

COMPUTERSIMULATIONEN: MODELLIERUNGEN 2. ORDNUNG

GÜNTER KÜPPERS und JOHANNES LENHARD

SUMMARY. Es soll ein Beitrag zur epistemischen Charakterisierung von Computersimulationen als jenseits von Experiment und Theorie geleistet werden. Es wird argumentiert, dass die in der Simulationstechnik eingesetzten Verfahren nicht numerische *Lösungen* liefern, sondern deren Dynamik mittels generativer Mechanismen *imitieren*. Die Computersimulationen in der Klimatologie werden als systematisches wie historisches Fallbeispiel behandelt. Erst „Simulationsexperimente“ gestatten es, mittels Modellen eine Dynamik zu imitieren, ohne deren Grundgleichungen zu „lösen“.

Computer simulations will be characterized in epistemic respect as a method between experiment and theory. It will be argued that simulations do not provide numerical *solutions*, rather they use generative mechanisms to *imitate* a dynamics. Climate science will be considered as a case both systematically and historically. Only simulation experiments allow to build models that imitate a dynamics without solving the relevant equations.

Key words: Computersimulation, Experiment, Imitation, Komplexität, Modell, Modellierung, Simulation

Complexity, computer, experiment, imitation, model, modeling, simulation

1. EINLEITUNG

Seit einigen Jahren wird behauptet, die Industriegesellschaft werde von der Wissensgesellschaft abgelöst. Wissen, so die These, wird zur wichtigsten Ressource industrieller aber auch gesellschaftlicher Innovationsprozesse. Im Verlauf dieses Prozesses werden zunehmend neue Anforderungen an die Wissenschaft gestellt. Nicht mehr die Aufklärung fundamentaler Gesetzmäßigkeiten in Natur und Gesellschaft steht im Vordergrund gesellschaftlicher Erwartungen, sondern die Lösung konkreter Aufgaben. Freilich gibt es unterschiedliche Ansichten darüber, wie weit dieser Prozess bereits fortgeschritten ist. Fest steht jedoch, dass der gesellschaftliche Druck auf die Wissenschaft zugenommen hat, für konkrete Probleme Lösungen anzubieten. Wie bewegt sich ein Satellit im Schwerkräftfeld der Erde, welches Strömungsverhalten erzeugt eine künstliche Herzklappe

oder wie entwickelt sich das globale Klima in den nächsten 50 Jahren? Das sind nur drei willkürlich herausgegriffene Beispiele aus einer beliebig langen Liste von Forschungsfragen, die nicht aus purem Erkenntnisinteresse gestellt werden, sondern hinter denen praktische Anwendungen stehen. Erreicht der Satellit die vorgesehene Umlaufbahn, wie lässt sich das Risiko einer Thrombose durch die Form und die Oberfläche von Herzklappen reduzieren oder wie stark erwärmt sich die Atmosphäre durch die Zunahme der Klimagase in der Atmosphäre?

Diese verstärkt an die Wissenschaft herangetragenen Nutzungserwartungen der Gesellschaft treiben die Forschung in immer komplexere Problemfelder. In vielen Bereichen wird Wissenschaft auf funktionierende Anwendungen ausgerichtet. Die in der Grundlagenforschung vertretbaren Idealisierungen und Vereinfachungen sind dann nicht mehr möglich, anwendungsorientierte Wissenschaft muss sich stärker als die Grundlagenforschung auf die Komplexität konkreter Problemstellungen einlassen. Im Kontext dieser Entwicklung werden zunehmend Computersimulationen eingesetzt, denn mit ihrer Hilfe lassen sich auch solche Probleme lösen, die wegen ihrer Komplexität mit den etablierten Mitteln der Wissenschaft, der theoretischen Analyse und der empirischen Datenerhebung, nicht mehr behandelt werden können. In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, inwieweit Computersimulationen als eine neue Methode der Wissensproduktion anzusehen sind, die jenseits von Theorie und Experiment Wissen über das Verhalten komplexer Systeme liefert. Im Folgenden soll versucht werden, den epistemischen Charakter von Computersimulationen näher zu bestimmen.

2. COMPUTERSIMULATIONEN – ZWISCHEN THEORIE UND EXPERIMENT?

Computersimulationen sind heute in vielen Feldern der Forschung und Entwicklung zu einem unverzichtbaren Werkzeug geworden, weil der Komplexität wachsender Anwendungsfelder anders nicht beizukommen ist. Sie ist zum hervorstechenden Merkmal von fast allen Simulationsprogrammen geworden, die Verwendung finden, wo die traditionellen mathematischen Methoden versagen. Die in komplexen Situationen erforderlichen nicht-linearen Modelle haben in der Regel keine allgemeinen analytischen Lösungen, mit Hilfe derer sich nicht-lineare Verhaltensmuster adäquat beschreiben ließen. Üblicherweise behilft man sich dann mit Linearisierungen, d.h. man versucht zumindest in Bereichen von hinreichend kleinen Variationen der Variablen, die nicht-linearen Terme gegenüber den linearen zu vernachlässigen. Das scheint zunächst unproblematisch, geht doch jeder Modellierungsansatz zu einer mehr oder weniger idealisierten und in ihrer Komplexität reduzierten Modellwelt über.

Viele Probleme sind jedoch mit dieser Methodik der Linearisierung nicht zu lösen, da sie mit der Vernachlässigung der nicht-linearen Terme auch wesentliche Merkmale ihres Verhaltens verlieren. In der Hydrodynamik sind es gerade die nicht-linearen Terme, die proportional zur Reibung sind, die für die Emergenz eines neuartigen Verhaltens entscheidend sind. Die Musterbildung in Flüssigkeitsströmung ist ein solch nicht-linearer Effekt und verschwindet mit der Linearisierung der Gleichungen. Ein anderes Beispiel unter vielen stellen die Randphänomene bei der Ausbreitung schneller Druckwellen dar, die in einem linearen Modell verschwinden, aber gerade den interessierenden Phänomenbereich darstellen. (Die Dynamik der Fronten solcher Druckwellen beschäftigte Stanislaw Ulam und John von Neumann im Rahmen des Manhattan Projekts, vgl. von Neumann und Richtmyer, 1947, sowie die Darstellung in Winsberg, 2003).

Lösungen, die sich in der wissenschaftlichen wie technischen Praxis bewähren sollen, dürfen deshalb die Komplexität der Problemstellung nicht zu stark reduzieren. Dem Umgang mit dem Komplexen sind aber auch in den Computersimulationen Grenzen gesetzt. Diese Einsicht hat, unter den Begriffen von Komplexität und Berechenbarkeit, zu einer tiefgreifenden Erforschung der prinzipiellen Möglichkeiten von Computermodellen geführt. Einerseits eröffnen numerische Methoden, hier insbesondere Simulationen, neue Zugänge, andererseits sind sie ihrerseits durch die "computational complexity" limitiert (vgl. z.B. Hoßfeld, 1999).

Computersimulationen haben auf eine vielfältige Weise Eingang in die wissenschaftliche und technische Praxis gefunden. Es gibt sogar eine VDI-Norm zur Bestimmung von Simulationen, nach VDI 3633 handelt es sich um das:

"Nachbilden eines Systems mit seinen dynamischen Prozessen in einem experimentierfähigen Modell, um zu Erkenntnissen zu gelangen, die auf die Wirklichkeit übertragbar sind."

Computersimulationen sind inzwischen selbst zum Thema der Wissenschaft geworden. Es gibt eine breite Literatur, die Simulation zum Gegenstand der Analyse hat. Freilich besteht in dieser Literatur keine Einigkeit darüber, welches die hervorstechendsten Merkmale der Computersimulationen sind. Guetzkow, um nur ein frühes Beispiel zu nennen, resümiert in "Simulation in Social Science" bereits 1962 ein "general disagreement in the literature as to how classifications should be made, . . ." (1962, 7) Insbesondere herrscht keine Einigkeit über die epistemischen Merkmale von Computersimulationen. Sind es lediglich numerische Berechnungen mathematischer Modelle oder haben sie einen eigenständigen Stellenwert innerhalb der Produktion neuen Wissens – jenseits von Theorie und Experiment?

Einige Ansätze versuchen über die spezifische Leistung der Modelle zu brauchbaren Definitionen zu kommen. So leitet Humphreys aus dem Umstand, dass traditionelle mathematische Methoden versagen, eine Definition von Simulationen ab:

“The point here is that even with radical idealizations, the problem of intractability is often inescapable, i.e. in order to arrive at an analytically treatable model of the system, the idealizations required would often destroy the structural features that make the model a model of that system type. (. . .)

Working Definition. A computer simulation is any computer-implemented method for exploring the properties of mathematical models where analytic methods are unavailable.” (Humphreys, 1990, 500f.)

Andere Untersuchungen konzentrieren sich auf weitere Eigenschaften von Simulationsmodellen. Besonders ihre Nähe zu dynamischen Modellen wird hervorgehoben.

