch für komplexere Modelle und feinere Berechnungsraster wird die Hilfe der Computer unabdingbar. Seit den letzten 40 Jahren hat sich die Rechengeschwindigkeit alle zehn Jahre um den Faktor 100 erhöht und heute werden rund 100 Milliarden Operationen in der Sekunde durchgeführt. In der Klimaforschung zeigt sich diese Leistungssteigerung, indem

physik, 38 Projekte aus der Chemie, 14 Projekte aus der Strömungsforschung, 11 Projekte der Nichtlinearen Dynamik, 14 Projekte aus der Astrophysik, 22 Projekte aus der Kernphysik, Geophysik/Meteorologie, Plasmaphysik und sonstiger Gebiete, aufgelistet. Kremer, M. (Hg.): Supercomputing Center'94, HLRZ Jülich, 1994

⁴ Neben dem numerischen Lösen von Gleichungen auf dem Papier werden seit Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts Differential Analyzer zur Gezeitenberechnung eingesetzt. Das sind mechanische Rechenmaschinen zur numerischen Simulation spezifischer Differentialgleichungen.

die Simulation von Klimaszenarien seit Ende der 70er Jahre weniger Berechnungszeit erfordern als die tatsächliche Wetterentwicklung selbst benötigt.⁵

Die Euphorie über die wachsenden Leistungskapazitäten und die damit verbundene Komplexitätssteigerung in der Modellierung führt zur Identifizierung von Problembereichen, die nun in den Bereich möglicher Handhabung rücken. *„Computational Science ist synonym mit der Untersuchung komplexer Systeme; ihr Instrument ist der Supercomputer, ihre Methode die Simulation. Ihr umfassender strategischer Ansatz lässt sich daher nur schwer mit dem deutschen Begriff des wissenschaftlichen Rechnens einfangen; sie zielt vielmehr auf die großen ungelösten wissenschaftlichen Probleme, die in ihrer Wichtigkeit und Tiefe nicht nur die betreffende wissenschaftliche Disziplin herausfordern, sondern von außerordentlicher Bedeutung und Auswirkung für die Gesellschaft und ihrer Bewältigung der Zukunft sind. Die Identifizierung solcher Probleme hat in den USA zur Klassifizierung als ‘Grand Challenges to Computational Science’ geführt, zu denen heute die Kernfragen aus den Gebieten der atmosphärischen Chemie (d.h. der Umweltforschung), der Astrophysik, der Materialforschung, der Molekularbiologie, der Elementarteilchenphysik und der Aerodynamik gezählt werden.“*⁶

2.3 Anwendungsfelder und Simulationsarten

Es gibt verschiedene Arten numerischer Simulationen wie deterministische, quantenmechanische, probabilistische und stochastische Simulationen, neuronale Netze und genetische Algorithmen als auch die unterschiedlichsten Anwendungsfelder in Wissenschaft, Industrie und Verwaltung: Strömungsdynamik, Molecular Modelling, Materialforschung,

⁵ Für eine Prognose müssen rund 250 Millionen unbekannte Zustandsgrößen wie Luftdruck, Windgeschwindigkeit, Temperatur u.a. auf Basis der Euler-Gleichungen, ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, von den Anfangswerten für den Zeitpunkt t_0 ausgehend berechnet werden. Dabei steht ein Berechnungsgitter zur Verfügung, dessen lokale Abstände zwischen den einzelnen Gitterpunkten am Äquator 120 km beträgt. Seit Ende der 90er Jahre konnte das Gitter auf einen Abstand von 60 km verfeinert werden. Dies wurde durch die Weiterentwicklung der Hardware möglich und durch die Parallelisierung der Rechenoperationen. Mit der Verfeinerung des Gitters erwartet man sich eine Erhöhung der Genauigkeit der Vorhersage und unter Umständen neue qualitative Aspekte: *„Die quantitative Steigerung der Rechnerleistung schlägt unter bestimmten Umständen in eine neue Qualität um und eröffnet Vorhersage- und Gestaltungsmöglichkeiten, die es vorher nicht gab.“* Trottenberg, U.: Quantensprünge in der Numerischen Simulation, in: Der GMD-Spiegel 4, 1998: S. 7

⁶ Hoßfeld, F.: ‘Grand Challenges’ - wie weit tragen die Antworten des Supercomputing?, KFA-ZAM-IB-9117, Forschungszentrum Jülich, 1991: S. 1

Ausbreitung von Schadstoffen, Optimierung der Logistik, Verkehrsplanung, Prüfung von Umweltvorgaben im Planungsbereich der Behörden u.v.m. Simulationsprogramme für spezifische Anwendungen stellen einen wachsenden Einsatzbereich wissenschaftlichen Wissens außerhalb der Wissenschaftsinstitutionen dar und sie sind ein marktfähiges Produkt der Wissenschaften.

Sozialwissenschaften: Quantitative und qualitative Simulationen

In den Blick der Öffentlichkeit rückten Computersimulationen erstmals mit den sozialwissenschaftlichen Simulationen der 70er Jahre. Die spektakulären Szenarien zu Fragen der Weltsituation sowie der aufkommende Planungswille in der Politik fanden in den beiden Studien des Club of Rome *Die Grenzen des Wachstums* (Forrester/Meadows) und *Menschheit am Wendepunkt* (Mesarovic/Pestel) ihren Ausdruck.⁷ Ziel war es, quantifizierbare Größen wie Rohstoffressourcen oder Energieverbrauch für die Zukunft anhand gegebener Gleichungssysteme zu berechnen. Doch bei aller Euphorie gegenüber den Möglichkeiten der neuen Methode zeigte sich schnell, dass Computersimulationen die Komplexität globaler Situationen stark vereinfachten und dass aufgrund der gesellschaftspolitischen Konsequenzen simulierter Szenarien und Planungsmodelle die neu entstandene Zukunftsforschung als *Wissenschaft des Überlebens*⁸ mit Vorsicht zu bewerten war. Man verwendete deterministische Simulation wie sie auch in der Physik genutzt werden. Doch für die Soziologie bedeutet es eine unnötige Einschränkung, denn: *„In vielen Sozialbereichen ist es nämlich weder möglich noch sinnvoll, soziale Beziehungen durch exakte Gleichungen darzustellen, und der „Sinn“ sozialer Interaktionen, wie immer man diesen bestimmen will, ist kaum als Realisation strenger mathematischer Zusammenhänge wiederzugeben.“*⁹

Es gibt jedoch weitere Simulationstechniken, die in den Sozialwissenschaften Anwendung finden, wie probabilistische und stochastische Simulationen oder Methoden aus den Bereichen der Künstlichen Intelligenz (KI) und des Künstlichen Lebens (KL), die *qualitative For-*

⁷ Forrester, J.: *World Dynamics*, Cambridge Mass. 1973. Für die zweite Studie schufen Mihailo Mesarovic und Eduard Pestel mit dem Modellierungsprogramm MODEL BUILDER ein komplexes Mehrebenenmodell. Mesarovic, M./Pestel, E.: *Menschheit am Wendepunkt*. 2. Bericht an den Club of Rome zur Weltlage, Stuttgart 1974; Pestel, E.: *Das Deutschland-Modell. Herausforderungen auf dem Weg ins 21. Jahrhundert*, Stuttgart 1978. Vrgl. Harbrodt, S.: *Computersimulation in den Sozialwissenschaften*, Reinbek bei Hamburg, 1974: S. 144ff

⁸ „... um mit Hilfe der neuen Methoden der permanenten Überschau und Vorausschau ... die immer komplexeren und krisenbedrohlicheren Entwicklungen der nächsten Jahrzehnte [zu] meistern.“ Jungk, R.: *Menschen im Jahr 2000*, Frankfurt, 1969: S. 10. Ein konkretes Beispiel ist das PLATO-System (Programmed Logic for Automated Teaching Operations) für das DELPHI Spielprogramm, das Mitte der 60er Jahre entwickelt wurde.

⁹ Klüver, J.: *Soziologie als Computereperiment*, Braunschweig-Wiesbaden, 1995: S.15

malismen ermöglichen. Angelehnt an die Kognitionswissenschaften nutzt man in der Soziologie mit Hilfe der KI-Sprachen LISP und PROLOG Systeme, die auf 'intelligenten' Bewusstseinsoperationen basieren (Expertensysteme) oder auf Elementen des KL wie neuronale Netze, Zellularautomaten oder genetische Algorithmen. Neuronale Netze lassen sich beispielsweise zur Modellierung von Übergangsgesellschaften verwenden, Zellularautomaten zur Simulation theoretischer Annahmen über des Interaktionsverhalten verschiedener Gesellschaftsklassen und genetische Algorithmen zur selektiven Konkurrenz von Theorien nach der These von Thomas Kuhn. Bei diesen Techniken stehen weniger die Prognose- und Planungszwecke im Vordergrund als vielmehr der Verstehensprozess dynamischen Systemverhaltens.

Chemie: Quantenmechanische Simulationen

Andere Schwerpunkte des Simulierens setzt die Chemie, die über die numerischen Daten der Berechnung chemischer Eigenschaften hinaus, qualitative Informationen aus der graphischen Symbolik der chemischen Strukturformeln gewinnt. Die Visualisierung erhält daher neben der Berechnung eine entscheidende Bedeutung. Die Darstellung von Molekülen – früher mit geometrisch-mechanischen Modellen wie Strichformel, Kugelstab- oder Kalottenmodell – wird nun mit Hilfe des Molecular Modelling zu einer berechneten Graphik, die es ermöglicht, anhand der simulierten Moleküle neue Eigenschaften visuell zu identifizieren und die Synthese von Molekülen am Bildschirm planbar zu machen.¹⁰ Aufwendige Bildtechniken erlauben die interaktive Stereo-3D Darstellung der Moleküle, die dem Forscher plastisch vor Augen stehen und die er ähnlich realen Objekten in jede beliebige Richtung drehen kann. Damit erhält er Einblicke in die unsichtbare Welt molekularer Szenarien.¹¹

¹⁰ Während die geometrisch-mechanischen Modelle nur zu rein didaktischen Zwecken verwendbar sind, „... kann die computergestützte Modellierung die Sichtweise des Chemikers und die Forschungsentwicklung der Chemie verändern. ... Das computergestützte Design ermöglicht die Voraussage von Experimenten und verbessert damit die Effizienz des Entdeckungsprozesses in der chemischen Forschung und des Produktionsprozesses in der chemischen Industrie.“ Mainzer, K.: Chemie, Computer und moderne Welt, in: Mittelstraß, J./Stock, G. (Hg.): Chemie und Geisteswissenschaften, Berlin, 1992: S. 119. Vrgl. auch Kaufmann, W./Smarr, L.: Simulierte Welten. Moleküle und Gewitter aus dem Computer, Heidelberg u.a 1994; Horwood, N. (Hg.): Mathematical and Computational Concepts in Chemistry, Chichester 1986; Brickmann, J.: Fraktale Dimension in der Chemie, in: Gerok, W. et al. (Hg.): Ordnung und Chaos in der unbelebten und belebten Natur, Stuttgart 1988; Brickmann, J./Knapp, W.: Der Computer ersetzt das Labor, in: Bild der Wissenschaft 3/1984

Physik: Deterministische Simulationen

In der Physik finden sich deterministische Simulationen komplexer Systeme in Raum und Zeit auf Basis partieller Differentialgleichungen, beispielsweise in der Strömungsdynamik mit den Erhaltungsgleichungen (Euler-Gleichungen oder Navier-Stokes-Gleichungen).¹² Die numerische Simulation bietet neben dem rein analytischen Lösungsweg eine Alternative an, die für den Bereich der nichtlinearen Differentialgleichungen von Interesse ist. Im Unterschied zum Formalismus der exakten analytischen Lösungen arbeitet die Simulation mit Approximationen und im nichtlinearen Bereich mit Heuristiken, d.h. sie ist keine exakte Methode und liefert unsichere Resultate, die durch Theorie oder Empirie bestätigt werden müssen. Prinzipiell bedarf eine gute Simulation einer ausreichenden empirischen Datenbasis und adäquater Beobachtungen bezüglich auftretender Muster, doch wird die Simulation auch dazu eingesetzt, teure Experimente und Beobachtungen zu ersetzen.

Industrie und Wirtschaft: Simulation als Dienstleistung und Produkt

Ein großer Anwendungsbereich der Simulation liegt in Industrie und Wirtschaft. In Zusammenarbeit mit Wissenschaftsinstitutionen in Form von Drittmittelprojekten oder im Verbund mit Ausgründungen aus wissenschaftlichen Institutionen etabliert sich die Computersimulation in vielen Domänen wie der Logistik, der Verkehrsregulierung, der Materialforschung oder der Biotechnologie, um nur einige zu nennen. Dabei handelt es sich je nach Anwendungsfeld um die gesamte Palette an Simulationsarten von der deterministischen bis hin zur probabilistischen Simulation, von Neuronalen Netzen bis hin zu genetischen Algorithmen. Als Tendenz lässt sich von einem verstärkten Einsatz von Simulationen in den nächsten Jahren ausgehen, da Simulationen zunehmend als gängige Instrumente der Wissensproduktion genutzt werden. Es entstehen umfangreiche Bibliotheken von Simulationsprogrammen und -tools, die Simulationen kostengünstiger als bisher gestalten. Hier etabliert sich mit dem Produkt der Simulation ein Wissens-Markt, den es näher zu untersuchen gilt, denn ein großer Teil der Simulationen bedarf keiner Großrechner wie sie in Rechenzentren großer Unternehmen oder Institutionen stehen, sondern kann auf PCs ausgeführt werden.

¹¹ Vgl. Brickmann, J.: Molecular graphics: how to see a molecular scenario with the eye of a molecule, in: J. Chem. Phys. 89/1992

¹² Populär wurden manche Effekte der nichtlinearen Dynamik komplexer Systeme in den 80er Jahren unter dem Begriff der Chaosforschung.

2.4. TRACE - Ein Beispiel aus der Geologie

Um einen Eindruck der Verwendung von Computersimulationen im Wissenschaftsalltag zu geben, wird die Simulation der Projektgruppe *Verhalten von Schadstoffen in geologischen Systemen* des Instituts für Erdöl und Organische Chemie (ICG-4) im Forschungszentrum Jülich von Harry Vereecken und Kollegen kurz vorgestellt. Grundlage für die 3D-Simulation ist das mathematische Modell, wie es im Forschungsbericht der Gruppe vom August 1994 beschrieben ist.¹³

Ein Ausschnitt eines, im Rahmen der Studie im Dezember 1995 geführten und mit eigenen Worten zusammengefassten Interviews, beschreibt eine typische Simulationssituation:

„Diese [Trace] 3D-Simulation befindet sich gerade im Aufbau. Die ersten Modellgleichungen sind geschrieben und werden programmiert. Momentan wird an der Parallelisierung gearbeitet, insofern ist die Visualisierung noch nicht erfolgt. Das Modell besteht aus zwei Differentialgleichungen, eine für die Wasserströmung und eine für den Transport gelöster Verbindungen. Die Simulation arbeitet mit dem Finite Elemente Verfahren. Es werden viele Berechnungspunkte benötigt und es ist noch nicht klar, wievieler Iterationen (Abbruch) es bedarf. Zur Lösung der Differentialgleichungen wird das Schwarz-Verfahren (dt. Mathematiker) genommen und für Parallelrechner umgeschrieben. Da die vorhandenen Tools für die Parallelisierung oder Vektorisierung nicht optimal sind, wird dies selbst programmiert und benötigt bereits ein Jahr Arbeitszeit.“¹⁴ ...

