

2014

Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft

Positionspapier

	Vorbemerkung	5
A.	Darstellung des Feldes	7
A.I	Zur Geschichte von Simulation	7
A.II	Zum Verständnis von Simulation und Simulationsprozessen	8
A.III	Zum Potenzial von Simulation	12
	III.1 Funktionen von Simulation	12
	III.2 Bedeutung von Simulation	14
B.	Analysen und Empfehlungen	16
B.I	Lehre und Ausbildung	17
	I.1 Modul „Simulationswissenschaft“ in grundständigen Studiengängen	18
	I.2 Bachelor in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft	19
	I.3 Bachelor in Simulationswissenschaft	20
	I.4 Master in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft	21
	I.5 Master in Simulationswissenschaft	22
B.II	Infrastruktur	22
	II.1 Technische Einrichtungen	23
	II.2 Entwicklung und Pflege von Methoden und Software	24
	II.3 Archivierung und Verfügbarkeit von Simulationsmodellen und -daten	25
B.III	Karrierperspektiven in der Wissenschaft	27
	III.1 Wissenschaftlicher Nachwuchs	27
	III.2 Akademische Karrierewege jenseits der Professur	29
B.IV	Strukturbildungen an Hochschulen	30
B.V	Forschung und Transfer	34
	V.1 Forschung	34
	V.2 Transfer	40
C.	Ausblick	43

Vorbemerkung

In den letzten drei Jahrzehnten lässt sich beobachten, dass der Einsatz von rechnerbasierter Simulation in immer mehr Wissenschaftsfelder hineinwirkt. So kommen Simulationen in der Meteorologie bei der Wettervorhersage, in der Finanzwirtschaftslehre bei Untersuchungen zur Wirkung von Geldmarktinstrumenten, in der Medizin bei der Analyse von Gewebebildungen oder in den Ingenieurwissenschaften zur Materialentwicklung zum Einsatz. Zugleich greifen auch Industrie und Politik vermehrt auf Ergebnisse von Computersimulationen zurück, so zum Beispiel bei der Produktentwicklung in der Automobilbranche, bei der Prozessoptimierung in der Chemie- und Pharmabranche, bei der Erstellung von Prognosen im Versicherungswesen oder auch bei der Simulation politischer Reformvorhaben wie beispielsweise der Analyse von Änderungen des Steueraufkommens und den damit verbundenen Verteilungswirkungen. In der Industrie ist Simulation mittlerweile ein im Alltag selbstverständlich eingesetztes Instrument. Trotz der zunehmenden Bedeutung und des großen Potenzials von rechnerbasierter Simulation und Simulationswissenschaft für die Entwicklung von Wissenschaft, Wirtschaft, Politik und Gesellschaft haben sich die Strukturen in Forschung und Lehre nicht adäquat mit entwickelt. Dies war der Anlass für die Befassung des Wissenschaftsrates mit dem Feld der Simulationswissenschaft. In der Vergangenheit hat der Wissenschaftsrat mehrfach themennahe Empfehlungen insbesondere zu den Hoch- und Höchstleistungsrechnern in Deutschland und in Europa sowie vereinzelt zur Förderung von *Computational Science and Engineering* (CSE) erarbeitet, zuletzt im Jahr 2012 |¹, nicht jedoch zum gesamten Feld der Simulationswissenschaft.

Simulation ist eine zentrale Ausprägung im weiteren Feld der *Computational Sciences*. Dieser Begriff wird häufig als Oberbegriff für alle wissenschaftlichen Fragestellungen herangezogen, die rechnergestützte, modell- und algorithmen-

|¹ Vgl. Wissenschaftsrat: Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland. Positionspapier, Berlin 2012. Darauf aufbauend erarbeitet der Wissenschaftsrat derzeit ein Konzept für die Organisation und Finanzierung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern.

basierte Methoden entwickeln oder diese zur Problemlösung heranziehen. Auch wenn sich die Ausführungen in diesem Positionspapier ganz überwiegend auf die Simulation als zentrale Ausprägung konzentrieren, lassen sich die Analysen und Empfehlungen größtenteils auch auf das größere Feld der *Computational Sciences* übertragen, zumal sich bisher noch keine begriffliche Trennschärfe zur genauen Charakterisierung der verschiedenen Forschungsfelder herausgebildet hat.

