

## 1 COMPUTEREXPERIMENTE

---

Der Einblick in die Klimamodellierung und ihren Umgang mit Computerexperimenten zeigt, dass sich die Meteorologie in den letzten zehn Jahren zu einer paradigmatischen e-Science entwickelt hat. Doch die Meteorologie steht damit nicht alleine da, auch wenn ihre besonderen Voraussetzungen diese Transformationen forciert haben. In nahezu allen naturwissenschaftlichen Disziplinen lassen sich ähnliche Entwicklungen ausmachen. Der Computer als Forschungs-, Erkenntnis- und Prognoseinstrument hat mittlerweile jeden Winkel der wissenschaftlichen Welt erreicht und hinterlässt seine Spuren. Damit hat die zweite Hälfte der wissenschaftlichen Revolution, von der James Glimm in der bereits zitierten Hommage an John von Neumann sprach, begonnen.<sup>1</sup> Für die wissenschaftsphilosophische Verortung der Computerexperimente ist es daher hilfreich, die allgemeinen Bedingungen ihrer Möglichkeit aus dem historischen Kontext sowie dem Fallbeispiel der Klimamodellierung zu rekonstruieren.

- 
- 1 „John von Neumann foresaw that the equations describing scientific phenomena, once expressed in mathematical terms, could be solved numerically, without recourse to routine or repetitive experiment. This vision is nothing less than the second half of the scientific revolution. Throughout four centuries we have expected that a successful scientific theory would have its major concepts expressed quantitatively as numbers and its major relationships expressed as mathematical equations; the truth of this theory was settled by experimental tests and hand calculations, often in idealized situations. The second half of the scientific revolution is no less sweeping in its goals. The solutions of the equations are also to be obtained on mathematical grounds, by numerical computation, without restriction to idealized cases”(Glimm 1990: 185).

## Allgemeine Bedingungen

Wie die historische Rekonstruktion zeigte, gründen Computerexperimente in der wissenschaftlichen Revolution des 17. Jahrhunderts. Die maßgeblichen Leistungen dieser Revolution waren die Substitution lebensweltlicher Wahrnehmungen durch instrumentenbasierte Handlungen (Experimente) und Aufzeichnungen (Messungen) als auch die Quantifizierung und Mathematisierung dieser instrumentenvermittelten Erkenntnisse. Indem die theoretischen Begriffe nicht mehr substantiell, sondern operationell konzipiert wurden – Isaac Newton betrachtete physikalische Vorgänge als Wechselwirkungen von Raum, Zeit und Massepunkten (vgl. Newton 1687) – ließen sie sich als Maße, bezogen auf Raum und Zeit, definieren. Und indem Raum und Zeit nicht mehr als kontinuierliche Größen verstanden wurden, sondern als differenzierbar – und mit dem Differenzialkalkül ein geeignetes mathematisches Instrument zur Erfassung von Veränderung geschaffen worden war – schloss sich der Kreis zwischen Quantifizierung und Mathematisierung realweltlicher Phänomene.<sup>2</sup> Diese Entwicklungen schafften die Voraussetzung für die Neudefinition dessen, was unter wissenschaftlicher Erfahrung und unter Wahrheit, besser gesagt: Evidenz, zu verstehen war. Nicht mehr die allgemeine Einsichtigkeit der Phänomene, wie seit Aristoteles gefordert, war das entscheidende Evidenzkriterium, sondern ihre Quantifizierbarkeit und Berechenbarkeit. Damit war „die Basis dafür gelegt, wahr mit mathematisch zu identifizieren“ (Böhme 1977: 252) und die Legitimation wissenschaftlicher Fakten an mathematische Verfahren und Instrumente zu delegieren.<sup>3</sup> Möglich wurde dies durch die Lockerung der an-

- 2 Dieser Kreis meint den Zusammenschluss der „concepts expressed quantitatively as numbers“ (Messung) mit den „major relationships expressed as mathematical equations“ (Gesetze) und begründet die Basis der strukturellen Isomorphie zwischen mathematischer Beschreibung und Welt (vgl. Glimm 1990).
- 3 In ihrer Studie *Experimentelle Philosophie. Ursprünge autonomer Wissenschaftsentwicklung* rekonstruieren Gernot Böhme, Wolfgang van den Daele und Wolfgang Krohn diesen Übergang als einen Prozess der kognitiven Ausdifferenzierung eines neuen Subjekt-Objekt-Verhältnisses. Rekurrend auf Jean Piaget zeigen sie den Übergang zu einem konstruktivistischen Subjekt-Objekt-Verhältnis auf, dessen Prinzipien auf die Wissenschaft angewandt „Gesetzmäßigkeit der Erfahrung, Fortschrittsbewußtsein, konstruktives Modelldenken“ bedeuten (Böhme, van den Daele, Krohn 1977: 8; vgl. Piaget 1972, 1973). Eine der Folgen dieses neuen Verhältnisses ist die Relativierung der Erkenntnis: „Das Bewußtsein davon, daß die Erkenntnis des Menschen von den Bedingungen abhängt, unter denen er sie beginnt, erfährt die Präzisierung, daß der Mensch zwischen sich und die Natur Instrumente einfügt, von deren Sicherheit er überzeugt ist“ (Krohn 1977: 114).

tiken Exaktheitsforderung und durch das neue ‚Prinzip der Stetigkeit‘ (vgl. Klein 1895).

Indem die zunehmend zahlreicher werdenden, empirischen Einzeldaten unter Gesetze subsumierbar und Prognosen extrapolierbar wurden, transformierte sich die induktiv-deduktive Rekonstruktion der Phänomene in den hypothetisch-deduktiven Forschungsstil der Moderne. Dieser neue Forschungsstil setzte Experimentalforschung mit Präzisionsmessung gleich und koordinierte Experiment, Messung und Theorie in ein und demselben Darstellungsraum: einem durch Koordinaten metrisierten, rein symbolischen Raum der Mannigfaltigkeiten. Dadurch kehrte sich das Verhältnis von Theorie und Empirie um: Hypothesen waren nicht mehr zwingend an vortheoretische Beobachtungen gebunden, sondern konnten durch quantitative Prognosen der mathematisierten Theorien gewonnen und in der messenden Experimentalforschung bestätigt werden. Die Extrapolation avancierte zum maßgeblichen Forschungsinstrument der Moderne.<sup>4</sup> Solange es sich dabei um „empirisch möglichst leicht nachprüfbare bzw. anwendbare singuläre Folgerungen (‚Prognosen‘)“ handelte, konnte deren Richtigkeit oder Falschheit in „den Experimenten usw., entschieden“ werden (Popper 1935/1989: 8). Doch anstelle eines experimentellen Gelingens oder Fehlschlagens trat nun zunehmend die exakte Messung: „Die Antwort, die das Experiment gibt, ist nicht mehr ein einfaches ‚ja‘ oder ‚nein‘, vielmehr ein gemessener Zahlenwert“ (Stichweh 1984: 233) beziehungsweise eine Flut an Messdaten. Doch wenn die experimentellen Antworten komplexer wurden, dann mussten auch die Fragen, in Form von deduzierten Folgerungen, komplexer werden. Damit gelangte die wissenschaftliche Revolution der Neuzeit in der Moderne an ihr vorläufiges Ende, denn die Mathematik konnte mit der Quantifizierung nicht mehr Schritt halten. Ende des 19. Jahrhunderts kehrt sich das produktive Verhältnis des hypothetisch-deduktiven Forschungsstils in ein trial-and-error Verfahren auf Basis empirischer Formeln und eines experimentellen Rechnens um, als: „to replace a computation from an unquestioned theory by direct measurement“ (Goldstine, von Neumann 1946: 4).

Dieser Schnelldurchlauf durch gut dreihundert Jahre Wissenschaftsentwicklung legt die Bedingungen der Ermöglichung von Computereperimenten offen. Die Wissenschaft bedurfte zwingend der Automatisierung der Extrapolation, um den eingeschlagenen Weg fortsetzen zu können. Die Stagnation der Analytik, die bis heute nicht überwunden ist,

4 „Wir [Mathematiker] sind daran gewöhnt zu extrapolieren; das ist ein Mittel, die Zukunft aus der Vergangenheit und aus der Gegenwart abzuleiten“ (Poincaré 1914: 17).

führte in zahlreichen Wissenschaftsdisziplinen zu einem Schisma zwischen Theorie und Empirie. Die analytisch deduzierbaren Folgerungen waren zu simpel, als dass sie praktische Relevanz für die neuen Wissenschaftsbereiche des 19. Jahrhunderts besessen hätten. Die Automatisierung der Extrapolation aber bedeutete, nach der Messung und dem Experiment nun auch die Theorie an Instrumente zu delegieren. Die Mathematisierung, welche die Theorie bereits in ‚symbolische Maschinen‘ (vgl. Krämer 1988, 1991) transformierte hatte, hatte zwar die Voraussetzungen dafür geschaffen. Doch solange ein geeignetes Instrument fehlte, sah sich die Wissenschaft der Stagnation ausgeliefert (vgl. Goldstine, von Neumann 1946). Der frei programmierbare Computer war das gesuchte Instrument, doch erst in den 1940er Jahren gelang es, diese Art von Maschine zu bauen. Denn es ging nicht darum, ein bestimmtes Verfahren zu automatisieren, sondern eine allgemeine Extrapolationsmaschine zu bauen. Dies bedeutete, dass der Zeichengebrauch selbst zu formalisieren und zu mechanisieren war. Vorbild dafür war die Mathematik, ihre rekursive Besonderheit, unendlich viele Zeichen aus einem einzigen Mechanismus (Regel) erzeugen zu können. Sofern sich ein mechanisch ausführbarer Mechanismus für eine bestimmte Folge von Zeichen angeben ließ, hatte man einen Algorithmus zur Beschreibung des durch die Zahlenfolge strukturell dargestellten Gegenstandsbereichs gefunden. Die Delegation dieses Mechanismus an die Maschine erlaubte es nun, die Generierung der Zahlenfolgen fast ins Unendliche weiterzuführen, also zu extrapolieren und somit die aus infinitesimalen Massenpunkten bestehende, physikalische Welt in ihrer Veränderung für ein diskretes Berechnungsraster ein gutes Stück weit zu berechnen.<sup>5</sup> Was zuvor per Hand nur ein kleines Stück weit in den mathematischen Möglichkeitsraum verlängerbar war, wird durch die steigende Rechenkraft der Computer immer weiter vorangetrieben. Immer zahlreicher lassen sich die Punktbahnen in den mathematischen Möglichkeitsraum hinein errechnen und dadurch zunehmend dichtere, quantitative Bilder des sich entfaltenden Möglichkeitsraumes generieren.<sup>6</sup>

- 
- 5 Die entscheidende Frage war nun nicht mehr nur, ob es einen solchen Mechanismus gab, sondern ob ein Mechanismus so beschaffen war, dass eine Maschine ihn ausführen konnte und dies in effektiver Zeit (primitive Rekursivität (for-Schleife) und  $\mu$ -Rekursivität (while-Schleife)).
- 6 Was 1670 mit Isaac Barrows senkrecht zur Zeitlinie gezogenen, abnehmenden Geraden zur Veranschaulichung von Momentangeschwindigkeiten begann, sind heute dichte Bilder von Projektionen zukünftiger Klimaentwicklungen oder dreidimensionale Animationen von Molekülen (vgl. Barrow 1670; Gramelsberger 2001).

