

Fluch und Segen: die Rolle anpassbarer Parameter in Simulationsmodellen

Abstract

Anpassbare Parameter spielen in der Simulation methodologisch eine Hauptrolle. Anhand von Beispielen aus der Thermodynamik wird gezeigt, wie Simulationen auf der Basis zweckmäßig angepasster Modelle Resultate erzielen können, die erheblich über das theoretische Wissen hinausreichen. Entscheidend dabei ist, wie „normale“ Experimente und Simulationsexperimente während der Parameteranpassung miteinander kooperieren. Diesem Segen steht jedoch auch ein Fluch gegenüber: die Verwendung anpassbarer Parameter kaschiert Mängel der Erklärungskraft der Modelle. Die in der Anpassung und Optimierung gefundene bündelnde Balance ist eine Antwort auf Nichtwissen und geht mit einem Holismus-Problem einher, das darauf beruht, dass nicht alle Einflüsse in Modellen separat erfassbar sind.

Adjustable parameters play a main role in the methodology of simulation. The chapter discusses examples from thermodynamics and shows how simulations based on suitably parameterized models achieve results that significantly expand available theoretical knowledge. The crucial point is how traditional and simulation experiments cooperate in the parameterization process. However, this boon comes with a bane: using adjustable parameters hides weaknesses in the explanatory force of the models. The balance established by adaptation and optimization is a reaction to a lack of knowledge, which is linked to a holism problem: the factors influencing a process cannot all be disentangled.

1. Einleitung

Simulation bringt die Begriffe von Modell, Theorie und Experiment in ein spezielles Nachbarschaftsverhältnis. Separat hat jeder dieser Begriffe eine ausführliche philosophische Diskussion erfahren. Die Philosophie der Simulation diskutiert nun darüber, ob und wie sich diese Begriffe im Kontext der Computersimulation verändern.¹ In unserem Beitrag wollen wir uns auf die Schnittstelle zwischen (theoretischem) Modell und Experiment konzentrieren. An dieser Stelle kommen die anpassbaren Parameter ins Bild. Diese mögen wie ein bloßes Detail erscheinen, als Statis-

1 Humphreys hat die erste Monographie zum Thema beigetragen: Paul W. Humphreys: *Extending Ourselves: Computational science, Empiricism, and Scientific Method*, New York 2004. Wendy S. Parker: »Computer Simulation«, in: Stathis Psillos und Martin Curd (Hg.): *The Routledge Companion to Philosophy of Science* 2013, 2nd Edition oder Eric Winsberg: »Computer Simulations in Science«, in: *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2014 Edition), Edward N. Zalta (Hg.), <http://plato.stanford.edu/archives/fall2014/entries/simulations-science/> liefern einen Überblick über den Stand der Diskussion, der viele Referenzen enthält.

ten, die allenfalls von technischem Interesse ist, wenn es darum geht, Unzulänglichkeiten des Modells auszubügeln. Der Anschein trügt jedoch. Wir wollen zeigen, dass anpassbare Parameter in der Simulation methodologisch eine Hauptrolle spielen. Das erfordert eine Perspektive, welche die technikphilosophischen Aspekte mehr im Blick behält, als das in der Philosophie der Simulation üblich ist.

Allerdings handelt es sich bei anpassbaren Parametern um eine zweiseitige Angelegenheit. Einerseits erweitern sie die Reichweite von Simulationen ganz erheblich über das hinaus, was mittels theoretischen Wissens erreichbar wäre. Sie gestatten es, Nichtwissen über das zu modellierende System zu bündeln und so auszubalancieren, dass die Performanz der Simulation stimmig erscheint. Entscheidend dabei ist, wie »normale« Experimente und Simulationsexperimente während der Parameteranpassung miteinander kooperieren.

Andererseits ist es gerade die Bündelung, durch die erfolgreich angepasste Parameter den Weg zu bestimmten Zielen versperren. Insbesondere wird die Erklärungskraft eingeschränkt. Denn die in der Anpassung und Optimierung gefundene bündelnde Balance geht unweigerlich mit Nichtwissen einher, insofern sich die Einflüsse verschiedener Faktoren überlagern und nur gemeinsam untersucht werden können. Anpassbare Parameter sind damit Ermöglicher und Verhinderer zugleich, oder kurz: Sie sind Fluch und Segen der Simulationsmodellierung.

Diese Behauptung möchten wir anhand der Thermodynamik diskutieren und belegen, genauer gesagt anhand der sogenannten Zustandsgleichungen, die Größen wie Druck, Temperatur und Volumen bei verschiedenen Stoffen miteinander ins Verhältnis setzen. Unter vielen Wahlmöglichkeiten erschien uns dieses Gebiet besonders geeignet, weil es weithin anerkannt und theoretisch wohl fundiert ist. Wenn anpassbare Parameter hier als Segen (und Fluch) wirken, dann erst recht in anderen Gebieten, die stärker von Empirie geprägt sind.

Wir beginnen, indem wir das methodische Vorgehen in der Computersimulation erläutern. Es stützt sich zentral auf eine Rückkopplungsschleife, mittels derer systematisch variierte Simulationsexperimente mit empirischen Experimenten kooperieren. Und diese Kooperation, so werden wir argumentieren, läuft über Parameteranpassung ab. Wir verdeutlichen das anhand des Beispiels der thermodynamischen Zustandsgleichungen und wenden uns dann abschließend der begrifflichen Figur der Bündelung zu, die in gewisser Weise dem in der Philosophie diskutierten Problem des »Holismus« entspricht. Die Bündelung theoretischer und technischer Aspekte, die in der Parameteranpassung erfolgt, macht die Rede von der »Autonomie« der Modelle² auf besondere Weise relevant und führt zur Charakterisierung als technisches Nichtwissen.

2 Margaret Morrison: »Models as Autonomous Agents«, in: Mary Morgan und Margaret Morrison (Hg.): *Models as Mediators*, Cambridge 1999, S. 38–65.

