

Modellbildung und Simulation*

Friedemann Mattern

Fachbereich Informatik, Technische Hochschule Darmstadt

1 Simulation

Das lateinische Wort “simulatio” bedeutet Heuchelei oder Täuschung – in dieser Hinsicht bezeichnete “Simulation” noch zu Anfang des 20. Jahrhunderts die Vortäuschung von Krankheiten, und zwar meist mit dem Zweck, vom Militärdienst ausgemustert zu werden. Mittlerweile ist allerdings das Tun “als ob” im Sinne des Nachspielens eines Vorgangs zu einem ehrenwerten und außerordentlich wichtigen wissenschaftlichen Prinzip mutiert, dessen heutige Bedeutung sogar in einer VDI-Richtlinie festgelegt wurde: Nach VDI 3633 ist Simulation das “Nachbilden eines Systems mit seinen dynamischen Prozessen in einem experimentierfähigen Modell, um zu Erkenntnissen zu gelangen, die auf die Wirklichkeit übertragbar sind”. Anstelle von realen Objekten oder Vorgängen technischer, biologischer, ökonomischer oder ökologischer Art werden entsprechende mathematische oder physikalische Modelle untersucht – Simulation läßt sich daher auch verkürzt mit “*Experiment am Modell*” als Ersatz für ein tatsächliches Experiment charakterisieren.

2 Anwendungsbereiche

Die Bedeutung der Simulation liegt darin, daß sie als Untersuchungsmethode vielfach auch dann noch eingesetzt werden kann, wenn andere Verfahren, wie etwa eine vollständige mathematisch-analytische Modellierung, versagen. Liegt das zu untersuchende System nicht vor (z.B. weil es erst geplant ist) oder laufen die Vorgänge der Realität zu schnell oder zu langsam ab (wie beispielsweise bei chemischen Reaktionen oder der Entstehung von Galaxien), so kann die Simulation ebenso wie bei der Erforschung von Vorgängen mit irreversiblen Nebeneffekten sogar die einzige Analysemöglichkeit darstellen.

Selbst wenn reale Experimente im Prinzip durchgeführt werden könnten, bietet die Simulation in vielen Fällen eine preiswerte, ungefährliche und gegenüber konventionellen Laborexperimenten flexiblere, schnellere, und ressourcenschonendere Alternative – man denke etwa an simulierte Crashtests oder den “digitalen Windkanal”. Hinzu kommt, daß viele Entwurfs- und Produktionsdaten sowie Parameter, die ein Experimentierumfeld bestimmen, meistens bereits in digitaler Form vorliegen, so daß sich auch von daher rechnergestützte Simulationen als synthetische Experimente anbieten, deren Resultate dann direkt

*Der vorliegende Beitrag entstand im Februar 1995 als Teil eines Projektes “Identität der Informatik”, bei dem eine Positionsbestimmung und eine Darstellung von Perspektiven der Informatik vorgenommen wird. Dankenswerte Hinweise und Anmerkungen kamen von mehreren Mitgliedern des “Darmstädter Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen” (DZWR).

wieder in andere Prozesse einer Versuchsplanung oder industriellen Fertigung einfließen können.

Typische Zielrichtungen von Simulationen sind etwa die *Optimierung* des Systemverhaltens, *Entscheidungshilfe* beim Systementwurf und bei der Auswahl unter verschiedenen Entwurfsalternativen, *Prognose* des Systemverhaltens (z.B. Wettervorhersage), *Validierung* eines geplanten Systems (z.B. einer VLSI-Schaltung), *Überprüfung von Theorien* durch hypothetische Modellbildung eines im Detail unbekanntes Systems (beispielsweise zur Untersuchung kognitiver Prozesse), *Modellanimation* zur Veranschaulichung eines komplexen Systemvorgangs, sowie *Training* komplexer Situationen im Ausbildungsbereich (z.B. Flugsimulator).