“Simulations are closely related to dynamic models. More concretely, a simulation results when the equations of the underlying dynamic model are solved. This model is designed to imitate the time-evolution of a real system. To put it another way, *a simulation imitates one process by another process.*” (Hartmann, 1996, 83)

Ganz ähnlich beurteilt das auch Brennan in seiner *Definition by edict*: “Simulation is the development and use of models to aid in the evaluation of ideas and the study of dynamic systems or situations.” (Brennan in McLeod, 1968, 6)

Allerdings gilt eine solche Bestimmung nur mit Einschränkungen und trifft auf bestimmte Simulationsmodelle überhaupt nicht zu. So stellen Monte-Carlo Methoden zwar eine Dynamisierung dar, insofern sie auf der häufigen Wiederholung eines Prozesses beruhen. Aber das bedeutet in der Regel nicht, dass auch das imitierte System dynamisch sein muss. Denn mit dieser Methode lässt sich auch eine Zahl – z. B. Pi – durch den Mittelwert über einen Zufallsprozess darstellen.

Ein anderer Aspekt von Computersimulationen betrifft die Visualisierung der Ergebnisse. Klassische Verfahren der numerischen Mathematik werden als Computerprogramme in den Rechner implementiert. Durch den Einsatz einer zusätzlichen Visualisierungssoftware können dann die numerischen Lösungen in ihrer Raum-Zeit-Struktur sichtbar gemacht werden. Computersimulationen tragen auf diese Weise zum besseren Verständnis komplexer Phänomene bei.

“Simulations thus permit *theoretical model experiments*. These can be expressed by graphics that are *dynamically* ‘anschaulich’ . . .” (Rohrlich, 1991, 515) Vergleiche auch Hughes (1999), der die Visualisierung als wesentlichen Teil von Simulationen ansieht. Als ein weiteres Merkmal wird der Bezug auf Anwendungen genannt, die mit pragmatischen Ansätzen ermöglicht werden sollen:

“The mathematical/logical models which are not easily amenable to conventional analytic or numeric solutions form a subset of models generally known as *simulation models*. . . . Computer modelling and simulation studies are primarily directed towards finding *satisfactory solutions* to practical problems.”(Neelamkavil, 1987, 1)

Solche Argumente stützen in der Regel nur die Einschätzung, Computersimulationen eröffneten lediglich neue Möglichkeiten der Berechnung in komplexen Problemlagen, deren schöne Bilder Verständnis suggerieren, wo vieles unklar ist. Die methodologische Relevanz von Simulationen wird freilich kontrovers diskutiert. Ein Standpunkt, Winsberg (2003) bezeichnet ihn als den *common view*, hält Simulationen in philosophischer Hinsicht für unergiebig. Denn bei allen praktischen Erfolgen gehe es im Grunde nur um die Lösung von Gleichungen mittels der *brute force* des Computers. Eine solche Position wird zum Beispiel von Stöckler eingenommen, der schreibt:

“Computer simulations enable tremendous progress on a pragmatic level, as a matter of degree in terms of speed and quantity, but not a revolution in the principles of methodology.” (Stöckler, 2000, 356)

Die Gegenposition hierzu erkennt Simulationen eine grundlegende philosophische Bedeutsamkeit zu und sieht in ihnen einen *third mode of science*. Diese Meinung wird z.B. von Rohrlich vertreten:

“The central claim of this paper is that computer simulation provides (though not exclusively) a qualitatively new and different methodology for the physical sciences, and that this methodology lies somewhere intermediate between traditional theoretical physical science and its empirical methods of experimentation and observation.” (Rohrlich, 1990, 507)

Für Galison bedeuten Simulationen ein “*Tertium Quid*” zu Theorie und Experiment (Galison, 1996) und auch Humphreys kommt zu einem ganz ähnlichen Schluss:

“I argue here that the computational methods of numerical experimentation constitute a distinctively new kind of scientific method, intermediate in kind between empirical experimentation and analytic theory.” (Humphreys, 1994, 103)

Wir wollen im Folgenden zeigen, dass Computersimulationen einen neuen methodischen Ansatz bei der Produktion von Wissens darstellen, der gleichbedeutend ist mit den klassischen Methoden von Theorie und Experiment. Dazu wollen wir weitere Argumente sammeln. Im nächsten Kapitel werden wir zeigen, dass die in der Simulationstechnik eingesetzten Verfahren zur numerischen Integration von Differentialgleichungen sich wesentlich von dem unterscheiden, was man im strengen Sinne unter numerischem Rechnen versteht – das Einsetzen von Zahlenwerten für Variablen und Parameter in analytisch gegebenen Formeln. Das numerische Integrieren von Differentialgleichungen dagegen ist die numerische *Imitation* einer Lösung der gesuchten Differentialgleichung.

Daraufhin werden wir dann am Beispiel der Computersimulationen in der Klimatologie zeigen, wie sehr man bei der Entwicklung der entsprechenden Modelle von dem Paradigma des Berechnens abweicht und die Imitation der physikalischen Prozesse im Vordergrund steht, die an der Dynamik des Klimas beteiligt sind. Die **Performanz des Modells auf dem Computer, so werden wir argumentieren, ist wichtiger als dessen Genauigkeit bei der Berechnung.** In der Literatur ist von einem neuartigen Typus von Experiment die Rede, der eine entscheidende Rolle bei der Imitation komplexer Prozesse spielt. Dass es sich hier um eine Verschiebung des klassischen Experimentbegriffs handelt, ist von Anfang an klar gewesen. Schon Ulam und von Neumann (von Neumann und Richtmyer, 1947) sprachen davon, mit dem Computer “Experimente” in der Mathematik durchzuführen. Die Bedeutsamkeit des experimentellen Zugangs für die Einschätzung der Simulationen ist neuerdings, ganz zu Recht, ins Zentrum der Aufmerksamkeit gerückt (Rohrlich, 1991; Humphreys, 1994; Dowling, 1999; Fox Keller, 2003; sowie Winsberg, 2003). Wir werden die im zweiten Kapitel eingeführte These von der Imitation anhand des Fallbeispiels der Klimaforschung vertiefen und insbesondere nachvollziehen, wie es erst “Simulationsexperimente” gestatten, eine Dynamik (die globale Zirkulation der Atmosphäre) zu imitieren, ohne deren Grundgleichungen zu “lösen”.

3. NUMERISCHE INTEGRATIONSVERFAHREN – DIE IMITATION EINER LÖSUNG

Seit ihrer Entstehung um 1700 haben sich Differentialgleichungen (DGL) als ein wichtiges Werkzeug erwiesen, dynamische Prozesse in Natur und Gesellschaft zu modellieren. In der Regel bildet eine DGL eine allgemeine Gesetzmäßigkeit auf einen konkreten Fall ab. Die mechanische ‘Bewegungsgleichung’, die die Bewegung eines Körpers der Masse m im Scherkräftfeld der Erde beschreibt, ist z. B. eine Konkretisierung der allgemeinen Newtonschen Gesetze für diesen Spezialfall.¹ Bei Vernachlässigung der Luftreibung erhält man die Formeln für den freien Fall.

Newtons berühmtes Gesetz besagt, dass die Kraft K gleich ist zum Produkt aus Masse m und der Beschleunigung b , die diese Masse erfährt. Dieses Gesetz wurde zum Paradigma der Mechanik und hat über viele Jahrhunderte unser Weltbild (Mechanismus) geprägt. In mathematischer Form liest sich diese Beziehung:

$$K = m \cdot b.$$

Aus dieser Beziehung folgt

$$b = K/m.$$

Setzt man für b das Differential der Geschwindigkeit nach der Zeit ein und setzt für die Kraft K die Erdanziehung, Masse mal Erdbeschleunigung g ein, so erhält man

$$dv/dt = g.$$

Integriert man die Gleichung, erhält man

$$v = \int g dt.$$

Da in diesem einfachen Fall die Abhängigkeit der Dynamik von den relevanten Variablen v , s und t linear ist, lässt sich die entsprechende Differentialgleichung (DGL) analytisch lösen. Das heißt, es lässt sich eine allgemeine Funktionen v und s bestimmen, deren Ableitung der DGL genügt:

$$v = gt + v_0,$$

und wegen $v = ds/dt$ bei nochmaliger Integration:

$$s = \int v dt = \int (gt + v_0) dt$$

$$s = 1/2 gt^2 + v_0 t + s_0,$$

wobei v die Geschwindigkeit, v_0 die frei verfügbare Anfangsgeschwindigkeit, s der zurückgelegte Weg, und s_0 einen frei wählbaren Anfangsort markieren.

Diese Lösungen für v und s enthalten freie Konstanten v_0 und s_0 , mit deren Festlegung alle konkreten Randbedingungen dieses Problems – Anfangsgeschwindigkeit und Anfangsort – befriedigt werden können. Die Lösung ist hier nicht numerisch, d.h. als Wertetafel für verschiedenen Zeitpunkte gegeben, sondern als analytische Funktion ihrer Variablen. Die Form der Dynamik lässt sich als funktionaler Zusammenhang zwischen den Variablen darstellen. Man kann an der Lösung “ablesen”, dass kleine Veränderungen in den Randbedingungen auch nur kleine Veränderungen in der Lösung zur Folge haben. Insbesondere lässt sich der ‘Fehler’, der durch die Vernachlässigung der Luftreibung gemacht wird, quantitativ abschätzen. Gerade dies ist eine wichtige lineare Abhängigkeit.

