

Epistemischer Status – Neue Transformationen

42 - 48 | Schnittstellenfunktion

Transformationsleistungen zwischen Theorie und Experiment / Messung

49 | Diffusion

Durchlässigkeit der Schnittstelle

Die grundlegende These der vorliegenden Studie geht von der Annahme aus, dass Computersimulationen neue Instrumente der Wissensproduktion sind, da sie neue Transformationen zwischen Theorie und Experiment / Messung eröffnen. Sie erfüllen eine spezifische Schnittstellenfunktion zwischen Theorie und Experiment. Dazu ist es notwendig, Teile der Theorie in den Computer zu transferieren. Dies ist nicht im Sinne einer Textverarbeitung oder -darstellung zu interpretieren. Vielmehr wird der Computer als neues Medium des Arbeitens mit Theorien verstanden. Dieser Transfer erfordert die Umgestaltung der theoretischen Darstellungsweisen, ihre Algorithmisierung, Dynamisierung und Diskretisierung. Theorien oder theoretische Modelle werden auf diese Weise zum Laufen gebracht, denn Computer bieten den Vorteil, Zeitbasierte Medien zu sein. Vielfältige Vergleiche lassen sich bezüglich der Simulation anstellen:

- Animierte Gedankenexperimente - Frank Stäudner spricht in seiner Arbeit von Gedankenexperimenten als Metapher für Computersimulationen trotz aller Unterschiede zwischen beiden Formen des Theoretisierens. Gedankenexperimente, die die bloße Vorstellungskraft überwinden und im Computer zur Anwendung kommen;
- Dynamische Modelle - Modelle, die ihren statischen Charakter auf Papier verlieren und eine zeitliche oder gar raumzeitliche Prozessierung erfahren;
- Theory-as-programm – Theorien, die zum Laufen gebracht werden;
- Computerexperimente – Experimente die im Modellbaukasten Computer komplett generierbar, erfassbar und nachvollziehbar sind.

Stäudner, F.: Virtuelle Erfahrung. Eine Untersuchung über den Erkenntniswert von Gedankenexperimenten und Computersimulationen in den Naturwissenschaften, Dissertation an der Universität Jena, 1988

Die Computersimulation lässt sich mit vielen Eigenschaften der Vergleichsmetaphern fassen, doch das ausschlaggebende Kriterium ist die spezifische Anwendung der Simulation. Sie bestimmt, ob es sich eher um ein Gedankenexperiment, ein dynamisches Modell, eine programmierte Theorie oder ein Computerexperiment handelt. Allerdings kommt dem Begriff des dynamischen Modells wohl eine übergreifende Stellung in diesem Portfolio zu.

Der Blick soll im Folgenden auf ein Konzept gelenkt werden, dass dem Simulieren als eine Handlungspraktik Rechnung trägt. Die Idee, Computersimulationen als neue Schnittstellen zwischen Theorie und Experiment / Messung bzw. Theorie und Beobachtung mit spezifischen Schnittstellenfunktionen und Transformationsleistungen zu betrachten, wird anhand konkreter Hinweise aus den Fallstudie diskutiert.

Schnittstellenfunktion

Transformationsleistungen zwischen Theorie und Experiment / Messung

Der Begriff der Schnittstelle ist weder exakt definiert, noch wird er einheitlich verwendet. Schnittstellen dienen der Mensch-Maschine-Kommunikation wie auch der Verknüpfung unterschiedlicher Medien. Im Grunde sind Schnittstellen Übersetzungsleistungen, die von einer Sprache in die andere oder von einem Medium in das andere Informationen transferieren und Prozessinteraktionen ermöglichen. Das konzeptuelle Design von Schnittstellen umfasst die Modellierung der Funktion, der Interaktion und der Daten. Im klassischen Schnittstellendesign von graphischen Benutzeroberflächen für Softwareanwendungen spielt die Usability eine wichtige Rolle und meint den Test der Anwendung auf eine gute Performance für unterschiedliche Plattformen, die Benutzerfreundlichkeit und die Evaluation der Funktionen. Gegebenfalls lässt sich das Konzept der Usability in Hinblick auf Theorie und Experiment / Messung modifiziert für die Simulation verwenden.