Ob die so erzeugten Trajektorien weiterhin realen Entwicklungslinien entsprechen,<sup>7</sup> beispielsweise als Projektionen zukünftiger Klimaszenarien, kann durch das neuzeitliche Diktum, wahr mit mathematisch zu identifizieren, allein nicht mehr entschieden werden. Hatte noch Newton optimistisch behauptet, „Hypotheses non fingo!“, so lässt sich dies heute auf Basis automatisierter Extrapolationen nicht mehr so einfach postulieren. Der Grund hierfür ist, dass mit zunehmender Komplexität die Garantie der Determiniertheit der Folgerungen, wie sie für analytisch deduzierte Prognosen gewährleistet war, nicht mehr gilt. Solange sich die mathematisierte Wissenschaft in streng deterministischen Systemen bewegt, lässt sich berechenbar mit wahr gleichsetzen. Doch sobald sie diese Systeme hinter sich lässt, kann dieses Evidenzkriterium nicht mehr als alleiniges aufrechterhalten werden, denn der eindeutige Zusammenhang zwischen Annahmen und Schlussfolgerungen ist in komplexen Systemen nicht mehr gegeben.<sup>8</sup> Dadurch ist es nicht immer entscheidbar, ob Extrapolationen ins Fiktive laufen oder ob der extrapolierte Möglichkeitsraum tatsächliche Entwicklungen beschreibt.<sup>9</sup> Dies bedeutet, dass nicht mehr allein die Quantifizierbarkeit und Berechenbarkeit, wie seit Newton und Leibniz gefordert, das alleinige Evidenzkriterium sein kann, da es an Kohärenz verloren hat, vielmehr bedarf es neuer Evaluationsstrategien. Das Beispiel der Klimamodellierung zeigt, welche Versuche aktuell unternommen werden, um solche neuen Strategien zu gewinnen. Obwohl die Simulationswissenschaften erst am Beginn der Entwicklung stehen, lassen sich doch einige interessante Beobachtungen machen.

Zum einen ist absehbar, dass sich der strenge Kohärenzanspruch für komplexe Systeme nicht wiedergewinnen lassen wird und der Traum vom sicheren Wissen ausgeträumt ist. Doch dieser Traum ist bereits seit 1889 ausgeträumt (vgl. Poincaré 1891) und das zu Recht, denn der Tribut war zu hoch: Nur stark idealisierte Systeme konnten dem streng deterministischen Anspruch gerecht werden. Doch solche Systeme lassen sich selten in Anwendungskontexten finden. Das bedeutet, dass unsiche-

- 
- 7 Ob die erzeugten strukturellen Ordnungen von Mannigfaltigkeiten tatsächlich empirischen Sachverhalten wie Messwerten entsprechen, lässt sich aufgrund der Möglichkeit ihrer Berechenbarkeit nicht entscheiden.
  - 8 Dies bedeutet nicht, dass die aktuelle Naturwissenschaft das alte Diktum aufgegeben hätte, aber sein Evidenzanspruch ist geschwächt und muss durch neue Evaluationsstrategien gestützt werden.
  - 9 Dies ist der Grund, warum jeder Simulationslauf eines Computerexperiments mit einem höherer aufgelösten Testlauf verglichen wird. Verhalten sich die Resultate stabil, selbst bei höher Auflösung des Berechnungsgitters, dann kann davon ausgegangen werden, dass man sich der exakten, aber unbekannten Lösung annähert.

re Prognosen zur approximativen Logik der Computereperimente gehören, dass sich aber der Grad der Unsicherheit zunehmend durch Metriken bestimmen lässt. Das Vorgehen der Klimaforschung anlässlich der beiden letzten IPCC Berichte zeigt, wie mühsam und aufwendig es ist, solche Metriken auf Komponenten- und Systemebene zu entwickeln. Doch es ist derzeit der beste Weg, um den Mangel an Kohärenz durch einen gewissen Grad an Kohäsion auszugleichen. Während die Kohärenz sich automatisch aus der Strenge des Verfahrens – beispielsweise der Deduktion – ergibt, muss die Kohäsion hergestellt werden.<sup>10</sup> Forschungspraktisch bedeutet dies, Modelle unter standardisierten Bedingungen zu testen und zu vergleichen, um Resultate zu erzielen, die als ‚likely‘ und unter besten Bedingungen als ‚very likely‘ einzustufen sind, also mit 66- bis 90-prozentiger oder gar mit mehr als 90-prozentiger Wahrscheinlichkeit eintreten. Die Analyse der Klimaforschung hat auch gezeigt, dass eine hohe Kohäsion zwischen Projektionen und tatsächlichen Entwicklungen nur unter bestimmten Bedingungen zu erreichen ist. Es erfordert einen gewissen Grad an Standardisierung, an Vergleichbarkeit der verschiedenen in-silico Experimentalsysteme sowie an Referenzdaten, basierend auf einer relativ guten Datenlage an empirischen Informationen. Oder in den Worten Vilhelm Bjerknes: „1. Man muß mit hinreichender Genauigkeit den Zustand der Atmosphäre zu einer gewissen Zeit kennen“ (Bjerknes 1904: 1). Desweiteren setzt eine hohe Kohäsion ein relatives Vertrauen in die zugrundeliegenden Theorien voraus. Im Falle der Meteorologie gilt das Motto: Je physikalischer ein Prozess beschrieben und modelliert werden kann, desto besser. Dabei recurriert die physikalische Beschreibbarkeit auf first principles, also auf Newtons Mechanik. Noch einmal mit Bjerknes gesprochen: „2. Man muß mit hin-

---

10 Der Begriff der Kohäsion ist der Literaturwissenschaft entlehnt, die damit den textlichen Zusammenhalt, im Unterschied zur inhärenten Struktur (Kohärenz des Textes), bezeichnet. Im vorliegenden Falle wäre zwischen einer Kohärenz des Verfahrens (analytische Deduktion zur Generierung von Aussagen) und der Kohärenz zwischen diesen Aussagen und dem, worauf sich die Aussagen beziehen (untersuchtes Realsystem) zu unterscheiden. Letztere wird bislang in den mathematisierten Naturwissenschaften als strukturelle Isomorphie der Gesetze durch Experiment und Messung als hinreichend begründet angesehen. Im Falle der Kohäsion gestaltet sich die Situation schwieriger, aber auch hier geht es zum einen um die Kohäsion des Verfahrens, beispielsweise durch Modellvergleich und Evaluation getesteter Simulationsmodelle, aber auch um die Kohäsion der mit Computereperimenten generierten Aussagen und den untersuchten Realsystemen. Dass trotz der schwächeren Evidenzbedingungen der Kohäsion die grundlegende Voraussetzung der strukturellen Isomorphie zwischen mathematischer Beschreibung und Welt in Frage gestellt wird, lässt sich in den Computational Sciences nicht beobachten.

reichender Genauigkeit die Gesetze kennen, nach denen sich der eine atmosphärische Zustand aus dem anderen entwickelt“ (Bjerknes 1904: 1). Dies zeigt, dass Computerexperimente zwar neue Berechnungsinstrumente sind, dass sie aber im Falle der deterministischen Simulation nach wie vor im klassischen Wissenschaftsverständnis der Neuzeit verankert sind. Mit diesem Ansatz geht in der Regel ein entsprechendes Systemverständnis der simulierenden Wissenschaft einher. Klima als System verstanden, lässt sich in Subsysteme unterteilen, die den grundlegenden Gesetzen ebenso folgen, wie das Gesamtsystem. Anders gewendet: Digitales Klima lässt sich aus vielen Subsystemen konstruieren und modellieren, die alle miteinander in Interaktion stehen. Erdsysteme sind die besten Beispiele hierfür.<sup>11</sup> Schließlich liegt es zwar in der approximativen Logik der Computerexperimente begründet, dass die Determiniertheit der Folgerungen nicht mehr gegeben ist und dass die exakte, aber unbekannte Lösung für ein Berechnungsraster nur angenähert werden kann. Aber auch hierfür haben sich mit den Stabilitätsanforderungen (vgl. von Neumann, Richmyer 1947) und den Konvergenztests Metriken entwickelt, welche es erlauben, die Güte der approximierten Resultate zu testen und zu beurteilen. Zwar handelt es sich dabei um Erfahrungswerte und sozusagen ‚empirische Tests‘, die jeglicher strengen Beweiskraft entbehren, die sich aber in der Forschungspraxis als gangbarer Weg herauskristallisiert haben, wie der Laxsche Äquivalenzsatz dokumentiert.