Im Falle komplexer Problemstellungen wie z.B. der Bewegung von drei Körpern verschiedener Masse in ihrem gegenseitigen Gravitationsfeld (Drei-Körper-Problem) verändert sich dieser Sachverhalt grundlegend. Die DGLen werden komplex, d.h. sie enthalten nicht-lineare Verknüpfungen ihrer Variablen. Jetzt gibt es in der Regel keine allgemeinen Lösungen mehr. Der Kontext einer konkreten Fragestellung, d.h. der Einfluss der Randbedingungen, kann daher nicht mehr als eine Spezifikation einer allgemeinen Lösung bestimmt werden. Jede konkrete Randbedingung führt zu

einer eigenen Lösung. Obwohl alle Lösungen derselben Gesetzmäßigkeit genügen, können sie sich jetzt grundsätzlich voneinander unterscheiden. Kleine Veränderungen in den Randbedingungen können zu großen Unterschieden im Verhalten der Lösung führen. Umgekehrt können unter Umständen auch deutliche Veränderungen in den Randbedingungen nur einen marginalen Einfluss auf das Verhalten der Lösung haben. Statt der linearen Kausalität – ähnliche Ursachen haben auch ähnliche Wirkungen – gilt jetzt: Ähnliche Ursachen können grundverschiedene Wirkungen haben. Mehr noch: Eine komplexe Dynamik kann in einer sich verändernden Umwelt unverändert bleiben oder sich dramatisch verändern. Unverändert bleibt sie dann, wenn die Dynamik einen so genannten Attraktor (stationäre Lösung) erreicht hat. Insofern kann Komplexität sowohl eine Reduktion der Möglichkeiten im dynamischen Verhalten, als auch eine Unvorhersehbarkeit ihrer Entwicklung bedeuten.

Die Lösung komplexer und in der Regel partieller Differentialgleichungen (PDG) ist im allgemeinen nur in Sonderfällen möglich oder erforderte Vereinfachungen (Linearisierungen), die dann oft genau die Phänomene nicht zeigen, an deren Analyse man besonders interessiert ist. Schon früh wurden Verfahren entwickelt, solche Gleichungen ‘numerisch’ zu behandeln. Im Einzelfall war dies mit einem erheblichen Aufwand verbunden. Im Falle des Drei-Körper-Problems brauchte man mehrere hundert Mannjahre, um eine Lösung auf diese Art zu bestimmen. Erst mit der Entwicklung des Computers ließen sich diese Verfahren in Rechenprogramme (Algorithmen) umwandeln, die die ‘Lösung’ partieller nicht-linearer Differentialgleichungen in wenigen Sekunden liefern konnten.

Der Begriff ‘Lösung’ sollte hier tatsächlich in Anführungszeichen gebraucht werden. Denn was auf den ersten Blick wie die Berechnung einer numerischen Lösung (technisch: Integration) einer solchen nichtlinearen DGL aussieht, erweist sich beim genaueren Hinsehen als ein geschickt gewähltes Verfahren, eine als DGL (oder als ein System von DGLen) modellierte Dynamik zu *imitieren*. An einem Beispiel wollen wir dieses Verfahren genauer beschreiben. Der Einfachheit halber betrachten wir eine DGL, die die Entwicklung einer Funktion $F(X)$ in der Zeit beschreibt.² Ausgangspunkt aller numerischer Verfahren zur Bestimmung des Verhaltens einer DGL ist deren Diskretisierung. Die DGL wird durch eine Differenzgleichung ersetzt. Statt die DGL

$$dX/dt = F(X(t))$$

analytisch zu integrieren, d.h. eine Funktion $X(t)$ zu suchen, die der DGL genügt, benutzt man die Differenzgleichung

$$X(t + \Delta t) = X(t) + \Delta t F(X(t)).$$

um den Wert X zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ aus seinem Wert zum Zeitpunkt t zu berechnen. Während die DGL über einen globalen funktionalen Zusammenhang eine analytische Funktion definiert, die die Dynamik exakt beschreibt, ist die Differenzgleichung eine lokale Vorschrift, aus einem gegebenen Zustand der Dynamik – z.B. dem Anfangswert – den Zustand zu einem Zeitschritt Δt zu berechnen. Insofern ist die Differenzgleichung ein generativer Mechanismus, die der DGL zu Grunde liegende Dynamik Schritt für Schritt zu imitieren.

Im Einzelnen: Ausgehend von einem festgelegten Anfangswert X_0 zum Zeitpunkt t_0 konstruiert man einen ersten Wert X_1 zum Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$, indem man am Punkt X_0 den unbekanntes Graphen der Lösung $X(t)$ durch seine Tangente ersetzt.³ Man ersetzt also die unbekannte Funktion lokal – an der Stelle X_0 – durch eine Gerade. Auf dieser Geraden kann man dann zum Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$ den Wert P_1 als eine erste Annäherung an den gesuchten Wert X_1 bestimmen. Nun könnte man P_1 als neuen Startpunkt nehmen und dort wieder den Graphen $X(t)$ durch seine Tangente ersetzen. Man ersetzt den unbekanntes Graphen durch eine Art Sägezahnfunktion. Auch ohne den genauen Verlauf des gesuchten Graphen zu kennen ist einsichtig, dass diese Sägezahnkurve nur bei entsprechend glattem Verlauf der Dynamik eine gute Imitation ist.

Um die Konstruktion zu verbessern, schlagen die gängigen Verfahren vor, nicht die Tangente am Anfang des Intervalls für die Berechnung des Funktionswertes am Ende zu benutzen, sondern statt dessen mehrere Hilfswerte zu berechnen, an denen jeweils die Steigung der Tangente in der Mitte des Intervalls berechnet wird. Über diese Hilfssteigungen wird zuletzt das gewichtete arithmetische Mittel gebildet. Dadurch erhält man eine lineare Approximation der Steigung des gesuchten Graphen, der die Krümmung des Graphen im Intervall besser berücksichtigt und der deshalb geeigneter ist, als Anfangswert einer jeden Iteration zu dienen.

Die in der Praxis am häufigsten benutzten Verfahren unterscheiden sich im Prinzip nur durch die Anzahl der Interpolationen bei der Berechnung der linearen Fortschreibung. Beim Euler-Cauchy-Verfahren sind es zwei Zwischenschritte, beim Runge-Kutta-Verfahren dagegen vier, über die dann arithmetisch gemittelt wird, um einen verbesserten Startwert für die nächste Iteration zu bekommen. Die gesuchte Stammfunktion bleibt während des gesamten Rechenvorgangs letztlich unbekannt. Lediglich ihre jeweilige Steigung wird am Anfang und in der Mitte des Iterationsintervalls berechnet. Statt der in der Zeit kontinuierlichen Differentialgleichungen betrachtet man diskrete sogenannte “finite Differenzgleichungen”. Aus einem durch die DGL definierten kontinuierlichen Prozess wird eine diskrete Folge von Zuständen. Aus einer globalen Gesetzmäßigkeit für die Veränderung von Variablen wird eine Rechenvorschrift für deren lokale Bestimmung. Das numerische Verfahren ist so gesehen keine Berechnung

der gesuchten Funktion $X(t)$, sondern ein über den generativen Mechanismus der Differenzgleichung erzeugtes Äquivalent. Die entscheidende Frage lautet dann natürlich, wie ‘gut’ das Äquivalent ist, d.h. wie gut die gesuchte Funktion approximiert wird.

Die mathematische Rechtfertigung für diesen Übergang von der mathematischen Modellierung einer Dynamik als Differentialgleichung – die Gesetzmäßigkeit der Dynamik ist beschrieben, aber nicht explizit gegeben – zu der Imitation der Dynamik durch den generativen Mechanismus der entsprechenden Differenzgleichung liegt darin, dass mit immer kleiner werdender Schrittweite, d.h. immer feiner werdendem Gitter, die Differenzgleichung schließlich in die Differentialgleichung übergeht. Im Limes ist die durch das numerische Verfahren erzeugte Kurve identisch mit der analytisch definierten Kurve als Lösung der DGL. In der Praxis arbeitet man jedoch nicht im Limes unendlich kleiner Schrittweiten, sondern, aus pragmatischen Gründen, mit zum Teil sogar recht großen Intervallen. Dass die Eigenschaften der von der Differenzgleichung erzeugten Dynamik mit der durch die DGL definierten Dynamik übereinstimmen, dafür gibt es keinerlei mathematische Garantie.

Während die analytische Lösung innerhalb der Näherungen des mathematischen Modells eine *exakte* Lösung ist, ist die über das numerische Verfahren gewonnene Lösung nur unter bestimmten Voraussetzungen eine Näherung. In der Regel lässt sich die Qualität der Näherung nur dann bestimmen, wenn die numerisch konstruierte Lösung mit der analytischen Lösung verglichen werden kann. Da eine analytische Lösung aber nur in den seltensten Fällen existiert oder gar zugänglich ist, lässt sich im allgemeinen die Güte des Verfahrens nicht bestimmen. Genau genommen kann die numerisch berechnete Lösung beliebig von der gesuchten analytischen abweichen, ohne dass man es am Verfahren merkt. Mit anderen Worten: **Nur in den einfachsten Fällen ist die Güte der durch ein numerisches Verfahren produzierten Näherung bekannt.** In allen anderen Fällen muss über die Güte der Approximation aufgrund anderer Kriterien entschieden werden.