In den Geowissenschaften sind Experimente nicht wiederholbar und sehr aufwendig bzw. teuer. Beispielsweise belaufen sich die Kosten für ein Gelände mit 64 Bohrungen auf rund 2 Mio. DM und die Auslegung erstreckt sich nur auf 100 Meter (z.B. Verfolgung der Schad-

¹³ „The model solves the generalized Richard's equation for water flow and the advective-dispersive equation for solute flow. The flow equation can handle sink/source terms (e.g. plant water uptake, pumping activity) and accounts for hysteretic effects in the moisture retention characteristic (four different models are included). Galerkin's finite element method is used to solve the water and transport equation. The nonlinear matrix equation is solved using Picard's iteration method. A Conjugate gradient technique with preconditioning is used to solve the linear system of equations arising from the discretization of the flow equation. Different equations are available to describe the moisture retention characteristic and the unsaturated hydraulic conductivity. Different boundary conditions can be imposed and real climate data can be used. The solute transport equation includes several adsorption isotherms (linear, Freundlich, Langmuir) and first order decay. The QMR method is used to solve the linear system of equation arising from the discretization of the transport equation. To handle large scale problems, the program can be run on computer systems with parallel architecture using a domain decomposition method (Vereecken et al., 1994).“ Vereecken, H. et al.: Trace A mathematical model for reactive transport in 3D variably saturated porous media, KFA/ICG-4 Internal Report No. 501494, Jülich, 1994: S. 4

stoffwolke). Eine Simulation hat hier enorme Vorteile! Eine Validierung in diesem komplexen Gebiet ist jedoch kaum möglich, denn es gibt zu viele Unbekannte, die nicht im Modell berücksichtigt werden können. Außerdem berechnet man Zustandsvariablen, während es sich in Wirklichkeit um Dynamiken handelt. Insofern kann man das Modell kaum validieren, sondern nur testen. Das Ziel ist es, Zusammenhänge zu verstehen und nicht Prognosen abzugeben. Aufgrund des Datenproblems und der Messungenauigkeiten gibt es wenig Kriterien, um festzustellen ob das Modell oder die Parameterwerte gut/schlecht sind. Während man in der Physik wohldefinierte Systeme untersucht, ist das hier nicht so. Exakte Voraussagen wird es nie geben, man kann höchstens die Fehlerschranken minimieren (Angaben +/- x). Aus diesen Gründen ist ein holistisches Modell, wie in der Weltklimafor-schung nicht erwünscht. Große Modelle bieten zwar viel Beschreibungen, aber wenig Berechnungen. ...¹⁵

2.5 Grenzen und Möglichkeiten der Computersimulation

Mit der Computersimulation bewegt sich die Wissenschaft auf unsicherem Gelände. Es handelt sich keineswegs um eine exakte Methode mit hinreichend genauen Prognosen, sondern um numerische Approximationen und Heuristiken. Darüberhinaus ist die Untersuchung komplexer Systeme mit Problemen behaftet, die zum einen in den Rechnern als endliche, diskret arbeitende Maschinen gründen, zum anderen in der Abstraktion mathematischer Modelle liegen. Die Endlichkeit der Rechenzeit zeigt sich in zweierlei Hinsicht. Auch wenn die aktuell verfügbaren Großrechner die Teraflop-Grenze überschreiten,¹⁶ gibt es Probleme, die zwar algorithmisch lösbar wären, jedoch nur exponentiell oder überexponentiell, und damit sowohl die physikalische Haltbarkeit der Maschine, als auch die Geduld des Wissenschaftlers überfordern würden. Insofern ist eine algorithmische Begrenzung gegeben, „...die typischerweise mit probabilistischen Verfahren (Monte-Carlo, Molecular-Dynamics) unter Inkaufnahme eines statistischen Fehlers umgangen ...“¹⁷ wird. Die Endlichkeit der Rechner betrifft jedoch nicht nur die Verarbeitungsmenge, sondern auch die

¹⁴ Basierend auf: Vereecken, H. et al.: A parallel Schwarz domain decomposition method for the numerical solution of transient water flow in heterogeneous porous media. Submitted to parallel computing, Forschungszentrum Jülich, 1994

¹⁵ Interview vom 4./5.12.1995 in: Gramelsberger, G.: Theorie - Simulation - Experiment, Magisterarbeit, Universität Augsburg, 1996

¹⁶ FLOPS (floating point operations per second) geben die Rechengeschwindigkeit an.

¹⁷ Müller-Krumbhaar, H.: Computersimulation in der Physik, Manuskript KFA Jülich 1989, S. 1.5

Darstellung der Zahlenwerte. Großrechner runden die eingesetzten Zahlenwerte für die Variablen in der Regel auf dreizehn Dezimalstellen hinter dem Komma. Diese Rundungen können in der Simulation zu erheblichen Fehlern führen.¹⁸ Hinzukommen weitere Fehlerquellen wie eine unadäquate Diskretisierung, ein falsch gewähltes Modell oder ein nicht wohldefiniertes Problem (z.B. Turbulenzmodell der Klimaforschung).

Problembereich: Diskretisierung

Um ein Gleichungssystem der diskreten Arbeitsweise der Rechner zugänglich zu machen, bedarf es der Diskretisierung von Raum und Zeit.¹⁹ Es gibt unterschiedliche Techniken der Diskretisierung,²⁰ die vom Umgang mit dem Berechnungsgitter abhängig sind. Dabei ist die typische Konsequenz der doppelten „...*Diskretisierung im Computer, also begrenzte Genauigkeit der Zahlendarstellung und begrenzte Genauigkeit des Punktegitters ...*“ zu beachten, die „...*nur in einem gewissen Intervall des Diskretisierungsparameters die Ergebnisse eine gewisse Genauigkeit erwarten lassen.*“²¹ In deterministischen Simulationen können daher Diskretisierungsfehler, Fehler aufgrund der Beschränktheit numerischer Zahlendarstellungen und numerische Instabilitäten aufgrund zu grober Diskretisierung auftreten.²² Hinzukommen Gitterartefakte durch fest vorgegebene oder periodische Randbedingungen, Gitterspiegelungen oder durch die spezifische Geometrie des Gitters. Welchen Einfluss die Verwendung verschiedener Berechnungsgitter sowie Algorithmen für die Qualität einer Simulation haben, illustrieren die Abbildungen des folgenden Beispiels der Simulation von Turbulenzen.²³

¹⁸ „Für gröbere Diskretisierung handelt man sich also einen Diskretisierungsfehler ein, für kleinere Diskretisierungen erhält man sehr plötzlich drastische Fehler wegen der Beschränktheit numerischer Zahlendarstellungen. Natürlich verbessert sich das Ergebnis bei höherer Genauigkeit der internen Zahlendarstellung entsprechend, das grundsätzliche Problem aber bleibt: Bildet man eine Differenz etwa gleich großer Zahlen, so kann der Fehler leicht gegen 100% gehen! Dies ist das typische Problem beim numerischen Differenzieren.“ Müller-Krumbhaar, H.: Computersimulation in der Physik, Manuskript KFA Jülich 1989: S. 1.7/1.8

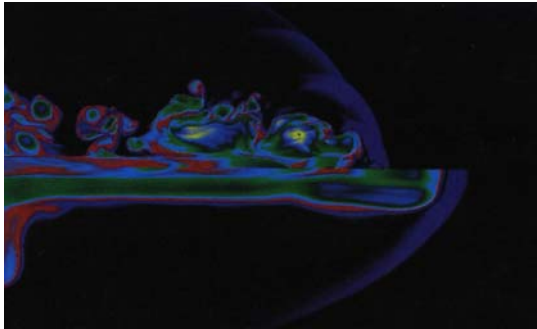
¹⁹ Die verwendeten mathematischen Modelle werden in einer Analysephase für den entsprechenden Zweck der Simulation überarbeitet bzw. erarbeitet. Die Numerik verwendet je nach Anwendung die Analysis, lineare Algebra, Approximationstheorie, Funktionsanalysis oder auch die Graphentheorie und Topologie.

²⁰ Differenzenverfahren, Finite Differenzen und Finite Elemente Verfahren, Finite Volumen Verfahren.

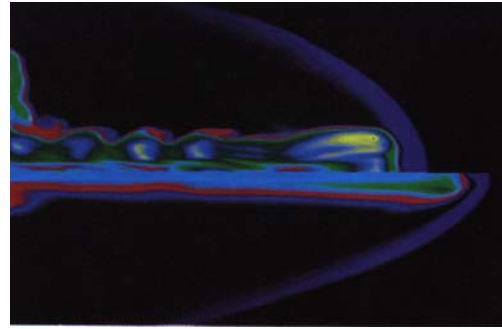
²¹ Müller-Krumbhaar, H.: Computersimulation in der Physik, Manuskript KFA Jülich 1989: S. 1.6

²² Für die Darstellung von Zuständen, die nicht von der Historie abhängen wie thermodynamische, lassen sich die Punkte des Phasenraums mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zufällig abtasten (Monte-Carlo-Verfahren). Dadurch erhält man eine wesentlich robustere Simulation.

²³ „Der Abbrechfehler ist die Abweichung der diskreten von der exakten Lösung. Da Δx sehr klein ist, werden die Abbrechfehler bei höheren Potenzen von Δx immer kleiner und folglich die Lösung immer genauer. Man kann daher auch die Genauigkeit einer Berechnung erhöhen, indem man den Algorithmus so umschreibt, daß er in höherer Ordnung genau ist. Verwendet man ein grobes Rechengitter und einen einfachen Algorithmus (bei den beispielsweise der Abbrechfehler proportional zu Δx ist), zeigt die Lösung nur die Bugwelle.“ Kaufmann, W./Smarr, L.: Simulierte Welten. Moleküle und Gewitter aus dem Computer, Heidelberg u.a., 1994: S. 78/79 (s. Abbildung 3, untere Hälfte)



2 Einfluss des Berechnungsgitters:
feines Gitter (oben), grobes Gitter (unten),
Kaufmann/Smarr, 1994, S. 79



3 Einfluss des Algorithmus:
komplexer Algorithmus (oben), einfacher (unten)
Kaufmann/Smarr, 1994, S. 79

Problembereich: Validierung

Simulationen basieren auf kognitiven Prozessen, die in der Erstellung des formalen und mathematischen Modells, in der Wahl des Diskretisierungsverfahrens und der mathematischen Heuristiken sowie im Tunen der Parameterwertbereiche und der interpretativen Gestaltung der visuellen Umsetzung resultieren. Um nicht Beliebigkeiten zu produzieren gilt es, die Adäquatheit der einzelnen Schritte vom Modell zur Visualisierung der Simulationsergebnisse zu belegen. Die Validierung eines Computerelements umfasst deshalb verschiedene Formen der Überprüfung der mathematischen, informatischen und anwendungsorientierten Handlungen.

Simulieren bedeutet Modellieren und Modelle basieren auf subjektiven Entscheidungen der beteiligten Wissenschaftler, die sich *die Welt entsprechend schneiden*,²⁴ wofür sich weniger formale Gültigkeitsbedingungen angeben lassen, als Plausibilitäten durch den gedanklichen Vergleich mit dem Verhalten realer Systeme.²⁵ Etwas anders gestaltet sich der mathematische Teil der Modellierung, der Konsistenz gegenüber Instabilitäten, Rundungs- und Abbruchfehler aufweisen muss. Anhand von Variationen der Anfangsbedingungen lässt sich die Parameterwertabhängigkeit des Systems und seiner Simulationsmerkmale

²⁴ Goodman, N.: Weisen der Welterzeugung, Frankfurt 1984

²⁵ „Aus alledem zeigt sich deutlich genug, daß mehr oder weniger subjektive Entscheidungen nicht zu umgehen sind. Es kommt vielmehr darauf an, sie im Bericht über das Simulationsmodell offen darzulegen, so daß sich der Anwender oder Leser ein eigenes Urteil von der Gültigkeit des Modells machen kann.“ Harbrodt, S.: Computersimulationen in den Sozialwissenschaften, Reinbek bei Hamburg, 1974: S. 178

testen. Schließlich erlaubt der qualitative und quantitative Vergleich der Resultate mit theoretischen Vorhersagen oder experimentellen Daten deren Überprüfung. Überschreitet die Outputdifferenz die Toleranzgrenze bedarf es einer Fehleranalyse. Das Simulationsmodell kann jedoch so komplex sein, dass es sich nicht mehr analysieren lässt.

Die Erwartungen an Simulationen sind deshalb unterschiedlicher Art. Zum einen euphorisch: „Wir können solche numerischen Verfahren nur deshalb entwickeln und anwenden, weil sich das physikalische Universum mit mathematischen Modellen beschreiben lässt,²⁶ und weil „jede Leistungssteigerung [der Supercomputer] ... die beobachtete Welt der Meßdaten der theoretischen Welt der Naturgesetze näher²⁷ bringt, - zum anderen kritisch: Simulationen sind „manipulierte, vereinfachte, zweckbestimmte Bilder: Sie sollen der Vorhersage von festgelegten Aspekten dienen, nicht eine umfassende Wahrheit widerspiegeln.“²⁸

Unsicherheit als immanentes Problem

Wenn sich die Validierung schon für die Simulation wohldefinierter Probleme des physikalischen Universums schwierig gestaltet, wie problematisch hat man sich dann die Verwendung von Simulationen in anderen, weniger formalisierbaren Bereichen vorzustellen? Hier ließe sich einwenden, dass qualitative Formalismen anderer Simulationsarten wie Neuro-naler Netze oder genetischer Algorithmen bedürfen, falls man solche überhaupt in einer Simulation generieren möchte. Doch selbst wenn ein Bereich formalisierbar und mathematisierbar ist, kann die Komplexität des Modells seiner tatsächlichen Komplexität nicht gerecht werden. Zum einen, da zu wenig Faktoren berücksichtigt werden: beispielsweise die vernachlässigte Absorptionsleistung der Ozeane in alten Klimamodellen; zum anderen da die Komplexität die mathematische Behandlung der Modelle vor unlösbare Probleme stellt, wie im Falle des Turbulenzmodells. „Eine präzise Simulation stößt an natürliche Grenzen, wo kleine Änderungen in den Daten große instabile Effekte bewirken und eine chaotische Dynamik dominiert. In vielen Fällen, zum Beispiel in der Klimaforschung, ist es jedoch weitgehend ungeklärt, ob die Unsicherheiten durch zu ungenaue Numerik (viel zu große Gitter-

²⁶ Kaufmann, W./Smarr, L.: Simulierte Welten. Moleküle und Gewitter aus dem Computer, Heidelberg, 1994: S. 14

²⁷ Kaufmann, W./Smarr, L.: Simulierte Welten, 1994: S. 31

²⁸ Neunzert, H.: Mathematik und Computersimulation: Modelle, Algorithmen, Bilder, in: Braitenberg, V./Hosp, I. (Hg.): Simulation. Computer zwischen Experiment und Theorie, Braunschweig-Wiesbaden, 1995: S. 55

*strukturen ...), durch Modellierungsfehler oder tatsächlich durch das potentiell chaotische Verhalten der Realität selbst (Klimakatastrophe) bedingt ist.*²⁹

Unsicherheit ist deshalb ein immanentes Problem der Computersimulation. Simulationen als exakte Prognoseinstrumente zu verstehen, die auf Basis formaler und mathematischer Gesetze wahre Aussagen erzeugen, wäre ein fataler und mitunter teurer Fehler. Ein warnendes Beispiel liefert der Untergang einer Ölplattform: Mathematiker konnten nachweisen, dass sich der Untergang einer Ölplattform - einige Minuten nach ihrer Fertigstellung - auf das unadäquate Diskretisierungsverfahren der Statiksimulation zurückführen ließe.³⁰ Da Simulationen zunehmend in sensitiven Bereichen eingesetzt werden wie der Reaktorsicherheit oder der Materialforschung im Flugzeugbau, bedarf es einer *Ethik des Simulierens* sowie besserer Standards, die über die üblichen Benchmark-Tests hinaus gehen.

