

## Ausblick

### Kooperieren

e-Science : Umstrukturierung der Forschungslandschaft

Hoßfeld, F.: *Grand Challenges – wie weit tragen die Antworten des Supercomputing*, FZ Jülich ZAM-IB-9117, 1991

Albus, S.: *Zahlen statt Zellen*, in: *Max Planck Forschung* 2/2002, 42-47

Stefan Albus interviewt in diesem Artikel Dr. Angela Stevens, die am Max Planck Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften die Forschergruppe Mathematische Biologie leitet. [www.mis.mpg.de/as/](http://www.mis.mpg.de/as/)

Denning, P.: *Computing, Applications, and Computational Science*, in: *An ACM Response: The Scope and Directions of Computer Science*, *Comm. ACM* 34, 10, 1001, 121-131

ACM Homepage  
[www.acm.org](http://www.acm.org)

Technomathematik der FH Aachen [23]

SFB 438 [24]

Simulieren ist ein interdisziplinäres und Teamorientiertes Geschäft. Sieht man von kleineren Simulationen ab oder von Simulationen, die bestehende Softwarelösungen nutzen, besteht ein Simulationsteam aus Informatikern und Wissenschaftlern der Anwenderdisziplinen. Wenn nötig, kommen Mathematiker hinzu. Dabei gelten nicht die Rechnerkapazitäten, sondern die Mathematik als kritische Ressource der Zukunft (vgl. Hoßfeld, 1991). Während die theoretische Physik fast synonym zu Mathematik gesehen wird, vollzieht sich die Annäherung an die Mathematik in anderen Disziplinen erst in letzter Zeit. Die *Mathematische Biologie* beispielsweise ist ein neuer Bereich, der nicht nur für die Biologie fruchtbar ist: „*In der Biologie haben wir es mit Fragestellungen zu tun, die für uns Mathematiker ungewöhnlich sind. Daraus können auch wir ganz neue Impulse für unsere Arbeit schöpfen.*“ (Stevens im Gespräch mit Albus, 2002, 46) Natürlich ist auch die Informatik gefragt: Bereits zu Beginn der 1990er Jahre rief die ACM *Association of Computing Machinery* zu einem neuen Selbstverständnis der Informatik auf: „... *encourage more computing researchers to embrace computational science by joining in projects with physical scientists, bringing their expertise in algorithms and architects*“. (Denning zitiert nach Hoßfeld, 1991, 2) Dieser Entwicklung zollen einige Universitäten mit interdisziplinären Studiengängen Rechnung. So verknüpft die Fachhochschule Aachen für ihren Studiengang *Technomathematik* die Fächer Angewandte Mathematik, Informatik und Technik und verfolgt dabei die Studienziele: *Simulation komplizierter Phänomene, Visualisierung, Reduktion der Datenfluten*. Ebenso ist die Forschung zu neuen Methoden und Anwendungen der Simulation selbst meist interdisziplinär organisiert. Beispielsweise arbeiten im DFG Sonderforschungsbereich 438 *Mathematische Modellierung, Simulation und Verifikation in Materialorientierten Prozessen und intelligenten Systemen* die Fakultäten Physik, Mathematik, Maschinenwesen, Informatik und Medizin der TU München, die Institute für Mathematik und Physik der Universität Augsburg sowie das Münchener Klinikum Rechts der Isar zusammen.