Funktion, Interaktion und Daten sind die maßgeblichen Faktoren des Interfacedesigns bzw. der Übersetzungs- oder Transformationsleistungen. Als solche sind sie in das Paradigma der Informationsverarbeitung eingebettet. Sie auf die Simulation als Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment / Messung anzuwenden, erfordert die adäquate Spezifizierung der Faktoren. Als erste Näherung lassen sich folgende Spezifikationen anführen, welche durch die folgende Auswertung der Interviews konkretisiert werden:

- Die Funktion der Schnittstelle Simulation besteht in der Darstellung komplexer Zusammenhänge als Prozesse, also im Moment der Dynamisierung der Theoriebasierten Modelle. Vor allem die Modellierung von Feedbackprozessen wird mit der Simulation möglich.
- Die Modellierung der Daten basiert auf der Diskretisierung und Digitalisierung der Variablen und Parameter im Modell sowie der Experiment- und Messdaten.
- Die Interaktion ergibt sich aus Fragen der Modellierung, die aus der Simulation neue Aspekte in Theorie und Experiment / Messung einbringen. Die Simulation moderiert diese neuen Aspekte.

Funktion

Darstellung komplexern Zusammenhänge als Prozesse

Basis der Dynamisierung von Modellen sind oft Differentialgleichungen wie sich im Falle der genetischen Simulationen zeigt: „...wenn man ein Schema der Reaktionen hat - Diagrammzeichnungen mit Pfeilen, Reaktionen und Rückkopplungen - dann ist es für einen Theoretiker relativ einfach, dieses Schema in Differentialgleichungen zu übersetzen.“ (Herzel, 011, 17-18) Dies ist ein Arbeitsvorgang, der von ersten Skizzen auf Papier zur Simulation im Computer führt: „Als wir mit Forschern im Max-Planck-Instituts für molekulare Genetik zusammen saßen und über die Modellierung von Huntington sprachen, haben wir als erstes - ich habe es sogar hier auf Papier – überlegt, welche Prozesse kennen wir: Das Gen wird

Die Angaben zu den Interviewzitate benennen die nummerierten Abschnitte des Interviews sowie die Seite, auf welcher der entsprechende Abschnitt im Kapitel Fallstudien zu finden ist.

transkribiert,“ (Herzel, 037, 21) „Das war tatsächlich die erste Seite des Modells. Wir fingen an nachzudenken, was wir über die Elementarprozesse aussagen können. Wie modellieren wir diese, damit das Ganze einigermaßen realistisch ist, aber auch nicht nach Unendlich läuft. Dann haben wir uns die Kinetik überlegt. Was wäre der einfachste, sinnvolle Ansatz für die verschiedenen, auf Papier gezeichneten Pfeile? In der nächsten Phase wird es schon präziser: Welche Moleküle spielen eine Rolle?“ (Herzel, 038, 21) Diese ersten Überlegungen sind die Grundlage der Simulation. „Das Modell ist jedoch noch ohne Rückkopplungsschleifen, also ein reduzierter Ansatz. Wenn man Rückkopplungsschleifen integriert, braucht man unbedingt die Computer, dann ist es nicht mehr auf dem Papier zu machen.“ (Herzel, 038, 21) „... das sind Spielzeugmodelle, für die man noch etwas auf Papier rechnen kann. Das sind die aller ersten Schritte. Man lernt Einiges über die Mechanismen, aber es ist noch weiter von der Realität entfernt als die Simulationen, die auch noch sehr abstrakt sind.“ (Herzel, 039, 22) Den einfachen Modellen auf Papier ohne Rückkopplungen sind Grenzen gesetzt. Je komplexer modelliert wird, desto weniger lassen sich die Modelle oder Teile davon ohne Computer abschätzen. „Je mehr ich solche Komponenten, die für sich selbst als relativ einfache Prozesse in diesem Modell behandelt sind, ... kopple und miteinander rückwirken lasse, desto weniger kann ich mit dem „Hausverstand“ die Ergebnisse vorhersagen. Ich muss also wirklich Modell-Läufe durchführen, um das sagen zu können.“ (Feichter, 022, 36)

Kinetik

Rückkopplungen

Mechanismen

Modell-Läufe

Simulation ist notwendig, um die Grenzen der Analytik zu überwinden: „Man könnte ohne Simulationen sonst nur wenige Fortschritte in dem dynamischen Zwei-Schwarze-Löcher-Problem machen. Wir hoffen bald eine experimentelle Wissenschaft zu sein, mit den Detektoren, die Gravitationswellen messen. D.h. wir brauchen ein Verständnis der dynamischen Situation der Schwarzen Löcher. Ich glaube die Simulationen werden immer wichtiger und werden ein immer zentralerer Fokus der Gravitationsphysik.“ (Pollney, 017, 27)