Aus mehreren Gründen ist insbesondere eine Befassung mit dem Feld der Simulation erforderlich. *Erstens* birgt dieses Feld ein hohes Potenzial nicht allein für die Weiterentwicklung einer Vielzahl von Disziplinen, sondern auch für die weitere wirtschaftliche und gesellschaftliche Entwicklung. In vielen Wissenschaften ist mit dem Einsatz von Simulationen die Hoffnung verbunden, Herausforderungen zu bewältigen, die nicht allein experimentell oder konventionell theoretisch bearbeitet werden können – wie im Fall der Analyse von Ursachen und Konsequenzen des Klimawandels. In der Wirtschaft ist Simulation vielfach eine Standardmethode, die schon heute in allen Hochtechnologiebereichen eingesetzt wird und die sich in weiteren Bereichen der Wirtschaft durchsetzen wird. Trotz dieses hohen Potenzials besteht *zweitens* weltweit im wissenschaftlichen wie im außerwissenschaftlichen Bereich ein derzeit kaum zu deckender Bedarf an Absolventinnen und Absolventen mit Kenntnissen im Bereich der Simulation. Zudem bedarf es *drittens* für einen Fortschritt in diesem Feld einer systematischen Verschränkung fachwissenschaftlicher Problemstellungen und simulationswissenschaftlicher Kompetenz, ohne dass vor allem an den Hochschulen die notwendigen Strukturen für eine solche Verzahnung vorhanden sind. *Viertens* lässt sich ein großes Defizit in den Bereichen Modellierung, Algorithmen- und Software-Entwicklung sowie in der nachhaltigen Pflege und Bereitstellung der Software im Zusammenhang mit dem Thema Simulation beobachten. Dadurch bleibt die Qualitäts- und Produktivitätssteigerung in den wissenschaftlichen Fachgemeinschaften und deren Infrastrukturen sowie in Wirtschaft und Verwaltung deutlich hinter den Möglichkeiten zurück.

Der Forschungsausschuss des Wissenschaftsrates hat dieses Positionspapier vorbereitet. Dazu hat er Sachverständige angehört, die nicht Mitglieder des Wissenschaftsrates sind. Ihnen und den Mitgliedern des Forschungsausschusses ist der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet.

Der Wissenschaftsrat hat das Positionspapier am 11. Juli 2014 in Dresden unter der Drucksachenummer (Drs.) 4032-14 verabschiedet.

A. Darstellung des Feldes

A.1 ZUR GESCHICHTE VON SIMULATION

In den fünfziger Jahren wurden rechnerbasierte mathematische Modellierungen zum Zwecke der Simulation komplexer Systeme erstmals in der Meteorologie und in der Nuklearphysik als wissenschaftliche Werkzeuge entwickelt und erprobt. |² Schon früh wurden Simulationen auch als Unterstützungswerkzeuge für industrielle Entwicklungsprozesse eingesetzt. |³ Spätestens seit den 1970er Jahren spielen Simulationen und ihre Ergebnisse auch in Gesellschaft und Politik eine wichtige Rolle.

Im gesellschaftlichen Diskurs ist Simulation seit der Veröffentlichung des *Club of Rome* „Die Grenzen des Wachstums“ im Jahr 1972 präsent. Die MIT Studie setzte erstmals nicht allein die bis dahin üblichen statistischen Verfahren ein, sondern griff auf Differenzialgleichungen zurück und erarbeitete ein Modell, das aus heutiger Sicht mit stark vereinfachten Annahmen die dynamische Entwicklung bestimmter globaler Trends sowie einiger wesentlicher Wechselwirkungen unterschiedlicher Parameter wie Bevölkerungsdichte, Nahrungsmittelressourcen, Energie, Umweltzerstörung etc. für die Zukunft zu projizieren versuchte. |⁴ Mittlerweile ist das zugrunde gelegte Modell aus unterschiedlichen Gründen wissenschaftlich nicht länger haltbar und gilt aus heutiger Sicht als übervereinfacht. Gleichwohl hat diese Simulation nicht nur in der Wissen-

|² Vgl. zur Geschichte der Simulation Winsberg, E.: Computer Simulations in Science, in: Stanford Encyclopedia of Philosophy, May 2013 (<http://plato.stanford.edu/entries/simulations-science>, Abruf vom 19.07.2013).

|³ In den 50er Jahren wurden Simulationen beispielsweise schon für die Entwicklung von Flugzeugflügeln eingesetzt.

|⁴ Vgl. hierzu: Gramelsberger, G.: Berechenbare Zukünfte – Computer, Katastrophen und Öffentlichkeit. Eine Inhaltsanalyse futurologischer und klimatologischer Artikel der Wochenzeitschrift „Der Spiegel“, in: CCP 1 (2007): S. 28-50 (http://195.37.26.249/ijsc/docs/artikel/01/02_Forschung_Gramelsberger_final.pdf, Abruf vom 19.09.2013).

schaft, sondern auch in breiten Kreisen der Bevölkerung und der Politik ein Bewusstsein für anthropogene Einflüsse auf die Umwelt geschaffen.

Mittlerweile sind Simulationen selbstverständlicher und unverzichtbarer Bestandteil in einer wachsenden Zahl von wissenschaftlichen Disziplinen. So spielen Computersimulationen, im Folgenden kurz Simulationen genannt, heute nicht nur eine zentrale Rolle in vielen Bereichen der Ingenieurwissenschaften, sondern auch der Natur-, Lebens- und Sozialwissenschaften. *Computational Neurology*, *Computational Chemistry* oder *Computational Medicine* sind einige Beispiele für entsprechende Teilgebiete der jeweiligen Disziplinen, in denen mit Simulationen gearbeitet wird. Während sich in vielen Naturwissenschaften bereits Teilgebiete entwickelt haben, die rechner- und simulationsgestützt arbeiten, sind hingegen in den meisten Geistes-, Sozial- und Wirtschaftswissenschaften Simulationen nach wie vor weniger verbreitet. In den letztgenannten Wissenschaften ist daher die für die Schaffung von Freiräumen zur fachwissenschaftlichen Forschung notwendige Arbeitsteilung im Rahmen simulationsgestützten Arbeitens noch nicht weit genug entwickelt.