Durch dieses breite Anwendungsspektrum ergeben sich vielfältige Einsatzmöglichkeiten, vor allem in Technik und Naturwissenschaft, aber auch in anderen Wissenschafts- und Wirtschaftsbereichen. Genannt seien hier neben den bekannten Hauptanwendungsgebieten der industriellen Fertigung (Automobil-, Flugzeug-, Elektro- und Chemieindustrie), der Verkehrs-, Logistik- und Materialflußplanung sowie dem militärischen Bereich beispielhaft die Ökologie (z.B. Modelle zur Schadstoffausbreitung), Biologie (z.B. Evolutionsmodelle), Volkswirtschaft (z.B. Marktmodelle) oder Architektur (z.B. graphisch animierte Planungsmodelle). Auch in der Forschung wird die Simulation mittels Hochleistungsrechner zunehmend wichtiger; für einige Gebiete der Grundlagenforschung, z.B. in der physikalischen Chemie, stellt dies mittlerweile sogar eine unverzichtbare Methode dar. Die generelle strategische Bedeutung, die der Simulation zugemessen wird, kommt nicht zuletzt auch dadurch zum Ausdruck, daß dieses Gebiet 1989 in einer Studie des US-amerikanischen Verteidigungsministeriums als eine von 24 "kritischen" Technologien aufgeführt wurde.

3 Modellbildung

Modellierung. Simulation setzt zunächst die Erstellung eines *Modells* voraus. Die Verwendung von Modellen ist mindestens so alt wie die Technik selbst – schon in der Antike konstruierte man etwa Holzmodelle von geplanten Bauwerken. In einem umfassenderen Sinne begleitet die Modellbildung sogar die gesamte kulturelle Entwicklung der Menschheit: Indem man sich ein Modell der Wirklichkeit macht, interpretiert man die Welt und versucht so, seine Umgebung zu begreifen. Selbst prähistorische Höhlenzeichnungen als früheste Zeugnisse menschlicher Kultur wurden gelegentlich als Darstellung solcher Modelle interpretiert, und auch im phantasievollen Spiel von Kindern – eine Schere wird zum Krokodil, ein Holzklötzchen zum Auto – zeigt sich die angeborene Verhaltensweise des Menschen, durch Modellbildung und Simulation anschauliche Vorstellungen, Fertigkeiten und Kenntnisse über reale oder imaginäre Sachverhalte zu erlangen. Die Fähigkeit, mentale oder konkrete Modelle zu bilden, stellt unbestritten eine wesentliche Voraussetzung für planvolles Handeln und rationale Entscheidungsfindung dar; in diesem Sinne befassen sich nicht nur die Informatik oder Mathematik, sondern auch Wissenschaften wie Philosophie, Psychologie und Linguistik mit jeweils spezifischen Aspekten der Modellierung.

Notwendigerweise wird bei der Modellbildung von Details der meist komplexen Realität, die für den angestrebten Zweck unerheblich sind, *abstrahiert* und

es werden bewußt oder unbewußt einige Aspekte *idealisiert*. In der Regel ist ein Modell daher ein *vereinfachtes Abbild der Wirklichkeit*, das sich bezüglich der relevanten Aspekte jedoch weitgehend analog zur Realität darstellen oder verhalten soll. Modelle können physisch existieren (ein Globus als Weltmodell, ein Modellflugzeug im Windkanal, das Schachspiel als Modell einer Militärstrategie, Puppen als “Dummies” bei Crashtests etc.), und damit konkreten Experimenten zugänglich sein, oder abstrakter auch nur in symbolischer oder mentaler Form vorhanden sein.

Symbolische Modelle in Technik und Wissenschaft. Die oben angesprochenen und in der modernen Wissenschaft und Technik so außerordentlich wichtigen *symbolischen Modelle*, bei denen die realen Objekte sowie deren Verhaltensweisen und Beziehungen untereinander durch abstrakte Begriffe beschrieben werden, sind klassischerweise die Domäne der Mathematik, aber auch der modernen Physik und der Informatik. Hierbei lassen sich zwei Modellklassen unterscheiden: Einerseits die analytischen Modelle, bei denen ein dynamisches Systemverhalten typischerweise durch eine Menge gekoppelter (Differential-) Gleichungen charakterisiert ist, sowie andererseits die deskriptiven Modelle, bei denen das reale System durch einzelne zustandsbehaftete Simulationskomponenten, die aufeinander einwirken, beschrieben wird.