Dynamische Situation

Die Problematik der Simulationsläufe liegt in ihrer Gestaltung (Randbedingungen, Parameter) und Initialisierung (Anfangsbedingungen). Prinzipiell lassen sich beliebige Bedingungen wählen. Man hat die Qual der Wahl, falls es nicht ausreichend theoretische oder empirische Indizien dafür gibt. „Da steckt natürlich die Theorie drin. Unter Theorie versteht man in der Physik zumindest, dass man einen Prozess so isolieren kann, dass man ihn genau beschreiben kann: Im Labor und in den Gleichungen. Das geht aber in der Natur nicht. Wir haben oft das Problem, dass Physiker nicht verstehen, warum wir keine Wettervorhersage machen können. Sie sagen, ihr habt die Gleichungen, warum löst ihr sie nicht? Aber das ist nicht der Punkt. Wir kennen nicht die Anfangsbedingungen, wir kennen nicht die Randbedingungen.“ (Feichter, 023, 36)

Gestaltung

Anfangsbedingungen
Randbedingungen

Um ein theoretisches Modell im Computer zu dynamisieren, bedarf es einiger Anpassungsleistungen wie der Diskretisierung oder eben der Bestimmung von Anfangs- und Randbedingungen. Das Beispiel des Schwarzen Loches in der Gravitationswellen-Simulation macht dies deutlich: „Ein besonderes Problem in der Relativitätstheorie ist gerade bei Schwarzen Löchern auch die Koordinatenwahl. Die Physik ist von den Koordinaten unabhängig, aber der Computer benötigt eine explizite Wahl der Koordinaten, die typischerweise dynamisch während der Evolution getroffen wird.“ (DFG-SFB/Transregio 7, Teilprojekt A5, <http://hpcs3.tpi.uni-jena.de/~sfb/german/mainb5.html>) „Unser Problem ist das Schwarze Loch und die Singularität. Wir müssen es umgehen, um damit zu arbeiten. D.h. wir benutzen

Koordinatenwahl

Randbedingungen

besondere Techniken wie Singularity Excision. Wir schneiden das Zentrum des Schwarzen Loches in der Simulation heraus, d.h. das Schwarze Loch steht nicht drin. Oder wir müssen Randbedingung auf das Loch setzen, die physikalisch zutreffend sein sollten. Aber wir kennen die Physik dort nicht. Wir haben nur die Gleichungen, aber wir kennen die realistischen Randbedingungen nicht. Aber, aus dem Schwarzen Loch, das wir in der Simulation ausschneiden, darf eigentlich keine physikalische Information herauskommen. Wir können sehr einfach mit den Randbedingungen umgehen, auch wenn sie nicht physikalisch sind: Die Informationen dürfen nicht aus dem Schwarzen Loch gelangen.“ (Pollney, 004, 24)

Raumzeitgitter

Eine Besonderheit der Gravitationsphysik ist, dass selbst das Raumzeitgitter, innerhalb dessen sich die Prozesse abspielen, nicht als homogenes Gerüst vorgegeben ist: „Andere Parameter sind, wie man überhaupt die Raumzeit erzeugt: Mit Slicing oder Coordinate Choices. Wir haben keine Koordinaten von Anfang an. In der Klimamodellierung beispielsweise hat man kartesische Koordinaten, man hat eine flache Raumzeit. Für uns können wir das in der Simulation ändern und man braucht die Änderung für die Stabilität.“ (Pollney, 019, 26)

Änderung der
Modellanordnung

Die Simulation erlaubt es, mit dynamischen Modellen zu experimentieren: „Letztendlich ist die Herangehensweise ganz ähnlich wie bei jemanden, der Messungen durchführt. Wir ändern etwas in der Modellanordnung, im System, und schauen dann, wie reagiert das System darauf und versuchen es zu verstehen. Im Idealfall läuft es so: Die Messleute finden irgendetwas, was sie sich nicht erklären können. Und dann versucht man es mit dem Modell zu erklären, versucht es zu simulieren.“ (Feichter, 024,36)