Wir werden schließlich resümieren, inwiefern Erklärungswege durch Bündelung (technisches Nichtwissen) in der Computersimulation versperrt sind, und inwiefern das nur jeweils auf ein Modell bezogen, nicht für die Methode schlechthin, gilt.

2. Thermodynamik, Simulation und Experiment

Wir werden uns durchweg auf Beispiele aus der Thermodynamik stützen, genauer aus dem Bereich der Zustandsgleichungen fluider Stoffe. Das ist ein bekanntes und relativ zugängliches Gebiet, zudem auch ein theoretisch wohl fundiertes. So können wir den Anschein vermeiden, anpassbare Parameter würden nur dort zum Thema, wo es an Theorie mangelt. Allerdings sind wir auch davon überzeugt, dass unsere Beispiele typisch sind. Die Thermodynamik ist nur eines unter vielen Gebieten aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften, die wir heranziehen könnten.

Die bekannteste Zustandsgleichung ist sicher die ideale Gasgleichung:

$$p v = R T \quad (1)$$

in der p den Druck, $v = V / n$ das molare Volumen (Volumen per Mol des Stoffes) und T die Temperatur in Kelvin bezeichnet – allesamt empirisch messbare Größen. R schließlich ist eine universal Konstante ($8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Das heißt, alle Stoffe erfüllen die Gleichung (1), vorausgesetzt die Dichte ist klein genug, bzw. das molare Volumen groß genug.

Das ideale Gasgesetz kann als Spezialfall eines viel allgemeineren Begriffs von Zustandsgleichung angesehen werden, die ganz allgemein ausdrückt, wie die Größen p , v und T voneinander abhängen. Die allgemeine Form ist entsprechend:

$$f(p, v, T) = 0 \quad (2)$$

Im einfachen Fall ist das gerade die Gleichung (1), aber bei höherer Dichte spielt die individuelle Beschaffenheit der Moleküle eine wachsende Rolle und die funktionale Abhängigkeit wird sehr viel komplizierter und stoffabhängig. Während im Idealfall eines Gases geringer Dichte nur der feste Parameter R auftritt, sind in den anderen Fällen weitere Parameter nötig, um die Relation zwischen den drei Größen quantitativ zutreffend auszudrücken. Die quantitative Ausprägung dieser Parameter kann in der Regel nicht theoretisch hergeleitet werden. Stattdessen werden sie danach beurteilt, wie gut die Gleichung zu Messdaten passt. Die genaue mathematische Form einer Zustandsgleichung enthält, neben der Beschreibung des p , v , T -Verhaltens selbst, viele weitere praktisch relevante Informationen, wie etwa die Dampfdruckkurve oder kalorische Größen. Es gibt eine große Zahl von Zustandsgleichungen, die in der Regel nur mit Computermethoden numerisch ausgewertet werden können.

Damit verknüpfen Simulationen drei wichtige Bereiche:

- (i) das Konstruieren eines theoretischen Modells (hier: der Zustandsgleichung), wozu auch die Wahl von anpassbaren Parametern zählt. Dadurch ist eine Modellgröße x^{mod} bestimmt, die aber typischerweise nicht einfach zugänglich ist, wie etwa die Dampfdruckkurve nicht einfach abgelesen werden kann.
- (ii) Die Implementierung auf einem Computer, was Diskretisierung, Lösungsalgorithmen, Kodierung, usw. beinhaltet, sowie die Durchführung der Simulation, durch die eine Größe x^{sim} bestimmt wird. In der Praxis bestehen oft verschiedene Implementierungen eines Modells auf verschiedenen Computern. Eine Simulation kann natürlich immer nur über eine spezifische Modellimplementierung auf einem bestimmten Computer Auskunft geben.
- (iii) Die Analyse der Resultate der Simulation im Hinblick auf das Modell stützt sich wesentlich auf einen Vergleich zwischen empirisch/experimentell gemessenen Größen x^{exp} und x^{sim} .

Wissenschaftler können den Input der Modelle oder Einstellungen von Parametern variieren, um dann zu »beobachten« wie sich x^{sim} verhält. Das ist eine experimentelle Verfahrensweise, auch wenn sie weder die Natur noch einen Aufbau im Labor untersucht.³ In vielen Fällen, wie auch im vorliegenden Fall der Zustandsgleichungen, zielt man auf Systeme der realen Welt ab. Daher ist der Abgleich zwischen x^{exp} und x^{sim} zentraler Bestandteil der Simulationsmodellierung.

Abbildung 1 setzt die genannten Größen in einem Schema miteinander in Verbindung.

3 Die Debatte um den Experimentcharakter von Simulationen ist eines der Hauptthemen der Philosophie der Simulation, vgl. Evelyn Fox Keller: »Models, Simulation, and »Computer Experiments«, in: Hans Radder (Hg.): *The Philosophy of Scientific Experimentation*, Pittsburgh 2003, S. 198–215; Mary S. Morgan: »Experiments without Material Intervention. Model Experiments, Virtual Experiments, and Virtually Experiments«, in: Hans Radder (Hg.): *The Philosophy of Scientific Experimentation*, Pittsburgh 2003, S. 216–235; Eric Winsberg: »Simulated Experiments: Methodology for a Virtual World«, in: *Philosophy of Science* 70 (2003), S. 105–125, oder Margaret Morrison: *Reconstructing Reality: Models, Mathematics, and Simulations*, New York 2015.