Das bisher behandelte Beispiel der Klimamodellierung und die aufgezeigten allgemeinen Bedingungen nehmen Bezug auf eine bestimmte Klasse von Computerexperimenten: Deterministische Simulationen auf Basis partieller Differentialgleichungen, die sich seit dem 17. Jahrhundert mit der Entwicklung des Differentialkalküls für die Beschreibung von Prozessen in den Naturwissenschaften etabliert haben. Auch wenn diese Klasse von Computerexperimenten sicherlich die am meisten genutzte ist, so gibt es weitere Arten, die auf anderen mathematischen Verfahren basieren (vgl. Gramelsberger 2004). Stochastische Simulationen wie die Monte-Carlo-Simulation gehören ebenso dazu (vgl. Galison 1996), wie probabilistische Simulationen, die auch in der Klimamodellierung eingesetzt werden und Klima als ein rein statistisches und nicht als ein deterministisches Phänomen begreifen (vgl. Murphy 1998). In der Chemie lassen sich quantenmechanische Simulationen finden, die auf den Schrödinger-Gleichungen basieren und diese entweder stochas-

11 Es gilt jedoch erhebliche Einpassungsprobleme zu überwinden, zum einen bezüglich Parametrisierungen, zum anderen bezüglich Subsystemen, die anderen Gesetzen folgen.

tisch mit Hilfe der Quanten-Monte-Carlo-Simulation, quantenmechanisch mit Ab-initio Verfahren oder quasi-deterministisch lösen.<sup>12</sup>

Seit einiger Zeit gibt es zudem Verfahren des sogenannten Soft Computing, mit welchen sich für bestimmte Fragestellungen Computerexperimente durchführen lassen. Zu diesen Verfahren gehören Genetische Algorithmen für Optimierungs- und Selektionsprobleme, Künstliche Neuronale Netze oder Zelluläre Automaten für Regelungs-, Bewertungs- und Mustererkennungsaufgaben, Bayesian Networks zur Simulation von Einstellungen und Annahmen für Schlussfolgerungen sowie Multiagentensimulationen für Interaktionsaufgaben. Diese Verfahren findet man in spezifischen Anwendungsbereichen unterschiedlicher Disziplinen, die auch als Complexity Sciences bezeichnet werden, beispielsweise in den Sozialwissenschaften zur Simulation von Aushandlungsprozessen, in der Medizin zur Automatisierung der Datenauswertung, in den Wirtschaftswissenschaften zur Simulation von Verbraucherverhalten aber auch in der Physik zum Studium instabiler Systeme. Dabei wird davon ausgegangen, dass sich auf Basis einfacher Regeln komplexes Verhalten generieren lässt.<sup>13</sup>

- 
- 12 In der Chemie bedarf es Simulationsverfahren, die die Wechselwirkungen aller Elektronen berücksichtigen. In der Regel basiert die potenzielle Energie der Teilchen dabei nicht auf experimentell ermittelten Werten, sondern wird mit iterativen Verfahren errechnet (Ab-initio Methoden). Indem die Wechselwirkung eines Elektrons so behandelt wird, als bewege es sich in einem mittleren, elektrostatischen Feld (lokale Dichtefunktionsmethode), erhält man durch iterative Berechnungen ein System der geringsten Energie. Dies ist für Aussagen über chemische Reaktionsraten von Bedeutung. Für größere Moleküle wären die Ab-initio Methoden zu aufwendig. Deshalb findet hier eine Mischung aus klassischen und quantenmechanischen Verfahren Anwendung. Moleküle werden dabei als System aus Massenzentren (Atome) dargestellt, die sich in einem durch Wechselwirkungen erzeugtem Kraftfeld bewegen. Nachdem die Kraftfelder ermittelt sind, lassen sich die Molekülbewegungen wie Verdrehungen, Verformungen oder Vibrationen mit den Newtonschen Bewegungsgesetzen ermitteln.
- 13 Soft Computing (vgl. beispielsweise zum Perceptron, dem Vorläufer neuronaler Netze, Rosenblatt 1958 versus Minsky, Papert 1969; zu zellulären Automaten von Neumann 1951; Ulam 1960; von Neumann, Burks 1966; zu Bayesian Networks Bayes 1763; Pearl 1985, 2000; zu Fuzzy Logik Zadeh 1965, 1994; zu genetischen Algorithmen Holland 1975; zu anderen Artificial Intelligence Verfahren Bond, Gasser 1988; European Centre for Soft Computing 2009; zur Simulation in den Sozialwissenschaften Klüver 1995; Conte 1997). Schwarmsimulationen (vgl. Beni, Wang 1989), fraktale Geometrien (vgl. Mandelbrot 1982) oder L-Systeme (vgl. Rozenberg, Salomaa 1980; Prusinkiewicz, Lindenmayer 1990) sind weitere und vor allem illustrative Beispiele des Soft Computing.



## Vergleichsbeispiele

Vergleicht man nun den Status quo des Umgangs mit deterministischen in-silico Experimentalsystemen und den entsprechenden Computereperimenten in den verschiedenen Computational Sciences, so zeigen sich unterschiedliche Verortungen, wenn es um Standardisierungen, neue Evaluationsstrategien, das mathematisierbare Systemverständnis sowie geeignete Konvergenzbedingungen geht. Gute Vergleichsbeispiele zur Klimamodellierung liefern die Gravitationsphysik und die Zellbiologie.<sup>14</sup>

Die Gravitationsphysik kann als einzige Naturwissenschaft auf ein geschlossenes Theoriesystem zurückgreifen: auf Albert Einsteins allgemeine Relativitätstheorie. Für Simulationen in diesem Bereich, beispielsweise um die Gravitationswellen kosmischer Ereignisse wie den Zusammenstoß zweier schwarzer Löcher zu simulieren, lässt sich Einsteins Theorie in Form von zehn partiellen Differentialgleichungen formulieren. Es handelt sich um „ein gekoppeltes, nicht-lineares System und jede Gleichung hat mehrere hundert Terme“ (Interview A 2004). Damit erfüllt die Gravitationsphysik einen ähnlich hohen Grad an mathematisierbarem Systemverständnis wie die Meteorologie, beide basieren auf first principles wenn auch unterschiedlicher Art. Dieses System an Differentialgleichungen bildet die Basis des mathematischen Modells der in-silico Experimentalsysteme. Allerdings entbehrt die Gravitationsphysik im Unterschied zur Meteorologie jeglicher Messdaten. Die Folge ist, dass es keine Möglichkeit der empirischen Evaluation der Computereperimente gibt und dass keine Informationen zu realistischen Rand- und Anfangsbedingungen sowie zur Justierung wichtiger Parametrisierungen zur Verfügung stehen. Man kennt den Zustand des Ereignisses, das man simulieren möchte, nicht.

„Unser Problem ist das schwarze Loch und die Singularität. Wir müssen es umgehen, um damit zu arbeiten. D.h. wir benutzen 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 Randbedingungen auf das Loch setzen, die physikalisch zutreffend sein sollten. Aber wir kennen die Physik dort nicht. Wir haben nur die Gleichungen,

---

14 In beiden Bereichen wurden Interviews geführt. Ein Interview (Interview A) mit einem Modellierer aus der Gravitationsphysik sowie zwei Interviews mit Zellbiologen, hier bezeichnet als Interview B und Interview C sowie weiterer Gespräche mit Biologen. Interview A und B sind in Auszügen bereits veröffentlicht (vgl. Gramelsberger 2004).

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“ (Interview A, 2004).

Ziel des Computereperiments ist eine Beschreibung der typischen Raum-Zeit-Krümmung für ein spezifisches Ereignis. Denn die Veränderung der Raum-Zeit-Geometrie selbst ist Gegenstand der gravitationsphysikalischen Forschung. Da man keine Messdaten hat, lassen sich weder die Zuverlässigkeit des in-silico Experimentalsystems noch die der Resultate überprüfen. Allerdings kann die Gravitationsphysik auf ein Referenzbeispiel zurückgreifen, auf eine exakte Lösung von Einsteins Gleichungen für ein einzelnes schwarzes Loch (Schwarzschild-Lösung). Damit lässt sich das Experimentalsystem zumindest für diesen einfachen Fall evaluieren. Doch „für dynamische Raumzeiten gibt es keine exakten Lösungen. Wir können also nicht mit einer exakten Lösung vergleichen, d.h. wir müssen darauf vertrauen, dass unsere Simulation richtig ist“ (Interview A, 2004).<sup>15</sup> Da sich die Simulationen für den Zusammenstoß zweier schwarzer Löcher jedoch extrem instabil verhalten, sind die Ergebnisse noch wenig vertrauenswürdig. Zudem gibt es weltweit nur einige Forschergruppen, die solche Computereperimente durchführen. Koordinierte Standardisierungsbemühungen sind also nicht zu erwarten, geschweige denn ein Modellvergleich. Pikant wird dies vor dem Hintergrund, dass die Gravitationsphysik im Begriff ist, sich zu einer experimentellen Wissenschaft zu entwickeln. Weltweit befinden sich dazu vier Gravitationsdetektoren im Testbetrieb, unter anderem in Hannover.

„Wir arbeiten mit dem GEO 600 Teleskop in Hannover zusammen, die Gravitationswellen messen möchten. Wir sollen realistische Wellenformen simulieren, damit sie es mit ihren Daten vergleichen können. [...] In Hannover und in den USA gibt es Detektoren. Sie messen erst seit ein paar Monaten. Das Signal der Gravitationswellen ist ziemlich schwach. Sie haben viel Rauschen in

---

15 Die Richtigkeit wird rein mathematisch geprüft: „Wir benutzen Konvergenztests. Wenn man die Gleichung auf einem Gitter mit ‚finite differencing‘ schreibt, erhält man einen Fehler, der abhängig von der Gittergröße ist. Geht man auf ein kleineres Gitter mit höherer Auflösung, hat man einen kleineren Fehler usw. Wenn man auf drei verschiedenen Gittergrößen simuliert, kann man die relativen Fehler zwischen den dreien messen. [...] Mit drei Auflösungen kann man sehen, ob man in die richtige Richtung geht, ob alle drei Auflösungen auf dieselbe Lösung konvergieren“ (Interview A, 2004).

ihrem Detektor und wenig Signal. Sie müssen irgendwie das Signal aus dem Rauschen herausfiltern. Sie hoffen, dass sie Gravitationswellensimulation dafür benutzen können, um das Signal vom Rauschen effektiver unterscheiden zu können. Das ist der Grund warum wir ziemlich akkurate Simulationen brauchen. Das Signal-Processing-Problem ist ziemlich schwierig. Sie brauchen akkurate Wellenformen. [...] 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“ (Interview A, 2004).

Eine ganz andere Situation der in-silico Experimentalsysteme und der Computerexperimente mit ihnen findet sich in der Zellbiologie. Trotz des zunehmenden Systemverständnisses gibt es keine first principles, welche die grundlegenden Prozesse in einer Zelle beschreiben. Hinzu kommt, dass Zellen im Unterschied zu schwarzen Löchern oder der Atmosphäre hochgradig offene Systeme sind, deren Zustand maßgeblich vom umgebenden Milieu abhängt. Ein weiterer Unterschied liegt darin, dass in Zellen verschiedene Kreisläufe wirken, die miteinander in komplexer Wechselwirkung stehen. Bei einem Systemverständnis muss daher von verschiedenen Systemen ausgegangen werden, die allerdings nicht unbedingt denselben Gesetzen unterliegen müssen. Möchte man etwas über gesteuerte Prozesse in der Zelle herausfinden, gilt es verschiedene Fragen zu beantworten.