Den Unterschied von numerischer Konstruktion zum numerischen Berechnen einer Lösung soll folgendes Beispiel illustrieren. In vielen Fällen ist es notwendig, die Nullstelle einer Funktion $F(X)$ zu berechnen, d.h. den Wert X_0 zu bestimmen, für den $F(X_0) = 0$ ist. Auch hier wählt man eine Schrittweite Δx und berechnet von einem Anfangswert X_a aus den Wert $F(X_a + n\Delta x)$, und zwar so lange, bis der berechnete Wert sein Vorzeichen ändert. Dann halbiert man die Schrittweite und rechnet rückwärts. Das macht man so lange, bis man den Vorzeichenwechsel des Funktionswertes in einem Intervall eingegrenzt hat, das klein genug ist, um die Anforderungen an die Genauigkeit der Lösung zu erfüllen. Das numerische Rechenverfahren selbst gibt Auskunft über die Genauigkeit der Approximation.

Die Güte der numerischen Imitation einer Dynamik wird im wesentlichen durch zwei Fehlerquellen bestimmt, die umgekehrt proportional zueinander sind: Einem *Verfahrensfehler*, der durch die Art der Diskretisierung entsteht und einem *Näherungsfehler*, der durch die Begrenzung der Stellen entsteht, mit der Zahlen im Computer dargestellt werden können. Im Folgenden wollen wir diese Fehlerquellen etwas ausführlicher diskutieren. Der Verfahrensfehler ist der Fehler, der durch das bei der Berechnung benutzte Diskretisierungsverfahren entsteht. In einfachen Fällen lässt sich dieser Fehler exakt angeben. Im Fall des exponentiellen Wachstums kann man analytisch zeigen, dass durch die Diskretisierung des Euler-Cauchy-Verfahrens eine Potenzreihe entsteht, die gegen die Exponentialfunktion konvergiert. Beim Runge-Kutta-Verfahren erhält man eine Taylorreihe, die ebenfalls gegen die Exponentialfunktion konvergiert. Durch entsprechend kleine Schrittweiten kann hier der Verfahrensfehler im Prinzip beliebig klein gemacht werden.

Aber je kleiner die Schrittweite wird, desto mehr Rechenschritte sind notwendig und desto größer wird der Rechenaufwand. Bei einer DGL macht das vielleicht wenig aus, aber bei komplexen Gleichungssystemen, wie sie in der Klimaforschung Verwendung finden, ist das eine erhebliche Begrenzung. Wie bekannt ist, vervierfacht sich der Rechenaufwand bei einer Halbierung der Maschenweite eines zweidimensionalen Gitters. Aber das ist nicht das einzige Problem: Da es sich bei den numerischen Verfahren um rekursive Rechenoperationen handelt, bei denen der neue Wert aus dem jeweils vorangegangenen Wert berechnet wird, können sich andere Fehler wie z.B. Näherungsfehler bei der Berechnung aufschaukeln. Näherungsfehler entstehen dadurch, dass die Zahlen im Computer nur auf eine bestimmte Anzahl von Stellen hinter dem Komma genau sind. Wegen der Rekursivität können die Rundungsfehler mit jeder neuen Iteration anwachsen. Hinzu kommt, dass ab einer gewissen Grenze eine weitere Verkleinerung der Schrittweite keine nennenswerten Gewinne mehr bei der Reduktion der Verfahrensfehler bringt, der Rundungsfehler aber mit der Zunahme der Iterationsschritte überproportional steigt.

Für die Genauigkeit eines numerischen Verfahrens ist immer der Gesamtfehler, d.h. die Summe aus Verfahrens- und Rundungsfehler interessant. Zumindest theoretisch gibt es für eine bestimmte DGL zusammen mit einem bestimmten Diskretisierungsverfahren eine optimale Schrittweite. Allerdings gelingt es in der Praxis nur selten, diese auch anzugeben. Bei 'gutartigen' Funktionen – z.B. keine Schwingungen – bleibt der Gesamtfehler in vertretbaren Grenzen. Bei 'böartigen', hoch nichtlinearen, Funktionen und gewissen Schrittweiten kann es leicht zu chaotischen Verläufen kommen. D.h. der berechnete Prozess erscheint vollkommen unregelmäßig. Ein Beispiel, an dem man das demonstrieren kann, ist das 'Drei-Körper-Problem'. Hier hat schon Poincaré gestöhnt und festgesellt,

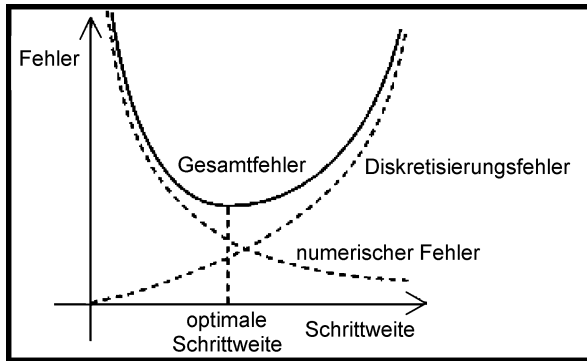


Abb. 1. Schematische Darstellung der Abhängigkeit von Diskretisierungsfehler und numerischem Fehler in Abhängigkeit von der Schrittweite.

dass die Fehler aus dem Ruder laufen können. Gleichzeitig markiert Poincarés Analyse den Beginn der Erforschung komplexer Systeme.

Heute markieren Computersimulationen bei der Analyse komplexer Systeme den Stand der Technik.⁴ In starkem Kontrast zu Poincarés Vorbehalten und im Gegensatz zu den hier vorgebrachten Argumenten überwiegt in der Literatur die Vorstellung, dass die dabei benutzten Verfahren die zu untersuchende Dynamik hinreichend gut approximieren. Eric Winsberg schreibt:

“Of course the transformation of the differential equations into difference equations constitutes an approximation. But by choosing an appropriately “fine grid”, that is by using discrete intervals of space and time that are sufficiently small, the simulationist can reduce the damage done by the approximation as much as he or she wants.” (1999, 278)

Andere sehen in den Simulationen durchaus den Effekt der Imitation, halten aber an der Vorstellung, die entsprechenden Gleichungen würden gelöst, fest. Stephan Hartmann kann hier stellvertretend zitiert werden, dass “a simulation results when the equations of the underlying dynamic model are solved.” (1996, 83)

Im Folgenden wollen wir zeigen, dass Computersimulationen keine numerischen Lösungen einer komplexen Modelldynamik sind, sondern der Versuch, eine Dynamik zu imitieren, um ihre charakteristischen Eigenschaften untersuchen zu können. Am Beispiel der Entwicklung von Simulationsmodellen in der Klimaforschung wollen wir diesen Standpunkt weiter ausführen.

4. PHILLIPS' EXPERIMENT⁵

Die Entwicklung von elektronischen Rechenmaschinen hatte im Kontext des Manhattan-Projektes zur Entwicklung der Atombombe begonnen.

Probleme wie die Diffusion der Neutronen oder die Ausbreitung von Schockwellen waren analytisch nicht zu behandeln und führten zur Entwicklung von Simulationsmethoden. Nach dem 2. Weltkrieg erwies sich vor allem die Meteorologie als ein zukünftiges und aussichtsreiches Einsatzgebiet dieser neuen Methode. John von Neumann, der zusammen mit dem Mathematiker Stanislaw Ulam in Los Alamos grundlegende Ideen zur Computersimulation entwickelt und auf der Basis hydrodynamischer Codes angewandt hatte⁶, war auch in der Nachkriegsphase die treibende Kraft. Bereits 1946 initiierte er eine Konferenz von Meteorologen “to tell them about the general-purpose electronic computer he was building and to seek their advice and assistance in designing meteorological problems for its use.” (Arakawa, 2000, 5)

Mit von Neumann als Mentor wurde am Institute for Advanced Studies (IAS) in Princeton eine meteorologische Arbeitsgruppe aufgebaut, die von Jule Charney geleitet wurde. Ihr Ziel war es, die Strömungsprozesse in der Atmosphäre mit Hilfe der Hydrodynamik zu modellieren und die entsprechenden Differentialgleichungen auf dem Computer zu ‘lösen’. “To von Neumann, meteorology was par excellence the applied branch of mathematics and physics that stood the most to gain from high-speed computation.” (Zitiert nach Arakawa, 2000, 5)

Norman Phillips, der am IAS arbeitete, gelang es 1955 im so genannten *first experiment*, die Dynamik der Atmosphäre zu simulieren, d.h. die Wind- und Druckverhältnisse der gesamten Atmosphäre mittels eines Computermodells nachzubilden.⁷ Die Entwicklung eines Simulationsmodells der allgemeinen Zirkulation der Atmosphäre wurde als ein bahnbrechender Erfolg gefeiert. Dieser Durchbruch kam für die Fachwelt überraschend, da die Komplexität der Prozesse, die die Dynamik in der Atmosphäre bestimmen, als ein unüberwindliches Hindernis für eine erfolgreiche theoretische Modellierung angesehen wurde. Zwar waren schon früher gewisse Fortschritte in der Theorie der allgemeinen Zirkulation der Atmosphäre zu verzeichnen. Sie betrafen aber nur sehr beschränkte Teilaspekte, z.B. die *lateral diffusion* (Rossby in den 30ern), oder den *jet stream* (Palmèn und Riehl in den 40ern). Die vorherrschende Ansicht war jedoch “that a consistent theory of the general circulation is out of reach.” (Lewis, 1998, 42; gestützt auf Brunt, 1944)

Die Ergebnisse von Phillips waren sensationell. Aus der langen Geschichte der Wetterbeobachtung vor allem in der Seefahrt waren bestimmte Strömungsverhältnisse in der Atmosphäre wohlbekannt. Und eben diese Muster ließen sich in Phillips’ Computerexperiment in verblüffender Weise reproduzieren. Binnen kurzer Zeit wurde der simulationsbasierte Zugang solcher “allgemeinen Zirkulationsmodelle” (*general circulation models*, kurz: GCMs) zum Königsweg in der Klimaforschung. In Princeton wurde bereits 1960 das *Geophysical Fluid Dynamics Laboratory* (GFDL) gegründet, das genau diesen Ansatz weiterverfolgte und damit zu einer

ersten institutionellen Verankerung der Simulationsmethode in der Klimaforschung führte⁸. Heute dominieren die GCMs die Klimaforschung und werden weltweit an nur wenigen Forschungseinrichtungen, (wie z.B: dem MPI für Meteorologie in Hamburg) weiterentwickelt. Sie gehören zum umfangreichsten und komplexesten, was die Klimaforschung und auch die Simulationsmodellierung überhaupt zu bieten haben.