Visualisierung

Eine weitere Funktion der Schnittstelle Simulation liegt in der Visualisierung der Resultate. „Sie ist ziemlich wichtig. Wenn man wissen will, ob die Randbedingungen richtig gestellt sind, oder wo die Stabilitäten liegen, wo der letztendliche Crash liegt, sieht man das nur in der Visualisierung. Auch ob die Gravitationswellen richtig herauskommen. Wir müssen das alles visualisieren.“ (Pollney, 013, 28) Nicht nur die Menge der Daten spielt hier eine Rolle, auch die Tatsache, dass man dynamische Prozesse simuliert, die sich am besten mit bewegten Bildern darstellen und untersuchen lassen. Hier liegt der Vorteil des Zeitbasierten Mediums Computer. Die Visualisierung ist eine wichtige Transformationsleistung: Theorie wird auf diese Weise sichtbar. Sichtbarkeit geht jedoch mit empirischer Konkretisierung einher, d.h. die Sichtbarkeit kann nur für konkrete Parameter, Anfangs- und Randbedingungen erfolgen. Im Falle des Molecular Modelling ist die Visualisierung der entscheidende Vorteil des Simulierens. Stereo-3D Darstellungen, interaktives Eingreifen in die visualisierten Prozesse und die freie Wahl der Perspektive ermöglichen ein Arbeiten mit den Molekülen wie mit realen Objekten. „Mit den Methoden des Molecular Modelling kann sich der Chemiker sozusagen in die Rolle eines Moleküls versetzen und das mikroskopische Geschehen aus dieser Sicht betrachten, er kann in das Geschehen modellhaft eingreifen und Voraussagen wagen, die weit über den Aussagewert konventioneller Modellbetrachtungen hinausgehen.“ (Brickmann, 1988, 23)

Sichtbarkeit der Theorie

Interaktivität

Virtuelle Objekte

Die Funktion der Schnittstelle Simulation besteht in der Darstellung komplexer Zusammenhänge als Prozesse. Um dies zu ermöglichen, sind einige Transformationsleistungen notwendig wie die dynamische Modellierung von Abläufen und sich selbst verstärkenden oder abschwächenden Rückkopplungen. Diese Prozessabläufe müssen für Modell-Läufe in einer

konkreten Anwendung implementiert werden, d.h. es müssen Entscheidungen über die Koordinatenwahl für Anfangs- und Randbedingungen sowie Parameter getroffen werden. Dies unterscheidet Simulationen vom analytischen Arbeiten mit Modellen.

Der Zuwachs für die Grundlage neuer Erkenntnisse liegt in den neuen Möglichkeiten, die sich durch die Transformation der theoretischen Modelle eröffnen: In ihrem dynamischen Ablauf, in ihrer größeren Komplexität, in der Berücksichtigung von Feedbackprozessen, in der Kopplung mehrerer Modelle, in der Anwendung auf den kompletten Skalen- und Parameterraum, in der Beherrschung der Prozesse und der möglichen Veränderbarkeit von Modellanordnungen und in der Visualisierung, die die Prozesse dynamisch präsentiert.

Daten

Diskretisierung und Digitalisierung

Die Arbeit mit Computern setzt die Digitalisierung aller Inputdaten voraus. Das erfordert die Diskretisierung der Daten und ihre Zerlegung in raumzeitliche Koordinaten, Angaben über ihren Typ (ASCII-Zeichen, Byte-Zahlen, Integer-Variablen, Fließkomma-Variablen) sowie ihren Wert, der die eigentliche Information darstellt, die man klassischer Weise von Messgeräten ablas. Diese Transformation analoger Werte in digitale Daten ist die Grundlage der Integration von Messdaten in Computersimulationen. Doch auch die Zustandsgrößen des Systems werden diskretisiert, insofern als ihre Entwicklung während der Simulation schrittweise für Raum und Zeit voranschreitet. Das Finite Differencing der Gleichungen ist dafür die Voraussetzung.