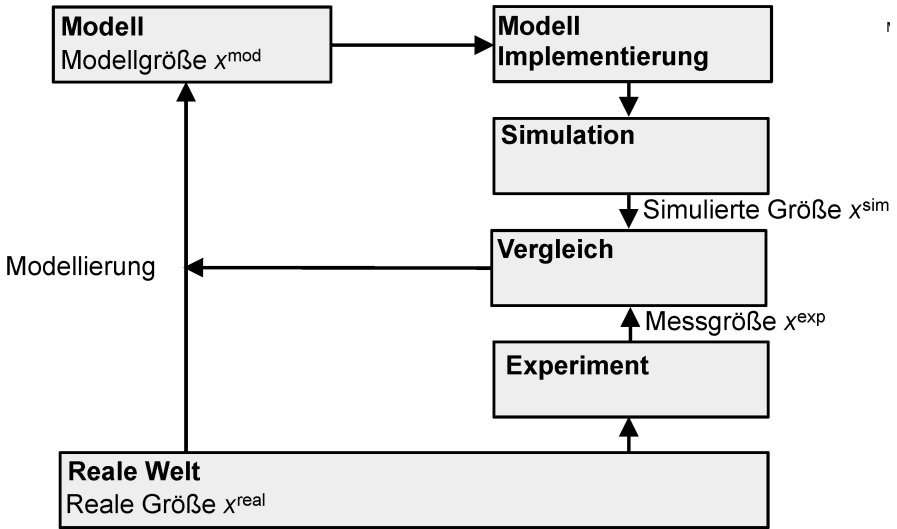


Abbildung 1: Schema der Beziehungen zwischen realer Welt, Modellierung, Simulation und Experiment.

Wir beginnen mit einer Größe x^{real} aus der (zu modellierenden) realen Welt. Ihr entspricht eine modellierte Größe x^{mod} des theoretischen Modells, die aber wegen der Komplexität des Modells nicht direkt ausgewertet werden kann. Daher wird das theoretische Modell als Simulationsmodell implementiert und ausgewertet, so dass die simulierte Größe x^{sim} schließlich mit der experimentell bestimmten (empirischen) Größe x^{exp} verglichen werden kann. Das Schema entspricht weitgehend den Auffassungen von Modellierung, etwa von R.I.G. Hughes⁴ oder H. Reichenbach,⁵ die das Zusammenspiel von modellseitigem mathematischen Schließen und Beobachtung hervorheben. Besonders ist jedoch, dass hier nicht deduktiv vorgegangen wird, sondern dass das theoretische Modell selbst einer teilweise experimentellen Erkundung bedarf. Wir haben es im Schema also mit zweierlei Typen von Experimenten zu tun: den »normalen« Experimenten (im Schema »von unten«) und Simulationsexperimenten (»von oben«), die x^{exp} bzw. x^{sim} bereitstellen.

Bis hierher war Simulation als ein Werkzeug in Erscheinung getreten, mit dessen Hilfe ein Modell zu Aussagen über eine Größe x gebracht wird. Es ging also, ganz der üblichen Auffassung folgend, um die Analyse eines theoretischen Modells und

4 Richard I.G. Hughes: »Models and Representation«, in: *Philosophy of Science* 64 (1997), Proceedings, S. 325–336.

5 Hans Reichenbach: *The Rise of Scientific Philosophy*, Berkeley und Los Angeles 1964, S. 102f.

den Vergleich mit einem Zielsystem (target system). Dabei muss ein Modell widerstreitenden Zielen genügen. Einerseits muss es das Zielsystems adäquat repräsentieren, sonst könnte es keine interessanten Aussagen liefern, andererseits muss es beherrschbar (tractable) bleiben, da man sonst die relevanten Aussagen gar nicht ermitteln und analysieren könnte und jedes noch so adäquate Modell nutzlos wäre.

Um unsere Behauptung einer Schlüsselrolle anpassbarer Parameter zu begründen, müssen wir das Schema der Simulationsmodellierung noch ein wenig komplizieren. Diese Komplikation ist in Abbildung 1 bereits enthalten und wurde auch bereits erwähnt. Es ist der nach links gerichtete Pfeil, der eine Schleife einführt, die unter Umständen auch mehrfach durchlaufen wird. Sie ist von größter Wichtigkeit.

Diese Feedback-Schleife ist zunächst eine klassische Regelungsschleife, die dazu dient, den Unterschied zwischen einer Variablen (hier: x^{sim}) und einem gegebenen Wert (hier: x^{exp}) zu minimieren. Dabei müssen übrigens diese Werte keine skalaren Größen sein; es können mehrere Werte sein, oder auch ganze Kurvenverläufe, wobei es dann natürlich mehrere Weisen gibt, den Unterschied zu operationalisieren. Diese Rückkopplungsschleife ist keineswegs unsere Entdeckung – sie ist keinerlei Geheimnis, wird jedoch oft als marginal betrachtet, als ein pragmatischer Weg, unvermeidbare Ungenauigkeiten nachzujustieren. Unser Punkt ist, dass diese Schleife der Anpassung von Parametern dient und dass diese Phase nicht von marginaler, sondern von ganz entscheidender Bedeutung ist.

Das Modellverhalten wird durch Simulationsexperimente erforscht und dann so modifiziert, dass es mit (verfügbaren) Ergebnissen klassischer Experimente übereinstimmt.⁶ Die Modifikation kann dabei auf zwei Arten erfolgen, einmal indem die Struktur des Modells verändert wird, oder indem Parameter angepasst werden. Wir konzentrieren uns auf die zweite Art.

Parametrisierungsschemata können als Werkzeuge angesehen werden, die dazu dienen, mit fehlendem Wissen und mit der Fehlerhaftigkeit des bestehenden (vermeintlichen) Wissens konstruktiv umzugehen. Ein Simulationsmodell wird gezielt so entworfen, dass es Parameter enthält, mit denen man das Modellverhalten flexibel steuern kann.

Im weiteren Gedankengang untersuchen wir die Rolle der anpassbaren Parameter genauer, um nachzuweisen, dass sie eine wesentliche Komponente der Simulationsmodellierung bilden. Während es Modelle mit solchen Parametern schon sehr viel länger gibt als Computer, standen praktische Hürden ihrem Gebrauch im Wege. Es macht einen enormen Unterschied, ob eine Schleife von Hand neu berechnet werden muss, oder ob sie automatisch (und schnell) durchlaufen wird. Nachdem Computer

6 In vielen interessanten Fällen ist die Messung selbst wiederum auf Modelle gestützt, so dass auch x^{exp} nicht unabhängig von Simulation ist. Wir gehen auf diese Komplikation hier nicht weiter ein.

und Software für Optimierung leicht verfügbar geworden waren, haben sich die Verfahrensweisen grundlegend gewandelt.