Dass der erste Versuch, ein Simulationsmodell für die Dynamik der Atmosphäre zu entwickeln, als ein Experiment betrachtet wurde, unterstreicht die Unsicherheit, die zu Beginn der Klimasimulation das Denken beherrschte. Gleichzeitig bringt der Begriff aber auch etwas methodisch höchst Bedeutsames zum Ausdruck, dass nämlich Wissenschaftler im Rahmen von Simulationen ihre Modelle wie einen experimentellen Aufbau gebrauchen. Die Resultate der Simulationen erhalten vor diesem Hintergrund einen quasi-empirischen Charakter.

Das im "ersten Experiment" verwendete Simulationsmodell arbeitete mit einer sehr groben räumlichen Diskretisierung der Atmosphäre. In vertikaler Richtung war sie in lediglich zwei Schichten unterteilt, und horizontal durch ein Gitternetz von Zellen mit mehr als 200 000 km² Fläche. Als Anfangszustand der Simulation wurde eine ruhende Atmosphäre angenommen, in der es keine Temperaturunterschiede und keine Strömung geben sollte. Die Druckverteilung entsprach einer statischen Atmosphäre mit einem umgekehrt zur Schwerkraft abnehmenden Druck. Die physikalischen Gesetzmäßigkeiten der Atmosphärendynamik wurden nun an das diskrete Gitter angepasst. Das heißt, dass die globalen, in Raum und Zeit kontinuierlichen Gleichungen der Hydrodynamik so umformuliert werden mussten, dass die zeitliche Veränderung der relevanten Variablen – Druck, Temperatur und Windgeschwindigkeit – an den Gitterpunkten berechnet werden konnten. Ein diskretes System, oder besser: Modell, zu konstruieren, ist eine typische Aufgabe im Zuge numerischer Integrationsverfahren.⁹ Dieser Modellierungsschritt stellt eine wesentliche und schwierige, ja konzeptionell neuartige Aufgabe dar. Im zweiten Schritt des Simulationsexperiments¹⁰ wurde dann die Dynamik angestoßen, d.h. die Strahlung der Sonne und die Rotation der Erde kamen hinzu. Die Atmosphäre verließ den Ruhezustand und pendelte sich in einen so genannten *steady state* ein, der einem stabilen Strömungsmuster entspricht. Bereits die Frage, wann man von einem solchen stationären Zustand sprechen kann, der nicht nur als Durchgangsstadium des Simulationsmodells zu betrachten ist, ist eine Frage, die man durch die Analyse der erzeugten (simulierten) Daten beantworten muss. Tatsächlich verschätzte sich Phillips gewaltig; wie eine nachträgliche Untersuchung ergab, hätte das Einpendeln seines Modells wesentlich mehr Zeit beansprucht, als Phillips angenommen hatte (Wiin-Nielsen, 1997). Obwohl Phillips' *basic state* nicht der korrekte *steady state* war, waren seine Ergebnisse dennoch überzeugend.

Die spannende Frage lautete, ob die in der realen Atmosphäre beobachteten globalen Muster der Windströmungen vom Modell adäquat wiedergegeben wurden. Als Vergleich dienten unter anderem die stabilen und doch komplexen Muster der Westwinde nördlich des Äquators (“surface westerlies”, zu genaueren Details über das Experiment, vgl. Lewis, 1998). Das Ergebnis war positiv, eine Übereinstimmung mit der Erfahrung war nach einhelliger Meinung gegeben:

“... the zonally averaged meridional circulation in the middle latitudes changed from the Hadley type to the Ferrel type, producing the midlatitude surface westerlies. In this way, the experiment simulated the very basic features of the observed general circulation of the atmosphere, whose causes had been more or less a matter of speculation.” (Arakawa, 2000, 8)

Der Erfolg dieses Simulationsexperiments lag darin begründet, dass eine “realistische” Atmosphärendynamik durch ein überschaubares System von nur sechs partiellen Differentialgleichungen beschrieben werden konnte.

$$\frac{D\vec{v}_H}{Dt} + f\vec{k} \times \vec{v}_H + \nabla_p \Phi = \vec{F}_H \quad (\text{horizontal equation of motion}) \quad (1)$$

$$\frac{Dc_p T}{Dt} - \omega\alpha = Q \quad (\text{thermodynamic energy equation}) \quad (2)$$

$$\frac{Dq}{Dt} = S \quad (\text{water vapor continuity equation}) \quad (3)$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial p} + \nabla_p \cdot \vec{v}_H = 0 \quad (\text{mass continuity}) \quad (4)$$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial p} + \alpha = 0 \quad (\text{hydrostatic equation}) \quad (5)$$

$$p\alpha - RT = 0 \quad (\text{equation of state}) \quad (6)$$

Diese Gleichungen gelten seit ihrem quasi-empirischen Erfolg als “primitive equations” der Atmosphäre.¹¹ Diese Gleichungen waren “einfacher”, als es von den Meteorologen erwartet worden war, die ein viel komplexeres System von Gleichungen erwartet hatten. Die vorherrschende Skepsis, durch einfache Gleichungen ließe sich keine komplexe Dynamik erzeugen, schien widerlegt. Das “Experiment”, der quasi-empirische Nachweis, dass diese sechs Gleichungen ausreichten, verschaffte ihnen auf einen Schlag die Anerkennung als Grundgleichungen, die sie auch heute noch besitzen und erhob sie von einer spekulativen Modellannahme in den Rang einer kausalen Beschreibung der “basic features” der Atmosphärendynamik.

Phillips’ Experiment brachte also im Grunde genommen einen zweifachen Erfolg: Die gelungene Auswahl von Grundgleichungen und deren erfolgreiche numerische Behandlung. Das entscheidende Kriterium für die Bewertung des Erfolgs war eindeutig die gelungene Imitation der Phänomene, d.h. der Strömungsmuster in der Atmosphäre. In Phillips’

Experiment wurden nicht die Grundgleichungen der Atmosphäre numerisch gelöst, wohl aber wurden die Phänomene der Atmosphäre durch den generativen Mechanismus der Differenzgleichungen imitiert. Das Ergebnis wurde deshalb auch nicht theoretisch gerechtfertigt, sondern allein über die Übereinstimmung mit der Wirklichkeit. Insofern handelt es sich bei der Rechtfertigung von Simulationsergebnissen um eine quasiempirische Strategie.

Man könnte nun einwenden, dass dieser Unterschied nicht so sehr ins Gewicht fällt. Das ist aber in mehrfacher Hinsicht nicht richtig. Erstens setzen Simulationsmodelle nicht lediglich die *brute force* des Computers ein, um zu Ergebnissen zu gelangen, wo sich Menschen mit Taschenrechnern auf aussichtslosem Posten befänden. Simulationsmodelle erfordern einen eigenen und neuartigen Modellierungsschritt. Neuartig ist dieser Schritt nicht deshalb, weil er auf ein diskretes Modell abzielt, sondern weil die Variationsbreite der geeigneten Modelle durch die spezifischen Anforderungen des Computers bestimmt wird. Denn der ausgewählte generative Mechanismus, mit dem eine bestimmte Dynamik imitiert werden soll, muss auf dem Rechner ‘laufen’, d.h. er darf nicht instabil werden, weil sich z.B. die Diskretisierungsfehler oder die numerischen Fehler, von denen im vorigen Kapitel die Rede war, aufschaukeln. Dies gilt im Prinzip für alle Typen von generativen Mechanismen wie z.B. Systeme von finiten Differenzgleichungen, zelluläre Automaten, oder neuronale Netze. Paul Humphreys (1991) hat zu Recht betont, dass es ein essentielles Kennzeichen von Simulationen darstellt, den Bereich der “tractable mathematics” neu zu definieren.

Im Folgenden soll das Problem der Instabilitäten am Beispiel der Klimasimulationen näher erläutert werden. Dort werden wir auf einen bemerkenswerten Umstand stoßen: Die Orientierung an der numerischen Berechnung einer Lösung führte die Klimaforschung eine Zeit lang in eine Sackgasse, bis sich die Einsicht durchsetzte, dass in der Simulationsmodellierung mehr gefordert und mehr erlaubt war, als nur eine “sklavische” Abhängigkeit vom vorgegebenen zu lösenden Gleichungssystem der *primitive equations*. Das macht unser Argument von der Simulation als eine Modellierung 2. Ordnung besonders deutlich.