Analytische Modelle basieren in der Regel auf einer fundierten wissenschaftlichen Theorie, die das Verhalten des realen Systems erklärt – vielfältige Beispiele dazu findet man etwa in der Physik und Chemie. Eine “Simulation” reduziert sich dabei i.a. auf das (mathematisch allerdings meist nicht-triviale) “Ausrechnen” und ist insofern eine deduktive Vorgehensweise. Diese Methode war in der Vergangenheit vor allem in den angewandten Naturwissenschaften und Ingenieurwissenschaften sehr erfolgreich; nachteilig ist jedoch, daß bei der Modellbildung meist stark vereinfacht und idealisiert werden muß, um überhaupt eine analytische Beschreibung oder Lösung zu ermöglichen. Zudem stellen viele der heute interessierenden Vorgänge in Natur und Umwelt Systeme aus un stetigen oder nichtlinearen Prozessen dar, die in komplexer Weise miteinander vernetzt und rückgekoppelt sind und für die keine geschlossene Theorie oder adäquate Beschreibung in analytischer Form vorliegt.

In solchen Fällen sind *deskriptive Modelle* sinnvoll, bei denen mehr oder weniger explizit eine künstliche Welt im Rechner nachgebaut wird und sich Erkenntnisse in induktiver Weise durch Experimente an diesem Modell erschließen. Rasante Fortschritte in der Rechentechnik ermöglichen es, den deskriptiven Modellen, die ihrem Wesen nach diskret sind, viele neue technische Anwendungen zu erschließen und damit vielen überaus spannenden Fragen der Wissenschaft nachzugehen. Die oftmals hohe Komplexität solcher Modelle stellt dabei bezüglich der Modellierungs- und Programmieretechnik, den Korrektheits- und Genauigkeitsforderungen sowie in Bezug auf die gewünschte Ausführungsgeschwindigkeit eine Herausforderung für viele Bereiche der praktischen und angewandten Informatik dar.

4 Simulationsprinzipien

Rechnergestützte Simulation läßt sich auf verschiedene Art einsetzen. Verstand man früher darunter nur die off-line Ausführung explizit programmierter Modelle mittels eines Großrechners, so lassen sich heute auf einem Notebook schnell Modellrechnungen (“*Was wäre, wenn die Zinsen in Japan steigen würden?*”) mit geeignet angewendeten Spreadsheet- oder Computeralgebra-systemen durchführen. Solche interaktiven, leicht zu bedienende Szenariengeneratoren und -auswerter zeigen einen interessanten Trend zumindest in der Geschäftswelt, Simulationen zum Management von Konsequenzen einzusetzen. Die Expertise zum Erstellen von Modellen sowie zur statistischen Auswertung und geeigneten graphischen Aufbereitung der Ergebnisse sollte idealerweise im System selbst vorhanden sein, so daß hierbei zunehmend auch Methoden der Künstlichen Intelligenz zum Einsatz kommen.

In komplexen Fällen, in denen keine einfachen Modellrechnungen genügen, werden jedoch weiterhin Modelle in eher klassischer Weise als Programm erstellt. Hierbei kommen verschiedene Prinzipien zur Anwendung, die nachfolgend kurz skizziert werden. Bei der Simulation deskriptiver Modelle wird dabei – im Unterschied zur quasi-kontinuierlichen Simulation analytischer Modelle, wo nur zum Zweck der numerischen Berechnung eine Diskretisierung vorgenommen wird – die *diskrete Struktur* der Modelle explizit berücksichtigt. Dies kann in unterschiedlicher Weise geschehen, was sich in verschiedenen sogenannten *Simulationsparadigmen* widerspiegelt. Diese umfassen Methoden, Strategien, Modellierungsstile und Sichtweisen, wobei zu jedem der im folgenden genannten Paradigmen typische Simulationssprachen, prototypische Anwendungen und auch spezifische Nutzerklassen gehören.