„Erstens, ist das Gen überhaupt da? Zweitens, ist das Gen überhaupt aktiv? Dann wäre man bei den Microarrays. Dritte Ebene: Die Gene kodieren für Proteine. Ist das Protein da? Vierte Ebene wäre, ist das Protein aktiv? Fünfte Ebene: Viele dieser Proteinen sind Enzyme, die Stoffwechselreaktionen beschleunigen. Für so eine Reaktion braucht man ein Edukt und es kommt ein Produkt heraus, manchmal auch mehrere Edukte oder Produkte. Ist das Protein nicht nur da, sondern sind auch die Edukte ausreichend vorhanden? Dann wäre man bei dem, was man gemeinhin Metabolomics nennt. Wenn man dann noch eine Ebene weiter runter geht: Wie ist das mit den Stoff-Flüssen? Nicht nur, wie viel von meinem Edukt habe ich und ist mein Protein aktiv, sondern wie viel Edukt pro Zeit setzt es denn um? Dann hat man eigentlich den kompletten Überblick.“ (Interview C, 2007).

Das Ausmaß der Komplexität in der Zellforschung wird an folgendem Beispiel weiter verdeutlicht: Möchte man in einem Laborexperiment herausfinden, ob ein bestimmter Stoffwechselprozess die Generierung eines bestimmten Proteins gegenüber einem anderen Prozess begünstigt, lassen sich zwei Vergleichssysteme herstellen, deren Proteinentwicklung dann mit Hilfe von Proteinanalysen nachvollzogen werden kann. Im ein-

fachsten Falle würden sich beide Proteinanalysen bis auf ein Protein gleichen. Doch die Realität im Laboralltag ist eine andere. „Das passiert aber nie, leider. Man kann nicht alle Proteine auflösen mit der derzeitigen Technologie, aber wir können ungefähr 1000 bis 1200 Proteine auflösen. Und wenn wir uns dann ansehen, wie viele von ihnen unterschiedlich sind [...] ja, dann sind fast 600 unterschiedlich. D.h., es passiert eine ganze Menge und das meiste davon wird wahrscheinlich nichts mit dieser Änderung in der Produktbildung zu tun haben. Jetzt gilt es natürlich herauszufinden, welche sind denn das. Das sind so Punkte, wo man dann ohne Bioinformatik eigentlich nicht mehr weiterkommt“ (Interview C, 2007). Nachdem sich ein Teil der 600 Proteine identifizieren ließ, beginnt die eigentliche Forschungsarbeit.<sup>16</sup>

„Jetzt redet man mit den Zellbiologen, was wisst ihr über dieses Protein? Womit wechselwirkt es? In welchen Fällen ist das stark oder schwach? Gibt es Erfahrungen, die wir auf unseren Prozess übertragen können? Damit man wie so ein Mosaik das irgendwann aufbauen kann: Dieser Prozess wird in der Zelle ausgelöst und jener und von dem zweigt sicher aber noch was ab, weil das mit Sicherheit ziemlich verschachtelte Netzwerke sein werden. Es reicht auch nicht, wenn man alles nur einmal macht, sondern man muss es natürlich wiederholen. So ein Verfahren ist nie identisch, [...] denn es ist lebende Materie mit der man arbeitet. Die verhält sich niemals gleich. Kleinste Unterschiede führen unter Umständen zu deutlichen Änderungen und das wirkt sich später auch in diesem Muster aus. Insofern haben wir erstmal eine ganze Reihe von Wiederholungen gemacht. [...]

Das ist der Status quo im Moment: Man erkennt, wie stark selbst Kleinigkeiten solche Netzwerke beeinflussen und damit werden wir wahrscheinlich die nächsten 10, 15 Jahre noch mit zu tun haben. Wir sind jetzt dazu übergegangen, uns noch stärker um diesen Bereich zu kümmern und stattdessen die Zahl der Prozesse, die wir untersuchen, zu reduzieren. [...] Wir versuchen möglichst viele von diesen funktionellen Genom-Analysemethoden auf diese drei verschiedenen Beispiele anzuwenden, um wenigstens die Variationsbreite auf

---

16 „Früher musste man sagen, na ja ich interessiere mich für zwei oder drei Proteine und die untersuche ich jetzt im Detail. Das geht bei so einer Flut überhaupt nicht. Man muss von diesen fast 600 Proteinen sehen: Wie viele kann ich denn überhaupt identifiziert? D.h., man muss diesen kleinen Fleck dann ausstechen und dann kann man das Protein – nach entsprechender Vorbehandlung im Massenspektrometer – hoffentlich vielleicht nachweisen. Je mehr genomische Informationen man hat, desto leichter ist das. Also bei Maus oder Mensch kommt man durchaus auf 50 bis 60 Prozent Trefferquote. Da sind wir noch deutlich von weg, wir haben jetzt von diesen 600 [Hamster-Proteinen], 120 oder 130 identifiziert, damit fängt die eigentliche Arbeit aber jetzt erst an“ (Interview C, 2007).

der Prozessseite möglichst klein zu halten. [...] Also man versucht aus diesen extrem komplexen Netzen [...] Ausschnitte herauszunehmen und zu verstehen, welche Proteine eine Rolle spielen, insbesondere Enzyme. Welche Enzyme katalysieren welche Reaktionen, welche Edukte sind relevant, welche Produkte sind relevant. Man möchte möglichst viele quantitative Informationen bekommen, um dann sagen zu können, jetzt müssen wir bestimmte Experimente machen. (Oder Computerexperimente?) Die Modellierung gibt mir immer ein Ergebnis, aber es würde nicht stimmen, weil Reaktionen fehlen. Denn wenn ich dem Computer sage, ich habe hier mein Netzwerk und ich vergesse diesen Abzweig da, dann rechnet der Computer natürlich aus, wie sich das verteilt. Aber es fehlt etwas, d.h. das was herauskommt ist falsch. [...] Da sind nun Markierungsexperimente [mit Kohlenstoff-13 markierter Glukose] ganz gut, denn ich sehe, wie viele Markierungen rein gehen, wie viel kommt unten an. Wenn das unten weniger ist, dann wurde irgendwo [im Computermodell] etwas vergessen. Das ist aber bei dieser Komplexität nicht so einfach. Wir fangen gerade erst an, das in Modelle umzusetzen“ (Interview C, 2007).

Im Unterschied zur Meteorologie beginnt die Zellsimulation nicht mit einem übergeordneten, generellen Ansatz der Prozesse (globale Zirkulation), um dann in Form von Sub-Modellen (z.B. Ozean, Eis, Vegetation) und Parametrisierungen (z.B. Wolken) immer detailreichere in-silico Experimentalsysteme zu kreieren. Zellsimulationen folgen eher einem ‚bottom-up‘ Prinzip. Es gibt eine unüberschaubare Anzahl von Modellen zu sehr spezifischen Teilprozessen der Zelle. Das führt zu dem Problem, – wie ein Zellbiologe in einem Gespräch darlegte – dass es kaum Vergleichsmöglichkeiten für diese Fülle an Modellen gibt. Sie sind zu spezifisch. Auch lassen sich diese Modelle nicht als Module eines Zellsystems, ähnlich einem Erdsystem, nutzen. Es gibt zwar Ansätze, die Modellierungssprache zu vereinheitlichen und dadurch die Modelle kompatibler zu gestalten, aber diese konnten sich bisher noch nicht durchsetzen. Nichtsdestotrotz ist es auch in der Zellbiologie das Ziel, die e-Cell zu programmieren (vgl. e-Cell Initiative 2009). „Das Idealmodell wäre eigentlich ein wirklich komplettes Abbild der Zelle, was es mir erlaubt jegliches Experiment vorweg zu nehmen. [...] So ein Modell wäre dann in der Lage zu sagen, bei soviel Medium und der Nährstoffmenge da drin, wachsen die Zellen so und so schnell zu der und der Zelldichte heran, produzieren so und so viel Produkt, so und so viel Stoffwechselabfallprodukte. [...] Ich weiß nicht, ob man jemals so weit kommt, ich glaube nicht. Also man soll nie ‚nie‘ sagen, aber ich glaube nicht, dass ich das noch in meiner Laufbahn erleben werde“ (Interview C, 2007).

Derzeit werden in der Zellbiologie große Anstrengungen unternommen, um die relevanten Parameter der Zellprozesse durch Laborexperimente zu identifizieren und zu quantifizieren, um sie schließlich model-

lieren und simulieren zu können. Es wird vermutet, – so ein Zellbiologe im Gespräch – dass nur rund dreißig Prozent der Zellprozesse bekannt sind. Zudem wurden diese Prozesse an einer Vielzahl unterschiedlicher Modellorganismen erforscht, angefangen von Bakterien, über Mäuse und Hamster, zu menschlichen Zellen wie beispielsweise Leberzellen. In wieweit diese Ergebnisse anhand unterschiedlicher Zellen miteinander vergleichbar und nutzbar sind, lässt sich nicht beantworten. „Erstens sind die Schemata nicht komplett, die die Biologen experimentell bestimmen. Man vergisst Interaktionen. Sie sind nicht vollständig und wenn sie vollständig sind, sind sie unüberschaubar. [...] Und zweitens sind viele Parameter – Zerfallsraten, Reaktionskonstanten, Temperaturabhängigkeiten – nicht bekannt“ (Interview B, 2004). Für die Simulation selbst einzelner Zellprozesse bedeutet dies: „Man muss bei der Simulation die Parameter oft erst einmal raten bzw. vernünftig wählen. Die Daten fehlen. Damit ist die Simulation mehr eine Karikatur der wirklichen Prozesse. Aber eine gute Karikatur betont das Wesentliche und damit kann man trotzdem etwas über die Prozesse lernen“ (Interview B, 2004).<sup>17</sup> Die Arbeit mit diesen Modelle und Simulationen hat für die Forschung jedoch einen entscheidenden Vorteil:

„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 Funktion 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 sorgfält-

---

17 Referiert wird hier auf reaktionskinetische Simulationen: „Die Simulation von reaktionskinetischen Systemen hat eine lange Tradition in der Chemie. Daran knüpfen wir an. Man kann eine Zerfallsreaktion durch eine Exponentialfunktion approximieren, die durch eine Differentialgleichung den Zerfall beschreibt. Man kann eine bimolekulare Reaktion durch ein Produkt der beiden Konzentrationen beschreiben und enzymatische Reaktionen mit der Michaelis-Menten-Kinetik. Letztendlich, 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“ (Interview B, 2004).

tig misst. Und dann werden die Experimente entworfen, meistens gemeinsam“ (Interview B, 2004).