Den Begriff des anpassbaren Parameters verstehen wir von seinem Gebrauch her. Wenn man etwa ganze Gleichungen im Modell auswechselt, ohne dass dahinter objektbezogene Überlegungen stehen, sondern vielmehr nur um bessere Passung zu erreichen, so werden auch diese Gleichungen wie anpassbare Parameter behandelt.

Die Zustandsgleichungen, die wir hier exemplarisch behandeln, enthalten solche Parameter, die üblicherweise durch experimentelle Daten bestimmt werden müssen. Die ideale Gasgleichung (1) bildet hier die Ausnahme. Man könnte zwar argumentieren, dass die Konstante R zunächst ein anpassbarer Parameter war, von dem sich aber herausgestellt hat, dass er keinen fallspezifischen, sondern einen universellen Wert annimmt.⁷

Eine kurze Bemerkung zur Wortwahl scheint uns angebracht. Es gibt eine Reihe von Begriffen, die sehr ähnlich zu »Anpassung« sind. »Kalibrierung« zum Beispiel wird häufig im Kontext von Messinstrumenten benutzt, weshalb Parameter zu kalibrieren etwas nach der Justierung eines Präzisionsinstrumentes klingt. Dagegen hat »*Tuning*« (hier hat sich der englische Begriff eingebürgert) eine abwertende Konnotation, obwohl er zum Standardgebrauch in einigen Wissenschaften geworden ist. Wir jedenfalls möchten weiterhin von »Anpassung« reden, gerade weil dadurch die in Frage stehende Sache noch nicht als gut oder schlecht präjudiziert ist. »Adaptieren« wäre von ähnlicher Qualität.

3. Anpassung von Parametern am Beispiel der Thermodynamik

Die nach der idealen Gasgleichung nächst-einfacheren Zustandsgleichungen sind die van der Waals Gleichung:

$$p = \frac{R T}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad (3)$$

und die Virialgleichung, die wir hier in folgender Form diskutieren:

$$\frac{p v}{R T} = 1 + B \frac{1}{v} + C \frac{1}{v^2} \quad (4)$$

Die Forscher, auf die diese Gleichungen zurückgehen, J. D. van der Waals und H. Kammerlingh Onnes, haben 1910 bzw. 1913, dafür Nobelpreise erhalten. Beide Gleichungen sind stark theoretisch fundiert in Physik und Mathematik. Sie enthalten aber beide auch anpassbare Parameter, nämlich a und b in Gleichung (3), sowie B und C in Gleichung (4). Diese Parameter werden benötigt, um die Gleichungen auf

⁷ Diese Universalität hat weitreichende Konsequenzen für die Definition der Temperatur und für die atomare Struktur der Materie, auf die wir hier aber nicht weiter eingehen können.

verschiedene Substanzen anzupassen, wie etwa Wasser oder Stickstoff. Dabei stellen die Parameter nicht notwendig einfache Zahlen dar, sondern können auch für Funktionen von Variablen stehen. Aus theoretischen Gründen z.B. hängen B und C in (4) nur von der Temperatur, nicht aber vom Druck ab. In der ursprünglichen Version von (3) waren a und b Zahlen, während in den meisten späteren Versionen zumindest a für eine Funktion der Temperatur steht. Natürlich haben Funktionen sehr viel mehr Freiheitsgrade zur Anpassung zu bieten als Zahlen.

Nicht alle Variablen sind Parameter. Ein Modell liefert in der Regel eine bestimmte Menge von Größen y , die als Ausgangsvariablen bezeichnet werden. Deren Werte hängen von den Eingangsgrößen u und den gewählten Werten der anpassbaren Parameter p ab. Wir interessieren uns hier nur für Ausgangsgrößen y , die mit experimentell gewonnenen Daten y^{exp} verglichen werden können. Die Menge aller Modellvariablen x umfasst u , p , und y sowie gegebenenfalls weitere Größen. Abbildung 2 zeigt ein Schema, in dem diese Verhältnisse in der uns schon bekannten Rückkopplungsschleife dargestellt werden.

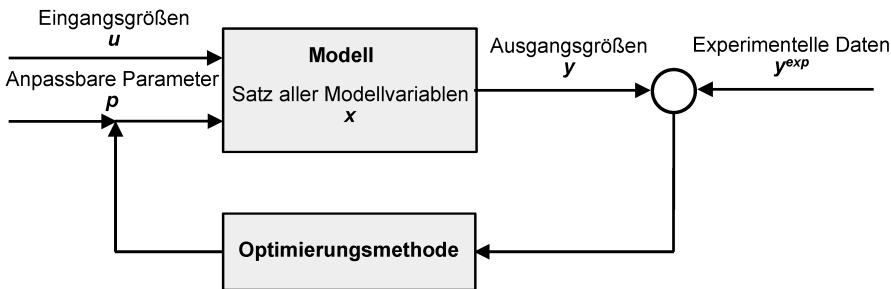


Abbildung 2: Schema der Parameteranpassung. Modell und Simulationsmodell werden hier nicht unterschieden.

Die Parameter p brauchen nicht Objekten oder Beziehungen in der realen Welt zu entsprechen. Ihre geschickte Einstellung dient zunächst dazu, die Qualität eines Modells in Hinsicht auf die Ausgangsvariablen y zu verbessern. Um das zu erreichen kann man es mit geschicktem Ausprobieren versuchen, geleitet von erprobten Heuristiken, die mitunter informell als eine Art Fingerspitzengefühl erfahrener Modellierer funktionieren. Aber heutzutage gibt es auch computerbasierte Optimierungsmethoden, die das Anpassen in ein eigenständiges Forschungsgebiet verwandelt haben.