5. ARAKAWAS TRICK

So durchschlagend der Erfolg von Phillips’ Simulationsexperiment war, so schwer wog eine Besonderheit seines Modells: die Dynamik der Atmosphäre blieb nur wenige Wochen stabil. Nach circa vier Wochen schaukelte sich die innere Energie auf und das System “explodierte”, d.h. die stabilen Strömungsmuster lösten sich im Chaos auf. “After 26 days, the field ...

became very irregular owing to large truncation errors, and is therefore not shown.” (Phillips, 1956, 145)

Dennoch sah man in dem Experiment einen generellen Erfolg. Die Möglichkeit, die Atmosphärendynamik zu simulieren, wurde nicht in Zweifel gezogen. Die Stabilität des Simulationsmodells zu erreichen, wurde nun als eine zusätzliche Herausforderung für die weitere Arbeit angesehen. Sie war gleichermaßen wichtig für die Klimaforschung, die an der Vorhersage langfristiger Phänomene interessiert war, wie für die Simulationsmethode allgemein. Denn das Problem der erfolgreichen und insbesondere stabilen Ersetzung der ‘natürlichen’ Dynamik eines DGL-Systems durch die künstliche Dynamik eines Differenzgleichungssystems gehören zur Kernaufgabe der Simulationsmethode. Phillips war sich der überragenden Bedeutung der Stabilitätsfrage bewusst und er nennt den Grund für die Instabilität des Verfahrens: die **Rundungsfehler, truncation errors**. Der Umgang mit den Rundungsfehlern wurde zum wichtigen Gebiet, das es zu erforschen galt, um stabile Simulationsergebnisse zu bekommen. Durch die rekursive Bestimmung von Systemzuständen aus einem Anfangswert können sich selbst die kleinsten Fehler im Laufe millionenfacher Iteration zu großen Fehlern entwickeln. Im vorigen Kapitel haben wir dieses Problem ausführlich diskutiert.

Die numerische Stabilität von Simulationsmodellen wurde zu einem zentralen Thema der Simulations- wie der Klimaforschung. Wieder war es John von Neumann, der nach Phillips’ Experiment, noch 1955 und vor der Veröffentlichung der Ergebnisse, eine Konferenz “on the Application of Numerical Integration Techniques to the Problem of the General Circulation” einberief (Pfeffer, 1960). Sie hatte den Umgang mit den *truncation errors*, dem vermuteten Verursacher der Instabilitäten, zum Hauptthema.

Es folgten Jahre intensiver Forschung und es war Phillips selbst, der herausfand, dass eine “nonlinear computational instability” dafür verantwortlich war, dass selbst sehr kleine Fehler zu großen Abweichungen führten (Phillips, 1959). Die Lösung des Problems wurde, auch von Phillips selbst, in entsprechenden Rundungsverfahren gesucht, welche die Fehler auf geeignete Weise wegmitteln sollten, bevor sie sich zu sehr aufschaukeln konnten. Diese Strategie orientierte sich ganz offensichtlich am Ideal einer möglichst korrekten Berechnung – Instabilitäten werden als Folge von Fehlern, von nicht hinnehmbaren Abweichungen von der wahren Lösung des kontinuierlichen Systems, aufgefasst.

Den entscheidenden Durchbruch aber brachte ein ganz anderer Ansatz, den **Akio Arakawa** verfolgte, ein mathematisch außerordentlich versierter Meteorologe, der ein GCM an der University of California in Los Angeles (UCLA) entwickelte. Für ihn stand die Imitation der Dynamik im Vordergrund und nicht eine möglichst präzise Berechnung von Lösungen. Sein Ansatz gesteht der Simulationsmodellierung gewissermaßen mehr

Autonomie im Vergleich zur Lösung der Grundgleichungen zu. Arakawa stellte freilich keine philosophischen Erwägungen über seinen Ansatz an, sondern argumentierte mit anspruchsvollen mathematischen Ableitungen.

Im Grunde erkannte Arakawa, dass man auf eine echte Lösung der Grundgleichungen überhaupt verzichten konnte, ja sogar sollte. Wenn die zeitliche Entwicklung der Simulation die Verhältnisse der Atmosphäre gut wiedergab und wenn sie das auch stabil tat, dann musste sie – selbst im Limes – keine Lösung der Grundgleichungen sein! Imitation der Phänomene der Atmosphäre geht vor Lösung der Grundgleichungen, so könnte man den Ansatz zusammenfassen.

Freilich bedeutet das nicht, dass man glaubt, mit völlig beliebigen Mechanismen eine vorgegebene komplexe Dynamik simulieren zu können. Deshalb hielt sich auch Arakawa eng an die gegebenen Gleichungen. ABER, er wandte etwas an, was später ‘Arakawa’s computational trick’ genannt werden sollte. Die Grundgleichungen definieren einen generativen Mechanismus, dessen zeitliche Entwicklung formal durch den Jacobi Operator beschrieben wird. Arakawa ersetzte nun den Jacobi Operator durch einen anderen, von ihm konstruierten, der deshalb auch Arakawa Operator genannt wird. Die Herleitung des Arakawa Operators ist voll von äußerst kunstfertigen mathematischen Argumenten, deren Details hier nicht von Interesse sind. (Vgl. Arakawa, 1966; sowie dessen spätere Rekonstruktion, 2000.) Entscheidend ist, dass der Arakawa Operator eine langfristige stabile Integration zuließ, indem er die nichtlineare Instabilität beseitigte. Genau diese Eigenschaft konnte Arakawa mathematisch beweisen.

Um die Stabilisierung des Simulationsverfahrens zu erreichen, musste Arakawa zusätzliche Annahmen einführen, die zum Teil gegen die Erfahrung und das vorhandene Wissen gerichtet waren. So ging er von der Erhaltung der kinetischen Energie in der Atmosphäre aus, obwohl klar war, dass diese Energie durch Reibung in Wärme umgesetzt wird, also definitiv nicht erhalten wird. Mehr noch, die Dissipation war vermutlich gerade von Bedeutung dafür, dass die wirkliche Atmosphäre eine so stabile Dynamik aufweisen konnte. Physikalisch argumentiert kann man sagen, dass Arakawa mit der Erhaltung der kinetischen Energie künstlich das Anwachsen der Instabilitäten begrenzt hat. In der wirklichen Atmosphäre besorgt dies die Reibung.

Das Verwenden offensichtlich gegen die Theorie und die Erfahrung gerichteter Erhaltungsannahmen stieß auf Skepsis in der Forschergemeinde. Wie sich Arakawa später erinnerte, lautete der Tenor: “Why require conservation while nature does not conserve?” (Arakawa, 2000, 16) Während die meisten glaubten, eine möglichst genaue Lösung der Grundgleichungen finden zu müssen, unternahm Arakawa einen zusätzlichen Modellierungsschritt, der sich nicht aus der physikalischen Basis ableitete, sondern nur im nachhinein, durch die Ergebnisse der Simulationsläufe,

als gelungene Imitation gerechtfertigt werden konnte. Der Erfolg seines Ansatzes gab Arakawa schließlich Recht und sein zunächst umstrittener Ansatz läuft heute unter “Rechentrick” (vgl. Weart, 2001).

Zunächst stand Arakawas Ansatz den verschiedenen, unabhängig verfolgten Glättungsmethoden gegenüber, die ebenfalls mit dem Problem der nichtlinearen Instabilitäten fertig werden sollten. Wieder brachte ein Simulationsexperiment die Entscheidung. 1978 führte Jule Charney ein Experiment durch, das in einem Wettbewerb zwischen mehreren GCMs bestand, die parallel und mit den gleichen Anfangsbedingungen liefen. Beteiligt waren drei Modelle: Leith/Lawrence Livermore Lab; Smagorinsky/GFDL Princeton und Arakawa/UCLA. Die ersten beiden hatten Glättungsmethoden implementiert, während das UCLA-Modell auf dem Arakawa-Operator basierte. Phillips schildert den Verlauf:

“...three general circulation models (...) were used for parallel integrations of several weeks to determine the growth of small initial errors. Only Arakawa’s model had the aperiodic behavior typical of the real atmosphere in extratropical latitudes, and his results were therefore used as a guide to predictability of the real atmosphere. This aperiodic behavior was possible because Arakawa’s numerical system did not require the significant smoothing required by the other models, and it realistically represented the nonlinear transport of kinetic energy and vorticity in wave number space.” (Phillips, 2000, xxix)

Das stärkt unser Argument: Die traditionelle Sicht, welche die Simulation als numerische Berechnung eines mathematischen oder physikalischen Systems auffasste, war wegen der durch die Rundungsfehler verursachten numerischen Instabilitäten in eine Sackgasse geraten. Die gewünschte Stabilität ließ sich nur durch Glättungsmethoden erreichen. Diese aber mussten ein unrealistisches Langzeitverhalten in Kauf nehmen. Der konkurrierende Ansatz von Arakawa dagegen erreichte eine “realistischere” Wiedergabe der Dynamik der Atmosphäre, indem er sich ganz kontra-intuitiv auf artifizielle, physikalisch unmotivierte Annahmen stützte – oder anders: von der Autonomie der Simulationsmodellierung Gebrauch machte.