Die Heterogenität der Beispiele zeigt, dass sich nicht nur die forschungspraktische Bedeutung der Computereperimente in den einzelnen Disziplinen unterscheidet, sondern dass sich aus der jeweils spezifischen Einbettung der Simulation in das disziplinäre Setting von Theorie, Experiment, Messung und Beobachtung die Relevanz der mit Simulationen produzierten Resultate ableitet. Wenn, wie in der Wettervorhersage eine gute Grundlage empirischer Daten, Modelle, die auf grundlegenden Theorien basieren, eine Infrastruktur der Standardisierung und des Austauschs vorhanden sind und adäquate Evaluationsstrategien entwickelt wurden, dann lassen sich mit solchen Simulationsmodellen Kurzzeitvorhersagen mit hoher Aussagekraft erreichen. Dies ist im Grunde erstaunlich, denn Wettersimulationen als die paradigmatischen deterministischen Simulationen sind aufgrund ihrer sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen problematische Simulationen.<sup>18</sup> Es waren gerade die Wettersimulationen, die in den 1960er Jahren das Problem der prinzipiellen Instabilität der Prognosen ins Bewusstsein der Wissenschaftler brachten (vgl. Lorenz 1963). Zwar ist das Problem der Instabilität in komplexen Systemen spätestens seit Henri Poincarés Arbeit über die Instabilität des Sonnensystems bekannt (vgl. Poincaré 1891), doch erst mit den Computereperimenten bekommt die Instabilität des Verhaltens komplexer Systeme eine zentrale Bedeutung für die Forschung, da die Aussagekraft der berechneten Prognosen problematisch wird. In seinem Buch *Instabilitäten in Natur und Wissenschaft* unterscheidet Jan Schmidt drei Arten prinzipieller Instabilität.

„Von *statischer Instabilität* kann gesprochen werden, wenn ähnliche Anfangsbedingungen während der Zeitentwicklung auseinanderlaufen und sich niemals mehr annähern, so wie dies bei der dynamischen Instabilität der Fall ist. Der populäre Begriff des deterministischen Chaos bezeichnet die *dynamische Instabilität* der kontinuierlichen sensitiven Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen. Bei der dynamischen Instabilität steht die Dynamik kontinuierlich auf ‚Messers Schneide‘; bei der statischen Instabilität ist dies lediglich der Fall auf die Anfangspunkte bezogen. [...] Doch neben diesen gibt es einen weiteren, viel fundamentaleren Typ von Instabilität, welcher in seiner physikalischen Relevanz bislang kaum eine grundlegende, wissenschaftstheoretische Reflexion erfahren hat und der auf das Modell- und Theorieverständnis der Physik zielt: die *strukturelle Instabilität*. Hier geht es um die Instabilität der

18 Im Unterschied zu Wettersimulationen sind Klimasimulationen nicht von Anfangsbedingungen sensitiv abhängig, sondern von Randbedingungen.

Gesetze selbst bzw. um deren Gesamtdynamik, d.h. um die Instabilität der Gleichungen unter ihren kleinsten Veränderungen, etwa unter Parameterveränderungen“ (Schmidt 2008: 93).

Aus diesen Bedingungen beziehen die Konvergenztests ihre Bedeutung für die Forschung mit Computereperimenten. Wie am Beispiel der Klimasimulation dargelegt, folgt jedem Experimentallauf ein Testlauf in höherer Auflösung. Im Falle der gravitationsphysikalischen Simulation gibt es noch weitere Testmöglichkeiten, beispielsweise die Überprüfung der Simulationsergebnisse an einem einfachen, aber analytisch gelösten Fall wie der Schwarzschild-Lösung oder den Abgleich mit Gleichungen zur Überprüfung.

„Wir haben Instabilitäten und können zwei schwarze Löcher nur für eine bestimmte Zeit simulieren. Die ‚evolution equations‘ sagen uns, wie man von den Daten eines Zeitpunktes zum nächsten kommt. Aber wir haben auch ‚constrained equations‘, die zufriedenstellend gelöst werden müssen. Wenn wir in der Zeit vorwärts gehen, können wir die ‚constrained equations‘ rechnen und sehen, ob wir sie immer noch zufriedenstellend lösen. Wenn nicht, wissen wir, dass wir uns mit den ‚evolution equations‘ von Einsteins Gleichungen entfernen. Wir benutzen die ‚evolution equations‘, um vorwärts zu gehen, mit den ‚constrained equations‘ können wir sehen, ob wir Einsteins Gleichungen lösen. Wenn die ‚constrained equations‘ richtig sind, wissen wir, dass wir immerhin noch Einsteins Gleichungen lösen“ (Interview A, 2004).

Konvergenztests und Abgleiche mit analytischen Lösungen gehören daher zur mathematischen Praktik des Computereperimentierens. Unter Umständen lassen sich Computereperimente in ein Beziehungssystem von Bedingungen einordnen, das Aussagen über ihren Erkenntniswert liefert. Ein solches ‚framework of cohesion‘, wie man es nennen könnte und es in Abbildung 21 skizziert ist, müsste folgende Skalen umfassen: Skala der Standardisierung, des umsetzbaren Systemverständnisses, der Evaluationsstrategien und der Konvergenzbedingungen. Aus diesem Bezugssystem könnte sich dann eine Matrix des Erkenntniswertes und der Prognosekraft ergeben. Es könnte sich aber auch die weitere Entwicklungsrichtung einer Disziplin ableiten lassen, die sie beschreiten müsste, um den Erkenntniswert und die Prognosegüte ihrer Computereperimente zu erhöhen. Durch diese Entwicklungsrichtung wird auch die Tendenz zur Vereinheitlichung von Wissenschaft durch den Computer deutlich, denn um diese simulationsadäquaten Entwicklungen zu erreichen, bedarf es der strukturellen Anpassung der Wissensbestände einer Disziplin an deren Quantifizierbarkeit und Mathematisierbarkeit.



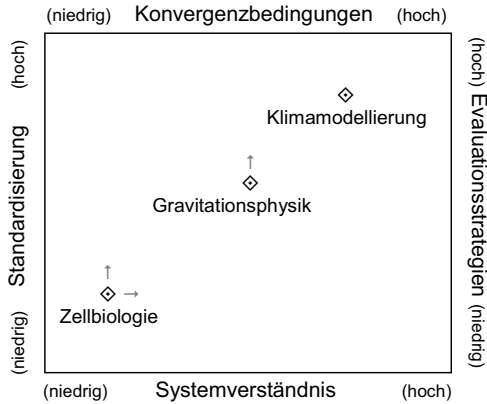


Abbildung 21: Framework of Cohesion  
(Gramelsberger 2009)

## Erkenntniswert

Die drei Beispiele machen deutlich, dass Computerexperimente analog den Experimenten als „[a] class of practises that naturally correspond to the label scientific [computational] experimentation“ (Dear 1995: 12) zu bezeichnen sind. Das Computerexperiment oder das in-silico Experimentalsystem schlechthin gibt es nicht. Computerexperimente sind sehr variable Instrumente der Wissensproduktion, die nur eines gemeinsam haben, nämlich dass sie auf Computern laufen. Und dennoch unterscheiden sie sich von simplen Berechnungen oder von Computerspielen. Doch was kennzeichnet sie und welchen Erkenntniswert tragen sie zur Forschung bei? Bislang wurden vor allem forschungspraktische Aspekte der Computerexperimente beleuchtet. Das kommt nicht von ungefähr, denn es geht in dieser Studie vor allem darum, die Tradition dieser neuen Erkenntnisinstrumente zu rekonstruieren sowie den Umgang mit ihnen in der aktuellen Forschung und die damit einhergehenden Transformationen zur e-Science zu beleuchten. Doch eine wissenschaftsphilosophische Verortung der Computerexperimente geht über solche forschungspraktische Aspekte hinaus, insofern sie die Epistemologie der Computerexperimente als Erkenntnisinstrumente analysiert. Eine solche Verortung knüpft einerseits an die wissenschaftstheoretischen Diskurse zum Verhältnis von Theorien, Modellen und Phänomenen an, insbesondere an Überlegungen zu mathematischen Modellen und Simulationen, andererseits an (Computer)-Laborstudien. Anhand der beiden oben genannten Fragen werden einige Positionen der aktuellen Debatte zur Si-

mulationen untersucht. Was jedoch generell bei der Lektüre auffällt ist, dass dem Computer selbst in seiner Notwendigkeit zur Algorithmierung von Theorie keine wirkliche Beachtung geschenkt wird. Dies zeigt sich insbesondere darin, dass zwischen Theorie, mathematischem Modell, algorithmiertem Modell (in-silico Experimentalsystem) und Simulation (Computorexperiment) nicht unterschieden wird. In der Regel wird vom theoretisch-mathematischen Modell und seiner Anwendung (Simulation) gesprochen. Doch es ist die Transformation vom theoretisch-mathematischen Modell zum Code und danach erst zur numerischen Anwendung, die den epistemischen Kern des Wandels der Wissenschaft im Zeitalter des Computers kennzeichnet. Zu rein mathematischen und experimentellen Bedingungen kommen informatische hinzu. Vor allem um diese informatischen Bedingungen geht es in der vorliegenden philosophischen Verortung, denn die Transformation von Theorie in den Computer – konkreter in maschinen-taugliche Algorithmen – kommt einer Medien-wende ähnlichen Umfanges gleich wie die Transformation materialer Äquivalente in symbolische Notationen.