Doch die Simulation fördert auch die interdisziplinäre Zusammenarbeit der Anwenderdisziplinen. Johann Feichter hat dies anschaulich für die Klimaforschung beschrieben. „*Wir haben jetzt die Klimamodelle um Vegetationsmodelle erweitert, wir interessieren uns für Mikrobiologie in den Böden, weil da Spurenstoffe aufgenommen und abgegeben werden. Wir interessieren uns für marine Biosphäre, d.h. wir arbeiten mit Zoologen zusammen. Wir arbeiten teilweise auch mit Wirtschaftswissenschaftlern zusammen, weil es auch um Emissionsszenarien, Energieszenarien usw. geht. Es ist unsere Erfahrung, dass es nur funktioniert, wenn wir auch einen Zoologen hier im Haus haben, einen Vegetationskundler im Haus haben, mit dem wir uns ganz intensiv austauschen können und der dann versteht, was wir machen. Er ist dann der Mittler zu den anderen Instituten.*“ (Feichter 001, 29) Dabei werden die Modellvorstellungen der anderen Disziplinen üblicher Weise an die Bedürfnisse und Skalen der Klimaforschung angepasst. „*Meistens beginnt die Modellentwicklung erst als Folge der Zusammenarbeit. Einfach weil ein Mikrobiologe vielleicht Modellvorstellungen entwickeln wird, um seine eigenen Messungen zu interpretieren. Aber das sind so kleinskalige Modelle, die können wir für Klimamodellierung überhaupt nicht verwenden. Wir arbeiten auf Skalen von Hunderten von Kilometern. Da versuchen wir Prozesse zu beschreiben, die vielleicht teil-*

weise im Nanobereich liegen, wenn ich an Aerosolpartikel denke. Es ist ein neues Denken für viele Leute, dass solche Modelle in Zusammenarbeit gemacht werden.“ (Feichter, 003, 29)

In der Gravitationsphysik ist die Kooperation international orientiert. Mathematiker, Informatiker und Gravitationsphysiker arbeiten auf internationaler Ebene zusammen und entwickeln gemeinsam Simulationsmodellen, die mehrere tausend Zeilen Code umfassen. Dazu ist eine entsprechende Softwareumgebung nötig, welche die problemlose Kooperation ermöglicht. „Wir benutzen ein Framework: CactusCode. Das ist ein Framework für die Parallelisierung ... Man kann neue Gleichungen, neue Tools integrieren. CactusCode ist ein zentrales Framework und wir schreiben Thorns (Dornen) dafür. Thorns sind Programmstücke mit bestimmten Funktionen. Die zentralen Gleichungen sind ein Thorn, die Messung der Gravitationswellen ein anderer. Der Horizon Finder, der den Rand des Schwarzen Loches findet, ist ein weiterer Thorn. Jeder Forscher arbeitet auf seinem eigenen Thorn und alles arbeitet zusammen. Das ist die gesamte Simulation. Die Benutzung dieses Tools für unsere Codes macht es einfach zusammenzuarbeiten und es macht es einfach, neue Ideen zu integrieren. Wir nehmen einfach einen Thorn heraus und fügen einen neuen ein. Das ist für die langfristige Stabilität des Codes sehr gut.“ (Pollney, 012, 27)

*“The name Cactus comes from the design of a central core (or “flesh”) which connects to application modules (or “thorns”) through an extensible interface. Thorns can implement custom developed scientific or engineering applications, such as computational fluid dynamics. Other thorns from a standard computational toolkit provide a range of computational capabilities, such as parallel I/O, data distribution, or checkpointing.” [25]*

Die internationale Zusammenarbeit ist im Falle der Gravitationsphysik Alltag „Wir [Albert Einstein Institut] haben seit letzter Woche ein Cluster mit 265 Prozessoren. Das ist ziemlich gut. Das erlaubt uns große Testmodelle zu simulieren. Doch die wirklich großen Simulationsläufe sind auf Supercomputer und Hochleistungsrechner in Garching und auch in den USA. Wir haben umfangreiche Allocations auf Supercomputern in den USA, auf welchen wir die größten Simulationen laufen lassen. ... NCSA Illinois National Center for Supercomputing Applications, auch an der Louisiana State University, am Pittsburgh Supercomputing Center und NERSC National Energy Research Scientific Computing Center.“ (Pollney, 016, 27) Denis Pollney wies in dem Gespräch darauf hin, dass man sich vom Grid Computing in naher Zukunft Unterstützung erhofft. Dieses neue Paradigma der Computational Science ist wie einleitend erwähnt für national und international kooperierende, Experiment- und Simulationsintensive Disziplinen konzipiert.