In der van der Waals Gleichung (3) zum Beispiel könnte man die Temperatur T und das molare Volumen v als Eingangsvariablen wählen und fragen, wie der zugehörige Druck p aussieht. Das Ergebnis, das die Gleichung liefert, hängt natürlich von der Wahl der Parameter a und b ab. Falls für einen bestimmten Stoff bereits einige gemeinsame Datenpunkte (für p , v , T) vorliegen, so kann man a und b entsprechend

anpassen. Geht man so vor, wird die Spezifizierung der Parameter offensichtlich sowohl von der Wahl des Vergleichsdatensatzes, als auch von der Wahl der Anpassungsmethode abhängen. Tatsächlich werden bei der Parametrisierung von Zustandsgleichungen nicht nur p , v , T -Daten, sondern auch Daten über Dampfdruck, kritische Punkte und kalorische Eigenschaften verwendet. Die quantitative Charakteristik solcher Eigenschaften kann aus (3) meist nur mit einigem Aufwand numerisch durch Computer bestimmt werden. Umgekehrt kann man Computer zu Anpassungen heranziehen (die Optimierungsmethoden oben in Abbildung 2), die vorher nicht möglich waren.

Bis hierhin trat die Anpassung von Modellparametern als Segen auf. Ein Parameterfit kann selbst Modelle sehr unklarer theoretischer Qualität in brauchbare Repräsentationen der Ausgangsgrößen y verwandeln. Zudem sind im Falle der Zustandsgleichungen Parameteranpassungen auch unverzichtbar, da man Eigenschaften (außer für ideale Gase) praktisch nie aus »ersten Prinzipien« vorhersagen kann. Folglich müssen für solche Vorhersagen auch experimentelle Daten herangezogen werden und das geschieht eben auf dem Weg über Parameteranpassungen.

Wir nennen drei Beispiele für solche Eigenschaften. Erstens liefern (3) und (4) die (ideale) Gleichung (1) als Grenzfall. Zweitens kann der Parameter B der Gleichung (4) direkt mit intermolekularen Paarwechselwirkungen in Verbindung gebracht werden und war tatsächlich für lange Zeit die wichtigste Informationsquelle über solche Wechselwirkungen. Drittens enthält bereits die simple Gleichung (3) Informationen über die Existenz kritischer Punkte oder metastabile Flüssigkeits- und Gasphasen und wie diese Eigenschaften zusammenhängen. Diese Beispiele unterstreichen die vereinheitlichende Kraft der thermodynamischen Theorie und auch die handfesten Vorteile quantitativer Informationen, die sich aus einer Kombination von Experiment und Theorie ergeben können.

Die Parameteranpassung ist aber nicht nur Segen, sondern zugleich auch Fluch, weil sie verschiedenartige Fehler und Unstimmigkeiten des Simulationsmodells überdeckt und scheinbar zum Verschwinden bringt. Selbst ein offensichtlich falsches und sogar widersprüchliches Modell kann zu einer guten Übereinstimmung mit experimentellen Daten gebracht werden. Sollte ein umsichtiger Wissenschaftler daher Modelle ablehnen, in denen Parameteranpassungen nötig sind? Und was nützt ein Modell, das Daten vorhersagen kann, die zu dessen Konstruktion ohnehin schon benötigt werden?

Zustandsgleichungen können auch diesen Punkt erhellen. Die Parameteranpassung kann oft an wenigen Punkten erfolgen, z.B. nur an den so genannten kritischen Punkt des betrachteten Stoffs. Trotzdem beschreibt das Modell dann verschiedene Eigenschaften des Stoffs, auch weit weg vom kritischen Punkt, oft gut. Andererseits birgt gerade dies eine Gefahr. Denn man kann sich auf die Vorhersagekraft des Modells nur eingeschränkt verlassen. Der Nutzer muss sowohl das Modell als auch die

Art der Parametrierung berücksichtigen und über viel Vorwissen verfügen, um hinsichtlich der Vorhersagekraft zu realistischen Einschätzungen zu kommen. Sicherheiten gibt es dabei nicht, während zugleich, beispielsweise bei der Auslegung von Apparaten, dramatische negative Konsequenzen drohen. Wir haben oben erwähnt, dass der Parameter B in Gleichung (4) mit den zwischenmolekularen Wechselwirkungen in Verbindung gebracht werden kann. Andererseits aber kann sein Zahlenwert für ein und denselben Stoff von der Art der Parametrierung abhängen. Die physikalische Interpretation des Zahlenwerts ist also nur unter bestimmten Bedingungen, die an die Parametrierung zu stellen sind, möglich. Wird dies verkannt, kommen falsche Aussagen zu den Wechselwirkungen zustande.

Es gibt noch eine ganze Reihe weiterer Erwägungen, die anpassbare Parameter zugleich als Fluch und Segen der Simulationsmodellierung zeigen. Wir können hier nur cursorisch auf diese Gründe eingehen.⁸

- *Wuchernde Varianten.* Wir hatten bereits beobachtet, dass die Spezifizierung der Parameter von der Wahl der Ausgangsdaten und der Anpassungsmethode abhängt. So kann es zu einer wahren Flut von Varianten der Zustandsgleichungen kommen, die noch dadurch verstärkt wird, dass sogar die mathematische Form variiert wird, um in bestimmten Situationen einen besseren Fit zu erreichen. Tatsächlich gibt es zur 1873 entwickelten van der Waals-Gleichung mittlerweile mehr als 400 Varianten.⁹ Das zeigt zwar den Einfluss der Arbeit von van der Waals, ist aber in gewissem Sinne auch entmutigend, da diese Varianten keiner theoretischen Klassifikation gehorchen. Mehr noch: die große Zahl der Varianten bezieht sich allein auf die mathematische Form, während die Kombinationen mit verschiedenen Mischungsregeln noch hinzukommen. Schon wegen der kombinatorischen Explosion können die meisten Varianten gar nicht eingehend getestet und untersucht werden, sie werden häufig nur von der Arbeitsgruppe, die sie vorgeschlagen hat, verwendet. Dieser Umstand ist von D. Frenkel als »dunkle Seite der Simulation« bezeichnet worden: »In the past, we had to think about the role of simulations because they were expensive, now we have to think because they are (mostly) cheap.«¹⁰

Sicher hat der Computer die Modifikation der Modelle enorm erleichtert und daher anpassbare Parameter erst richtig attraktiv gemacht. Die Anzahl der Parameter ist nur noch eine schwache Bedingung. Während die van der Waals-Glei-

8 Für eine ausführlichere Darstellungen verweisen wir auf Hans Hasse und Johannes Lenhard: »Boon and Bane: On the Role of Adjustable Parameters in Simulation Models«, in: Johannes Lenhard und Martin Carrier (Hg.): *Mathematics as a Tool. Boston Studies in History and Philosophy of Science*, New York 2017.