Möglichkeiten: Eröffnung neuer Forschungsbereiche und Einsichten

Neben den Grenzen eröffnen computergestützte Simulationen für jene Bereiche neue Möglichkeiten, die zeitlich oder räumlich durch aktuelle Messtechniken nicht zugänglich sind oder für die Experimente aus ethischen und pekunären Gründen oder aufgrund irreversibler Folgen unerwünscht erscheinen. Die Möglichkeiten von Computersimulationen zeigen sich vor allem in der Anschaulichkeit der Visualisierung, denn sie geben Einsichten in Bereiche jenseits des menschlichen Wahrnehmungshorizonts. Das Molecular Modelling, die Elementarteilchenphysik oder die Astrophysik sind Beispiele hierfür. Dabei spielen neben der Verkleinerung oder Vergrößerung des Massstabs, die Dehnung oder Raffung der Zeit und die isolierte Darstellung einzelner Aspekte unter der Wirkung des Gesamtsystems eine entscheidende Rolle. Als Beispiel lässt sich die Simulation der kollektiven Anregungen in Plasmen anführen. Untersucht werden die Wechselwirkungen in Plasmen, die *„weitgehend kollektiver Natur und extrem nichtlinear [sind]. Sie sind daher nur durch Computersimulationen zu erfassen.“*³¹ Gegenüber dem Experiment hat die Simulation den Vorteil, dass die zeitliche Kürze des Vorgangs und die isolierte Diagnostik einzelner Teilchen in Wechselwirkung kein Problem darstellen - *„z.B. die Frage nach dem Grad der Ionisation eines Goldatoms beim Durchgang eines Schwerionenstrahls aus dem GSI-Beschleuniger in Darmstadt. Wir haben zur Zeit keine Apparatur, die diesen Effekt in einem Goldtarget*

²⁹ Trottenberg, U.: Quantensprünge in der Numerischen Simulation, in: Der GMD-Spiegel 3-4, 1998: S.10. Determiniert chaotische Zustände treten jedoch nur in nicht wohldefinierten Problemstellungen auf.

³⁰ Vgl. Wittum, G.: Mehrgitterverfahren effizienter Löser für partielle Differentialgleichungen, Vortragsmanuskript, Jahrestagung der DMV Deutsche Mathematiker Vereinigung, Stuttgart 1995

³¹ Mulser, P. u.a.: Kollektive Anregungen in Plasmen. Supercomputer ermöglichen neue Erkenntnisse, in: Thema Forschung, TH Darmstadt, 1995: S. 76

sichtbar machen könnte. Hier hilft die Computersimulation, die das Experiment nachstellt und zu Schlüssen führt, die durch das Experiment überprüft werden können.“³²

Darüberhinaus ermöglichen Computersimulationen das Handling großer Datenmengen zur Darstellung nichtlinearen Systemverhaltens (Grand Challenges), Virtualität in der Generierung anschaulicher Artefakte wie beispielsweise massenloser Spurbällchen, die das Bewegungsverhalten in Gewitterwolken nachzeichnen, Fiktionalität bei der Erzeugung von Welten ohne Naturgesetze oder der Analyse parameterwert-induzierten Systemverhaltens, Einsichten in dynamische Prozesse und Vielteilchensysteme, als auch isolierte Beobachtungen einzelner Aspekte unter der Wirkung des Gesamtsystems. Die Vorteile liegen in der Heuristik, die computergestützte Simulationen bieten. Und schließlich führen sie zu Wiederentdeckung und Behandlung nichtlinearer Systeme. *„Die großen Fortschritte in der Naturwissenschaft des 19. und 20. Jahrhunderts wie in der klassischen Dynamik, Elektrodynamik und Quantenmechanik waren allesamt im linearen Bereich. Nichtlineare Systeme wurden als exotische Ausnahmen betrachtet. Man tat sogar, als ob alle wesentlichen Phänomene der Welt mit linearen Approximationen hinreichend beschreibbar waren. Kein Wunder, denn die nichtlinearen Differentialgleichungen ... waren zum überwiegenden Teil nicht analytisch lösbar. Es gab für sie zwar numerische Lösungsverfahren, aber keine Computer, um sie in einer vernünftigen Zeit auszuführen!“*³³

2.6. Interdisziplinäre Ausbildung und Forschungslandschaft

Die Entwicklung der letzten sechzig Jahre von festverdrahteten zu frei programmierbaren Rechnern, vom Dezimal- zum Digitalsystem, von elektromagnetischen Relais zu Mikroprozessoren, von seriellen Rechnern, Vektorrechnern bis hin zu Parallelrechnern führte und führt zu dem enormen Anstieg der Rechengeschwindigkeiten und -kapazitäten, die neben den verbesserten Algorithmen und Programmen die Voraussetzung für wissenschaftliches Rechnen darstellen. Je mehr Rechenkapazitäten zur Verfügung stehen, desto aufwendigere Simulationen können durchgeführt werden, desto größer ist der Erkenntnisgewinn - so die (vereinfachte) Formel des Scientific Computing. Entsprechend aussagekräftig ist das Ranking der Großrechner, die zumeist in universitären Rechenzentren und Forschungs-

³² Mulser, P. u.a.: Kollektive Anregungen in Plasmen, 1995: S. 76

³³ Canty, M.: Chaos und Systeme. Einführung in Theorie und Simulation dynamischer Systeme, Braunschweig-Wiesbaden, 1995, S.: 35

stitutionen stehen.³⁴ Die TOP 500 Liste der Universität Mannheim gibt eine Übersicht der leistungsfähigsten Computer der Welt. 1998 befanden sich fünfzig der TOP100-Rechner in den USA, dreiundzwanzig in Japan, acht in Deutschland, sechs in Großbritannien, fünf in Frankreich, drei in Schweden, zwei in Korea und jeweils einer in Italien, Kanada und Australien. Damit wird die Konzentration der computergestützten Forschung augnscheinlich, angeführt von den USA und gefolgt von Japan und Europa. Deutlich wird jedoch auch die Abhängigkeit der Computational Science und ihrer Erfolge vom Wettlauf um die Rechenkapazitäten. Ende 2001 verfügt man in Deutschland zwar noch über sieben TOP100-Rechner, doch wesentlich schlechter platziert als 1998.

TOP 100 Platzierung	Juni 1998	TOP 100 Platzierung	November 2001
7	Max-Planck-Institut Garching	10	Deutscher Wetterdienst
10	Universität Stuttgart	17	Leibniz Rechenzentrum München
11	Wetterdienst Offenbach	37	Deutscher Wetterdienst
17	Forschungszentrum Jülich	49	Pharma Company
23	Forschungszentrum Jülich	63	Forschungszentrum Jülich
39	Leibniz Rechenzentrum München	80	Max-Planck-Gesellschaft
49	ZIB/Konrad-Zuse-Zentrum Berlin	84	HWW/Universität Stuttgart
89	Universität/Forschungszentrum Karlsruhe		

Verteiles Arbeiten

Die Orte des wissenschaftlichen Rechnens sind Rechenzentren, Höchstleistungsrechenzentren und Metacomputingzentren. Letztere organisieren ein, an unterschiedlichen Standorten verteiltes Rechnen durch die schnelle Datennetzanbindungen verschiedener Rechner. Die Entwicklung in Deutschland wird durch das Deutsche Forschungsnetz unterstützt, das im Frühjahr 1996 mit einer Transferleistung von 34 bis 155 Mbps (bit per second) als Basisinfrastruktur in Betrieb genommen wurde (B-Win),³⁵ und an das Einrichtungen der Wissenschaft, Forschung und Lehre angeschlossen sind. (Im Vergleich, eine ISDN-Leitung erbringt eine 128 Kbps-Leistung.) Die für das heterogene Metacomputing nötigen Netzkapazitäten bewegen sich mittlerweile im Gbps-Bereich. Seit August 1997 wird im Forschungszentrum Jülich und in der GMD St. Augustin an entsprechenden Netzanbindungen und am Metacomputing gearbeitet (DFN-Projekt: Gigabit Testbed West). *„Zur Berarbeitung anspruchsvoller numerischer Probleme reicht die Rechenleistung selbst modernster Su-*

³⁴ Achtundsiebzig der TOP100-Rechner finden sich an Universitäten und Forschungseinrichtungen. Die restlichen zweiundzwanzig Großrechner stehen in US-amerikanischen Regierungsbehörden, in der Industrie und bei den Großrechner-Herstellern selbst. <http://www.top500.org> (Stand: Juni 1998)

³⁵ Was das Breitband-Wissenschaftsnetz für Deutschland ist, ist das Internet 2 für die USA, das Renater II für Frankreich, das Super JANET für Großbritannien oder das BARR-B für Italien. Informationen unter

percomputer oft nicht aus. Die Zusammenfassung räumlich verteilter Rechner zu einem Metacomputer kann hier Abhilfe schaffen. Eine Reihe von Anwendungen enthält Teilprobleme, für deren Lösung Rechner unterschiedlicher Architektur - etwa massiv parallele Systeme und Vektorrechner - optimal sind. Eine entsprechende Verteilung auf verschiedene Rechner kann daher vorhandene Ressourcen besser ausnutzen. Voraussetzung hierfür ist, dass die Rechner durch hinreichend leistungsfähige Kommunikationsnetzwerke verbunden sind. Kritisch ist für beide Szenarien, dass die Rechenleistungen der beteiligten Rechner und die Kommunikationsleistung zwischen den Rechenknoten in einem angemessenen Verhältnis zueinander stehen müssen.“³⁶

Neue Ausbildungsprofile

Forschungsprojekte zum verteilten, massiv-parallelen Rechnen oder zum High Performance Computing Management beschäftigen die wachsenden Fachbereiche und Institute der Informatik und des Scientific Computing. Die Etablierung neuer Lehrbereiche wie der interdisziplinäre Studiengang *Rechnergestützte Wissenschaften (RW)* seit dem Wintersemester 1997/1998 an der ETH Zürich sind Zeichen des Wandels der Arbeitsweise in den Wissenschaften: *„RW beinhaltet mathematische Modellbildung, den Einsatz numerischer Lösungstechniken und das Benutzen von Computern, um naturwissenschaftliche und technische Probleme zu analysieren und zu lösen. Das Gebiet der RW ist verschieden von der Informatik. Es ist aber auch verschieden von Theorie und Experiment, den traditionellen Formen der Natur- und Ingenieurwissenschaften. Die RW stellen einen dritten wissenschaftlichen Weg dar, zusätzlich zu Theorie und Experiment.“³⁷* Charakteristisch für dieses neue Ausbildungsprofil ist die Interdisziplinarität. *„Der Studiengang „Technomathematik“ [TH Aachen] besteht aus 50% Mathematik, 20% Informatik und 30% Technik (Physik, Maschinenbau, Elektrotechnik). ... Der neue Studiengang ist interdisziplinär angelegt und trägt den aktuellen Erfordernissen des Arbeitsmarktes Rechnung. ... Arbeitsplätze hierfür bieten die mathematischen Abteilungen der Großindustrie und Forschungsinstitute, Softwarehäuser sowie Ingenieurbüros.“³⁸*

<http://www.dfn.de/>. Der DFN koordiniert auf nationaler Ebene die Aktivitäten der Vernetzung, während Rechenzentren und Datenautobahnen unter die Zuständigkeit der Länder fallen.

³⁶ Eickermann, Th./Wunderling, P.: Aufbruch ins Jahr 2000. Start des Gigabit Testbed West, in: DFN-Mitteilungen 45, 11/1997, unter: <http://www.rtb-nord.uni-hannover.de/dfn/mitteilungen/html/heft45/B5/B5.html> (Stand: 8.8.98).

³⁷ Ankündigung der ETH Zürich unter: <http://www.math.ethz.ch/RW/> (Stand: 8.8.98)

³⁸ <http://www.nrw.de/aktuell/presse/pm98/pl98-117.html> (29.09.2001)

Neben dem Wissenschaftlichen Rechnen entwickelt sich die Disziplin der Visualisierung (Scientific Visualization). Die Möglichkeit der farblichen, dreidimensionalen und beweglichen Darstellung von Daten in Echtzeit ist rechenintensiv und setzt leistungsstarke Computer sowie entsprechende Darstellungstechniken und Programme voraus. Immersive Umgebungen wie VR- und CAVE-Technologien erlauben es in Zukunft, sich in die Simulation zu begeben.³⁹ Jede Änderung der Perspektive des Betrachters wird dabei via Tracking-System in der Darstellung berücksichtigt. Forschung, beispielsweise im Bereich des Molecular Modelling, kann dann bedeuten, visuell geleitet im simulierten Molekül strukturelle Veränderungen vorzunehmen, die berechnet und später im Labor synthetisiert werden. Die Universität Koblenz-Landau trägt mit der Ausbildungsrichtung Computervisualistik der neuen Entwicklung Rechnung. Dazu heißt es: *„Die Computervisualistik muß sich in ihrem inhärenten Forschungsgegenstand, dem Visuellen, nicht nur von der technisch/algorithmischen Seite nähern, sondern sie muß auch zahlreichen Aspekten des Umgangs mit dem Visuellen aus der Didaktik, Kunst und Design, Pädagogik, Philosophie und Psychologie Rechnung tragen.“*⁴⁰

2.7 Simulation als Produkt

Bislang wurde vor allem über das Wissenschaftliche Rechnen mit Hilfe von Großrechnern gesprochen. Doch ein weiterer Bereich der Simulationen spielt sich heute auf PCs ab. Die Simulation gewinnt mit der Entwicklung leistungsfähiger Computer und verbesserter Modelle in zahlreichen Anwendungsbereichen an Marktpotential. Dabei reicht das Spektrum von der Materialforschung, über die Logistik, bis hin zur Flugsteuerung von Satelliten. Zum einen werden standardisierte Simulationsprogramme wie SIMULINK⁴¹ mit umfangreichen Bibliotheken für lineare, nichtlineare, zeitdiskrete, kontinuierliche oder hybride Modelle angeboten, zum anderen werden Simulationen für spezifische Problemstellungen wie beispielsweise am Fraunhofer-Institut für Produktionsanlagen und Konstruktionstechnik erstellt. Die Simulation verschafft in der Planungsphase einen Erkenntnisgewinn, insofern sie es ermöglicht, *„... Betriebsdaten zu gewinnen von einem Produktionssystem, das nur auf*

³⁹ VR-Technologien erzeugen eine dreidimensionale Umgebung, in die sich der Betrachter mit Hilfe von 3D-Brillen oder Head Mounted Displays begibt. CAVE-Technologien sind Räume, die an den Seiten, oben und unten mit Projektionen der Simulation bespielt werden, in deren Mittelpunkt der Betrachter steht.

⁴⁰ Konzept des Studiengangs Computervisualistik, Broschüre der Universität Koblenz-Landau, 1998: S. 3

⁴¹ SIMULINK ist ein Produkt von The Math Works Inc., Natick MA, USA <http://www.mathworks.com>

dem Papier existiert. Auf diese Weise konnten die Planer immer wieder Alternativen bilden, qualifiziert testen und so zu einer abgesicherten Lösung kommen, die auch unterschiedlichen zukünftigen Produktionsszenarien gerecht wird.⁴² Dies ist nur eine Möglichkeit des wirtschaftlichen Potentials der Computersimulationen. Zwar gibt es noch keine Studie zum Marktvolumen von Computersimulationen, doch es zeichnet sich deutlich ab, dass hier ein Wissens-Markt entsteht, der eine Schnittstelle zwischen Wissenschaft und Wirtschaft etabliert. Einige der Fraunhofer-Institute und zahlreiche Ausgründungen von Firmen sind hierfür ein nicht übersehbares Indiz.