## e-Science

Die Gravitationsphysik ist paradigmatisch für die Umstrukturierung der Forschungslandschaft, wie sie sich in zahlreichen Disziplinen ankündigt oder bereits etabliert ist. Grid Computing schafft dafür in naher Zukunft die benötigten Strukturen. „Grid computing, most simply stated, is distributed computing taken to the next evolutionary level. The goal is to create the illusion of a simple yet large and powerful self managing virtual computer out of a large collection of connected heterogeneous systems sharing various combinations of resources. The standardization of communications between heterogeneous systems created the Internet explosion. The emerging standardization for sharing resources, along with the availability of higher bandwidth, are driving a possibly equally large evolutionary step in grid computing.“ (IBM Redbook, 3) Für die Wissenschaften bedeutet dies: Simulations- und Experimentintensive Wissenschaftsbereiche werden unter einer Plattform integriert. Detektoren, Expe-

*IBM Redbook: Introduction to Grid Computing with Globus, 2002 [26]*

UNICORE  
www.unicore.org

EUROGRID  
www.eurogrid.org

Dr. Rüdiger Krahl ist beim Projektträger DLR für das Grid Computing in Deutschland zuständig. Nach seiner Aussage spielt das Grid Computing zukünftig die maßgebliche Rolle für das Handling der datenintensiven Forschung.  
www.pt-dlr.de/PT-DLR

IVO der EU  
www.ivoa.eu

DataGrid der EU [27]

WTCW Wetenschap & Technologie Centrum Watergraafsmeer: Virtual Lab e-Science. Towards a new Science paradigm, Feb. 2003 (Projektantrag; Konsortium von 21 Partnern aus Wissenschaft und Industrie; Koordination: L.O. Hertzberger, Universität Amsterdam)

perimentiergerätschaften und Simulationsrechner verschmelzen zu einer Arbeitsumgebung. Virtuelle Labore und Forschungsumgebungen entstehen. Das erfolgreichste deutsche Projekt ist UNICORE *UNiform Interface to COmputing RESources*, dessen Entwicklung 1997 begann und das die Basis für das im November 2000 gestartete EUROGRID ist. „*The EUROGRID IST project will establish a European domain-specific GRID infrastructure based on the UNICORE system.*“ (UNICORE, <http://www.unicore.org/unicore.htm>) Aktuell wird an der Interoperationalität mit dem US-amerikanischen Grid-System GLOBUS gearbeitet.

Ein ambitioniertes Projekt ist das niederländische *Virtual Lab e-Science*. Während es sich beim IVO *International Virtual Observatory* der EU oder dem *DataGrid* des CERN um spezielle Labore handelt, soll beim *Virtual Lab e-Science* die Vernetzung fast aller Simulations- und Experimentintensiver Wissenschaftsbereiche der Niederlande und ausländischer Partner vollzogen werden. „*This networked R&D environment comprises resources as: computing power, data storage, networks, experiments, raw data, visualization equipment, information, and published results. It also has to accomodate the growing number of mixed and continuously changing private-public research coalitions. Networked R&D leads to a new paradigm in scientific research called e-Science. It is the new way of doing science enhanced through global coloboration using advanced computing and communication technologies and driven by floods of data coming from variety of sources.*“ (WTCW, 16) Dabei spielt für die e-Science die Idee der Verschmelzung von *in vitro*, *in vivo* und *in silico* Daten eine wesentliche Rolle. „*Furthermore, many fields in experimental science have an increasing demand to combine data from in vivo, in vitro and in silico experimentation. This not only requires large amount of compute power and storage, but also demands the combination of data sets from simulation with real life experiments.*“ (WTCW, 23)

Für immer mehr Disziplinen wird diese Form der Kooperation alltäglich werden. Die institutionellen Bedingungen sind entscheidend für den Erkenntnisfortschritt. Das Handling enormer Datenkapazitäten erlaubt die Modifikation der Wissensproduktion: Die flächendeckende Ausrichtung von Experimenten mit Hochdurchsatzverfahren in der Genetik, von Messungen mit Remote Sensing Verfahren in der Klimaforschung und von Simulationen deckt immer größere Bereiche des Skalen- und Parameterraums in immer feinerer Zeitauflösung ab. Die Kapazitäten erlauben es, zunehmend komplexere Modelle zu simulieren und vermehrt rückgekoppelte Prozesse zu berücksichtigen. Es ist zu erwarten, dass sich die wachsende Datendichte und zeitliche Verfeinerung der Messungen und die wachsende Komplexität der Simulationen irgendwann in manchen Disziplinen dem Optimum des 1:1-Mapping der Daten annähert. Damit würde die Simulation als Schnittstelle ihre volle Funktion entfalten und könnte uneingeschränkt die Diffusion der Daten zwischen Experiment- und Messdetektierter Realwelt und Theorienbasierter Modellwelt im Computer moderieren.