Die Aufbereitung der Fakten in Daten ist die notwendige Transformationsleistung, um Experiment und Messung in die Simulation zu integrieren. *„Als erstes bieten wir Theoretiker auch Service. Wir helfen bei der Auswertung der Daten, z.B. bei den DNA-Chips. Man kann Tausende von Genen gleichzeitig per Computergestützter Auswertung analysieren, wie diese hoch- oder runtergeregelt werden. ... Wir helfen bei der Datenanalyse. Das ist für uns sehr produktiv. Dadurch wissen wir, welche Daten mit welchem Aufwand gewinnbar sind, wie gut die Daten sind und wir lernen natürlich auch sehr viel über das System.“* (Herzel, 021,19) *„Das hilft uns, die Modelle zu konzipieren. Die Modellierung führt dann wieder zu Fragen und wir entwickeln gemeinsam die Experimente. Ein Beispiel für diese Rückkopplungen zwischen Simulation und Experiment ist die Frage: Brauchen wir für die Modellierung Zeitaufgelöste Messungen? Das war in den älteren Studien oft nicht üblich. Man hat die Zellen nach fünf Tagen verglichen und dann festgestellt, dass die Gene hoch- oder runterreguliert waren. Weil wir für die dynamische Modellierung – wir wollen ja Differentialgleichungen lösen, wir wollen die Zeitprozesse im Computer nachvollziehen – unbedingt Zeitreihen brauchen, haben wir die Experimentatoren gebeten, Zeitreihen durchzuführen.“* (Herzel, 022,19)

Datenanalyse

Zeitaufgelöste
Messungen

Zeitreihen

Doch es geht nicht nur um die Aufbereitung vorhandener Daten, denn es *„sind viele Parameter – Zerfallsraten, Reaktionskonstanten, Temperaturabhängigkeiten – nicht bekannt. D.h. man muss bei der Simulation die Parameter oft erst einmal raten bzw. vernünftig wählen. Die Daten fehlen.“* (Herzel, 012, 18) Daten müssen erzeugt werden. Dies kann durch Raten oder vernünftiges Wählen auf Basis von Erfahrungen geschehen oder beispielsweise für Anfangsdaten durch iterative oder stochastische Verfahren erfolgen. Zudem ist es nicht

Datenerzeugung

Signal und Rauschen

ganz einfach die richtigen Daten zu erhalten wie der Beginn der experimentellen Forschung in der Gravitationsphysik verdeutlicht. „In Hannover und in den USA gibt es Detektoren. ... Sie müssen irgendwie das Signal aus dem Rauschen herausfiltern. Sie hoffen, dass sie Gravitationswellensimulation dafür benutzen können, um das Signal vom Rauschen effektiver unterschieden zu können. Das ist der Grund warum wir ziemlich akkurate Simulationen brauchen.“ (Pollney, 015, 26)

Abdeckung
des Parameter-
und Skalenraums

Die Daten müssen in ihrer Auflösung und bezüglich des erfassten Skalenraums mit der Simulation harmonieren. Es „ist natürlich so, dass Messungen immer nur eine kleine Untermenge des Parameterraumes erfassen und eine kleine Untermenge des Skalenraums, überhaupt der ganzen Atmosphäre erfassen können. Bei den Messungen ist es natürlich so, dass je größere sie Skalen erfassen, eben mit Satellitenmessungen, desto unsicher sind die Messungen. Und je sicherer die Messungen sind, desto kleiner ist die Skala. Sie wissen alles über einen Punkt, aber wissen sie dann auch etwas über die Atmosphäre? Letztendlich ist es immer eine Ergänzung. Das Modell kann ihnen den ganzen Skalenraum wiedergeben und den ganzen Parameterraum.“ (Feichter, 016, 34)

Transformationsleistungen sind auch für die Modellierung der Daten nötig. Die Simulation kann nicht nur helfen die richtigen Daten zu erkennen, die Transformation von Fakten in Daten vollzieht sich in zahlreichen Etappen des Filterns, Interpolierens, Kodierens usw. Die Datenanalyse ist mittlerweile ebenfalls Computergestützt. Der Zuwachs für die Grundlage neuer Erkenntnisse liegt in den, durch die digitale Aufbereitung homogenisierten Daten, die sich in die dynamischen Modelle integrieren lassen. Die Generierung von Daten aus Fakten und deren Aufbereitung für die Simulation ist ein Punkt, der bei weiterführenden Forschungen anhand von Fallstudien näher untersucht werden sollte.

Interaktion Fragen der Modellierung

Aus diesen, eher technisch bedingten Transformationsleistungen ergeben sich neue Betrachtungsweisen und Fragen an Theorie und Experiment / Messung. Die Interaktion zwischen beiden wird durch die Simulation als Schnittstelle moderiert und bringt neue Aspekte in die theoretische und experimentelle Forschung ein.