Produzenten-Anwender Verhältnis

Mit der Etablierung des Produkts Simulation formt sich in der Computational Science ein Produzenten-Anwender Verhältnis, das neu für die Wissenschaften ist. Dabei eröffnen sich zahlreiche Fragen: Gelten hier die marktwirtschaftlichen Gesetze oder handelt es sich um eine subventionierte Produktivität? Wie sind Wissenschaft und Wirtschaft miteinander verflochten und welche Rolle spielt die Standortpolitik? Wie produzieren die Wissenschaften in diesem Bereich? Wie abhängig ist der Anwender in Nachhinein vom wissenschaftlichen Know how? Wie groß ist das Vertrauensverhältnis von Laien in Simulationen? Kann es passieren, dass „... die gewonnenen Lösungsapproximationen in Objekte einer virtuellen Wirklichkeit [zurückübersetzt, so anschaulich sind, dass] ... der Anwender das Ergebnis nicht nur leicht interpretieren kann, sondern sehr häufig mit der tatsächlichen Wirklichkeit verwechselt und überhaupt nicht mehr die Möglichkeit von Fehlern in Rechnung stellt.“⁴³

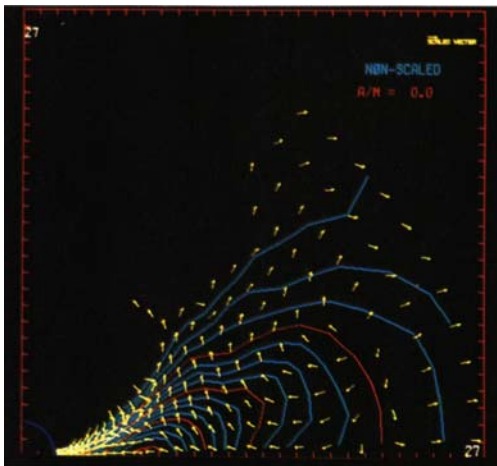
2.8. Visualität als dominanter Faktor

Die Resultate der Computersimulationen sind unanschauliche Kolonnen von Zahlen beziehungsweise elektronischen Zuständen. Die Visualisierung transformiert die numerischen Werte in farbige Pixeldarstellungen und fügt auf diese Weise zahlreiche individuelle Werte zu intuitiv erfassbaren Strukturen zusammen, die in den Zahlkolonnen nicht erkennbar

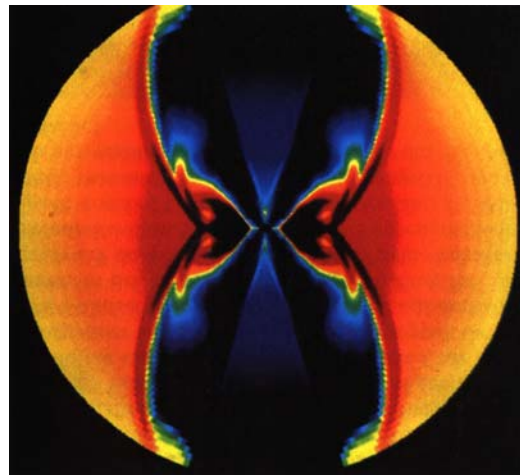
⁴² Mertins, K.: Planungssicherheit durch Simulation, Technica 9, 1993: S. 16

⁴³ Fuhrmann, F./Kleis, U./Mackens, W.: Partielle Differentialgleichungen und Numerische Software, in: Nagel, W.E. (Hg.): Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen, Forschungszentrum Jülich, Bd. 18, 1996: S. 119

wären. Der Informationsgewinn gegenüber der Darstellung mit Ziffern besteht dabei in der visualisierten Entfaltung der Strukturen und Zusammenhänge zwischen den Werten. Für die Visualisierung ist die Steigerung der Leistungskapazität der Rechner und die damit einhergehende Quantität von entscheidender Bedeutung. Der Unterschied zwischen einem Diagramm und der bildhaften Darstellung zeigt sich an folgendem Bildbeispiel.



4 Simulation eines Gasstroms in ein schwarzes Loch auf einem älteren Computer, Kaufmann/Smarr, 1995, S. 58



5 Simulation des Gasstroms mit einem 400mal schnelleren Computer für ein erheblich verfeinertes Berechnungsgitter und einen größeren Bildausschnitt, Kaufmann/Smarr, 1995, S. 58

Filtering, Mapping, Rendering

Der Visualisierungsprozess gliedert sich in drei Phasen: Filtering, Mapping und Rendering. Beim Filtering werden die Rohdaten der numerischen Simulation aufbereitet. Beispielsweise wird durch entsprechende Filter Rauschen unterdrückt. Mapping bedeutet die Abbildung der Daten auf Geometrie und Farben, z.B. die Zuordnung von Farben für Temperaturwerte. Rendering ist die eigentliche Bilderzeugung: Die Daten können ein- bis mehrdimensional dargestellt werden je nach den beinhalteten Variablen. Zweidimensionale Flächen (Polygone) lassen sich mit Farben oder Texturen (Texture mapping) belegt zur Formung von Gestalt verwenden.⁴⁴ Erst die von David Mittelman entwickelte Methode des Raytracing (Strahlenverfolgung) erlaubt jedoch den aktuellen Qualitätsstandard von Computergraphiken.⁴⁵ „Vom Auge des Betrachters ausgehend wird hierbei der Weg eines Lichtstrahls

⁴⁴ Als Texturen können erzeugte Muster oder reale Vorlagen wie Holzmaserungen benutzt werden.

⁴⁵ Die ersten Visualisierungsversuche in 3D stammen aus den 50er Jahren. Mit Hilfe von Malprogrammen wurden Bilder erstellt, die zwar Tiefenwirkung, jedoch keine Dreidimensionalität erzielten. Dem folgte die Erstellung räumlicher Objekte mit Hilfe mathematischer Methoden, die anfangs mit Gittermodellen arbeiteten.

durch die virtuelle 3D-Umgebung errechnet. Bei Reflexionen an Körpern wird deren Farbe, Oberfläche und Transparenz berücksichtigt, so dass ein sehr reales Bild entsteht.“⁴⁶ Die Objekte können mit entsprechenden Farben und Eigenschaften belegt oder mit Texturen überzogen werden. Schattenwurf durch Einsatz von Lichtquellen und Lichtbrechung sind berechenbar. Raytracing war bis vor einigen Jahren aufgrund des enormen Rechenaufwands nur mit Großrechnern möglich.

Interaktive stereo 3D-Visualisierung

Es gibt weitere Methoden, um Dreidimensionalität zu erzeugen. Volume rendering geht von dreidimensionalen Grundformen aus: „For the visualization of volume data, three-dimensional primitives have been introduced. If the field values are organized in a regular grid, the volume can be intersected into small cubic volume elements (voxels).“⁴⁷ Die Visualisierung mit Volumendaten ist jedoch rechenaufwendig, deshalb wird oft die Kombination mit polygonalen Darstellungen oder die Konvertierung von Volumendaten in polygonale angewandt. Farben besitzen ebenfalls dreidimensionale Eigenschaften durch die Modulation von Farbton, Intensität und Sättigung. Schließlich kann die Zeit als vierte Dimension für den animierten Ablauf einer Simulation genutzt werden.

Fortgeschrittene Visualisierungstechniken ermöglichen die interaktive 3D-Stereodarstellung wie sie vor allem im Molecular Modelling genutzt wird. Dem Chemiker steht dabei das simulierte Molekül dreidimensional vor Augen. Er kann es drehen und manipulieren als ob es sich um ein reales Objekt handelt. Auf diese Weise lassen sich Moleküle auf spezifische Eigenschaften hin visuell untersuchen und optimieren. Mit Hilfe der Computersimulation und ihrer 3-D Visualisierung wird nicht nur die Effizienz des Entdeckungsprozesses in der Chemie gesteigert, sondern die Anzahl der Laborversuche und Tierexperimente verringert. Die Simulation dient dabei der Vorselektion ineffektiver Versuche.

Telegene Wirkung: Außerwissenschaftliche Informationsvermittlung

ten um beispielsweise eine Kugel aus Dreiecken zu konstruieren. Indem man die Flächen der Dreiecke nutzte, diese einfärbte (Flat-Modelle) sowie durch eine Lichtquelle mit Schatten und Reflexionen versorgte, kam man der Dreidimensionalität ein Stück weit näher. Das Problem der Kantenübergänge, das die Dreiecksstruktur sichtbar erscheinen ließ, konnte durch einen Algorithmus von Henri Gouraud behoben werden, der weiche Übergänge zwischen den Flächen ermöglichte. Damit gelang die Konstruktion einer *echten* Kugel durch Interpolation.

⁴⁶ Lohse, H.: Virtuelle Seitenblicke, in: OS/2 Inside, Okt. 1995: S. 95

⁴⁷ Frühauf, M./Göbel, M.: Interactive Scientific Visualization: Algorithms and System, FhG-IGD Darmstadt 1992: S. 11

Die 3-D Objekte und die Videos animierter Simulationen bislang ungesehener Objekte und Prozesse sind es, die ihren spektakulären Niederschlag in den Medien finden. Die Zuschauer können dem Zusammenstoß von Galaxien beiwohnen, durch molekulare Prozesse surfen oder die Folgen ihrer Umweltsünden miterleben. Simulationen sind aufgrund ihres zeitlichen Ablaufs telegene Instrumente der außerwissenschaftlichen Informationsvermittlung und werden mit Vorliebe von Wissenschaftssendung angefragt. Wissenschaft, die sich nicht visuell umsetzen lässt, wird im Medienzeitalter geringere Chancen auf öffentliche Aufmerksamkeit und demzufolge Forschungsgelder haben. Doch die Bilder sind mit Vorsicht zu genießen. Allzu leicht wird vergessen, dass es sich dabei um hypothetische Modelle handelt und dass der scheinbare Bildbeweis einer Theorie nur dem Computer entsprungen ist. Eine andere Simulation kann das Gegenteil darstellen und hier liegt eine der Ursachen für den Vertrauensverlust in die Wissenschaften und ihre Experten. Von daher scheint es „... *durchaus lohnend, darüber nachzudenken, inwieweit eine Illusion der exakten Beschreibung von Wirklichkeit zweckmäßig ist und ob das damit erreichte Kaschieren immer verbleibender Ungenauigkeiten nicht vielleicht als gefährlich einzustufen ist. Möglicherweise muß man über Verfremdungseffekte nachdenken, welche helfen, den Modellcharakter des jeweils Dargestellten im Bewußtsein zu halten.*“⁴⁸

2.9 Fazit: Wandel der Arbeitsweise und Funktion der Wissenschaften aus Sicht der Computational Science

Simulation: Erweiterung der theoretischen und experimentellen Arbeitsweise

Das Spektrum der Verwendung von Simulationen ist weitreichend und umfasst technische, naturwissenschaftliche und sozialwissenschaftliche Kontexte ebenso, wie deterministische, stochastische und heterogene Verfahren. Simulationen dienen verschiedenen Zwecken: Als Demonstrationsmodelle zur Veranschaulichung von Zusammenhängen, als Experimentalmodelle zur Ermittlung oder Prüfung von Hypothesen, als theoretische Modelle, um Sachverhalte in logisch gebündelter Form zu übermitteln oder als operative Modelle mögli-

⁴⁸ Fuhrmann, F./Kleis, U./Mackens, W.: Partielle Differentialgleichungen und Numerische Software, in: Nagel, W.E. (Hg.): Partielle Differentialgleichungen, Numerik und Anwendungen, Forschungszentrum Jülich, Bd. 18, 1996: S. 119

cher Zielaußenwelten zur Entscheidungs- und Planungshilfe.⁴⁹ Immer häufiger finden sich in Forschungsberichten im Umfeld des Scientific Computing Hinweise wie dieser: „Durch die stürmische Entwicklung der Computer im allgemeinen und von parallelen Hochleistungsrechnern im besonderen hat sich in den Naturwissenschaften neben dem traditionellen praktischen Weg (Experiment und Beobachtung) und dem theoretischen mathematischen Ansatz (Gesetzmäßigkeiten zwischen verschiedenen Größen) mit der Numerischen Simulation ein dritter Weg zur Beschreibung der Realität in Natur- und Ingenieurwissenschaften herausgebildet.“⁵⁰

Problemorientierte Forschung, Gesellschaft und die Wirkung der Bilder

„Die Entstehung einer „problemorientierten Forschung“ kann man als Antwort des Wissenschaftssystems auf neue Anforderungen betrachten, die von Seiten der Gesellschaft an die Wissenschaften gestellt werden. ... Es ergeben sich immer mehr Problembereiche, die von der Wissenschaft, oder mit ihrer Hilfe, definiert worden sind.“⁵¹ Diese Problembereiche dokumentieren die allumfassende Reichweite der Wissenschaften und ihrer Techniken, aber auch die Bereitschaft, Probleme in wissenschaftlicher Weise anzugehen. Diese Tendenz lässt sich auch für Computersimulationen zeigen. Immer zahlreicher kommen Simulationen in Bereichen zum Einsatz, die durch komplexe Planungen, kostenintensive Experimente oder öffentliches Interesse nach einer virtuellen Umsetzung im Vorfeld verlagern, sei es um Kosten zu sparen, visuelle Überzeugungsarbeit in Entscheidungsphasen zu leisten oder um den experimentellen Aufwand zu minimieren.

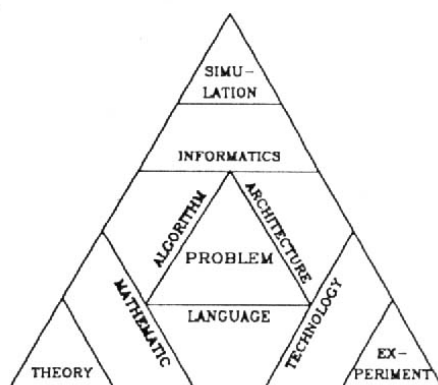
Der Begriff des Problems spielt in der Computational Science eine wichtige Rolle, wenn auch in einem anderen Sinne als dem gesellschaftlichen Problemverständnis. Der Algorithmus als allgemeines Verfahren zur schrittweisen Lösung eines Problems, der Computer

⁴⁹ „Typische Zielrichtungen von Simulationen sind etwa die Optimierung des Systemverhaltens, Entscheidungshilfen beim Systementwurf und bei der Auswahl unter verschiedenen Entscheidungsalternativen, Prognose des Systemverhaltens (z.B. Wettervorhersage), Validierung eines geplanten Systems (z.B. einer VLSI-Schaltung), Überprüfung von Theorien durch hypothetische Modellbildung eines im Detail unbekanntes Systems (beispielsweise zur Untersuchung kognitiver Systeme), Modellanimation zur Veranschaulichung eines komplexen Systemvorgangs, sowie Training komplexer Situationen im Ausbildungsbereich (z.B. Flugsimulator).“ Mattern, F.: Modellbildung und Simulation, Technical Report TR-VS-95-02, TH Darmstadt, 1995: S. 2

⁵⁰ Ankündigung der Abteilung Wissenschaftliches Rechnen und Numerische Simulation des Institut für Angewandte Mathematik an der Universität Bonn unter <http://www.wissrech.iam.uni-bonn.de/lehre/vorlesung1a.html> update vom 4.7.97 (Stand: 14.8.98)

⁵¹ Bechmann, G. et al.: Sozialwissenschaftliche Konzepte einer interdisziplinären Klimawirkungsforschung Karlsruhe, 1995: S.101. Die Studie zeigt den Funktionswandel sowie die Probleme der problemorientierten Forschung auf. Klimaforschung, Gentechnologie, Ökologie oder Aidsforschung gehören in diese neuen Forschungsbereiche, die sich durch Komplexität, Variabilität bezüglich der Auswirkungen und Unsicherheit in der Wissensbasis auszeichnen.

als *problem solver* und die Mathematik als *Ressource der Zukunft* prädestinieren das Wissenschaftliche Rechnen zur Lösung der *Grand Challenges*. In der *Tripod of Scientific Methodology* gruppiert sich Theorie, Experiment und Simulation um das *Problem* als Mittelpunkt. Die Computational Science zielt in ihrem eigenen Verständnis „...auf die großen ungelösten wissenschaftlichen Probleme, die in ihrer Wichtigkeit und Tiefe nicht nur die betreffende wissenschaftliche Disziplin herausfordern, sondern von außerordentlicher Bedeutung und Auswirkung für die Gesellschaft und ihrer Bewältigung der Zukunft sind. Die Identifizierung solcher Probleme hat in den USA zur Klassifizierung als ‘Grand Challenges to Computational Science’ geführt, zu denen heute die Kernfragen aus den Gebieten der atmosphärischen Chemie (d.h. der Umweltforschung), der Astrophysik, der Materialforschung, der Molekularbiologie, der Elementarteilchenphysik und der Aerodynamik gezählt werden.“⁵² Dennoch decken sich beide Begriffsauffassungen, indem Simulationen in der Regel für ein konkretes Problem konzipiert sind wie die Ausbreitung von Schadstoffen, die Entwicklung klimatischer Phänomene oder die Auswirkungen eines Flugzeugabsturzes auf ein Kernkraftwerk.