Ereignisorientierte Simulation. Beim *ereignisorientierten Simulationsprinzip* wird angenommen, daß Zustandsänderungen am Modell nur durch das Eintreten von atomaren, d.h. keine Simulationszeit¹ verbrauchenden *Ereignisse* verursacht werden. Alle Ereignisse besitzen einen Eintrittszeitpunkt, wobei einige bereits initial vorgemerkt sind, die meisten Ereignisse jedoch erst im Verlauf der Simulation entstehen und in einer Planungsliste verwaltet werden. Da entsprechend der ereignisorientierten Weltansicht zwischen zwei Ereignissen nichts geschieht, kann in iterativer Weise jeweils die Simulationszeit auf den Eintrittszeitpunkt des nächsten eingeplanten Ereignisses erhöht werden und die mit diesem Ereignis verbundene Zustandsänderung, inklusive einer möglichen Erzeugung neuer Ereignisse, durchgeführt werden. Durch diese ereignisgesteuerte Fortschaltung der Simulationszeit können in der Simulation ereignislose, gegebenenfalls länger dauernde Totzeiten übersprungen werden, “whose passage in the real world we are forced to endure” (G.S. Fishman).

Transaktionsorientierte Simulation. Eine Unterklasse der ereignisorientierten Simulation stellt die *transaktionsorientierte Simulation* dar, die besonders gut zur Modellierung von Warteschlangensystemen geeignet ist. Hierbei werden in einem System vernetzter Stationen Arbeitseinheiten (“Transaktio-

¹Unter *Simulationszeit* versteht man die simulierte Zeit im Modell, sie ist also das Abbild der Zeit der simulierten Realität und hängt in der Regel nicht mit der Ausführungszeit von Simulationsaktionen bei der rechnergestützten Simulation zusammen.

nen”) von einer Station zu einer anderen weitergereicht, wobei es aufgrund unterschiedlicher Verweilzeiten bei den Stationen und Konkurrenz bei der dortigen simulierten Betriebsmittelzuteilung zu komplexen Abhängigkeiten der Transaktionen untereinander kommen kann. Durch diese spezielle Weltansicht lassen sich viele betriebswirtschaftlich interessante Systeme einfach beschreiben und modellieren, unter anderem baut die weitverbreitete Simulationssprache GPSS auf diesem Paradigma auf.

Prozeßorientierte Simulation. Eine andere, wesentlich breiter anwendbare Unterklasse der ereignisorientierten Simulation ist die *prozeßorientierte Simulation*, bei der ein Modell aus einer gegebenenfalls dynamischen Menge interagierender aktiver Objekte (“Prozesse”) gebildet wird. Jedes derartige Objekt besitzt einen Zustand in Form lokaler Daten und durchläuft in programmierter Weise eine Folge von Ereignissen, die den lokalen Zustand, aber auch den Zustand anderer Objekte oder den globalen Systemzustand, insbesondere die Simulationszeit, ändern. *Simscrip*t und *Simula* stellen bekannte Vertreter prozeßorientierter Simulationssprachen dar.

Zeitgesteuerte Simulation. Im Gegensatz zur ereignisorientierten Simulationstechnik beruht die *zeitgesteuerte Simulation* darauf, daß die Simulationszeit fortlaufend um ein gewisses Zeitinkrement erhöht wird. Nach jeder Erhöhung der Simulationszeit werden die innerhalb der letzten Epoche aufgetretenen Zustandsänderungen der Modellkomponenten durchgeführt. Die Größe des Zeitinkrements ist hierbei von entscheidender Bedeutung für Korrektheit, Genauigkeit und Effizienz der Simulation. Typische Anwendungsklassen der zeitgesteuerten Simulation sind solche Systeme, bei denen sich die Zustandsänderungen nicht ohne unnötige Detaillierung einzelnen Ereignissen zuordnen lassen, also etwa ökologische Prognosemodelle oder volkswirtschaftliche Planspiele sowie Modelle aus den Bereichen Physik, Technik oder Meteorologie. Ferner wird die zeitgesteuerte Methode dann angewendet, wenn im Rahmen einer interaktiven Simulation (bis hin zur “virtuellen Realität”) dem Benutzer ein quasi-kontinuierlicher Ablauf des Geschehens vorgespielt werden soll.