Modellabgleich

Loop zwischen Simu-
lation und Experiment

Mit Simulationen lassen sich unterschiedliche Modellansätze testen: „Das sind leicht unterschiedliche Kinetiken. Wenn man das messen könnte, hätte man Hinweise welcher Modellansatz korrekter ist.“ (Herzel, 017, 18) Und die Simulation nimmt Einfluss auf die Struktur der Experimente. Dabei entsteht ein „Loop“ zwischen Simulation und Experiment. „Das ist das angestrebte Ziel: Ein Loop. Man lernt vom Experimentator: Was ist das Problem? Was weiß man? Er hat in der Regel einen sehr guten Literaturüberblick. Dann simuliert man mehr oder weniger ins Blaue. Man stellt dumme Fragen an den Experimentator. Das ist vielleicht das Wichtigste und er antwortet dann typischerweise: Das habe ich mir noch nie überlegt? Ist das denn so wichtig? Zum Beispiel: Wie groß sind die Konzentrationen verschiedener Signalmoleküle? Kann man das deterministisch oder stochastisch simulieren? Ist der Feedback überhaupt schnell genug für das System? Wie lange dauert das? Was für eine Funkti-

on ist das, mit der sich die Aggregate bilden? Usw. Das sind typische Fragen der Theoretiker, die bei der Modellierung benötigt werden und die oft nicht im Mittelpunkt der experimentellen Untersuchung stehen. Dann wird nachgedacht und es stellt sich heraus, das sind interessante Fragen. Man kann wirklich eine Menge lernen, wenn man das sorgfältig misst. Und dann werden die Experimente entworfen, meistens gemeinsam.“ (Herzel, 019, 18-19)

Strukturierung von Experimenten

Die Interaktion via Simulation findet in beide Richtungen statt. Auch Erkenntnisse für theoretische Überlegungen ergeben sich aus der Simulation. „Zum Beispiel wissen wir aus der Modellierung, dass diese innere Uhr eine negative Rückkopplungsschleife hat. ... Aus der Modellierung wissen wir, damit eine Rückkopplungsschleife funktioniert, braucht man eine Verzögerung, die ungefähr ein Viertel der Periode beträgt.“ (Herzel, 027, 20) „Wir betrachten dieselben Probleme wie die Experimentatoren, aber von einer anderen Seite. Allein die Begriffe Switch/Schalter. Diese werden zwar implizit auch von Biologen benutzt, sie nennen es dann Check Point oder Transition Point. Aber es ergibt sich für sie nicht sofort die Frage: Welche Mechanismen führen dazu? Durch welche Feedbacks wird es reguliert? Für uns, sobald wir einen Switch sehen, wissen wir, da ist Kooperativität zugange, da gibt es wahrscheinlich einen positiven Feedback. Wir sehen es mit anderen Augen. Dadurch gibt es tatsächlich neue Fragestellungen.“ (Herzel, 035, 21)

Abgleich zwischen Simulations-Beobachtung und Experiment-Beobachtung

Prozessorientiertes Denken

In der Gravitationsphysik ist das Ziel der Simulation explizit auf die Interaktion zwischen Theorie und Messung hin ausgerichtet: „Wir sollen realistische Wellenformen (Wave Forms) simulieren, damit sie es mit ihren Daten vergleichen können.“ (Pollney, 007, 26) „Intensität, Form, und Frequenz der Wellen.“ (Pollney, 008, 26) „Andererseits, wenn sie ein Signal finden, möchten sie wissen, was für ein System sie gesehen haben. D.h. sie benötigen eine Simulation, die ihnen sagt, das waren zwei schwarze Löcher mit dieser Masse und solcher Geschwindigkeit.“ (Pollney, 015, 26) Ohne Simulation wäre die angestrebte Bibliothek von Wellenformen unerreichbar und es gibt direkte Rückwirkungen von der Simulation in die Theorie. „Anfang der 1990er Jahre gab es wichtige Annahmen von Choptuik. ... Er fand ein theoretisches Ergebnis durch Simulationen. Später wurde es analytisch berechnet und bestätigt. Das war für die numerische Gravitationsphysik eine ziemlich wichtige Entdeckung, die er mit Computern entdeckt hatte und die später theoretisch bestätigt wurden.“ (Pollney, 023, 27)