9 Jose O. Valderrama: »The state of the Cubic Equation of State«, in: *Industrial Engineering Chemistry Research* 42 (2003), Heft 7, S. 1603–1618.

10 Frenkel, D.: »Simulations: The dark side«, in: *The European Physical Journal Plus* 128 (2013), Heft 10, DOI 10.1140/epjp/i2013-13010-8.

chung mit den beiden Parameter a und b auskommt, enthalten moderne Zustandsgleichungen 30 und mehr Parameter.¹¹

- *Notwendigkeit der Parameteranpassung.* Was macht die Anpassung zu einem drängenden wie unvermeidlichen Problem? Ganz allgemein stellt jedes mathematische Modell (nur) eine in vielerlei Hinsicht idealisierte Version des Zielsystems dar. Es gibt also stets Eigenschaften des Zielsystems, die im Modell gar nicht enthalten sind. Ob sie nun unbekannt, idealisiert oder falsch modelliert sind, spielt momentan gar keine Rolle, denn die Parameteranpassung behandelt alle diese Einflüsse auf die gleiche Weise, indem sie das Modellverhalten an vorhandene Daten angleicht. Selbst wenn sämtliche Eigenschaften eines Zielsystems bekannt sein sollten, heißt das noch lange nicht, man könnte sie auf behandelbare Weise in einem Modell abbilden. Auch dann sind anpassbare Parameter unerlässlich.

In der van der Waals-Gleichung zum Beispiel haben die Parameter a und b eine physikalische Deutung, nämlich als Darstellung anziehender, bzw. abstoßender Kräfte. Nun gibt es aber viele verschiedene Aspekte, die bei der molekularen Anziehung eine Rolle spielen, die im Parameter a sozusagen alle in einen Topf geworfen werden. Somit kann a als »effektiver« Parameter gelten. Für den Parameter b gilt entsprechendes. Trotz dieser kruden Vereinfachung ist die Gleichung außerordentlich erfolgreich. Das hat zweierlei Gründe: Erstens stellt die mathematische Form (ohne spezifizierte Parameter) der Gleichung ein theoretisches Gerüst dar, das wesentliche Eigenschaften erfasst, etwa die Koexistenz von Dampf und flüssiger Phase, oder den idealen Gas-Limes. Der zweite Grund sind die geeignet angepassten Parameter, die sozusagen quantitativ zielführend sind. Entscheidend beim Erfolg ist sicher, dass beide Gründe zusammenwirken.

- *Parameter ohne physikalische Bedeutung.* Simulation macht Gebrauch von der Rückkopplungsschleife, um mit Parametern p des Modells das globale Verhalten y zu steuern (in der Diktion der Abbildung 2). Dabei ist nicht erforderlich, dass diese Parameter eine physikalische Deutung haben. Ja, selbst wenn eine solche Deutung vorhanden wäre, würde sie im Anpassungsvorgang leicht aufgegeben. Der Form nach drückt a intermolekulare Anziehungskräfte aus. Diese lassen sich aber in der gebündelten Form in a nicht als solche unabhängig messen. So wird a quantitativ gemäß dem globalen Modellverhalten eingestellt. Daher ist die quantitative Spezifizierung weitgehend unabhängig von der physikalischen Interpretation. Im Nachhinein könnte es freilich trotzdem eine plausible Interpretation geben, was dann für die Qualität des Modells spräche, dessen Anpassung dann (so-

11 Das Zusammentreffen von Computermodellierung, explorativem Testen von Parametern und der wuchernden Anzahl von Varianten wird im Zusammenhang der Quantenchemie diskutiert bei Johannes Lenhard: »Disciplines, Models, and Computers: The Path To Computational Quantum Chemistry«, in: *Studies in History and Philosophy of Science Part A* (2014), Heft 48, S. 89–96.

gar) zu einer physikalischen Interpretation führte. Der Fall, dass ein Parameter von vorneherein keine physikalische Bedeutung hat, scheint trivial. Er ist eben eine Stellschraube zur Anpassung des Modellverhaltens (Ausgangsvariablen y). Aber warum werden solche Parameter überhaupt ins Modell aufgenommen? Sie ergeben sich aus einer technischen Bedingung, dass nämlich ein komplexes System durch ein behandelbares Modell dargestellt werden muss. Das sind gegenläufige Anforderungen, die nur durch einen Kompromiss erfüllt werden können. Die Sache wird noch dadurch kompliziert, dass Parameter mit theoretisch-physikalischer Bedeutung im Laufe der weiteren Modellverfeinerung diese Deutung verlieren können, ohne dass sie ihren Namen ändern. Ein Beispiel liefert wieder die van der Waals-Gleichung (3). Der Parameter a war ursprünglich eine bestimmte, (nur) vom betrachteten Stoff abhängige Zahl. Später wurde aber klar, dass das thermodynamische Verhalten über einen weiten Bereich von Temperaturen hinweg (Dampfdruckkurve) besser beschrieben werden kann mit einem Parameter a , der auch von der Temperatur abhängt. Die mathematische Form für $a(T)$ ist rein empirisch (*curve-fitting*) und entsprechend haben die dort auftretenden Parameter auch keine physikalische Deutung.

- *Parameter der Implementierung.* Bis hierher haben wir nur Modellparameter diskutiert und dabei eine Komplikation außen vor gelassen, die gerade für Simulationsmodelle zentral ist. Die theoretischen Modelle, von denen hier die Rede war, können oft gar nicht direkt untersucht werden, sondern nur als implementierte Computermodele, d.h. Simulationsmodelle. Das ist ein veritabler Modellierungsschritt, der eigene technische Bedingungen stellt. Die Frage etwa, wie ein mathematisch-theoretisches Modell angemessen zu diskretisieren wäre, besitzt keineswegs eine eindeutige Antwort. Einerseits sind anpassbare Parameter schon aus technischen Gründen unvermeidlich, um diskret, d.h. schrittweise, arbeitende Rechner mit kontinuierlicher Mathematik kompatibel zu machen. Andererseits sind gerade die Parameter der Implementierung nur mit Vorsicht zu genießen. Wenn Parameter, die Form des Gitters oder den numerischen *Solver* steuern, dann machen diese Parameter die Simulation abhängig von der konkreten Implementierung und erschweren dadurch die Untersuchung des theoretischen Modells.