6 Tripod of Scientific Methodology,
Hoßfeld, 1995, S. 2

Die Verwendung numerischer Simulationen als Methode zur Ersetzung beziehungsweise Extrapolation von Experimenten für Prognose- und Optimierungszwecke führt jedoch zu einem Dilemma, das am Beispiel der Klimaforschung deutlich wird. Ältere Simulationen, die als Nebenbedingung die Absorptionsleistung der Ozeane vernachlässigten, kamen zu drastisch höheren Werten der Erderwärmung als aktuelle Modelle. Die Prognosen dieser Simulationen dienen als Grundlage politisch-gesellschaftlicher Entscheidungsprozesse,

⁵² Hoßfeld, F.: ‘Grand Challenges’ - wie weit tragen die Antworten des Supercomputing?, KFA-ZAM-IB-9117 Jülich 1991: S. 1

obwohl sie als Simulationen komplexer Systeme allenfalls einen Erklärungswert besitzen. Die seit einigen Jahrzehnten den Wissenschaften zuwachsende Definitionsmacht und Lösungskompetenz und der sich dabei vollziehende Funktionswandel hin zu einer problemorientierten Forschung geht mit gesellschaftlichen Anforderungen wie Prognoseerwartungen, Risikoanalysen und Optimierungen an die Wissenschaften einher, die mit dem Instrumentarium der numerischen Simulation nicht unbedingt einlösbar sind, auch wenn die Visualisierungen anschauliche Bilder komplexer Prozesse liefern. Da sich diese Bilder als äußerst mediengerecht erweisen und zunehmend einer breiten Öffentlichkeit präsentiert werden, suggeriert dies das Bild einer für Laien *verstehbaren Forschung*. Tatsächlich kaschieren die Visualisierungen mit ihrer intuitiven Anschaulichkeit die Komplexität der dahinterstehenden Forschungen und Methoden sowie die Problematiken. Die Betonung des Modellcharakters der Simulationen wird durch die Überzeugungskraft der Bilder leicht konterkariert. Ein zunehmender Prognosedruck auf die Wissenschaften seitens der Politik, Wirtschaft und Gesellschaft ist die Folge. Die mediengerechte Rolle der computergestützten Simulation für diesen Funktionswandel der Wissenschaften ist unübersehbar.

Hinzu kommt als psychologisches Moment das Vertrauen in die *Richtigkeit* computergestützter Ergebnisse. Wurden zu Beginn der Computerentwicklung Großrechner als *Supergehirne*⁵³ bezeichnet, so werden heute Supercomputer und das Internet mystifiziert, indem die Macht der Computer beziehungsweise die Ohnmacht der Nutzer, die aufgrund der ungeheuer raschen Dynamik der Entwicklung in schlichter Überforderung der Nachvollziehbarkeit resultiert, zur Akzeptanz der logischen *Konsistenz* funktionierender Programme als konstitutives Wahrheitskriterium führt. Dabei zeichnet sich der Rechner als syntaktische Maschine dadurch aus, dass die Operationen keinerlei extrasymbolischen Bezugs bedürfen. Dieser wird durch theoretische, visualisierte oder funktionsbedingte Interpretationen hinzugefügt und unterliegt nicht zwingend der Notwendigkeit logischer Konsistenz und damit einer Richtigkeit in diesem Sinne. Zwar sind jene mediene geeignete Simulationen computergestützt, doch überträgt sich das spezifisch logische Wahrheitskriterium der Konsistenz nicht auf interpretative Bezüge. Zudem sorgt die Hypothesizität der Simulationsergebnisse komplexer Systeme für eine prinzipielle Unsicherheit der Prognosen. Bezüglich gesellschaftsrelevanter Forschungsbereiche wie der Sensibilitätsforschung zeigt sich das Problem der Vermengung komplexer Umfelder mit neuen wissenschaftlichen Methoden und aufmerksamkeitsstarkem Interesse der Medien, Politik und Gesellschaft deutlich: *„Stattdessen entstehen oft ganz neue Formen der Wissensproduktion, zum Teil wie im*

⁵³ „In damaligen Presseberichten hieß es, ENIAC könne in wenigen Stunden erledigen, wozu hundert Wissenschaftler ein ganzes Jahr bräuchten. Durch solche Artikel kamen für Computer Bezeichnungen wie „Supergehirn“ und „elektronisches Genie“ in Mode.“ Kurzweil, R.: Das Zeitalter der Künstlichen Intelligenz, München-Wien, 1993: S.183

Wildwuchs, die das Unsicherheitsproblem verfahrensmäßig marginalisieren und damit nur allzu oft gegen traditionelle Wissenschaftsnormen verstoßen. Anschaulich geschieht dies z.B. auf dem Gebiet der Prognose, wo die einstige Anbindung der Prognostik an Theorien aufgegeben wird. Zur Verdeutlichung spricht man von „Prognostizistik“. Die nahezu gleichzeitige Entwicklung des Computers hat diesen Trends entscheidend zum Durchbruch verholfen.“⁵⁴

Bei aller Kritik an der Computersimulation beziehungsweise an falsche Erwartungen etabliert sich die Simulation zunehmend im Wissenschaftsalltag, sowohl in der Grundlagenforschung als auch in der anwendungsorientierten Forschung, in der Wirtschaft wie auch in der öffentlichen Wahrnehmung. Von daher ist ein kritischer Umgang mit Computersimulationen angezeigt, der die Öffentlichkeit bezüglich der immanenten Probleme und Unsicherheiten sensibilisiert.

Wissenschaftstheoretische Interpretationsversuche

Da bislang keine übergreifende Theorie der Simulation - weder aus Sicht der Mathematik, der Informatik, den Anwenderdisziplinen, noch der Wissenschaftstheorie - existiert, basiert dieser *dritte Weg* auf einer Sammlung verschiedener Verfahren zur Simulation spezifischer Problematiken. Genügt dies, um bereits von einem dritten Weg sprechen zu können? Worin unterscheiden sich (numerische) Simulationen von (quantitativ ausgewerteten) Experimenten oder (formalisierten) Theorien? Was ist das qualitativ Neue der computergestützten Simulation? Und wie ist die vielbeschworene Realitätsnähe zu gewährleisten? Eine, an aktuellen Entwicklungen orientierte Wissenschaftsphilosophie und -soziologie findet hier eine Fülle interessanter Fragen. In der Auseinandersetzung mit dem Thema des wissenschaftlichen Rechnens zeichnen sich Präferenzen ab, die einen modelltheoretischen Ansatz nahelegen. Dabei könnte die numerische Simulation und deren Visualisierung die Lücke zwischen Theorie und Beobachtung in einer neuen Weise schließen, indem nun Theorien selbst beobachtbar werden. Dies impliziert freilich nicht den Analogieschluss von den beobachtbaren (visualisierten) Strukturen auf beobachtbare (reale) Strukturen. Eher lässt sich von der Ersetzung der zu untersuchenden Realweltausschnitte - Objekte oder Vorgänge - durch mathematische Modelle sprechen, die mit errechnetem, gemessenem oder heterogenem Datenmaterial *numerisch konkretisiert* werden.

⁵⁴ Bechmann, G. et al.: Sozialwissenschaftliche Konzepte einer interdisziplinären Klimawirkungsforschung Karlsruhe, 1995: S. 95

Wollte man Eckwerte einer Theorie der (computergestützten) Simulation angeben, so müssten die von den Rechnern, als Instrumente der Simulation, vorgegebenen Bedingungen wie die Diskretisierung ebenso berücksichtigt werden, wie die verschiedenen Simulationsprinzipien (ereignisorientierte, transaktionsorientierte, Prozessorientierte, zeitgesteuerte und stochastische Simulation).⁵⁵ Desweiteren wären Standardisierungskriterien für die verwendeten Verfahren, deren Fehleranalysen sowie die Leistungsfähigkeit herauszuarbeiten, wie sie für letztere aus Sicht der Informatik mit den Benchmarktests bereits praktiziert werden.⁵⁶ Zudem sind Kriterien zur Prüfung der Korrektheit einer Simulation beziehungsweise ihrer Resultate zu definieren. Da der Arbeitsprozess der Simulation eine Fülle von Abstraktionen, Interpretationen, Zuordnungen und Reduktionen von Aspekten für komplexe Systeme in einem vielfältigen, interdisziplinären Arbeitsfeld mitsichbringt, ist dies kein einfaches Unterfangen. Schließlich gestaltet sich die Validierung - die Frage nach der *Realitätsnähe* des simulierten Modells - trotz Anschaulichkeit schwierig, (nicht nur) für jene Fälle, für welche die Simulation Experimente ersetzen soll beziehungsweise dort zum Einsatz kommt, wo Experimente nicht durchführbar sind. Aufgrund mangelnder experimentell ermittelter Datenbasen können die visualisierten Ergebnisse nur als Veranschaulichung von Theorien dienen. Ob die Visualisierungen als *bridge principles* dienen können, steht noch zu klären.

Wie sich die numerische Simulation als dritte Methode neben Experiment/Beobachtung und Theorie einrichten und wie dies theoretisch zu fundieren sein wird, ist Thema der Forschung kommender Jahre. Eine erste Verortung als *theory-as-program* und/oder *numerische Experimente* demonstriert die vielfältige Ausrichtung aufgrund unterschiedlicher Verwendungen numerischer Simulationen. Während *theory-as-program* die Umsetzung formalisierter Theorien in Computerprogramme thematisiert, charakterisiert der Begriff der *numerischen Experimente* die Funktion der *Number Cruncher* als Datenlieferanten. Abhängig vom Umfang der verwendeten experimentellen Datenbasis lassen sich computergestützte Simulationen zur Erklärungs- und Prognosezwecken nutzen. Die inhärenten Problematiken legen jedoch einen vorsichtigen Umgang zu Prognosezwecken nahe.

⁵⁵ Mattern, F.: Modellbildung und Simulation, Technical Report TR-VS-95-02, TH Darmstadt, 1995: S. 4-5

⁵⁶ Zum Beispiel: „*The benchmark used in the LINPACK benchmark is to solve a dense system of linear equations. For the TOP500, we used that version of the benchmark that allows the user to scale the size of the problem and to optimize the software in order to achieve the best performance for a given machine.*“ unter <http://suparum.rz.uni-mannheim.de:8080/data/1par/10top/81lis/29lin.htm> update vom 3.6.94 (Stand: 28.11.97)

3. SIMULATION AN DER SCHNITTSTELLE ZWISCHEN MODE I UND II

Wandel der Wissenschaften im Übergang von Mode I in Mode II

3.1 Zusammenfassung

Computersimulationen haben ihren Ursprung im Modelldenken und dem Ziel, die Modelle formalisiert und mathematisiert in operative Instrumente zu wandeln, wie es typisch für Mode I Wissenschaften ist. Dieses Bestreben basiert auf der Entkopplung der (interpretativen) Semantik von der (kalkülierbaren) Syntax (Semiotic shift). Durch die Loslösung der operativen Instrumente (Formeln, Kalküle, Simulationen) von einer kontextorientierten Interpretation lassen sich dieselben Instrumente für unterschiedliche Kontexte verwenden. Insofern sind Simulationen nicht nur Resultate einer interdisziplinären Zusammenarbeit von Wissenschaftlern, sie sind ganz und gar transdisziplinäre Produkte einer modularen Strukturierung der Computational Science. Mit der Entkopplung von syntaktischer Operationalität und Interpretation sind zahlreiche Probleme verbunden, die nicht zuletzt für das Phänomen von Expertisen und Gegenexpertisen und dem daraus resultierenden Vertrauensverlust in die Wissenschaften verantwortlich sind. Das diese Probleme nicht mutwillig, sondern strukturell bedingt sind, lässt sich an der Rekonstruktion des semiotischen Umbaus der Wissenschaften nachweisen, dessen Resultat die Computersimulation ist.

Die Verwendung numerischer Simulationen stellt in den Wissenschaften eine Revolution dar, die zugunsten zunehmender Komplexität mit dem Verzicht auf Exaktheit einhergeht. Die Simulation als Approximation und die Verwendung von Heuristiken im nichtlinearen Bereich erhöhen den Erklärungswert simulierter Modelle durch größere Faktorensensitivität, reduzieren jedoch den Prognosewert für komplexe Systeme.

Der folgende Abschnitt stellt Computersimulationen in den Kontext der Mode II Diskussion und zeigt ihren ambivalenten Status zwischen Mode I und II. Simulationen sind transdisziplinäre Module, die in einer interdisziplinären Zusammenarbeit zustandekommen, sie sind anwendungs- und problemorientiert, ihre Visualität vermittelt dem Laien den Eindruck einer verstehbaren Forschung und im Falle von Simulationsprodukten eines selbst anwendbaren Forschungswissens.

3.2 Veränderte Situation der Wissenschaften - Mode II

Die vielfältige Diskussion um die Veränderungen in der wissenschaftlichen Wissensproduktion, die Erkenntnisse über die Mikroprozesse des wissenschaftlichen Arbeits sowie die sich wandelnden Bedingungen von Forschung haben das traditionelle Wissenschaftsbild einer exakten, hochspezialisierten, hierarchisch institutionalisierten und disziplinären Wissenschaft entzaubert. Die soziale Aufmerksamkeit der Gesellschaft gegenüber wissenschaftlichen Thematiken und die Sensitivität bezüglich ihrer sozio-globalen Auswirkungen schaffen einen Wissens-Markt, der mit wachsendem Umfang den Wissenschaften neue Regeln abverlangt und die Wissensproduktion zunehmend nach Außen verlagert. Wissenschaft findet nicht mehr nur in elitär-wissenschaftlichen Kreisen und Publikationsorganen statt, sondern wird durchlässig und vollzieht sich im Scheinwerferlicht der marktwirtschaftlichen Öffentlichkeit und ihrer Medien. Dies hat weitreichende Folgen für die Wissenschaften, ihre Institutionen, Forschungs- und Ausbildungsprogramme sowie ihre maßgeblichen Zielsetzungen.

Gibbons et al. skizzieren diese Konsequenzen in ihrem Buch *The New Production of Knowledge* und zahlreiche Studien untersuchen Teilspekte des Prozesses der Umstrukturierung.⁵⁷ Folgt man den Thesen von Michael Gibbons et al. über die Erweiterung der traditionellen Wissenschaft (Mode I) durch neue Praxen (Mode II), dann sind es vor allem folgende Aspekte, die für die Wissenschaften dominant werden:

- Transdisziplinäre Zusammenarbeit
- Heterogenität des Forschens
- Integration sozio-ökonomischer Kontexte und anwendungsorientierter Problemlösungsstrategien
- Nutzung globaler Kommunikationstechnologien

Die Lektüre der Mode II Wissenschaftsauffassung besticht durch die ausführliche Darstellung der zahlreichen Aspekte des neuen Forschens. Doch es fällt auf, dass einer wichtigen Entwicklung der aktuellen Wissenschaften nur eine kleine Rolle zugestanden wird und zwar

⁵⁷ Gibbons, M. et al.: *The New Production of Knowledge*, 1994; Bonß, W./Hohlfeld, R. et al.: *Wissenschaft als Kontext*, 1993; Nowotny, H.: *Rethinking Science*, 1999; Knorr-Cetina, K.: *Die Fabrikation von Wissen*, 1991; Bender, G. et al.: *Neue Formen der Wissenserzeugung*, 2001; Latour, B./Woolgar, S.: *Laboratory life*, 1979; Cozzens, S./Gieryn, T. (eds.): *Theories of Science in Society*, 1990, Dolby, R.: *Uncertain Knowledge*, 1996; Mulkay, M.: *Science and the Sociology of Knowledge*, 1970; Mulkay, M.: *Sociology of Science*, 1991, u.a. (4.2 Stand der Forschung)

dem Wandel der Wissenschaften auf Basis des zunehmenden Einsatzes von Computern und der Entstehung einer Computational Science mit ihrem wichtigsten Forschungsinstrument der computerbasierten Simulation. M. E. ist jedoch gerade dieser Wandel des wissenschaftlichen Arbeitens eine maßgebliche Ausprägung der Mode II Praxen. Deutlich wird dies an zwei Aspekten: Zum einen an der Form der Wissensproduktion der Computersimulationen, die nicht nur Instrumente des problemorientierten Modelldenkens mit all seinen Unsicherheiten darstellen, sondern immer auch anwendungsorientiert sind. Zum anderen anhand der medialen Wirkung der visualisierten Resultate, da nicht zuletzt die Bilder der Computersimulationen in den 70er Jahren die Aufmerksamkeit der breiten Öffentlichkeit auf wissenschaftliche Themen lenkte und damit eine öffentliche Sensitivität schuf.