Identifikation von Datenstrukturen

Entdeckung neuer Zusammenhänge

Für die Klimaforschungen gestaltet sich die Interaktion zwischen Theorie und Messung via Simulation etwas anders. Die Simulation ist quasi das Experiment, um Zusammenhänge zu verstehen. „Wir sprechen von Experimenten. Wir betrachten das Modellsystem als Labor. Wir machen ein Experiment, wo wir etwas ändern und sehen, was rauskommt. Das sind Computerexperimente, die wir ja in der Natur nicht durchführen können oder sollten. ... Wir ändern etwas in der Modellanordnung, im System, und schauen dann, wie reagiert das System darauf und versuchen es zu verstehen.“ (Feichter, 024, 36) „Also zum Beispiel: Verstehen wir eigentlich, warum es einen Aufbau der Eiszeiten gegeben hat. ... Und ob man die richtig erfasst hat, d.h. ob verschiedene Modellkomponenten, ob die Subsysteme richtig gekoppelt sind, ob sie es richtig beschreiben, kann man nur feststellen, wenn man von dem jetzigen Klimazustand weit weg geht. Indem man ganz verschiedene Klimazustände beschreibt und möglichst wenig vorschreibt.“ (Feichter, 007, 30)

Ersatz für Experimente

Die Interaktion zwischen Theorie und Experiment / Messung ergibt sich aus Fragen der Modellierung. Indem die Prozesse nicht nur theoretisch beschrieben, sondern dynamisch modelliert werden, d.h. für konkrete Anfangs- und Randbedingungen sowie Parameterwerte zum Laufen gebracht werden, lässt sich einiges über das Funktionieren theoretischer Annahmen erkennen. Die negative Rückkopplungsschleife der inneren Uhr, die der Verzögerung bedarf, ist ein gutes Beispiel dafür, ob ein Prozess in der Dynamisierung tatsächlich funktioniert. Die Ausrichtung der Experimente an die Fragestellung der Simulation wie im Falle der Zeitaufgelösten Messungen, die Identifikation von Datenstrukturen mit Hilfe der Simulation in der Masse der Messdaten oder die Rückwirkung neuer Entdeckungen durch die Simulation auf die Theorie sind Beispiele für die Interaktion zwischen Theorie und Experiment / Messung an der Schnittstelle Simulation. Hanspeter Herzel hat das Verhältnis von Simulation und Experiment treffend als Loop bezeichnet. Letztendlich ist es ein Loop zwischen Theorie und Experiment / Messung moderiert durch die Simulation.

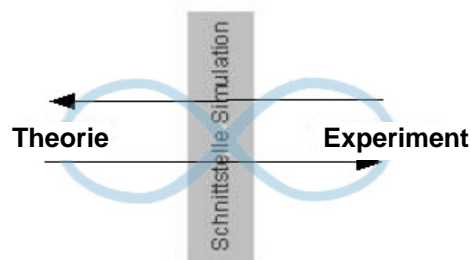


Abb. 24: Simulation als Schnittstelle

Der Zuwachs für die Grundlage neuer Erkenntnisse liegt im Modellabgleich, der neuen Strukturierung von Experimenten, dem Abgleich zwischen Simulations- und Messbeobachtungen, der Identifikation von Datenstrukturen, der Entdeckung neuer Zusammenhänge, der Visualisierung von Theorien und der Prognosemöglichkeit mit Hilfe der Simulation. Simulationen können Experimente ersetzen, sie können aber auch neue Anregungen in die Theorie tragen. Da Simulationen einerseits theoretische Modellläufe sind, mit welchen sich experimentieren lässt, andererseits mit empirischen Daten initialisierte und gestaltete Anwendungen sind, die zum Verstehen von Prozessen, zur Entdeckung neuer Zusammenhänge und zur Prognose dienen, erweitern sie Theorie und Experiment / Messung. Vielleicht nicht als neue, von der Theorie und dem Experiment unabhängige Methode, aber doch als neue Form des Arbeitens mit Theorie und Experiment / Messung.

Die Simulationstypischen Transformationsprozesse basieren auf der Konkretisierung der Numerik betriebenen Anwendungen im großen Umfange, der Dynamisierung der Prozesse, der zunehmenden Komplexität durch die Integration von Feedback-Prozessen und Subsystemen, der Visualisierung als graphischer Oberfläche numerisch konkretisierter Theorien, dem Mapping empirischer Daten zur Initialisierung und Parametrisierung durch die Homogenisierung der Datenstrukturen und des Skalenraums, dem großräumigen Abgleich zwischen Simulations- und Experimentbeobachtung, der Änderbarkeit der Modellanordnung, ihrer Initialisierung und Parametrisierung, dem Experimentieren mit dem Computer. Viele dieser Aspekte sind prinzipiell nicht neu, doch der quantitative Zuwachs modifiziert die Wissensproduktion und die Arbeitsweise von Forschung: Die punktuelle, heterogene Ausrichtung mit geringer Reichweite traditioneller Experimente und Berechnungen strebt hohen Auflösungen und großen Reichweiten entgegen. Die Simulation erlaubt die Erforschung des gesamten Parameter- und Skalenraums und die Automatisierung mit Remote Sensing oder Hochdurchsatzverfahren ermöglicht die massenhafte Generierung von Messdaten.