Stochastische Simulation. Oft wird im Zusammenhang mit Simulation auch der 1944 von J. von Neumann geprägte Begriff *Monte-Carlo-Methode* verwendet. Hierbei handelt es sich allerdings weniger um ein bestimmtes Simulationsprinzip, als vielmehr um eine Sammelbezeichnung für numerische Verfahren, bei denen ein stochastisches Modell aufgestellt wird und die entsprechenden Zufallsgrößen mit Hilfe von Zufallszahlen simuliert werden. Im verallgemeinerten Sinne wird darunter jede Nachbildung von Vorgängen, auf deren Ablauf zufällige Faktoren Einfluß nehmen, verstanden – treffender auch als *stochastische Simulation* bezeichnet. Typischerweise wird dabei die Eintrittswahrscheinlichkeit oder der Eintrittszeitpunkt von Ereignissen sowie die Dauer gewisser Aktivitäten im Simulationsmodell durch Zufallsgrößen modelliert.

5 Zur Pragmatik der Simulation

Simulationsmodelle sind oft sehr große Programmsysteme, die in explorativer und inkrementeller Weise entwickelt werden. Schon dies stellt hohe Anforder-

rungen an den Softwarekonstruktionsprozeß (Modularisierung, Wiederverwendung von Programmteilen, Dokumentation). Hinzu kommen noch spezifische Aspekte wie Dynamik und Parallelität: In einer typischen Simulationswelt entstehen und vergehen Objekte, und es sind i.a. mehrere Objekte gleichzeitig aktiv, die miteinander wechselwirken und konkurrieren.

Simulationsprachen. Aufgrund dieser Anforderungen sollten Simulationsprachen, die nicht ausschließlich auf ein spezifisches Anwendungsgebiet zugeschnitten sind, nicht nur dynamische Datenstrukturen zur Verwaltung dieser Objekte bieten, sondern auch Konzepte zur (quasi-) konkurrenten Darstellung aktiver Objekte und Prozesse. Neben einem geeigneten konzeptionellen Rahmen, welcher die Abstraktionen und Notationshilfsmittel zur adäquaten Umsetzung des Modells in ein ausführbares Programm bereitstellt, erwartet man idealerweise auch Unterstützung bei der Generierung von Zufallszahlen unterschiedlicher Verteilung, der Aggregation und statistischen Aufarbeitung der anfallenden Daten sowie gegebenenfalls deren graphische oder animierte Darstellung.

Zur Erfüllung der genannten Anforderungen hat sich das Paradigma der *Objektorientierung* außerordentlich bewährt, bekanntermaßen entstand die objektorientierte Programmierung bereits Mitte der 60er Jahre mit der für Simulationszwecke geschaffenen Sprache *Simula*. Tatsächlich erlaubt die objektorientierte Modellierung durch das Prinzip der autonomen kommunizierenden Objekte sowie des hierarchischen Klassenkonzepts einen problemadäquaten Entwurf deskriptiver Modelle und ermöglicht damit die gewünschte konzeptionelle Nähe zum jeweiligen Anwendungsbereich.

Um das Erstellen von Simulationsmodellen zu vereinfachen, wurden neben universellen Simulationsprachen auch Zusatzpakete für gängige Programmiersprachen sowie auf spezifische Anwendungsbereiche (z.B. die Analyse von Produktionsanlagen oder Kommunikationsnetzen) hin zugeschnittene Entwurfsumgebungen entwickelt, die den Modellierungs- und Programmieraufwand beträchtlich reduzieren. Generell bleibt jedoch die Simulation eine schwierige Aufgabe, insbesondere wenn Aspekte der numerischen Stabilität, der Diskretisierung und der stochastischen Versuchsplanung eingehen, die einerseits die Genauigkeit des Modells und damit die Aussagekraft der Simulation betreffen, andererseits aber oft nicht unabhängig von der verwendeten Entwicklungs- und Ausführungsumgebung betrachtet werden können.

Korrektheit. Beide bei einer Simulation iterativ durchlaufene Phasen, sowohl das Erstellen des Modells als auch die anschließende Durchführung von Experimenten an diesem Modell, erfordern besondere Aufmerksamkeit, damit den Resultaten vertraut werden kann. So sind Fehler bei der Modellierung (falsche Interpretation von Eigenschaften des realen Systems, Vernachlässigung wesentlicher Aspekte) manchmal nur schwer oder sogar überhaupt nicht an den Simulationsergebnissen erkennbar; ferner kann die durch eine detaillierte Verhaltensmodellierung verursachte mangelnde Transparenz des programmierten Modells berechnete Zweifel an der Aussagekraft der Simulation wecken.