Fazit: Bündelung und Nichtwissen

Anpassbare Parameter und der Umgang mit ihnen sind ein wesentlicher Bestandteil der Simulationsmodellierung. In diesem abschließenden Teil möchten wir ein Fazit ziehen, das den Begriff der Bündelung noch weiter erläutert und den Typus von Nichtwissen genauer bestimmt, der mit der Parameteranpassung verbunden ist.

Es handelt sich um ein recht spezielles Nichtwissen, ein Nichtwissen zweiter Ordnung, könnte man sagen. Auf der »ersten« sachlichen Ebene der Modellierung hat man es mit einem Sammelsurium von Aspekten zu tun, gegen die sich Wissen durchsetzen müsste. Diese Aspekte umfassen fehlendes Wissen über theoretische Zusammenhänge (wie interferieren Teilaspekte?), Unkenntnis über die adäquate Rahmung der relevanten Dynamik (was muss ins Modell noch rein?), übertriebene Idealisierung¹², Ungenauigkeiten der Modellierung (ist diese Approximation gut genug?), fehlerhafte Implementierung und weiteres. Diese verschiedenen Quellen von Nichtwissen beeinflussen allesamt die Einstellung eines Parameters. Dessen beste Anpassung ist dort erreicht, wo sich die genannten – und je nicht genau gewussten – Einflüsse möglichst aufheben. Das Nichtwissen hinter einem angepassten Parameter, auf das wir hier abzielen, ist insofern von »zweiter« Ordnung, als es das Nichtwissen der »ersten« Ebene zum Gegenstand hat. Man weiß eben nicht genau, wie sich das Bündel des Nichtwissens erster Ordnung zusammensetzt. Daher ist es aufgrund dieses Nichtwissens nicht möglich, das Modellverhalten den einzelnen Einflüssen – und Fehlerquellen – zuzuordnen. Der Segen anpassbarer Parameter ist, dass sie eine solche Zuordnung überflüssig machen können. Der Fluch ist, dass dies auch zu groben Fehlern führen kann.

Inwiefern kann dieses Nichtwissen als prinzipiell bezeichnet werden? Diese Frage lässt sich auf zweierlei Weise beantworten. Einerseits ist die Verwendung anpassbarer Parameter in einem Modell stets ein Ausdruck von Nichtwissen. Andererseits scheint kein spezieller Parameter unverzichtbar und der Weg steht im Prinzip offen, durch eine neue und näher an »*first principles*« orientierte Modellierung, einen Parameter, oder ein ganzes Parametrisierungsschema, überflüssig zu machen, gewissermaßen »aufzulösen«. Der Fluchpunkt wäre dann eine parameterfreie Modellierung, letztlich eine Vorhersage aus ersten Prinzipien. Eine solche ist übrigens in Teilgebieten der Thermodynamik von Stoffdaten möglich. Bestimmte Eigenschaften von Gasen lassen sich heute mit sehr hoher Genauigkeit aus der Schrödinger-Gleichung vorhersagen, ohne dass Messungen erforderlich sind. Die Vorhersagen stimmen exzellent mit Messwerten überein, ihre Genauigkeit kann die von Messwerten übertreffen. In vielen Fällen wird der Fluchpunkt jedoch imaginär bleiben, da mit einer feineren und (sowohl raum-zeitlich als skalenmäßig) höher auflösenden Modellierung in aller Regel neue Prozesse als relevant ins Bild geraten. Der Schritt aus dem Regen eines Parameterschemas führt dann leicht unter die Traufe eines anderen (wenn auch feineren). Daneben muss man auch nüchtern feststellen, dass viele der

12 Man kann bei mathematischer Modellierung zwischen Abstraktion und Idealisierung unterscheiden, wie das im Zusammenhang der Simulation zum Beispiel Morrison: *Reconstructing Reality*, tut. Die Vorteile der begrifflichen Präzision können wir hier jedoch nicht auskosten, da die »Bündelung« ja gerade diese Unterschiede verwischt.

Erfolgsgeschichten der Computersimulation, wie die der Thermodynamik, ganz zentral mit anpassbaren Parametern arbeiten.

Inwiefern ist dieses Nichtwissen ein technisches? Es kann auf eine doppelte Weise als ein technisches Nichtwissen bezeichnet werden, zunächst in einem »vorwärts« gewandten Sinn, der von der Technologie der Computer herrührt. Diese macht es notwendig, noch weitere Schritte nach der theoretischen (und mathematischen) Modellierung zu tun, der von den Bedürfnissen der Computertechnologie motiviert ist. Dazu zählen die Diskretisierung (mit der immer auch eine spezielle Art der Parametrierung einhergeht, siehe hierzu unsere Anmerkung oben), aber auch der algorithmische Programmentwurf und schließlich die Implementierung (vgl. Abbildung 1). Das Simulationsmodell als eigenständiges Modell wurde in der Philosophie der Simulation bereits öfters diskutiert.¹³ Mitunter machen die genannten weiteren Schritte auch eine »List« erforderlich, die sozusagen gegen den theoretischen Entwurf mittels pragmatischer Maßnahmen Simulationen und ihre Resultate akzeptabel macht.¹⁴ Das Bemühen etwa, die zur Verfügung stehenden Ressourcen einer parallelen Rechnerarchitektur auszunutzen, kann eine erhebliche Sogwirkung entfalten, welche in manchen Fällen auch die Formulierung des theoretischen Modells beeinflusst. Alle diese Schritte und Maßnahmen sind nicht durch das theoretische Modell selbst, sondern durch dessen weitere Behandlung als Computermodell motiviert. Sie sind in ihrer Auswirkung auf das Modellverhalten (y^{sim} in der Diktion von Abbildung 2) nur durch Simulationsexperimente zu explorieren und entsprechend durch Anpassungen zu kontrollieren.