3.3 Semiotisierung der Wissenschaften

Modelldenken

Simulationen sind Erkenntnisinstrumente, die weitaus älter sind als elektronische Computer. Allgemein lässt sich definieren, dass Simulationen zur Nachbildung eines „... *Systems mit seinen dynamischen Prozessen in einem experimentierfähigen Modell [dienen], um zu Erkenntnissen zu gelangen, die auf die Wirklichkeit übertragbar sind.*“⁵⁸ Simulationen basieren auf theoretischen Erkenntnissen und stellen experimentelle Versuche im semiotischen Medium des Computers dar. Insofern sind sie hybride Techniken zwischen Theorie und Experiment.

Der Begriff der Simulation und der Begriff des Modells werden in den Wissenschaften synonym verwendet, in dem Sinne, dass ein Modell ein Original simuliert. Da die Methode des Modellierens in zahlreichen Wissenschaften etabliert ist, lässt sich hier die gemeinsame Basis für die Transdisziplinarität der Simulationen finden. Verantwortlich für diese Gemeinsamkeit ist die maßgebliche Leistung neuzeitlicher Wissenschaft, die in der Verwendung, Formalisierung und Mathematisierung von Modellen liegt. Modelle formulieren regelbasierte Strukturzusammenhänge zwischen Entitäten, deren Wechselwirkungen sich funktionalisieren und damit mathematisieren lassen, indem bestimmt wird, „*ob zwei auf ein Element treffende Wirkungen ... addiert, multipliziert oder anderweitig miteinander verrechnet wer-*

den müssen und ob z.B. eine komplizierte funktionale Verknüpfung analytisch oder durch eine Tabellenfunktion vorgeschrieben werden kann.“⁵⁹ Bei dieser Transformation von der Beobachtung in die Theorie und von der Theorie in formale Modelle ist entscheidend, dass die konstitutiven Merkmale eines Modells erhalten bleiben. Dabei darf nicht vergessen werden, dass Modelle Abstraktionen sind und in der Regel die Zusammenhänge vereinfacht abbilden.⁶⁰

Operative Instrumente: Entkopplung von Syntax und Semantik

Mit der Formalisierung schafft die Wissenschaft neben der beschreibenden Theorie und dem Experiment ein Medium, das sich nicht an der Semantik der Sprache orientiert,⁶¹ sondern den operativen Charakter einer formal verwendeten Schrift in den Mittelpunkt stellt: Formel, Algorithmus und Kalkül sind *symbolische Maschinen*⁶² und ideale Instrumente des systemorientierten Modelldenken, mit welchen sich regelgesteuert hantieren lässt. Der Verdienst moderner Wissenschaft ist es, die *symbolischen Maschinen* zu mechanisieren, d.h. sie vom Papier in tatsächliche Maschinen zu implementieren, indem mit dem Computer die entsprechende Maschine entwickelt wurde.⁶³ Zwar hat bereits Leibniz den Zusammenhang zwischen Formalisierung und Mechanisierung erkannt, aber erst Turing gelingt es 1936 mit seinem Konzept der Turingmaschine einen allgemein programmierbaren Rechner zu entwerfen. Seine Leistung besteht dabei darin, nicht eine spezifische Rechenoperation zu mechanisieren, sondern die formal-operative Zeichenverwendung selbst. Der Computer lässt sich in diesem Sinne als semiotische Maschine bezeichnen, die dazu in der Lage ist, die symbolischen Maschinen der Wissenschaften zur Anwendung bringen.

⁵⁸ VDI Richtlinie 2633

⁵⁹ Bossel, H.: Simulation dynamischer Systeme: Grundwissen, Methoden, Programme, Braunschweig-Wiesbaden, 1989: S. 31

⁶⁰ „Der Wissenschaftler verfährt nicht weniger drastisch, wenn er die meisten Dinge und Ereignisse, die in unserer Alltagswelt vorkommen, ausrangiert oder einem Reinigungsprozeß unterwirft, während er andererseits jede Menge Ergänzungen vornimmt, um Kurvenverläufe zu vervollständigen, die durch verstreute Daten angedeutet werden, und auf dürftiger Beobachtungsbasis komplizierte Strukturen errichtet. So sucht er die Welt zu bauen, die mit den Begriffen übereinstimmt, die er gewählt hat, und die den universellen Gesetzen gehorchen, die er vorgegeben hat.“ Goodman, N.: Weisen der Welterzeugung, Frankfurt, 1984: S. 28

⁶¹ Die Unterscheidung zwischen Syntax und Semantik referiert auf Nelson Goodmans Symboltheorie anhand der Kriterien von syntaktischer und semantischer Differenziertheit und Disjunktheit bzw. Dichte eines Symbolsystems. Goodman, N.: Sprachen der Kunst, Frankfurt 1997

⁶² Krämer, S.: Symbolische Maschinen, 1988

⁶³ Die Entwicklung beginnt mit den mechanischen Rechenmaschinen von Schickard (1623), Pascal (1642), Leibniz (1682) und Babbage (1843), über mechanische Maschinen zur Berechnung je einer spezifischen Differentialgleichung, bis hin zu Turings (1940), Zuses (1941) und Aikens (1944) elektrische Computer.

Numerische Simulationen sind solche operativen Instrumente. Sie sind rein semiotische Formen der Wissensproduktion, die einer anschließenden Interpretation bedürfen. Da es sich einerseits mathematisch gesehen um Approximationen handelt, andererseits die formalen Modelle hypothetischen Charakter aufweisen, ist die Prognosekraft von Simulationen begrenzt. Dennoch setzen sich Computersimulationen zunehmend durch, da sie einen experimentellen Zugang zu Bereichen schaffen, die für herkömmliche Experimente zu groß oder zu klein, zu schnell oder zu langsam oder zu gefährlich sind. Durch die Leistungsfähigkeit der Rechner evolviert die Computersimulation in den Wissenschaften neben der Theorie und dem Experiment zu einem dritten Weg mit eigenen Forschungs- und Ausbildungsprogrammen, Institutionen und Standards. Sie wird zum Produkt, das in soziale, wirtschaftliche und industrielle Kontexte Einzug hält und das einen Markt schafft, der Wissenschaft, Gesellschaft, Wirtschaft und Politik miteinander verzahnt.

3.4 Simulationen als neue Formen der Wissensproduktion

Worin besteht nun das Neue der Wissensproduktion mit Hilfe von Simulationen, wenn sie als Methode auf formalisierte und mathematisierte Modelle zurückgreifen, also auf typischen Formen der *exakten* Mode I Wissenschaften?

Der für Mode I prototypische Begriff des Wissenschaftlichen als Abgrenzung zum Nicht-Wissenschaftlichen ist einer spezifischen Form der Wissensproduktion vorbehalten, die sich an der experimentellen und mathematischen Mechanik Newtons orientiert und im weiteren an den Disziplinen der Physik und der physikalischen Chemie. Mode I Praxen sind nach Gibbons et al. in keiner Weise transdisziplinär, temporär, anwendungsorientiert oder heterogen organisiert.⁶⁴ Mode I Wissenschaft wird zum einen durch einen spezifischen Begriff des Wissenschaftlichen und zum anderen durch soziale Faktoren etablierter Praxen charakterisiert. Schenkt man nun dem Begriff des Wissenschaftlichen nähere Beachtung, so impliziert dieser ein Erkenntnisschema, das mit der neuzeitlichen Wissenschaft dominant wird. Newtons Mechanik schafft nicht nur die Ablösung von der Substanzmetaphysik

⁶⁴ „... in Mode 1 problems are set and solved in a context governed by the, largely academic, interest of a specific community. By contrast, Mode 2 knowledge is carried out in a context of application. Mode 1 is disciplinary while Mode 2 is transdisciplinary. Mode 1 is characterized by homogeneity, Mode 2 by heterogeneity. Organisationally, Mode 1 is hierarchical and tends to preserve its form, while Mode 2 is more heterarchical and transient.“ Gibbons et al.: The New Production of Knowledge, 1994: S. 3

und damit die Trennung von Naturlehre und Philosophie, sondern führt die Identifikation der mathematischen mit der wahren Theorie ein. Kategorien wie Exaktheit und Beweisbarkeit lassen sich damit aus der Mathematik in die Wissenschaften übertragen und lenken die Aufmerksamkeit auf die objektiv-logischen Zusammenhänge des wissenschaftlichen Satzsystems und ihrer Nachprüfbarkeit, wie sie später von Popper rekonstruiert werden.⁶⁵ Das Bild von der exakten Wissenschaft liegt in der Mathematisierung von Wissenschaft begründet. Die Physik, die physikalische Chemie aber auch die quantitative Soziologie sind mathematisierte Wissenschaftsbereiche und die Entwicklung ist soweit fortgeschritten, dass theoretische Physik und Mathematik identisch sind. Doch dieses Bild der exakten Wissenschaft und ihrer Form der Wissensproduktion ist verkürzt und trifft allenfalls auf einen sehr kleinen Bereich der Physik zu: „*Its [Mode-I] ideal is Newtonian empirical and mathematical physics.*“⁶⁶

Grundlegend für die Mode I Wissenschaften der Neuzeit ist vielmehr die hypothetische Denkweise in Modellen und die Reformulierung beschreibender Theorien als problemorientierte Darstellungen von Wirkzusammenhängen. Diese Form der Wissensproduktion ist trotz exakter Beschreibungsmittel aufgrund ihrer Hypothesizität unsicher und hochgradig interpretativ, sie ist problemorientiert und als Simulation immer auch anwendungsorientiert. Die Rede von der exakten Wissenschaft ist in zweierlei Hinsicht problematisch. Zum einen da die exakten im Sinne von formalen Beschreibungen an ihre Grenzen stoßen, zum anderen, da mathematische Exaktheit nur einem kleinen Teil von formalisierten Modellen vorbehalten bleibt, die aufgrund ihrer Einfachheit über eine exakte analytische Lösung verfügen. Die numerischen Lösungsverfahren sind jedoch Approximationen an die exakten Lösungen und von daher ist die Methode der Simulation nicht nur durch Hypothesizität und Heuristik, sondern durch prinzipielle Nicht-Exaktheit charakterisiert. Die Mode I Wissenschaften verlassen ihren Anspruch der Exaktheit mit der Verwendung von Simulationen als Alternativen zu analytischen Lösungsverfahren. Der Begriff des Wissenschaftlichen, wie er für die Mode I Wissenschaften von Gibbons et al. formuliert wird, trifft auf numerische Simulationen nicht zu. Die Methode der numerischen Simulation - ob auf Papier oder Computer ausgeführt - ist jedoch mehr als nur eine neue Verfahrensweise zur Wissensproduktion, sie ist eine wissenschaftliche Revolution der *exakten* Wissenschaften.

Diese Revolution geht mit sozialen Faktoren einher, die mit weiteren Aspekten des Gibbonschen Mode I Wissenschaftsbildes brechen: a. Transdisziplinäre Zusammenarbeit, b.

⁶⁵ Popper, K.: Logik der Forschung, Tübingen 1989

⁶⁶ Gibbons et al.: The New Production of Knowledge, London u.a., 1994: S. 2

Heterogenität des Forschens, c. Integration sozio-ökonomischer Kontexte und anwendungsorientierter Problemlösungsstrategien sowie d. Nutzung globaler Kommunikationstechnologien.

a. Transdisziplinäre Zusammenarbeit

Die Computersimulation ergibt sich aus der interdisziplinären Zusammenarbeit von Wissenschaftlern der Anwenderdisziplinen, Informatikern, Mathematikern und Datendesignern. Simulationen sind transdisziplinäre Anwendungen insofern sich die selben Modelle für die unterschiedlichsten Disziplinen adaptieren lassen: Strömungsdynamische Simulationen finden in der Kardiologie ebenso Anwendung, wie in der Material- oder Klimaforschung. Simulationen lassen sich als Module in unterschiedlichsten Disziplinen verwenden. Ein Beispiel für diese Vorgehens- und Sichtweise gibt ein Artikel der September '95 Ausgabe der internen Zeitschrift des Forschungszentrums Jülich: *Straßenverkehr und Schüttgüter haben vieles gemeinsam*. Es heißt da, der Strassenverkehr sei „*eines der dringenden Probleme unserer mobilen Gesellschaft ... Verkehrsprognosen, -planung und kontrolle zählen zu den großen wissenschaftlichen Herausforderungen. Sie erfordern ein detailliertes Verständnis der grundlegenden dynamischen Aspekte, ein engmaschiges System von Meßpunkten, leistungsfähige Computer und clevere Algorithmen zur Verarbeitung der Daten. ... Konzeptionell zeigen sich Parallelen zwischen dem Strom von Fahrzeugen auf einer mehrspurigen Straße einerseits und dem Fluß von granularer Materie (Sand, Tabletten, Getreide, etc.) durch ein Rohr andererseits. Dabei hat der Stau seine Entsprechung in den Dichtewellen (»Verstopfung«), die man in den Schüttgütern beobachtet. Auch andere Parallelen zwischen dem Fließverhalten granularer Materie und dem Verkehr werden vermutet.*“⁶⁷ Die elektrostatische Aufladung granularer Materie wird mit Transportvorgängen verglichen. Beides wird durch langreichweitige Wechselwirkungen dominiert. Schlüsselworte sind dabei „*Strukturbildung, Skaleninvarianz, Dynamik fern vom Gleichgewicht und Ungeordnete Systeme*“⁶⁸

b. Heterogenität des Forschens

Das Anwendungsspektrum der Simulationen erfordert heterogenes Forschen für soziale, industrielle und wirtschaftliche Anwendungen. Wissenschaftliche Institutionen kooperieren

⁶⁷ Wolf, D., *Straßenverkehr und Schüttgüter haben vieles gemeinsam*, in: Intern Nachrichten und Berichte des , Forschungszentrum Jülich, 1995: S. 10

mit Unternehmen, sozialen Gruppen und Behörden, Wissenschaftler verschiedener Disziplinen schließen sich national wie international temporär zu Gruppen zusammen. Die Vernetzung der Forschungs- und Rechenzentren sowie die Nutzung des Internets ermöglichen die regional verteilte Zusammenarbeit. Ein interessantes Gebiet heterogener Kooperationen sind Simulationsprojekte, die Feldforschung und ökonomische Ziele integrieren und so die unterschiedlichsten Gruppen - Betroffene, Unternehmer und Wissenschaftler - zusammenbringen. Vor allem im Umwelt- und Planungsbereich lassen sich solche Simulationsprojekte finden. Dabei kommt die Möglichkeit zunehmend umfangreichere Modelle zu simulieren einer größeren Kontextsensitivität zu Gute.

c. Integration sozio-ökonomischer Kontexte und anwendungsorientierter Problemlösungsstrategien

Die Integration sozio-ökonomischer Kontexte und anwendungsorientierter Problemlösungsstrategien ist die Triebfeder des Produktes Simulation und der Etablierung eines entsprechenden Wissens-Marktes. Die Anwendungen reichen je nach Anforderung von der Simulation eines Moleküls, über die Aerodynamik von Flugzeugflügeln, bis hin zum Populationsverhalten einer gefährdeten Spezies in einem Umweltsystem. Die Struktur der Simulation, welche die Analyse relevanter Faktoren in der Entwicklung eines Systems in Raum und Zeit zum Ziel hat, ist an Problemlösungsstrategien orientiert, abhängig von der forschungsrelevanten Fragestellung, die dem Modell zugrunde liegt.

d. Nutzung globaler Kommunikationstechnologien

Computersimulationen werden auf PCs, Workstations und Großrechner ausgeführt und mit der Vernetzung werden regional verteilte Computercluster zu heterogenen Netzwerken mit virtuellen Bedienungsflächen zusammengefügt. Das Internet erlaubt den Zugriff auf weit entfernte Rechner und deren Kapazitäten ebenso, wie den informativen Austausch zu Projekten in verteilt arbeitenden Gruppen. Einige Projekte nutzen intensiv die Möglichkeiten der globalen Kommunikationstechnologien, um Berechnungen weltweit zu verteilen oder Zugriff auf Rechner- und Softwareressourcen zu geben. Das Projekt MOLCAD der Physikalischen Chemie der TH Darmstadt beispielsweise ermöglicht es, via Internet jede beliebige Strukturformel eines Moleküls zu simulieren und graphisch darstellen zu lassen. Chemi-

⁶⁸ Wolf, D., Straßenverkehr und Schüttgüter haben vieles gemeinsam, 1995: S. 10

ker aus der ganzen Welt können damit für ihre Forschungsarbeit die Hard- und Software der TH Darmstadt nutzen.⁶⁹

3.5 Fazit: Simulation an der Schnittstelle zwischen Mode I und II

Hypothetizität, Modelldenken und Operationalität sind die dominanten Faktoren neuzeitlicher und moderner Wissenschaft. Interpretativität gesellt sich als autonome Kategorie hinzu, insofern die Interpretation im Prozess der Formalisierung von der syntaktischen Operationalität der Formeln, Kalküle, Algorithmen und Simulationen abgekoppelt wird und später wieder hinzugefügt werden muss. Dies hat zur Folge, dass formale Modelle und ihre Implementierungen in operative Strukturen wie Formeln, Kalküle, Algorithmen und Simulationen transdisziplinär verwendet und für verschiedenste Kontexte interpretiert werden können. Dies hat aber auch zur Folge, dass unterschiedliche Interpretationen für die selben Modelle und Kontexte je nach Gewichtung von Faktoren möglich werden. Der Prozess der Formalisierung der wissenschaftlichen Modelle und die Verwendung der mathematischen Schrift zur Artikulation der formalisierten Modelle wird als *Semiotic shift* der Wissenschaften verstanden.