Daher scheint eine *Validierung* des Modells (‘‘Entspricht es der Realität in ausreichendem Maße?’’) unumgänglich, gestaltet sich in der Praxis allerdings oft schwierig. Ein Modell ist in diesem Sinne adäquat, ‘‘wenn die Folgen der

Experimente, die man mit dem Modell macht, die Modelle der Folgen sind, die man mit der wirklichen Einrichtung machen würde” (P. Rechenberg). Leider lassen sich jedoch die Simulationsergebnisse nicht immer mit der Wirklichkeit vergleichen, da Simulationen ja gerade als Ersatz für echte Experimente durchgeführt werden. Selbst wenn dies möglich ist und das Modell eine Entsprechung in der Realität hat, muß man sich meist damit begnügen, das Modell für ausgewählte Fälle mit entsprechend empirisch gewonnenen Daten zu vergleichen (“*Hätte das Klimamodell die letzte Eiszeit korrekt vorhergesagt?*”), um so – wie bei jeder Theorie – durch mißlungene Invalidierungen das Vertrauen in die Adäquatheit zu stärken.

Insbesondere bei stochastischen Simulationen müssen viele Aspekte realer Versuchsplanungen berücksichtigt werden. Das betrifft vor allem die bezüglich statistischer Gesichtspunkte korrekte Durchführung der Experimente sowie die Auswertung und Interpretation der Ergebnisse. Die Einbindung eines Simulationssystems in andere technische Systeme (ggf. unter strikten Realzeitanforderungen) sowie die Realisierung graphisch-interaktiver Schnittstellen und Animationen stellt weitere hohe Anforderungen und ist mitverantwortlich dafür, daß Simulationssysteme meist große und schwer zu wartende Programmsysteme sind.

6 Simulationen in den “Computational Sciences”

Jahrhundertlang standen analytische Lösungsmethoden – mit ihrer grundsätzlichen Schwäche der Idealisierung und Vernachlässigung kleiner, u.U. aber entscheidender Effekte – im Vordergrund des wissenschaftlichen Interesses. Dies war berechtigt, da einerseits mit analytischen Modellen viele fundamentale Zusammenhänge der Natur beschrieben werden konnten, und andererseits die sich bei deskriptiven Modellen ergebenden numerisch aufwendigen oder langwierigen Rechnungen sowieso nicht ausgeführt werden konnten. Der Einsatz immer schnellerer Rechner (“number cruncher”) beginnt nun aber zusammen mit dem sich schnell entwickelnden Gebiet des “Wissenschaftlichen Rechnens” die wissenschaftliche Methodik nachhaltig zu verändern, indem das Arbeiten mit Zahlen und großen Datenmengen an Stelle der analytischen Formeln an Bedeutung gewinnt.

Hochleistungsrechner. Der amerikanische Vizepräsident Al Gore, seinerzeit noch Senator von Tennessee, hat die Bedeutung von Simulation mittels Hochleistungsrechnern sehr plastisch in einem Artikel der Washington Post im Juli 1990 so beschrieben: *“It is hard to understand an ocean because it is too big. It is hard to understand a molecule because it is too small. It is hard to understand nuclear physics because it is too fast. It is hard to understand the greenhouse effect because it is too slow. Supercomputers break these barriers to understanding. They, in effect, shrink oceans, zoom in on molecules, slow down physics, and fastforward climates. Clearly, a scientist who can see natural phenomena at the right size and the right speed learns more than one who is faced with a blur.”*

Das Wesentliche an der Verwendung von Hochleistungsrechnern für Simulationszwecke ist, daß es damit möglich wird, die Ergebnisse an sich einfacher

Theorien in komplizierten Situationen zu berechnen. Dies trifft etwa für die Vielteilchensysteme zu, die sich dadurch auszeichnen, daß in ihnen viele Beziehungen wirken, die im einzelnen meist verstanden sind, nicht aber in ihrem Zusammenwirken. Ein typisches Beispiel hierfür stellen Kollisionen von Galaxien aus Millionen von Sternen dar: Zwar läßt sich die Gravitationswechselwirkung zwischen zwei Massen leicht mit Bleistift und Papier ausrechnen, für große Systeme ist eine analytische Verhaltensbeschreibung jedoch ausgeschlossen. Hier ist man also auf eine detaillierte Simulation angewiesen, will man solche Systeme verstehen oder Theorien, etwa aus den Bereichen Physik und Materialwissenschaften mit zum Teil noch nicht gänzlich geklärten Phänomenen (z.B. Diffusion von Ladungsträgern in einem Halbleiter, Schmelzen von Metall, Magnetisierung von Eisen), überprüfen.