Das Nichtwissen ist noch in einem zweiten Sinne technisches Nichtwissen. Denn es ist die Computertechnologie, die das wiederholte Durchlaufen der Rückkopplungsschleife zu einem Standardverfahren der Parameteranpassung macht. Dadurch aber wird die Bündelung in den Parametern immer dichter gepackt. Gerade die Leichtigkeit der Iteration und auch die Option zur numerisch-autonomen Optimierung (s. Abbildung 2) erzeugen Nichtwissen, in dem Sinne, dass die verschiedenen Einflüsse, die zu der je spezifischen Ausprägung von Parametern geführt haben, im Nachhinein (»rückwärts«) nicht mehr einzeln nachzuverfolgen sind. Die Einfachheit und Schnelligkeit, mit der parametrisierte Simulationsmodelle mit akzeptabler Performanz erstellt werden können, mag den einen oder anderen Wissenschaftler auch von

13 Vgl. Eric Winsberg: *Science in the Age of Computer Simulation*, Chicago und Illinois 2010; Humphreys: *Extending Ourselves*, oder Johannes Lenhard: »Computer Simulation«, in: P. Humphreys (Hg.), *The Oxford Handbook of Philosophy of Science*, New York 2016, S. 717–737.

14 Vgl. Winsberg: »Simulated Experiments«, S. 105–125; oder Johannes Lenhard: »Computer Simulation: The Cooperation between Experimenting and Modeling«, in: *Philosophy of Science* 74 (2007), S. 176–194; jüngst auch Andreas Kaminski u.a.: »Simulation als List«, in: Gerhard Gamm u.a. (Hg.): *List und Tod*, Jahrbuch Technikphilosophie 2016, S. 93–121, die »List« als treffenden Begriff einführen.

einer anstrengenderen tieferen theoretischen Durchdringung der untersuchten Gegenstände abhalten. Dies wäre in der Tat ein Fluch.

Wir haben bevorzugt von einer Bündelung gesprochen, die mit oder in den Parametern vor sich geht. Ein vielleicht ganz passendes Bild, das diese Wahl motiviert, ist die Herstellung eines Seiles. Dabei werden viele einzelne Schnüre miteinander verdreht, um ein Seil hoher Zugfestigkeit herzustellen. Diese globale Eigenschaft ist mehr als die Summe der Zugfestigkeiten der Schnüre – sonst bräuhete man gar keine Verdrehung. Nein, der eigentliche Vorteil liegt in der Interaktion der einzelnen Schnüre im eng gepackten Bündel. So auch bei den Parametern, es kommt auf die geschickte Wahl der anzupassenden Größen und die geschickte Konstruktion des Modells an, das sie enthält, um einen Mehrwert durch die Bündelung zu erzielen. Die Autonomie, von der in der Philosophie der Modelle gerne und mit Recht die Rede ist (seit Morrisons Artikel »Models as Autonomous Agents« von 1999, vgl. Fußnote 2), wird in der Simulation durch die technisch bedingte Verfügbarkeit von Iterationen auf besondere Weise befeuert.

Die Rede von der Bündelung mag etwas ungewöhnlich sein. Es gibt einen verwandten Begriff in der philosophischen Diskussion, nämlich den sogenannten »Holismus«.¹⁵ Auch er bezeichnet die Situation, dass ein komplexes Gebilde nicht in Untereinheiten aufgeteilt und diese einzeln analysiert werden können, weil diese Teile interagieren, also ein Ganzes bilden. Wir benutzen jedoch lieber den Begriff der Bündelung, weil unser Fall der Simulationsmodellierung besonders gelagert ist. Hier kommt nämlich noch hinzu, dass diese einheitliche Gestalt durch die Rückkopplungsschleife erst im Laufe der Modellierung erzeugt wird (und nicht etwa begrifflich bereits zu Anfang vorliegt).

Damit sind wir am Ende wieder bei Fluch und Segen der anpassbaren Parameter angelangt. Sie tragen zentral zum praktischen Erfolg von Simulationen bei (ohne dass sie diesen Erfolg aus sich heraus garantieren würden). Aber man akzeptiert gleichzeitig ein technisches Nichtwissen im oben geschilderten Sinne. Der praktische Erfolg, was Vorhersage und allgemein die Passung von y^{exp} und y^{sim} angeht, auch wo diese nur hypothetisch bleibt, weil noch gar keine Daten vorliegen, geht mit gravierenden Risiken und Nachteilen einher. Denn die Bündelung (das rückwärts gewandte Nichtwissen) versperrt den Weg für Erklärungen, zumindest soweit sie auf einer Analyse gemäß einzelner Einflussfaktoren beruhen.

Diese letzte Klausel scheint uns bedeutsam, denn Simulationen schließen Erklärungen nicht per se aus. Vielmehr bieten Simulationen neue Möglichkeiten, das Modellverhalten sozusagen abzutasten und kennenzulernen, indem Parameter und Eingangsgrößen variiert werden. Wo sich Erklärungen auf diese Möglichkeiten stützen, wären sie jedoch eine Betrachtung von außen, die sich am Modellverhalten und

15 Den terminologischen Hintergrund der Duhem-Quine These lassen wir hier außen vor.

nicht an inneren (theoretischen) Mechanismen orientiert. Inwiefern ist das mit den in der Philosophie geläufigen Erklärungsmodellen vereinbar? Wir sehen das als eine reizvolle, aber zur Zeit noch offene Frage an. Die Philosophie der Wissenschaften zielt üblicherweise auf begriffliche Analyse ab, die hier eben nicht durchführbar ist. Allein der Umstand, dass diese Frage offen ist, zeigt unseres Erachtens bereits, dass technische Aspekte einen großen Einfluss auf das begriffliche Zentrum der Wissenschaftsphilosophie haben.