Diese Massen an Daten diffundieren durch die Schnittstelle Simulation, die dafür geschaffen ist hohe Auflösungen und große Reichweiten zu verarbeiten. Ein konkretes Beispiel ist die Anpassung von Experimenten an die Bedingungen der Simulation, um das Diffundieren der Daten vom Medium des Experiments ins Medium der dynamisierten, theoretischen Modelle zu ermöglichen. *„Mein Kollege Jens Timmer hat mit einer Biologin zusammen eine einfache Signalkaskade in Zeitreihen gemessen und die Modelle entsprechend angepasst. Das ist eine Kunst für sich. Oder die Magdeburger Kollegen um Herrn Gilles: Sie haben ausreichend Zellzyklusdaten für ihr großes Modell, um die Variablen richtig zu fitten.“* (Herzel, 044, 22) Doch es gibt auch Grenzen: *„Die meisten Tumore stammen aus einer einzigen Zelle. In dieser Zelle akkumulieren sich Mutationen, sie vermehrt sich klonal und führt zum Tumor. Eine Simulation, die vielleicht für eine Zell-Linie perfekt ist, ist für die meisten Tumore uninteressant, da sie eine andere Entstehungsgeschichte haben. Man muss also Prinzipien herausfinden, die übergreifend, die allgemeingültig sind. Und das ist mit einfachen Modellen manchmal leichter.“* (Herzel, 045, 22)

Wenn es früher nicht üblich war, Zeitaufgelöste Experimente durchzuführen (vgl. Herzel, 022, 19) und Endresultate zur Überprüfung theoretischer Annahmen dienten, dann liegt hier wohl ein wichtiger Gewinn in der Nutzung von Simulationen. Simulationen erfordern für das Mapping der Daten entsprechend aufbereitete Messdaten und entsprechende Experimente. Darüber hinaus ermöglichen die Theoriebasierten Simulationsmodellen einen Informationszuwachs: *„Und was letztendlich ein Modell ja auch kann: Es kann auf physikalisch sinnvolle Weise zwei Parameter miteinander verknüpfen, die von einander abhängen. Die Feuchte hängt vom Transport ab, die Feuchte hängt von der Temperatur ab. Über ein Modell verknüpfen sie Feuchte und Temperatur und holen damit aus den Messungen mehr heraus.“* (Feichter, 018, 35)

Die Visualisierung von Simulationen erlaubt die Diffusion von Vorstellungen. Das Molecular Modelling beispielsweise transportiert die Vorstellung der Moleküloberflächen zum Zwecke der Anschaulichkeit in die Simulation. Die Oberflächen werden durch die stereo 3D-Visualisierung zu Objekten. Mit Collision Detection oder haptischen Simulationen werden die, durch die Oberfläche abgegrenzten Objekte fassbar und manipulierbar. *„Mit den Methoden des Molecular Modelling kann sich der Chemiker sozusagen in die Rolle eines Moleküls versetzen und das mikroskopische Geschehen aus dieser Sicht betrachten, er kann in das Geschehen modellhaft eingreifen und Voraussagen wagen, die weit über den Aussagewert konventioneller Modellbetrachtungen hinausgehen.“* (Brickmann, 1988, 23) Aber auch abstrakte, in den Theorien verschlüsselte Gestaltungen von Prozesszusammenhängen werden sichtbar. Das sind nur einige Indizien für eine Diffusion an der Schnittstelle Simulation. Aufgabe eines weiterführenden Forschungsprojekts im Zeichen der Schnittstellen-These wäre die Identifikation weiterer Transformationen sowie die detaillierte Darstellung der Diffusion anhand von Fallbeispielen. Ziel sollte die genauere Beschreibung der Schnittstelle Simulation für Theorie und Experiment / Messung, aber auch für Theorie und Beobachtung sein. Aus den detaillierten Beschreibungen könnte dann eine Theorie der Diffusion gewonnen werden.