„What is a simulation and what is the difference and the relation between a model and a simulation?“, fragt Stephan Hartmann in einem Aufsatz aus der Perspektive der Wissenschaftstheorie. „I maintain that the most significant feature of a simulation is that it allows scientists to imitate one process by another process [...] carried out by a computer“ (Hartmann 1996: 77, 79). Und weiter, nach einem kurzen Überblick über modelltheoretische Ansätze: „More concretely, a simulation results when equations of the underlying dynamic model are solved“ (Hartmann 1996: 83). Die Dynamik respektive Prozesshaftigkeit von Simulationen ist sicherlich das wichtigste Kennzeichen. Mit Computersimulationen überwindet die Wissenschaft statische Modelle aus Holz, Draht oder anderen Materialien. ‚Scale models‘, die zum Studium von Eigenschaften und Verhalten eines Objekts verwendet werden, wie Flugzeugmodelle im Windkanal, können nun im Digitalen untersucht werden. Aber es sind vor allem die theoretischen Modelle, die zuvor nur in einfachster Weise auf dem Papier skizzierbar oder als Gedankenexperiment vorstellbar waren, die sich jetzt mit Computern analysieren lassen.<sup>19</sup> Dies

---

19 Eine treffende Beschreibung dieser Transformation vom Papier in den Computer gibt ein Biologe in einem der Interviews: „Dann haben wir uns die Kinetik überlegt. Was wäre der einfachste, sinnvollste Ansatz für die verschiedenen, auf Papier gezeichneten Pfeile? In der nächsten Phase wird es schon präziser: Welche Moleküle spielen eine Rolle? Nachdem man es aufgeschrieben hat, kann man vereinfacht auf dem Papier abschätzen, was zu erwarten ist, indem man eine Bifurkationsanalyse macht, Matrizen,

eröffnet den Spielraum für Untersuchungen, die in realiter nicht möglich wären. Der Computer verlängert, ähnlich den Beobachtungs- und Messinstrumenten, den Blick in bislang unzugängliche Bereiche, die zu klein, zu groß, zu schnell, zu langsam, zu gefährlich oder eben zu komplex sind. Doch der Computer führt weiter: Im Unterschied zu den Beobachtungs- und Messinstrumenten erweitert er nicht nur den Blick in neue Bereiche, sondern ermöglicht die experimentelle Manipulation in diesen Bereichen, aber eben nur in rein symbolischer Form. Paul Humphreys untersucht diesen Aspekt in seinem Buch *Extending Ourselves. Computational Science, Empiricism, and Scientific Methods*. Er schreibt: „What rarely happens is an analogue of the third type of empirical extension, augmentation, giving us instrumental access to new forms of mathematics that are beyond the reach of traditional mathematics. Here the question naturally arises: Could instrumentally enhanced mathematics allow an investigation of new areas of mathematics to which our only mode of access is the instrument itself?“ (Humphreys 2004: 5).<sup>20</sup> Dieser Erweiterungsgedanke, der bereits seit den Debatten der frühen Neuzeit über die Zulässigkeit von Beobachtungsinstrumenten für die wissenschaftliche Erkenntnis diskutiert wird, charakterisiert das Neue der Simulation, das

---

Stabilitätsanalysen. Dazu braucht man noch keinen Computer. Schließlich kann man das Modell im Computer implementieren. Und wir haben die Bifurkationen, die wir vorhergesagt haben, auch tatsächlich gefunden. [...] 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.“ (Interview B, 2004).

- 20 In dem Versuch diese Erweiterungsfunktion zu fassen, führt Humphreys ‚theoretical‘ und ‚computational templates‘ ein. Erstere sind allgemeine Gleichungen wie Newtons zweites Axiom, letztere die berechenbaren Gleichungen, die allerdings nicht immer auf Gesetzen basieren müssen. „The first thing to note about Newton’s Second ‚Law‘ is that it is only a schema, what I shall call a theoretical template. It describes a very general constraint on the relationship between any force, mass, and acceleration, but to use it in any given case, we need to specify a particular force function, such as a gravitational force, an electrostatic force, a magnetic force, or some other variety of force. If the resulting, more specific, equation form is computationally tractable, then we have arrived at a computational template“ (Humphreys 2004: 61). Üblicherweise werden diese ‚computational templates‘ in der Literatur als mathematisches Modell bezeichnet, das die allgemeinen Gleichungen konkretisiert und ausführbar macht. Von daher ist auch Humphreys Definition einer Simulation nicht überraschend: „A computer simulation is any computer-implemented method for exploring the properties of mathematical models where analytic methods are unavailable“ (Humphreys 1991: 501). Auch wenn von manchen Autoren diese Definition als zu eng empfunden wird, so trifft sie den Kern der Simulationen, die auf Differenzialgleichungen basieren.

es epistemologisch zu fassen gilt. Die Schlussfolgerung von Humphreys, „the fact that extending ourselves, scientific epistemology is no longer human epistemology“ (Humphreys 2004: 8), scheint angesichts von über vierhundert Jahren instrumentenbasierter Wissenschaft mit Vorsicht zu genießen sein. Diese Instrumente wie auch der Computer sind menschlichen Ursprungs, insofern unterliegen sie, ebenso wie die damit produzierten Einblicke, den von Menschen konzipierten Bedingungen. In eben diesen Erweiterungsleistungen hat sich Zivilisation im Unterschied zu einem, wie auch immer gearteten Urzustand schon immer definiert.<sup>21</sup> Genau in diese Erweiterung – nicht nur der Sinneswahrnehmung, sondern nun auch der auf Mathematik basierten Anschauung in neue Bereiche – ist es, die die Wissenschaftsphilosophie an der Computersimulation fasziniert, ohne von einer ‚non-human epistemology‘ sprechen zu müssen. Im Gegenteil, es handelt sich durch und durch um eine menschliche, da fabrizierte Epistemologie. Doch was bedeutet es nun, die mathematikbasierte Anschauung durch die Computer zu erweitern? Leider beschreibt Humphreys nur, dass der Computer, ähnlich dem Mikroskop, unsere Berechnungsmöglichkeiten erweitert, indem beispielsweise komplexere Modelle in höherer Auflösung berechnet werden können.<sup>22</sup> Was dies konkret bedeutet, wird nicht weiter thematisiert. Und genau hier liegt das Problem der Analyse von Simulation. Es lassen sich gewisse Kennzeichnungen der Simulation durch Methodenvergleiche, Fallbeispiele und Abgrenzungen zu bereits bestehenden wissenschaftsphilosophischen Theorien herausarbeiten. Doch es ist wesentlich schwieriger, den Erkenntniswert, die epistemische Neuheit und die Folgen für die wissenschaftliche Erfahrung und damit das wissenschaftliche Weltbild

- 
- 21 Solche ‚human enhancement‘ Diskussionen, die aktuell im Kontext der Converging Technologies wieder verstärkt diskutiert werden, sind mit Vorsicht zu genießen, da hier oft nostalgische, auf einen natürlichen Zustand recurrierende und transhumanistische Positionen in eigenartiger Manier aufeinandertreffen (vgl. Coenen 2008).
- 22 „I have argued that computational devices are the numerical analogues of empirical instruments: They extend our limited computational powers in ways that are similar to the ways in which empirical instruments extend our limited observational powers“ (Humphreys 2004: 116). „As with microscopes, a desirable property of computer simulations is resolving power – the greater the degree of resolution, the more detail the simulation provides. [...] Because of the quantity of data available, by using graphical representations for the solutions one often can literally see more detail with increased computational power“ (Humphreys 2004: 118). Was wird nun erweitert dadurch? „We can thus see, through the vehicle of the microscopic metaphor, how progress of theoretical science is dependent upon technological extensions of our mathematical abilities. The realm of the [computationally] tractable, like the realm of the observable, is an expanding universe“ (Humphreys 2004: 121).

zu fassen.<sup>23</sup> Das kommt nicht von ungefähr, denn zum einen sind Simulationen relativ neue Erkenntnisinstrumente und zum anderen ist ihre Vielfalt ebenso groß wie die der Modelle.<sup>24</sup> Letztendlich entscheidet in der Forschungspraxis der Zweck darüber, welche Art von Simulation wie genutzt wird.<sup>25</sup> Dies macht deutlich, dass Simulationen in erster Linie praktische Werkzeuge sind. „Whereas theories, like local claims, can be true or false, models and simulations are typically seen in more pragmatic terms, being more or less useful, rather than more or less true. Scientific models and simulations are given the status of tools, as well as representations; they are objects, as well as ideas. They easily cross categories, such as ‚theory‘ and ‚experiment‘, the bounds of which are otherwise well-established. And modeling and simulation sit uncomfortably in science both socially and epistemically, because of the boundaries they cross“ (Sismondo 1999: 247).

Es sind diese Grenzüberschreitungen, die es so schwierig machen, Simulationen epistemologisch zu bestimmen. Sie liegen als Hybride „somewhere intermediate between traditional theoretical [...] science and its empirical methods of experimentation and observation“ (Rohrlich 1991: 507). Fast poetisch artikuliert es Peter Galison in seiner Studie zur Entwicklung der Monte-Carlo-Simulation in den 1940er Jahren in Los Alamos. Simulation „ushered physics into a place paradoxically

- 
- 23 Ebenso vielfältig wie die Modelle und Simulationen sind daher die Versuche, beides epistemologisch zu bestimmen. Es überrascht nicht, dass die wissenschaftstheoretischen und -philosophischen Verortungen dabei stark von den jeweiligen Fallbeispielen abhängen, die sich üblicherweise auf physikalische Beispiele, manchmal auch auf ökonomische, meteorologische oder biologische und chemische, seltener auf Beispiele aus der Technik, der Medizin oder anderen Disziplinen beziehen. Von daher sind Aussagen nur im jeweiligen Kontext der untersuchten Fallbeispiele zu bewerten, wie dies auch für die vorliegende Studie gilt. In anderen Kontexten mag die Situation des Simulierens sowie der Einbettung in Theorie, Modell, Experiment, Beobachtung und Messung eine andere sein.
- 24 Einen Überblick in punkto Modellvielfalt bietet der Einführungsartikel zum Thema *Models in Science* der Stanford Encyclopedia of Philosophy (Stanford Encyclopedia of Philosophy 2006).
- 25 So unterscheiden beispielsweise Friedemann Mattern und Horst Mehl kontinuierliche und diskrete Simulationen. Diskrete Simulationen differenzieren sie je nach Zweck und Perspektive weiter in ereignisgesteuerte (beispielsweise Verkehrssimulationen), zeitgesteuerte (beispielsweise Game of Life), aktivitätsgesteuerte, prozessgesteuerte und transaktionsorientierte (beispielsweise Ablaufsteuerung in Fabriken) Simulationen (vgl. Mattern, Mehl 1989). Im Laufe der letzten Jahrzehnte wurden verschiedene Simulationsverfahren entwickelt wie beispielsweise die Differenzenmethode, die Finite Elemente Methode sowie Zelluläre Automaten, und Methoden wie adaptive Gitteranpassung oder genetische Modelle.

dislocated from the traditional reality that borrowed both the experimental and theoretical domains, bound these borrowings together, and used the resulting bricollage to create a marginalized netherland that was once nowhere and everywhere on the usual methodological map. In the process of negotiation the relationship of Monte Carlo to traditional categories of experiment and theory, the simulators both altered and helped define what it meant to be an experimenter or theorist in the decades following World War II“ (Galison 1996: 120). Diesen neuen Status der simulierenden Forscher hat Deborah Dowling in einer Interviewstudie hinterfragt. „The authority of scientific simulation relies on an analytical knowledge of the underlying ‚theoretical‘ mathematics, while the pragmatic utility of simulation relies on the scientist’s ability to black-box the program, to delegate the computations to the machine and to interact ‚experimentally‘ with the surface“ (Dowling 1999: 271; vgl. Dowling 1998). Die Unterscheidung zwischen mathematischer Grundlage und experimenteller Oberfläche, die auf Sherry Turkles Untersuchungen zu Human-Computer-Interaktionen zurückgeht (vgl. Turkle 1995), legt einen „playing around [Modus und ...] creative experimentation with a mathematical model“ nahe (Dowling 1991: 271). Nicht von ungefähr lautet der Titel von Dowlings Artikel *Experimenting on theories*. In ähnlicher Weise sprechen Günter Küppers und Johannes Lenhard von *Computersimulationen: Modellierungen 2. Ordnung* und meinen damit, dass „Computersimulationen als ein Experimentieren mit Theorien zu begreifen“ sind (Küppers, Lenhard 2005: 326).<sup>26</sup> Dieses Experimentieren wird von Evelyn Fox Keller weiter unterschieden als ‚experiments in theory‘ und ‚computer experiments‘ (vgl. Fox Keller 2003).