Die artifizielle Annahme, die kinetische Energie zu erhalten, führte zu einer Imitation der Atmosphärendynamik, weil dadurch die stabilisierende Wirkung der Reibung simuliert wurde. Arakawa betrachtete die Aufstellung finiter Differenzgleichungen nicht als bloße Ableitung aus dem kontinuierlichen System der physikalischen Grundgleichungen, sondern sah sie als eine (partiell) eigenständige Konstruktionsaufgabe an. Phillips beschreibt das im Rückblick als: “the formulation of a *physically meaningful* finite-difference scheme that will simulate the nonlinear process in the equations of motion.” (2000, xxviii)

Computersimulationen in der Klimaforschung müssen also keine Lösung von Differentialgleichungen approximieren, sondern können Mechanismen benutzen, die die physikalischen Eigenschaften der Dynamik imitieren. Das bedeutet vor allem, dass es kein rigores

Ableitungsverhältnis zwischen Simulationsmodell und physikalisch-mathematischem Modell gibt, vielmehr besteht für die Simulationsmodellierung ein gewisser Freiraum. Hier spielen die in der Wissenschaftstheorie momentan diskutierten Gesichtspunkte der Vermittlung und Autonomie von Modellen eine wichtige Rolle. Die von Margaret Morrison (1999) gegebene Charakterisierung von Modellen als “(partly) autonomous agents” trifft jedenfalls einen grundlegenden Aspekt der Simulationsmodelle. Wegen dieser Autonomie der Simulation gegenüber den Grundgleichungen sind Computersimulationen keine einfache numerische Berechnung, sondern sind Modellierungen zweiter Ordnung, im Sinne einer iterierten Modellkonstruktion.

Die Adäquatheit eines Simulationsmodells lässt sich deshalb auch nicht theoretisch beweisen oder aus allgemeinen Prinzipien ableiten. Simulationsergebnisse lassen sich nur an der Erfahrung messen. Das impliziert besondere Validierungsprobleme dort, wo Erfahrungswerte nicht zur Verfügung stehen, weil zukünftige Entwicklungen vorausgesagt werden sollen. Gerade das ist das Problem der Klimasimulationen im politischen Diskurs der Klimapolitik.

6. SIMULATION ALS MODELLIERUNG ZWEITER ORDNUNG

Beide Beispiele numerischer Integration, sowohl der einfache Fall des Runge-Kutta-Verfahrens, wie der ungleich komplizierter gelagerte des Arakawa Operators, führten zur These, dass die Simulation eine Modellierung zweiter Ordnung bedeutet, die insbesondere die modellierte Dynamik imitiert und nicht etwa numerisch eine Lösung berechnet.

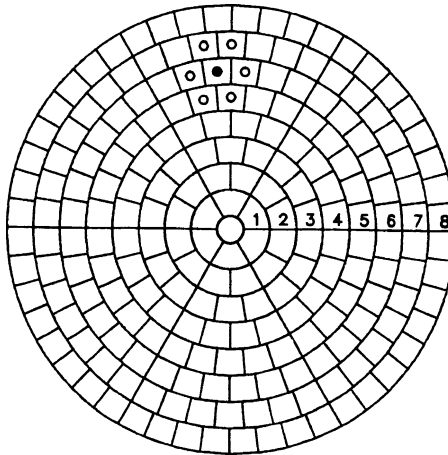


Abb. 2. Schema von Zellen auf konzentrischen Ringen (aus Seiden u.a., 1990).

Diese Aussage ist nicht auf solche Simulationsmodelle begrenzt, die ein System kontinuierlicher DGLen diskretisieren. Auch andere Simulationsverfahren benutzen generative Mechanismen, um eine bestimmte Dynamik zu simulieren. Als Beispiel wollen wir Modelle anführen, die auf der Methode der zellulären Automaten basieren. Sie sind von Anfang an auf die Fähigkeiten des Computers zugeschnitten, weil sie lokale Veränderungen iterativ bestimmen.¹² Ein aufschlussreiches Beispiel für ein solches CA-Modell stammt von Seiden und Schulman (1990)¹³, die die Entwicklung von Spiralgalaxien untersuchen. Eine solche Galaxie besteht aus einer Vielzahl von Körpern, deren Bewegungen prinzipiell bekannten physikalischen Gesetzen gehorchen. Die Interaktion der vielen Sterne aber macht das Problem so komplex, dass ein entsprechendes Differentialgleichungssystem von vorneherein als Modellierung ausscheidet. Dementsprechend kann ein solches Simulationsmodell auch kein solches mathematisches Modell approximieren (geschweige denn "lösen"). Seiden und Schulman konstruieren ein CA-Modell, das aus einer Art Dartscheibe besteht, die in Zellen aufgeteilt ist. Jede dieser Zellen ist entweder besetzt (schwarz) oder unbesetzt (weiß) und in jedem Zeitschritt wird der neue Zustand einer Zelle aus demjenigen ihrer Nachbarzellen errechnet. Das ist genau der Typ von Aufgabe, in dem Computer stark sind und solche zellulären Automaten sind als Modelle von Anfang an auf den Computer hin entworfen worden.¹⁴ Natürlich kommt alles, ebenso wie im Falle der atmosphärischen Zirkulation, auf die genaue Spezifikation dieser Dynamik an. Es ist eine subtile Angelegenheit, verschiedene physikalische Abläufe wie etwa Staubexplosionen in die "zelluläre Spirale" umzusetzen, oder die Drehbewegung der Scheibe zu steuern und im Verlauf der Simulation eine feiner werdende Unterteilung vorzunehmen. Hierfür spielt, genau wie bei Phillips' Experiment, die Urteilskraft erfahrener Wissenschaftler (Astronomen wie Computerprogrammierer) eine große Rolle. Es liegt auf der Hand, dass dieses CA-Modell keine Approximationseigenschaft an ein 'realistisches' Modell im Sinne eines Systems von Differentialgleichungen aufweist, wenn sich Seiden und Schulman auch stark an einem probabilistischen Modell orientieren. Was macht ein solches CA-Modell dann adäquat oder nicht? Ist das nicht völlig beliebig? Als Kriterium wird das Ergebnis der Simulation verwendet, d.h. das Bild nach sehr vielen Iterationen der zellulären Dynamik. Es besteht in einem fein gekörnten Bild, in dem die besetzten Zellen schließlich zu schwarzen Pixeln geschrumpft sind. Mit je geeigneten Parametereinstellungen (Anfangskonfiguration, Drehgeschwindigkeit, usw.) ähneln diese durch Simulation erzeugten Bilder auf verblüffende Weise Fotos, die per Teleskop aufgenommen wurden.

Diese Ähnlichkeit ist ausschlaggebend, nicht die strukturelle Ähnlichkeit zwischen zellulären Automaten und Sternen. Und für die Beurteilung dieser Ähnlichkeit ist auch kein mathematisches Maß

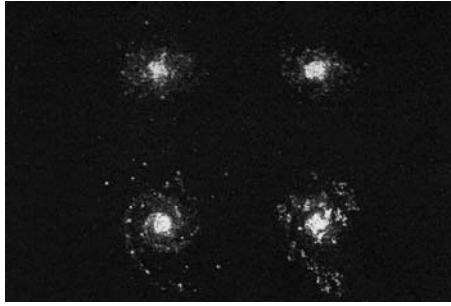


Abb. 3. Zwei photographierte (links) und simulierte (rechts) Galaxien, aus Seiden u.a., 1990.

vorhanden, sondern es zählen die Bilder. Freilich hat es eines umfangreichen Tunings bedurft, d.h. der Einstellung der freien Parameter des Simulations-modells, um die so verblüffend passenden Vergleichsbilder zu erzeugen. Die quasi-experimentelle Herangehensweise, die aufgrund von Beobachtungen in theoretischen Modell-Experimenten die "Stellschrauben", d.h. Parameter, der Modelle justiert, ermöglicht erst Simulationen dieser Art. Die These von der Modellierung zweiter Ordnung trifft auch hier zu. Denn das CA-Modell *imitiert* die physikalische Dynamik einer Spiralgalaxie, wie die Fotos so anschaulich zeigen. Das beantwortet freilich die Frage nicht, welches Wissen ein solches Modell liefert und was man aus ihm lernen kann. Auf alle Fälle lassen sich theoretische Alternativen quasi-empirisch überprüfen, so dass es gerechtfertigt zu sein scheint, Computersimulationen als ein Experimentieren mit Theorien zu begreifen. Damit würden aber Simulationsmodelle einen eigenständigen Status in der Wissensproduktion jenseits von Theorie und Experiment erhalten.

ACKNOWLEDGMENTS

Wir bedanken uns bei der VolkswagenStiftung für die großzügige finanzielle Unterstützung unserer Arbeit im Rahmen der VW-Forschergruppe "Wissenschaft im Umbruch" und bei Holger Lücking für die hilfreiche Mitarbeit im Projekt.

ANMERKUNGEN

- ² So gesehen sind DGLen Mittler zwischen einer allgemeinen Theorie und deren spezifischer Anwendung. Die aktuelle Debatte um models as mediators (Morgan and Morrison, 1999) schließt hier an das in der Wissenschaftsphilosophie altbekannte Thema der Anwendungsproblematik an: Allgemeine Gesetze können nicht direkt angewandt werden.
- ³ Analoges gilt auch, wenn X nicht nur von der Zeit, sondern auch noch vom Ort abhängt und selbst ein Vektor aus vielen Variablen ist. Die dann zum Einsatz gelangenden

Verfahren diskretisieren auch den Raum in einem dreidimensionalen Gitter. Für genauere Informationen zu solchen Verfahren muss auf die reichhaltige Literatur verwiesen werden.