Die Explorationsstudie steht im Zeichen der Frage: Wie wird in verschiedenen Disziplinen simuliert? Dabei hat sich die skizzierte und exemplarisch dargestellte Untersuchungsmethode (Interviews, Gespräche und Beobachtungen vor Ort, zur Verfügung gestellte Notizen u.m. als Datenbasis der qualitativen Auswertung) als sehr fruchtbar erwiesen. Es zeigt sich anhand konkreter Beispiele, dass Simulationen Schnittstellen zwischen Theorie und Experiment / Messung sind, dass sie die Diffusion von Daten ermöglichen, dass sie komplexe, rückgekoppelte Modelle in ihrer Dynamik darzustellen vermögen und dass sie Theorie sichtbar machen. Sie erlauben ein neues Arbeiten mit Theorie in einem experimentellen Sinne.

Die Explorationsstudie kann jedoch nur einen ersten Eindruck vermitteln. Ein weiterführendes Forschungsprojekt könnte in diesem Sinne eine wesentlich detailliertere Charakterisierung des epistemischen Status wie auch des praxisnahen Paradigmas des Simulierens formulieren. Dabei sollten auch die Gesellschaftswissenschaften mit einem Multiagentenprojekt berücksichtigt werden. Denn es gilt zu untersuchen, ob sich das Konzept der Transformationsprozesse und Schnittstellenfunktion auch auf das Verhältnis von Theorie und Beobachtung anwenden lässt, ob sich das skizzierte Paradigma für komplexe adaptive Systeme bewährt. Folgende Themen haben sich als viel versprechend herauskristallisiert: Datengenerierung, Abgleich zwischen Simulation und Experiment, Kontextualisierung durch Parametrisierung, Validierung, kleine/große Modelle, Denkweisen, e-Science, Sichtbarkeit von Theorien.

- Wie werden experimentelle Daten für die Simulation generiert und aufbereitet?
- Wie sieht der Einfluss der Simulation auf Experiment und Messung konkret aus?
- Wie lösen Simulationen die Phänomenologie der Experimente auf?
- Wie könnte eine Theorie der Diffusion formuliert sein?
- Wie vollzieht sich die Kontextualisierung von Simulationen? Welche Rolle spielen dabei die Parameter, welche die Komplexität und Dynamik der Prozesse?
- Welche weiteren Transformationen zwischen Theorie und Experiment ergeben sich an der Schnittstelle Simulation?
- Welche Validierungspraktiken haben sich etabliert?
- Welche Intentionen verfolgen große bzw. kleine Modelle einer Disziplin? Sind sie unterschiedliche Herangehensweisen, um zu Erkenntnissen zu gelangen?
- Wie strukturieren Modell- und Problemorientiertes Denken die Erkenntnisproduktion?
- Wie gestaltet sich der Austausch zwischen der Simulation als Anwendung und der Simulation als Forschungsgegenstand von Mathematik und Informatik?
- Lässt sich das Usability Konzept des klassischen Interfacedesigns in Hinblick auf Theorie, Simulation und Experiment / Messung modifizieren?
- Welche Rückwirkungen zwischen Simulation und institutionellen Bedingungen lassen sich feststellen? Welche Rolle spielt das Paradigma der e-Science in Zukunft?
- Wie vollzieht sich der semiotische Umbau der wissenschaftlichen Erkenntnisgrundlagen? Welchen Einfluss hat dies auf die Wissensproduktion?
- Ist die Simulation und ihre Visualisierung eine vollkommen neue Möglichkeit, um Theorien sichtbar zu machen?