Die experimentelle Verwendung von Simulationen lässt sich in vielfältiger Weise in der Wissenschaft finden. Daher ist es wichtig, Computersimulationen und ihre „complex chain of inferences that serve to transform theoretical structures into specific concrete knowledge [...] that has its own unique epistemology“ (Winsberg 1999: 275) genau zu untersuchen. Diese Epistemologie, so Eric Winsberg, der sich an Allen Franklins Frage orientiert ‚How do we come to believe rationally in an experimental result?‘ (vgl. Franklin 1986), generiert sich aus den verschiedenen Komponenten einer Simulation.

„A calculational structure of theory; techniques of mathematical transformation; a choice of parameters, initial conditions, and boundary conditions; re-

---

26 Das Konzept der Modellierung zweiter Ordnung bezieht sich bei Küppers und Lenhard darauf, dass Simulation „die modellierte Dynamik imitiert und nicht etwa numerisch eine Lösung berechnet“ (Küppers, Lenhard 2006: 324).

duction of degrees of freedom; ad hoc models; a computer and computer algorithm; a graphics system; and an interpretation of numerical and graphical output coupled with an assessment of their reliability. A thorough epistemology of simulation requires a detailed analysis of the role of each of these components and an analysis of how a skilled simulationist can manage each potential contribution as a source of error. Here, I will have to be satisfied to note a few crucial features of the process of scrutiny“ (Winsberg 1999: 289).<sup>27</sup>

Die Schlussfolgerung, welche Winsberg aus seiner Analyse zieht, ist, dass das Vertrauen in Simulationen nicht unbedingt auf deren theoretischer Fundierung resultiert, sondern dass „the epistemology of simulation [...] is very much an empirical epistemology, and not merely a mathematical-logical one [...] our theoretical knowledge is just one of several ingredients that simulationists use to produce their end product – a model of the phenomena“ (Winsberg 1999: 290, 291). Winsberg entschuldigt sich für diese unbefriedigende Konklusion mit dem Hinweis: „Unfortunately, this conclusion is simply the result of a fundamental limitation of our cognitive power. When it comes to complex systems, we simply cannot bend our theories to our cognitive will – they will not yield results with any mechanical turn of a crank“ (Winsberg 1999: 291). Ob dies aber bedeutet, dass sich das Verstehen nur auf der Oberfläche der Bildschirme, also an den simulierten Phänomenen abspielt, gilt es zu hinterfragen. Denn in der Forschungspraxis ist es in der Regel nicht so, dass erst ein Simulationsmodell programmiert und damit dann experimentiert wird oder dass eine Modellhierarchie durchlaufen wird, an deren Ende die Simulation als Experiment steht. Modellierung, Programmierung und Simulation – zu Test- wie experimentellen Zwecken – sind miteinander rückgekoppelt und die Modellierer gehen in diesem Arbeitsprozess immer wieder zurück zur Theorie, zum mathematischen Modell und zum Code, nehmen Veränderungen vor, um dann erneut Simulationsläufe zu starten. Das vorläufige Ende – als ‚release‘ einer Modellversion bezeichnet – geschieht meist willkürlich aus Zeitgründen, etwa in der Klimamodellierung, um zugesagte IPCC Szenarien zu rechnen oder ein Modell der Community zur Verfügung zu stellen. Doch schon am nächsten Tag wird das in-silico Experimentalsystem

27 In einem anderen Aufsatz spricht Winsberg von einer Modellhierarchie: Die Theorie wird durch das ‚mechanische‘, also theoretische Modell spezifiziert (Anfangs- und Randbedingungen, Parametrisierungen), in ein dynamisches Modell transformiert (ad-hoc Modellierungen, Annahmen, Approximationen, etc.) und schließlich diskretisiert und codiert in ein ‚computational model‘ überführt, das dann berechnet wird. Die Resultate werden visuell aufbereitet, analysiert sowie interpretiert und ergeben schließlich das ‚model of the phenomena‘ (vgl. Winsberg 1999a).

weiter verändert, eine neue Version generiert und neue Simulationen durchgeführt. Diese Rückkopplungen und (Re-)Konfigurationen auf allen Ebenen charakterisieren das Forschen mit Computerexperimenten.<sup>28</sup> Ein Großteil des Erkenntnisgewinns resultiert gerade aus diesen permanenten Verbesserungen und Tests, also durch das Einrichten, Justieren und Verändern des in-silico Experimentalsystems, und nicht nur aus dem Experimentieren mit dem fertigen Konstrukt. Der epistemisch wohl fruchtbarste Prozess ist vielleicht sogar die Fehlersuche im Modell wie das Beispiel der Vulkanparametrisierung illustrierte. Für viele Wissenschaftsbereiche spielen diese immer wieder hergestellten Rückkopplungen zu Teilen der zugrundeliegenden Theorie, des Codes, aber auch zu den empirischen Quellen während des Konstruktionsprozesses die wichtigste Rolle für den Erkenntnisgewinn. Daher wäre es wichtig, diese von Winsberg angesprochene „complex chain of inferences that serve to transform theoretical structures into specific concrete knowledge“ (Winsberg 1999: 275) an konkreten Fallbeispielen in ihren verwickelten Zusammenhängen im Laufe der Arbeitsprozesse zu untersuchen.

Dabei würde es allerdings weniger um die Frage gehen, „whether or not, to what extent, and under which conditions, a simulation reliably mimics the physical system of interest“ (Winsberg 2003: 115), als mehr um die methodologischen wie epistemischen Transformationen, die innerhalb dieser Kette an Folgerungen stattfinden. Wissen wird während des Modellierens, Codierens und Simulierens von einem Modus in einen anderen transformiert und stellt damit einen sehr komplexen Prozess der Erkenntnisgewinnung dar. Genau diese Transformationen sind für den Entdeckungszusammenhang simulationsbasierter Erkenntnisse charakteristisch und kennzeichnen den Unterschied zu anderen Formen wissenschaftlicher Erkenntnisgenerierung. Sich allein auf das fertige Konstrukt oder den Begründungszusammenhang zu fixieren, ist dabei wenig hilfreich. Denn was häufig ignoriert wird, ist, dass Simulationsmodelle weit mehr als computerberechenbare Umsetzungen von basalen Gleichungen respektive Modellierungen zweiter Ordnung sind. Die hauptsächliche Arbeit steckt in der Programmierung der zusätzlichen Parametrisierungen, nicht nur in der Diskretisierung der zugrundeliegenden Gleichungen und den dafür nötigen Randbedingungen. Meist geht dies auch mit einer interdisziplinären Ausweitung der Simulationsmodelle einher,

---

28 Natürlich spielt hier auch wieder das gewählte Fallbeispiel eine Rolle. Vielleicht lässt sich ein Durchlauf durch eine Modellhierarchie bis zum Simulationslauf in manchen Wissenschaftsdomänen und vor allem für einfache Modelle finden. Doch im Falle der Klimamodellierung, aber auch der Biologie und der Gravitationsphysik ist das in realiter sicherlich nicht der Fall.



denn oft wird Information aus weiteren Wissenschaftsdisziplinen benötigt. Dies hängt natürlich vom Ziel der Simulation ab. Computerlaborstudien, wie die von Martina Merz zu Simulationen in der Elementarteilchenphysik, von Erika Mattila zu Epidemiesimulationen oder von Mikaela Sundberg zur Klimaforschung, wissen um die Bedeutung dieses Restes jenseits der basalen Gleichungen (vgl. Merz 1999, 2002; Mattila 2006; Sundberg 2005). Sie decken die verwickelten, epistemischen Prozesse des Modellierens und Simulierens auf. Mattila beispielsweise beschreibt die Einsicht, die sie aus ihrer empirischen Studie gewonnen hat, wie folgt:

„The empirical analysis conducted in this study supplies an account of the multiple functions of models within their life span: there was a change during the modeling process from *research objects* to *tool*, depending on the corresponding uses and applications. As tools they were material for other models, and they also nurtured the skills of the modellers to expand their research to other fields. [...] The modellers stressed that the models functioned as ‚media‘ for communication. The starting point was the need to find ways of organizing and managing interdisciplinary research work in order to build infectious-disease models. Although regular collaborative means, such as joint seminars and literature reviews were also used, the models played a special role in facilitating the communication: the difficult technical details, the mathematical formalisms, and the specificities of the infection were communicated *in* them“ (Mattila 2006: 187, 188). „Did the models fulfill any experimental functions (i.e. were bound up with experimental practice)? They were used in predicting possible scenarios by answering ‚what-happens-if‘ types of questions, which could be considered to carry their experimental function“ (Mattila 2006: 189).

In der Forschungspraxis stellt sich das Verhältnis zwischen Simulationsmodellen und Modellierern als ein komplexes dar, in welchem den Modellen allerlei unterschiedliche Funktionen zukommen. Das Experimentieren ist dabei nur eine unter vielen Funktionen, und steht dabei meist unter der prognostischen ‚was-wäre-wenn‘-Fragestellung. Merz fasst diese verschiedenen Funktionen einer Simulation unter dem Begriff ‚Multiplexität‘ zusammen (vgl. Merz 1999). Mit Lorenzo Magnani, der sich dabei allerdings nicht auf Simulationsmodelle, sondern auf klassische Modelle bezieht, könnte man Simulationen aufgrund ihrer vielfältigen Funktionen als ‚epistemic mediators‘ bezeichnen (vgl. Magnani 2001). Sundberg meint Ähnliches, wenn sie von einer ‚line of work‘ spricht: „The practices more literally constitute a line of work, ranging from theoretical construction, explorative use, pragmatic construction, to applied use. However, it is the simulation model, rather than collaborative projects, that brings the working practices in modeling together as a

collective (subworld)“ (Sundberg 2005: 159). Diese vielfältigen Funktionen der Computereperimente gestalten Forschungspraxis um, die einer neuen Syntax folgt, wie sie Matthias Heymann in seiner historischen Studie zu atmosphärenchemischen Simulationen rekonstruiert hat. „The use of computer as a tool required a change of practices towards a drastic simplification, the collection and preparation of an enormous amount of input data, the adoption of control procedures to validate the models, and the execution of ‚computer experiments‘ in sensitivity studies. The range and order of practices, which evolved in atmospheric modeling, may be regarded as what Rohrlich called ‚new syntax‘ of scientific practices or as a specific new form of knowledge production“ (Heymann 2006: 78). „It produces ‚computer observations‘, which make a new entry into the heterogeneous set of elements of knowledge“ (Heymann 2006: 84). Diese ‚computer observations‘ generieren zunehmend einen neuen Raum quasi-empirischer Analysen.