Mit dem *Semiotic shift* und der Entwicklung der Computer, die ideal geeignet sind, die formalisierten und algorithmisierten Modelle *zum Laufen* zu bringen, tendieren die Wissenschaften, die mit solchen Modellen arbeiten, zur Interdisziplinarität, da mindestens die Mathematik, aber meist auch die Informatik, über die Anwenderdisziplinen hinaus für die Konzeption und Realisation solcher Modelle von Nöten ist. Mit der Interdisziplinarität geht in der Regel ein vernetztes Arbeiten in Gruppen einher, das mittlerweile mit Hilfe der globalen Informationstechnologien elektronisch organisiert ist. Dadurch ist es möglich, die Arbeitsgruppen zu erweitern, denn die Kommunikation wie die Ressourcen lassen sich lokal verteilt realisieren. Die Flexibilität der Kommunikation geht mit einer Flexibilisierung der temporären Zusammensetzung von Arbeitsgruppen einher, da diese keiner festen Installierung an einem bestimmten Ort mehr bedürfen.

⁶⁹ Brickmann, J. et al.: New Men-Machine Communication Strategies in Molecular Modelling, in: The proceedings of the twenty-eighth Hawaii international conference on system science, 1995, 273-282

Doch der *Semiotic shift* erzeugt eine weitere Neuerung in den Wissenschaften. Simulationsmodelle kodieren Wissen, das - in Software artikuliert - auch Laien als Anwendern zugänglich gemacht werden kann. Die Interpretation dieses formal kodierten Wissens für sozio-ökonomische und andere Kontexte bleibt dem Anwender überlassen. Hier liegen neue Anwendungsfelder und Produkte für die Wissenschaften, aber auch Gefahren in der unkontrollierten und unfachlichen Interpretation. Grundsätzlich eröffnet sich jedoch ein neuer Bereich der Interaktion zwischen Wissenschaft, Gesellschaft, Wirtschaft und Politik und ein neues Instrument der Wissensproduktion und der außeruniversitären Wissensvermittlung.

4. FAZIT

4.1 Relevante Themenfelder und Fragestellungen

Als Vorschlag für mögliche Forschungsprojekte wurden fünf Themenfelder identifiziert, die sich anhand basaler Fragestellungen erschließen lassen.

Neue Form der Wissensproduktion

Analyse der Simulation als dritter Weg der Wissenschaften

Stichpunkte: Was ist eine Simulation?, Simulationsarten, Hypothetizität und Prognoseerwartungen, Transdisziplinarität, Problem- und Anwendungsorientierung, Ethik der Simulierens, Standards

Erarbeitung des theoretischen Hintergrunds anhand der leitenden Fragestellung: Wie gestaltet sich die modulare Strukturierung der Computational Science?

Heterogene Forschungslandschaft

Skizze der computerbasierten Forschung und ihrer Anwendungsfelder in Deutschland sowie der internationalen Anbindung

Stichpunkte: Institutionen, Ausbildungsprogramme, Forschungswege und -bedingungen
Bestandsaufnahme der Forschungslandschaft anhand der leitenden Fragestellung: Wie ist die heterogene Forschungslandschaft der Computational Science strukturiert?

Interdisziplinarität als Praxis

Untersuchung der Bedingungen der Realisierung von Forschungsprojekten auf Basis computerbasierter Simulationen

Stichpunkte: Interdisziplinäre, verteilte Zusammenarbeit, Internet-basierte Partizipation, Netzwerke, Simulation als Modul

Erstellung einer Ethnographie anhand der leitenden Fragestellung: Was sind die Bedingungen einer interdisziplinären Zusammenarbeit beispielsweise im Falle des Molecular Modelling?

Simulation als Produkt

Wissenschaft als Produzent vermarktbarer Produkte und Dienstleistungen

Stichpunkte: Marktwirtschaftliche Potentiale, Definition des Verhältnisses wissenschaftlicher Produzenten und außerwissenschaftlicher Anwender, Dienstleistung

Erstellung einer Ethnographie anhand der leitenden Fragestellung: Wie definiert sich das Verhältnis zwischen Wissenschaft als Produzent marktfähiger Produkte und ihren Anwendern?

Medial Wirkung

Analyse des Einsatzes von Computersimulationen in der außerinstitutionellen Wissensvermittlung und Politikberatung

Stichpunkte: Visualität als dominanter Faktor, Erklärungs- und Darstellungsinstrumentarium, interpretativer Spielraum, telegene Wirkung

Durchführung einer Medienanalyse anhand der leitenden Fragestellung: Wie wandelt sich das Bild der Wissenschaften in der Öffentlichkeit aufgrund der telegenen Wirkung von Computersimulationen?

4.2 Stand der Forschung

Zur veränderten Situation der Wissenschaften

Der Wandel der Wissenschaften und damit die neue Situation, in der sich die Wissenschaften befinden, werden in zahlreichen Studien und wissenschaftssoziologischen Untersuchungen reflektiert. Das *Re-Thinking* von Wissenschaft umfasst dabei die Bereiche der

Institutionalisierung, der Wissensproduktion, der Publikationsweisen und Evaluierung sowie der Mediatisierung und Regulierung von Wissenschaft. Die für die vorliegende Expertise relevante Literatur bezieht sich auf den Themenkreis der Wissensproduktion und -darstellung.

- Beck, U./Giddens, A./Lasch, S.:** *Reflexive Modernisierung. Eine Kontroverse*, Frankfurt 1996
- Bender, G. (Hg.):** *Neue Formen der Wissenserzeugung*, Frankfurt 2001
- Bnoss, W./Hohfeld, R./Kollek, R. (Hg.):** *Wissenschaft als Kontext - Kontext als Wissenschaft*, Hamburg 1993
- Böhme, G./van den Daele, W./Krohn, W.:** *Experimentelle Philosophie. Ursprünge autonomer Wissenschaftsentwicklung*, Frankfurt 1977
- Cozzens, S./Gieryn, T. (eds.):** *Theories of Science in Society*, Bloomington 1990
- Dolby, R.:** *Uncertain Knowledge: An Image of Science for a Changing World*, Cambridge 1996
- Friedman, S./Dunwoody, S./Rogers, C. (eds.):** *Communicating Uncertainty. Media Coverage of New and Controversial Science*, Mahwah, N.J. - London, 1999
- Gibbons, M. et al.:** *The new production of knowledge: The dynamics of science and research in contemporary societies*, London 1994
- Gooding, D./Pinch, T./Schaffer, S. (eds.):** *The Uses of Experiments*, Cambridge, MA. 1989
- Goodman, N.:** *Weisen der Welterzeugung*, Frankfurt 1984
- ders.: *Sprachen der Kunst. Entwurf einer Symboltheorie*, Frankfurt 1995
- Knorr-Cetina, K.:** *Die Fabrikation von Erkenntnis*, Frankfurt 1991
- dies.: *Laborstudien. Der kultursoziologische Ansatz in der Wissenschaftsforschung*, in: Martimsen, R. (Hg.): *Das Auge der Wissenschaft. Zur Emergenz von Realität*, Baden-Baden 1995, 101-135
- Kohring, M.:** *Die Funktion des Wissenschaftsjournalismus*, Opladen 1997
- Kornhauser, W.:** *Scientists in Industry: Conflict and Accommodation*, Berkeley-Los Angeles 1962
- Krämer, S.:** *Symbolische Maschinen. Die Idee der Formalisierung in geschichtlichem Abriß*, Darmstadt 1988
- dies.: *Berechenbare Vernunft. Kalkül und Rationalismus im 17. Jahrhundert*, Berlin-New York 1991
- dies.: *Medien, Computer, Realität: Wirklichkeitsvorstellungen und Neue Medien*, Frankfurt 1998
- Kuhn, T.:** *The Structure of Scientific Revolution*, Chigago 1970
- Latour, B.:** *Science in Action*, Stony Stradford 1987
- ders./Woolgar, S.: *Laboratory Life: The Social Construction of Scientific Facts*, Beverly Hills 1979
- Lewenstein, B. V.:** *Science and the Media*, in: Jasanoff, S., et al. (eds): *Handbook of Science and Technology Studies*, Thousand Oaks 1995, 343-360
- Lüdtke, K.:** *Interdisziplinarität und Wissensentwicklung*, in: *Journal for general Philosophy Science*, 26, 1993, 93-117
- Mulkay, M.:** *Sociology of Science*, London 1991
- ders.: *Science and the Sociology of Knowledge*, London 1970
- Nowotny, H./Scott, P./Gibbons, M.:** *Re-Tinking Science. Knowledge and the Public in an Age of Uncertainty*, Cambridge UK 2001
- Weingart, P.:** *Die Stunde der Wahrheit? Zum Verhältnis der Wissenschaft zu Politik, Wirtschaft und Medien in der Wissensgesellschaft*, Weilerwist 2001
- ders.: *Neue Formen der Wissensproduktion: Fakt, Fiktion und Mode*, in: *TA-Datenbank-Nachrichten*, 8. Jg.(3/4), 1999, 48-57
- ders.: *Science and the Media*, in: *Research Policy*, 27, 1998, 869-879
- ders.: *Wissensproduktion und soziale Struktur*, Frankfurt 1976
- Rheinberger, H.-J./Hagner, M./Wahrig-Schmidt, B. (Hg.):** *Räume des Wissens: Repräsentation, Spur, Codierung*, Berlin 1997

Zur Computersimulation und Visualisierung in den Wissenschaften

Dem Thema der computerbasierten Simulationen und Visualisierung wird bis auf die Fachliteratur in der Mathematik, der Informatik und den Anwenderdisziplinen im wissenschafts-

soziologischen, -philosophischen oder -theoretischen Bereich wenig Aufmerksamkeit geschenkt. Die Fachliteratur der Mathematik und Informatik konzentriert sich auf die Entwicklung neuer Algorithmen, Diskretisierungs- und Visualisierungsverfahren oder Hardwareprobleme. Die Fachliteratur der Anwenderdisziplinen handelt von spezifischen Simulationen, ihren Problemen und Resultaten. Im wissenschaftssoziologischen, -philosophischen oder -theoretischen Bereich finden sich Publikationen zu folgenden Schwerpunkten, wobei darauf hinzuweisen ist, dass es bislang keine Theorie der Simulation und der Visualisierung gibt und dass eine grundlegende Einordnung der Simulation als neue wissenschaftliche Methode und als neue Praxis wissenschaftlichen Forschens fehlt :

a. Arbeiten, die sich mit dem Computer als neuem Instrument der Wissenschaften auseinandersetzen: Coy 1992; Deureese 1995; Krückenberg 1974; Mainzer 1995; Mitcham 1996; Randow 1990.

b. Arbeiten, welche die Simulation in ihrer Anwendung aus der Perspektive einer spezifischen Wissenschaft thematisieren und aufarbeiten. Vor allem in den Sozialwissenschaften finden sich seit den 70er Jahren Arbeiten dazu. Einen guten Überblick gibt die Homepage der Sektion Modellbildung und Simulation der Deutschen Gesellschaft für Soziologie <http://www.uni-koblenz.de/~kgt/DGSMoModSim.htm>. Außerdem: Ahrweiler 1998; Bennett 1995; Bossel 1992; Braitenberg 1995; Burkholder 1992; Conte 1997; Forrester 1973; Gsänger/Klawitter 1995; Harbrodt 1974; Hegselmann 1995; Herz 2000; Holst 1979; Kaufmann/Smarr 1994; Klüver 1995; Liebl 1992; Mertens 1982; Mesarovic/Pestel 1974; Troitzsch 1990; Suleiman 2000.

c. Wissenschaftssoziologische, -theoretische bzw. -philosophische Arbeiten liegen kaum vor. Einer jeweils sehr spezifischen Perspektive widmen sich Andersen 1994 und Paul 1977. Wichtige methodische Aspekte erschließen sich aus der sozialwissenschaftlichen Studie von Bechmann 1995 des Instituts für Technikfolgenabschätzung des Forschungsinstituts Karlsruhe zu methodischen Problemen von Klimasimulationen. Kritische Aspekte zur verantwortungslosen computergestützten Modellierung liefert Booß-Bavenbek 1990; bei Gendolla 1997 finden sich Reflexionen über Simulationsmodelle, und bei Hartmann 1996 gibt es den Versuch einer prozessual orientierten methodischen Einordnung der simulierenden Wissenschaften. Monographien liegen vor von Casti 1997 über das ‚Als-ob‘ der Simulation, von Mader 1996, über die mit der Simulation verknüpfte Theoriebildung sowie von Stäudner 1998 über den Erkenntniswert von Gedankenexperimenten und Computersimulationen in den Naturwissenschaften. Ein Kolloquium des Deutschen Kongresses

der Philosophie widmete sich dem Computer, und an einzelnen Stellen finden sich dort Verweise zur Simulation (Lenk 1993).

d. Die Computervisualisierung ist aufgrund ihrer Anforderungen an die Rechenkapazitäten ein relativ junges Feld in den Wissenschaften. Es gibt einige Publikationen, die sich mit den Anwendungsmöglichkeiten der Visualisierung lehrbuchartig befassen: Earnshaw 1992; Frühauf/Göbel 1992; Fortner 1995; Göbel 1995; Bungartz 1996; Strothotte 1997, 1998.

e. Theoretische Arbeiten zu wissenschaftlichen Bildern: Eine Einteilung wissenschaftlicher Bilder gibt Robin 1992 und Holländer 2000. Stafford 1994; Tufte 1983, 1990, 1996 und Knorr-Cetina/Amann 1990 beschäftigen sich mit wissenschaftlichen Visualisierungskomponenten wie Diagrammen oder Bildlegenden. Lynch 1985; Lynch/Edgerton 1988 und Lynch/Woolgar 1990 geben eine Analyse der Repräsentation in den Wissenschaften. Schickore 1999 beschäftigt sich mit der Sichtbarkeit in der empirischen Forschung. Steinbrenner/Winko 1997 diskutieren verschiedene Bildbegriffe u.a. im wissenschaftlichen Kontext. Sachs-Hombach 1998, 2001 setzt sich im Rahmen des Forschungsbereichs Computervisualistik an der Universität Magdeburg mit der Faktizität computergenerierter Bilder im Rahmen einer allgemeinen Bildtheorie auseinander. Goodman 1995 gibt eine semiotische Analyse zu Bildern und Diagrammen, die von Scholz 1991 im Vergleich mit anderen Bildtheorien diskutiert wird.