- 4 Über Einzelheiten des Verfahrens kann man sich in den entsprechenden Lehrbüchern informieren. Siehe z.B. Netz, H. (Hrsg.): *Formeln der Mathematik*, Westermann, Braunschweig 1965, 546 ff.
- 5 In komplizierteren Fällen stellt die Wahl eines 'richtigen' Gitters ein eigenständiges Problem dar, vgl. z.B. Hackbusch 1985.
- 6 Der Experimentbegriff ist in verschiedenen Bedeutungen gebräuchlich. Insbesondere wird er im Folgenden nicht im Sinne einer Messung, sondern eher im Sinne des Evaluierens von theoretischen Annahmen gebraucht. Dass die Simulationen einen neuartigen und philosophisch bedeutsamen experimentellen Zugang eröffnen, war bereits in der Einleitung angesprochen worden (vgl. auch Rohrlich, 1991; Winsberg, 2003; Fox Keller, 2003).
- 7 Peter Galison, 1996 erzählt diese Geschichte.
- 8 Für eine detaillierte Schilderung vgl. Lewis, 1998, für eine weitergreifende Ideengeschichte der Modellierung der allgemeinen Zirkulation der Atmosphäre vgl. Lorenz, 1967.
- 9 Im gleichen Jahr wurde auch das National Center for Atmospheric Research (NCAR) in Boulder, Colorado gegründet.
- 10 Dies wurde im vorherigen Kapitel ausführlich diskutiert.
- 11 Winsberg, 1999 unterscheidet eine ganze Hierarchie verschiedener Modellierungsschritte.
- 12 Sie sind in verschiedenen Versionen gebräuchlich, je nach Art des zugrunde gelegten Koordinatensystems. Diese sind übernommen aus Gates 1987, 16/17.
- 13 Dieses Argument erfasst auch eine weitere Klasse von Simulationsmodellen, die so genannten Agentenmodelle. In ihnen werden soziale Dynamiken imitiert, vgl. z.B. den Sammelband Hegselmann, 1996. Wenn etwa in solchen Modellen vorgeführt wird, wie altruistisches Verhalten durch die Nutzenmaximierung einzelner Akteure entstehen kann, so steht von vorneherein fest, dass damit keine Approximation an irgendwelche Gesetze des gesellschaftlichen Zusammenlebens verbunden ist. In diesem Falle ist sogar umstritten, ob es überhaupt solcherlei Gesetze gibt, oder vielleicht vorsichtiger formuliert: der gesetzmäßige Charakter und seine Option auf Vorhersage und Manipulation spielt meist keine Rolle. Es geht vielmehr darum, mittels bestimmter Simulationstechniken beobachtetes Verhalten zu imitieren.
- 14 Es weist bereits eine kleine Rezeptionsgeschichte auf, da es von Rohrlich auf der PSA 1990 als ein Beispiel für Simulation und ihren "dynamically anschaulichen" Eigenschaften, wie sie in Visualisierungen zum Tragen kommen, angeführt wurde (Rohrlich, 1991).
- 15 Es gibt sogar den Standpunkt, dass in der angewandten Mathematik das Paradigma der Differentialgleichungen im Zuge der Computer-Revolution durch dasjenige der zellulären Automaten abgelöst würde, vgl. dazu die voluminöse Monographie von Stephen Wolfram (2002).

LITERATURVERZEICHNIS

Arakawa, A.: 1966, 'Computational Design for Long-Term Numerical Integration of the Equations of Fluid Motion: Two-Dimensional Incompressible Flow. Part I', *J. Comp. Phys.* **1**, 119–143.

- Arakawa, A.: 2000, A Personal Perspective on the Early Years of General Circulation Modeling at UCLA. *General Circulation Model Development*. D. A. Randall. San Diego, Academic Press: 1–66.
- Brennan, R. D.: 1968, Simulation is Wha-a-t? Part II. *Simulation, The Dynamic Modeling of Ideas and Systems with Computers*. J. McLeod. New York, McGraw-Hill: 5–12.
- Dowling, D.: 1999, 'Experimenting on Theories,' *Science in Context* **12**(2), 261–273.
- Fox Keller, E.: 2003, Models, Simulation, and "Computer Experiments." *The Philosophy of Scientific Experimentation*. H. Radder. Pittsburgh, University of Pittsburgh Press.
- Galison, P.: 1996, Computer Simulations and the Trading Zone. *The Disunity of Science: Boundaries, Contexts, and Power*. P. Galison. Stanford, Calif., Stanford Univ. Press: 118–157.
- Gates, W. L.: 1988, Climate and the Climate System. *Physically-Based Modelling and Simulation of Climate and Climate Change*. M. E. Schlesinger. Dordrecht, Kluwer: 3–22.
- Guetzkow, H.: 1962, *Simulation in Social Science*. Englewood Cliffs, Prentice Hall.
- Hackbusch, W.: 1985, *Multi-Grid Methods. Theory and Applications*. Heidelberg, Springer.
- Hartmann, S.: 1996, The World as a Process. Simulations in the Natural and Social Sciences. *Modelling and Simulation in the Social Sciences from the Philosophy of Science Point of View*. R. Hegselmann. Dordrecht, Kluwer: 77–100.
- Hegselmann, R., Ed: 1996, *Modelling and Simulation in the Social Sciences from the Philosophy of Science Point of View*. Dordrecht, Kluwer.
- Hoßfeld, F.: 1999, Komplexität und Berechenbarkeit: Über die Möglichkeiten und Grenzen des Computers. *Vortrag an der N-W Akademie der Wissenschaften*.
- Hughes, R. I. G.: 1999, The Ising Model, Computer Simulation, and Universal Physics. *Models as Mediators*. M. S. Morgan and M. Morrison. Cambridge, Cambridge University Press: 97–145.
- Humphreys, P.: 1991, Computer Simulations. *PSA 1990*. F. Fine, Wessels. East Lansing, Philosophy of Science Association. **2**, 497–506.
- Humphreys, P.: 1994, Numerical Experimentation. *Patrick Suppes: Scientific Philosopher*. P. Humphreys. Dordrecht, Kluwer. **2**: 103–121.
- Lewis, J. M.: 1998, 'Clarifying the Dynamics of the General Circulation: Phillips's 1956 Experiment,' *Bull. Am. Met. Soc.*, **79**(1), 39–60.
- Lorenz, E.: 1967, The Nature of the Theory of the General circulation of the Atmosphere. Geneva, World Meteorological Organization WMO, No. 218, TP. 115: 161.
- Morgan, M. S. and M. Morrison, Eds: 1999, *Models As Mediators. Perspectives on Natural and Social Science*. Ideas in Context 52. Cambridge, Cambridge University Press.
- Morrison, M.: 1999, Models as autonomous agents. *Models As Mediators. Perspectives on Natural and Social Science*. M. S. Morgan and M. Morrison. Cambridge, Cambridge University Press: 38–65.
- Neelamkavil, F.: 1987, *Computer Simulation and Modelling*. New York, John Wiley and Sons.
- Netz, H., Ed: 1965, *Formeln der Mathematik*. Braunschweig, Westermann.
- Neumann, J. v. and R. D. Richtmyer.: 1947, Statistical Methods in Neutron Diffusion. *Analogies Between Analogies; the mathematical reports of S. M. Ulam and his Los Alamos collaborators*. S. M. Ulam, A. R. Bednarek and F. Ulam. Berkeley and Los Angeles, California, University of California Press.
- Pfeffer, R. L., Ed: 1960, *Dynamics of Climate. The Proceedings of a Conference on the Application of Numerical Integration Techniques to the Problem of the General Circulation held October 26–28, 1955*. Oxford, Pergamon.

Phillips, N.: 1956, "The General Circulation of the Atmosphere: A Numerical Experiment", *Quat. J. R. Met. Soc.* **82**(352), 123–164.

Phillips, N.: 1959, An Example of Non-Linear Computational Instability. *The atmosphere and the sea in motion*. B. Bolin. New York, Rockefeller Institute Press.

Phillips, N.: 2000, Foreword. *General Circulation Model Development*. D. A. Randall. San Diego: xxvii–xxix.

Rohrlich, F.: 1991, Computer Simulation in the Physical Sciences. *PSA 1990*. F. Forbes, Wessels. East Lansing, Philosophy of Science Association. **2**: 507–518.

Seiden, P. E. and L. S. Schulman: 1990, 'Percolation Model of Galactic Structure', *Advances in Physics* **39**(1).

Stöckler, M.: 2000, On Modeling and Simulations as Instruments for the Study of Complex Systems. *Science at Century's End*. M. Carrier, G. J. Massey and L. Ruetsche. Pittsburgh, University of Pittsburgh Press: 355–373.

Weart, S.: 2001, Arakawa's Computation Trick, American Institute of Physics.: **2001**, <http://www.aip.org/history/climate/arakawa.htm>. Version 21.1.2003.

Wiin-Nielsen, A.: 1991, 'The Birth of Numerical Weather Prediction', *Tellus* **43**, 36–52.

Winsberg, E.: 1999, 'Sanctioning Models: The Epistemology of Simulation', *Science in Context* **12**(2), 275–292.

Winsberg, E.: 2003, 'Simulated Experiments: Methodology for a Virtual World', *Philosophy of Science* **70**: 105–125.

Wolfram, S.: 2002, *A New Kind of Science*. Champaign, Wolfram Media.

Institut für Wissenschafts- und Technikforschung
Universität Bielefeld
Postfach 100131
33501 Bielefeld
(johannes.lenhard@uni-bielefeld.de)