Doch was bedeutet es für den einzelnen Wissenschaftler im Alltag, wenn Computer eine neue Form der Arbeitsteilung einführen, nämlich die zwischen Forschern und Computern? „Das Gelingen von Kooperation zwischen Objekt und Subjekt setzt auf Seiten der Wissenschaftler Fertigkeiten, Erfahrungen und Kooperationsbereitschaft voraus“ (Merz 2002: 271), schreibt Martina Merz in ihrem Artikel *Kontrolle – Widerstand – Ermächtigung: Wie Simulationssoftware Physiker konfiguriert*, der das Wechselverhältnis zwischen Modellierern und ihren Modellen untersucht. „Auf dieser Grundlage ist eine Arbeitsteilung zwischen Objekt und Subjekt möglich: Wissenschaftler bereiten die Simulationssoftware vor und setzen Anfangsbedingungen. Sie übergeben darauf die Initiative an das Computerprogramm, das nun seine Daten eigenständig produziert. Während das Programm läuft, entzieht es sich dem Zugriff von außen. [...] Im Anschluss an den Prozess der Datenproduktion ergreifen wiederum die Wissenschaftler die Initiative, indem sie den Softwareoutput verarbeiten und interpretieren“ (Merz 2002: 271). Die Wechselwirkungen zwischen Modellierern und ihren Modellen werden von beiden Seiten gesteuert, wobei die Modelle als komplexe beziehungsweise multiplexe Objekte die Zugriffsformen regulieren. „Insbesondere jene Bestandteile [der Simulationssoftware], die den identitätsstiftenden konzeptionellen Kern des Programms stützen und ausmachen, sind für die große Mehrheit der Anwender unzugänglich, während relativ eigenständige Programmkomponenten von Anwendern nach Bedarf

an- und ausgeschaltet werden können“ (Merz 2002: 275, 276).<sup>29</sup> Aus dieser Reglementierung ergeben sich Gebrauchsanweisungen im Umgang mit der Simulation. Kontrollentzug und Widerstand gegenüber den geplanten Simulationsexperimenten sind die Folge. Dabei erscheint das Objekt den Forschern, so Merz, aus zwei Gründen widerständig. „Zum einen geben simulierte Daten den Grad ihrer Zuverlässigkeit nicht ohne weiteres preis; zum anderen sind die potenziellen Ursachen für unerwartete Ereignisse vielfältig. Das Objekt mutiert quasi unter der Hand von einer Antwortmaschine in eine (die Physiker herausfordernde) Fragemaschine“ (Merz 2002: 280). Ein Physiker, der für die Studie interviewt wurde, bringt es auf den Punkt: „A lot of people really trust the Monte Carlo as a sort of absolute prediction of QCD [Quantenchromodynamik] whereas most people who know a bit more about what happens inside a program distrust it maybe more“ (Merz 2002: 280).<sup>30</sup> Doch es lässt sich noch eine weitere Konfiguration feststellen und zwar hinsichtlich des Sozialen des Forschungsalltags, und genau hierin liegt auch ein wichtiger Aspekt für den Erkenntnisgewinn. „Simulation versetzt Physiker in die Lage, den Grenzbereich von Theorie und Experiment als einen Raum der Interaktion, Kooperation, Verhandlung, Manipulation und Entdeckung zu entfalten. Diese Konfiguration des Sozialen beruht auf verschiedenen Modi der Verbindung und Überbrückung“ (Merz 2002: 283, 284). Dabei spielt die Visualisierung der Resultate eine Rolle. Diese entsprechen eher der Vorstellungswelt der Experimentalphysiker und ermöglichen daher theoretischen Physikern einen neuen Zugang zur Theorie. Das Experimentieren mit dem Simulationsmodell leistet Ähnliches. Auf der anderen Seite werden Experimentalphysiker „durch die Simulation befähigt, neues epistemisches Terrain zu betreten und explorieren. Dabei erkunden sie einen Teil des epistemischen Raums theoretischer Physiker. [...] Simulation verkoppelt und erweitert epistemische Räume und ermöglicht die Etablierung neuer Formen der Arbeitsteilung und Kooperation zwischen Physikern verschiedener Ausrichtung. [...] Simulation [ermächtigt] Physiker insbesondere auch zu neuen Formen des Forschungshandelns“ (Merz 2002: 285, 286).<sup>31</sup>

- 
- 29 Das gilt nicht nur für Anwender von Simulationssoftware. Im Falle großer Modelle wie in der Klimaforschung hat ein einzelner Modellierer nur auf einen Teil des Gesamtmodells Zugriff und muss sich mit den anderen Programmteilen arrangieren.
- 30 Von daher sollten nicht nur Naturwissenschaftler, sondern vor allem Wissenschaftstheoretiker und -philosophen, Simulationen nicht nur als neue experimentelle Antwortmaschinen betrachten, sondern vor allem ihren Wert als Fragemaschinen anerkennen.
- 31 „Dabei hat Simulation zwei epistemische Funktionen: Zum einen erlaubt sie ein Experimentieren am Computer (in ‚dry lab‘-Experimenten) [...].

Diese neuen Formen des Forschungshandelns, die neue Syntax der Forschungspraxis, beschäftigt auch eine Reihe von Autoren im Kontext ökonomischer Simulationen. Im Unterschied zu den naturwissenschaftlichen Simulationsverortungen kommt hier eine weitere Komponente ins Spiel. „I suggest that the umbrella term ‚simulation‘ [...] was formed from a set of four interlocking elements, namely: ‚experiment‘, ‚model‘, ‚game‘ and ‚the computer‘ (Morgan 2004: 362). Mary Morgan, die in ihrem Artikel *Simulation: The birth of a technology to create 'evidence' in economics* die Entstehung der Simulation in den 1960er Jahren untersucht, zitiert einige der Simulationspioniere, unter anderem Geoffrey P. Clarkson und Herbert A. Simon: „Simulation is a technique for building theories that reproduces part or all of the output of a behaving system [...] The process of simulation involves constructing a theory, or model, of a system that prescribes the system's processes [...] By carrying out the processes postulated in the theory, a hypothetical stream of behavior is generated that can be compared with the stream of behavior of the original system“ (Clarkson, Simon 1960: 920). Dieses Zitat verortet Simulationen nicht nur in den Bereich von Technologien, und diesem Vorschlag folgt Morgan in ihrer Analyse,<sup>32</sup> sondern kennzeichnet den wichtigsten Zweck ökonomischer Simulationen, nämlich Verhalten zu simulieren. Es wird aber auch deutlich, dass die benötigte Theorie oder das Modell eines spezifischen ökonomischen Settings parallel zur Simulation entsteht. Im Unterschied zur Physik handelt es sich nicht um einen jahrhundertealten Formelkanon, der nun dank Simulationen numerisch approximiert und somit in neuer Weise analysiert werden kann. Simulationen erschließen den Wirtschaftswissenschaften in den 1960er Jahren, neben realen Rollenspielen, erst die Möglichkeit zu experimentieren und dafür braucht es entsprechende Modelle respektive Theorien.<sup>33</sup> „By tradition, economics was not regarded as an experimental science, a view which had to be overcome“ (Morgan 2004:

---

Zum anderen unterstützt sie die Erforschung von Analysestrategien und alternativen Modellbeschreibungen und dient damit einer Vertiefung des theoretischen Verständnisses“ (Merz 2002: 270).

- 32 „Labeling simulation a technology gives two advantages. First, as a technology, it presents itself in various forms, with each of the combined elements having more or less importance for any particular version, so we can be less concerned about the specifics of the techniques. Second, it draws attention to the combination of human know-how and material things associated with the meaning of ‚technology‘“ (Morgan 2004: 363).
- 33 „The, now classic, first market experiment in economics was reported by Edward Chamberlin (1948) who described a set of forty-six classroom („laboratory“) experiments“ (Morgan 2002: 46, vgl. Chamberlin 1948).

369). Ähnlich wie in der Biologie stimulieren Simulationen neue Arten von Theorien, von Modellen und von Experimenten.

Daher sollten Simulationen, wie das Margaret Morrison für Modelle fordert, als „autonomous agents“ verstanden werden (vgl. Morgan, Morrison 1999). In ihrem Buch *Models as Mediators* postulieren Morgan und Morrison: „We believe there is a significant connection between the autonomy of models and their ability to function as instruments of investigation. It is precisely because models are partially independent of both theories and the world that they have this autonomous component and so can be used as instruments of exploration in both domains“ (vgl. Morrison, Morgan 1999: 10). In dieser Interpretation wird der Simulation ein wichtiger, aber leider nicht autonomer Stellenwert zugewiesen. Simulation wird hier als eine modellspezifische Form der Repräsentation angesehen, die den autonomen Charakter der Modelle stärkt. „Although simulation and modelling are closely associated it is important to isolate what it is about a model that enables it to ‚represent‘ by producing simulations. This function is, at least in the first instance, due to certain structural features of the model, features that explain and constrain behavior produced in simulations. In the same way that general theoretical principles can constrain the ways in which models are constructed, so too the structure of the models constrains the kinds of behavior that can be simulated“ (vgl. Morrison, Morgan 1999: 29).<sup>34</sup>

Doch möglicherweise lässt sich der Spieß umdrehen und fragen, ob nicht mittlerweile die Simulation die Struktur der simulierbaren Modelle und Theorien bedingt und damit zu einer neuen Klasse von Modellen und Theorien als auch Experimenten führt.

---

34 Hier fehlt die Differenzierung zwischen mathematischem Modell, insilico Experimentalsystem (algorithmiertem Modell) und experimentellem Setting, also dem konkreten Computerexperiment. Das Verhalten der Simulation wird entscheidend von den Anfangs- und Randbedingungen bestimmt, nicht nur durch die vom Modell vorgegebene Struktur.