Ähnliches gilt für die Meteorologie. Die Notwendigkeit, in diesem Bereich schnelle Rechner einzusetzen, wurde schon 1922 – also lange vor der Erfindung des Computers – vom britischen Mathematiker L.F. Richardson in seinem Buch “Meteorology and Numerical Analysis” dargelegt. Er kam darin zum Schluß, daß mehrere zehntausend Personen gleichzeitig – und wegen des notwendigen Datenaustausches in räumlicher Nähe zueinander – arbeiten müßten, um mit der Vorhersage vor dem Eintreffen des Wetters fertig zu sein. Allerdings scheint diese Abschätzung aus heutiger Sicht noch viel zu optimistisch; der Bedarf an Rechenleistung ist in den Bereichen Meteorologie, Klimaforschung, Ökologie und den erkenntnistheoretisch besonders spannenden Gebieten der Atomphysik, Chemie und Biologie mit ihren “Grand Challenges” noch lange nicht gedeckt. Aus diesem Grund rücken zunehmend *Parallelrechner* in den Blickpunkt des Interesses; durch die mit dem “massiv parallelen Rechnen” verbundenen Probleme und Herausforderungen der Bereiche Rechnerarchitektur, Algorithmenentwurf, Programmierumgebungen, Visualisierung etc. gewinnen neben Teilgebieten der Mathematik auch weite Teile der Kerninformatik an Bedeutung für dieses Anwendungsfeld.

Erkenntniserwerb durch Simulation. Wissenschaftstheoretisch interessant ist der sich durch den zunehmenden Einsatz von Simulationen mittels Hochleistungsrechner abzeichnende *Paradigmenwechsel*: Neben dem von Francis Bacon zu Beginn des 17. Jahrhunderts propagierten Wechselspiel zwischen Theorie und Empirie gewinnt nunmehr die Simulation als eine dritte Säule im Erkenntniserwerb an Bedeutung; gerade Hochleistungsrechner geben Wissenschaftlern in nie dagewesener Weise Flexibilität und “Macht” über ihre Modelle. Bezeichnenderweise werden heutzutage schon gelegentlich physikalische Experimente in der Weise ausgewertet, daß ein Simulationsmodell so lange variiert wird, bis es sich ebenso verhält wie das entsprechende reale Experiment. Der Schluß, daß das untersuchte Phänomen damit eine Erklärung gefunden hat, liegt dann nahe – auch wenn es noch nicht in einem tieferen, analytischen Sinne verstanden ist, sondern man höchstens hoffen darf, daß sich einem damit weitere Anhaltspunkte zur Formulierung eines wohl eher befriedigenden analytischen Modells eröffnen. Im Rahmen der sich herausbildenden “computational sciences” wird die rechnergestützte Simulation sogar zur tragenden Methode erhoben, bei der die Entwicklung des Theoriengebäudes durch Simulationsmodelle bestimmt wird. Die Bezeichnung eines Simulationsmodells als “theory-as-program” (T.M. Ostrom) ist allerdings eine radikale Auffassung, der

sich bisher wohl nur wenige Wissenschaftler anschließen dürften.

Simulationen mit Hochleistungsrechnern eröffnen jedenfalls die Chance, von den klassischen reduktionistischen Methoden der Naturwissenschaften abzurücken und mittels realitätsgetreuer holistischer Modelle, bei denen die zugrundeliegenden Naturgesetze nicht übersimplifiziert werden, das Zusammenspiel vieler Einzelkomponenten in ihrer Gesamtheit zu erfassen. Damit entspricht auch die Simulationstechnik dem allgemein zu beobachtenden Wandel des wissenschaftlichen Denkens zum Ende des 20. Jahrhunderts, statt Einzelphänomene in stärkerem Maße vernetzte Strukturen zu untersuchen.