- Ahrweiler**, P./Gilbert, N.(eds.): *Computer Simulations in Science and Technology Studies*, Berlin - Heidelberg 1998
- Andersen**, P./Ohstrom, P.: *Katastrophen und Computer*, in: Zeitschrift für Semiotik, Bd. 16, Heft 1-2/1994, 29-50
- Bechmann**, G. et al.: *Sozialwissenschaftliche Konzepte einer interdisziplinären Klimawirkungsforschung*, Karlsruhe 1995
- Bennett**, B.B.: *Simulation fundamentals*, Engelwood Cliffs 1995
- Booß-Bavenbek**, B.: *Gegen unfundierte, verantwortungslose computergestützte Modellierung*, in: Randow, 1990, 138-157
- Bredenkamp**, Horst: *Gazing Hands and Blind Spots: Galileo as Draftsman*, Science in Context 13, 3-4, 2000, 423-462
- Brian**, S. (ed.): *Picturing Knowledge: historical and philosophical problems concerning the use of art in science*, Toronto 1996
- Brickmann**, D.: *Fraktale Dimension in der Chemie*, in: Gerok, W. et al. (Hg.): Ordnung und Chaos in der unbelebten und belebten Natur, Freiburg 1988, 229-247
- ders.: *Wie Chemiker mit Computern reden*, Mitteilung der v. Humboldt Stiftung, 52, 1988, 19-24
- ders.: *Molecular graphics: how to see a molecular scenario with the eyes of a molecule*, in: J. Chem. Phys. 89, 1992, 1709-1721
- ders./Knapp, W.: *Der Computer ersetzt das Labor*, in: Bild der Wissenschaft 3/84, 1984, 38-42
- Bossel**, H.: *Modellbildung und Simulation*, Braunschweig-Wiesbaden 1992
- Bungartz**, H.-J. et al.: *Einführung in die Computergraphik: Grundlagen, Geometrische Modellierung, Algorithmen*, Braunschweig, 1996.
- Burkholder**, L. (ed.): *Philosophy and the Computer*, Boulder - San Frasisco - Oxford 1992
- Braitenberg**, V./Hosp, J. (Hg.): *Simulation. Computer zwischen Experiment und Theorie*, Braunschweig-Wiesbaden 1995
- Canty**, M.: *Chaos und Systeme. Eine Einführung in Theorie und Simulation dynamischer Systeme*, Braunschweig-Wiesbaden 1995

- Casti, J.L.:** *Would-be-worlds. How simulation is changing frontiers of science*, New York 1997
- Conte, R./Hegselmann, R./Terna, P. (eds.):** *Simulating Social Phenomena*, Berlin - Heidelberg 1997
- Coy, W. u.a. (Hg.):** *Sichtweisen der Informatik*, Braunschweig Wiesbaden 1992
- Deureese, J. (ed.):** *Supercomputers in the theoretical and experimental science*, Int. workshop on the use of supercomputers in theoretical Science, New York 1995
- Earnshaw, R.A./Wiseman, N.:** *An Introductory to Scientific Visualization*, Berlin u.a. 1992
- Fellmann, F.:** *Bedeutung als Formproblem - Aspekte einer realistischen Bildsemantik*, in: Sachs-Hombach/Rehkämper (Hg.), 2000, 14-40
- ders.: *Symbolischer Pragmatismus. Hermeneutik nach Dilthey*, Hamburg 1991
- ders.: *Interpretationismus und symbolischer Pragmatismus*, in: Allgemeine Zeitschrift für Philosophie, Heft 15.2, 1990, 51-72
- Fortner, B.:** *The Data Handbook. A Guide to Understanding the Organization and Visualization of Technical Data*, New York 1995
- Forrester, J.:** *World Dynamics*, Cambridge Mass. 1973
- Frühauf, M./Göbel, M.:** *Interactive Scientific Visualization: Algorithms and System*, Fhg-IGD Darmstadt 1992
- Galison, P.:** *Computer Simulation and the Trading Zone*, in: Galison, P./Stump, D.J. (eds.): *The Disunity of Science: Boundaries, Contexts, and Power*, Stanford 1996
- Gendolla, P.:** *Über Simulationsmodelle*, in: Schanze/Ludes (Hg.): *Qualitative Perspektiven des Medienwandels*, Opladen 1997
- Goodman, N.:** *Sprachen der Kunst. Entwurf einer Symboltheorie*, Frankfurt am Main 1995
- Göbel, M./Müller, H./Urban, B. (Hg.):** *Visualization in Scientific Computing*, Wien - New York 1995
- Gsänger M./Klawitter, J. (Hg.):** *Modellbildung und Simulation in den Sozialwissenschaften*, Dettelbach 1995
- Harbrodt, S.:** *Computersimulation in den Sozialwissenschaften*, Band 1 + 2, Reinbeck bei Hamburg 1974
- Hartmann, S.:** *The World as a Process*, in: Hegselmann, R., 1996, 77-100
- Hegselmann, R. et al.:** *Modelling and Simulation in the Social Sciences from the Philosophy of Science Point of View*, Dordrecht 1996
- Herz, D./ Blätte, A.:** *Simulation und Planspiel in den Sozialwissenschaften. Eine Bestandsaufnahme der internationalen Diskussion*, Münster, Hamburg - London 2000
- Holländer, H. (Hg.):** *Erkenntnis, Erfindung, Konstruktion. Studien zur Bildgeschichte von Naturwissenschaft und Technik vom 16. bis zum 19. Jahrhundert*, Berlin 2000
- Holst, P.:** *Computersimulationen 1951 - 1976*, London 1979
- Horwood, N. (ed.):** *Mathematical and Computational Concepts in Chemistry*, Chichester 1986
- Hoßfeld, F.:** »Grand Challenges« - *Wie weit tragen die Antworten des Supercomputing?*, Forschungszentrum Jülich, KFA-ZAM-IB-9117, 1991
- Hoßfeld, F.:** *Wissenschaftliches Rechnen - Motor der Rechenentwicklung*, Forschungszentrum Jülich, KFA-ZAM-IB-9215, 1992
- Husserl, E.:** *Die Krisis der europäischen Wissenschaft und die transzendente Phänomenologie. Eine Einleitung in die phänomenologische Philosophie*, Den Haag 1976
- Jungk, R.:** *Menschen im Jahr 2000*, Frankfurt 1969
- Kaufmann, W.J./Smarr, L.:** *Simulierte Welten. Moleküle und Gewitter aus dem Computer*, Heidelberg 1994
- Knorr-Cetina, K./Amann, K.:** *Image Dissection in Natural Scientific Enquiry*, in: *Science, Technology, and Human values*, vol. 15(3), 1990, 259-283
- Klüver, J.:** *Soziologie als Computerexperiment*, Braunschweig-Wiesbaden 1995
- Kremer, M. (Hg.):** *Supercomputingcenter'94*, HLRZ Jülich, 1994
- Krückeberg, F. et al. (Hg.):** *Computer und Gesellschaft. Nutzen und Gefahren einer modernen Technologie*, Stuttgart 1974
- Lenk, H. (Hg.):** *Neue Realitäten - Herausforderungen der Philosophie*, Berlin 1995
- Liebl, F.:** *Simulation*, München 1992
- Lohse, H.:** *Virtuelle Seitenblicke*, in: OS/2 Inside, 10, 1995, 94-97
- Lynch, M.:** *The Externalized Retina: Selection and Mathematization in the Visual Documentation of Objects in the Life Sciences*, in: *Human Studies* 11(2/3), 1991, 81-109
- ders./Edgerton, S.: *Aesthetics and Digital Image Processing: Representational Craft in Contemporary Astronomy*, in: *Sociological Review Monograph* 35, 1988, 184-220
- ders./Woolgar, S. (eds.): *Representation in scientific practice*, Cambridge MA 1990
- Mader, A.:** *Computersimulation: Möglichkeiten zur Theorienbildung und Ergebnisinterpretation*, St. Augustin 1996
- Mainzer, K.:** *Computer - Neue Flügel des Geistes?*, Berlin New York 1995
- ders.: *Chemie, Computer und moderne Welt*, in: Mittelstrass, J./Stock, G. (Hg.): *Chemie und Geisteswissenschaften*, Berlin 1992, 113-138
- Mattern, F.:** *Simulation als Grundprinzip des wissenschaftlichen Rechnens*, in: *Thema Forschung, Zeitschrift der TH Darmstadt* 2/ 1995, 14 - 25

- Mertens, P.:** *Simulation*, Stuttgart 1982
- Mertins, K.:** Planungssicherheit durch Simulation, in: *Technica* 9, 1993, 12-18
- Merz, M.:** *Multiplex and Unfolding: Computer Simulation in Particle Physics*, in: *Science in Context* 12, 2, 1999, 293ff
- Meuer, H-W./Schumacher R.:** *Höchstleistungsrechner im Universitätsbereich der Bundesrepublik*, in: *PIK* 18/1 1995, 35-38
- Mesarovic, M./Pestel, E.:** *Menschheit am Wendepunkt*, Stuttgart 1974
- Mitchel, W.J.T.:** *Picture Theory. Essays on Verbal and Visual Representation*, Chicago - London 1994
- Müller-Krumbhaar, H.:** *Einleitung zu: Computersimulation in der Physik*, Vorlesungsmanuskripte des Instituts für Festkörperforschung, KFA Jülich, 1998, 1-19
- Paul, S.:** *Wesenszüge der mathematischen Modellierung physikalischer und biologischer Sachverhalte*, in: *Dt. Z.f. Philosophie* 25/1, 1977, 212-226
- Popper, K.:** *Logik der Forschung*, Tübingen 1989
- Randow, G.v. (Hg.):** *Das Kritische Computerbuch*, Dortmund 1990
- Robin, H.:** *Die wissenschaftliche Illustration. Von der Höhlenmalerei zur Computergraphik*, Basel – Boston – Berlin 1992
- Rötzer, F.:** *Der Betrachter als Produzent? Zur Kunst der Rezeption im Zeitalter technischer Medien*, in: *Welsch, W./Pries, Ch. (Hg.): Ästhetik im Widerstreit*, Weinheim 1991, 129-142
- Sachs-Hombach, K./Rehkämper, K.:** *Bild - Bildwahrnehmung – Bildverarbeitung*, Interdisziplinäre Beiträge zur Bildwissenschaft, Wiesbaden 1998
ders.: *Vom Realismus der Bilder*, Magdeburg 2000
- Sachs-Hombach, K./Schirra, J.:** *Computervisualistik als angewandte Bildwissenschaft*, in: *Hess-Lüttic, E. (Hg.): Medien, Texte und Maschinen*, Wiesbaden 2001, 117-137
- SCAI [1998]:** *Progress-Report, Institute for Algorithms and Scientific Computing (SCAI)*, GMD St. Augustin
- Schickore, J.:** *Sehen, Sichtbarkeit und empirische Forschung*, in: *Journal für General Philosophy of Science*, 30, 1999, 273-287
- Scholz, O.:** *Bild, Darstellung, Zeichen. Philosophische Theorien bildhafter Darstellungen*, Freiburg – München 1991
- Stachowiak, Herbert:** *Allgemeine Modelltheorie*, Wien – New York 1973
- Stafford, M.:** *Artful Science. Enlightenment, Entertainment and the Eclipse of Visual Education*, Cambridge, MA 1994
- Städner, F.:** *Virtuelle Erfahrung: eine Untersuchung über den Erkenntniswert von Gedankenexperimenten und Computersimulationen in den Naturwissenschaften*, Dissertation an der Universität Jena 1998
- Steinbrenner, J./Winko, U. (Hg.):** *Bilder in der Philosophie & in anderen Künsten & Wissenschaften*, Paderborn u.a. 1997
- Ströker, Elisabeth [1973]:** *Einführung in die Wissenschaftstheorie*, Darmstadt
- Strothotte, Ch./Strothotte, T.:** *Computational Visualization. Graphics, Abstraction, and Interactivity*, Berlin - Heidelberg 1998
- Strothotte, T.:** *Seeing between Pixels. Pictures in Interactive Systems*, Berlin - Heidelberg 1998
- Suleiman, R./Troitzsch, K./Gilbert, N. (eds.):** *Tools and Techniques for Social Science Simulation*, Berlin 2000
- Troitzsch, K.G.:** *Modellbildung und Simulation in den Sozialwissenschaften*, Opladen 1990
- Trottenberg, Ulrich [1996]:** Tele-Kooperation zwischen New York und Sankt Augustin, in: *Der GMD-Spiegel* 4, 1996, S. 65-68
- Trottenberg, Ulrich [1989]:** *Quantensprünge in der Numerischen Simulation*, in: *Der GMD-Spiegel* 3-4, 1998, S. 7-10
- Tufte, E.:** *Visual Explanation*, Cheshire 1996
ders.: *Envisioning Information*, Cheshire 1990
ders.: *The Visual Display of Quantitative Information*, Cheshire 1983
- Vereecken, H. et al:** *TRACE - A mathematical model for reactive transport in 3D variably saturated porous media*, KFA/ICG-4 Internal Report No. 501494, KFA Jülich 1994
- Wolf, D.:** *Straßenverkehr und Schüttgüter haben vieles gemeinsam*, in: *Internet-Nachrichten und Berichte des Forschungszentrums Jülich* 3/9, 1995, 16-17

Eigene Vorarbeiten

Die computergestützte Simulation und ihre Visualisierung bilden seit 1996 meinen Forschungsschwerpunkt. Zahlreiche Interviews mit Wissenschaftler deutscher Forschungs-

stitute wie den Forschungszentren Jülich und Karlsruhe, der GMD St. Augustin, des Fraunhoferinstituts Darmstadt sowie verschiedener Universitäten sind die Grundlage der theoretischen Arbeiten zu den sozialen Praxen des Simulierens und zur Simulation als dritten Weg der Wissenschaften. Seit 1998 rückt mit der Doktorarbeit verstärkt die semiotische Analyse wissenschaftlichen Arbeitens und der Simulation in den Mittelpunkt.

- Gramelsberger, G.:** *Semiotik und Simulation: Die Fortführung der Schrift ins Dynamische. Entwurf einer Symboltheorie der numerischen Simulation und ihrer Visualisierung.* Doktorarbeit, FU Berlin, Institut für Philosophie, Prof. Dr. Sybille Krämer 2001, 153 pp., (im Druck)
- Gramelsberger, G.:** *Die Ambivalenz der Bilder,* in: Klaus Rehkämper/Klaus Sachs-Hombach (Hg.): *Vom Realismus der Bilder. Interdisziplinäre Forschung zur Semantik bildhafter Darstellungen,* Magdeburg 2000, 55-63
- Gramelsberger, G.:** *Die Intersubjektivität ikonischer Wissensvermittlung und deren Wahrheitsfähigkeit,* in: Wilhelm Hofmann (Hg.): *Die Sichtbarkeit der Macht. Theoretische und empirische Untersuchungen zur visuellen Politik,* Baden-Baden 1999, 61-75
- Gramelsberger, G.:** *Konzeptuelle Aneignungsstrategien und deren Metaphern im Umgang mit dem Internet,* in: Udo Thiedeke (Hg.): *Bildung im Cyberspace. Vom Grafikdesign zum künstlerischen Arbeiten in Netzen. Erprobung eines Weiterbildungskonzeptes,* Projektband I, Opladen 1999, 94-118
- Gramelsberger, G.:** *Theorie – Simulation – Experiment. Computergestützte Simulation als erkenntnistheoretische Erweiterung der Erklärungs- und Prognosemöglichkeiten in den Naturwissenschaften,* Magisterarbeit, Universität Augsburg, Institut für Philosophie und Wissenschaftstheorie, Prof. Dr. Klaus Mainzer, 1996, 148 pp.