In der Industrie sind Simulationen heute vor allem in Unternehmen mit starkem Bezug zu den Ingenieurwissenschaften wie zum Beispiel in der Automobilindustrie oder im Maschinen- und Anlagenbau ein alltägliches Werkzeug. In Zukunft wird eine Ausweitung auf fast alle Bereiche der Industrie erwartet: nicht allein in der Entwicklung von Produkten und den dazugehörigen Prozessen sondern auch in der Gestaltung, Optimierung und Qualitätssicherung von Produktion, Logistik und Vertrieb. Daher besteht in der Wirtschaft ein großer Bedarf an rechnergestützten Methoden, um wettbewerbsfähige funktionale Produkte anbieten und mit hoher Effizienz, Qualität und Sicherheit herstellen und vertreiben zu können.

A.II ZUM VERSTÄNDNIS VON SIMULATION UND SIMULATIONSPROZESSEN

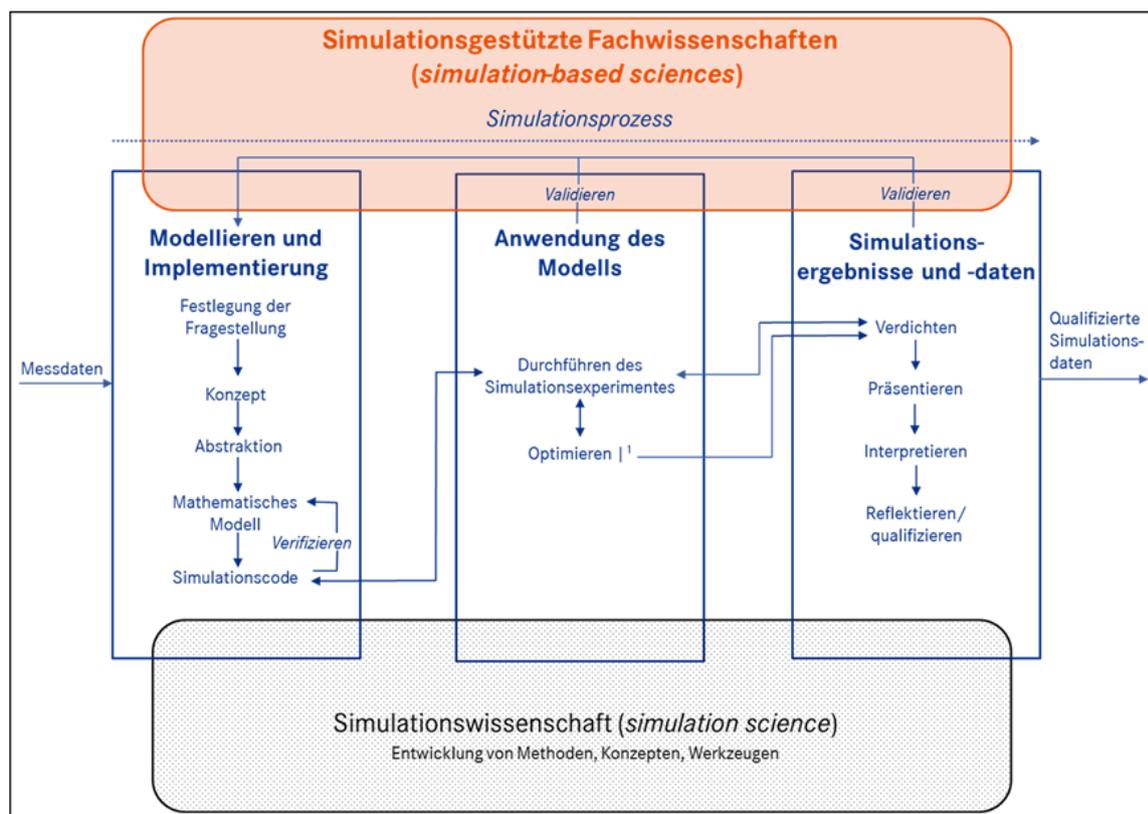
Das Feld der Simulation entwickelt sich in den letzten Jahren mit hoher Dynamik. Um ein gemeinsames Grundverständnis von Simulation und Simulationswissenschaft zu schaffen, sollen die Begriffe und wissenschaftlichen Zusammenhänge zunächst erläutert werden.

Simulation wird verstanden als „*process of designing a model of a real system and conducting experiments with this model for the purpose either of understanding the behavior of the system and its underlying causes or of evaluating various designs of an artificial*

system or strategies for the operation of the system“. |⁵ Simulationen sind demnach Experimente mit einem formalen Modell („*in silico*“-Experimente), die Fragestellungen adressieren und Erkenntnisse erzielen, die nicht oder nur mit großem Aufwand über direkte Beobachtung und Messung oder über ein reales Experiment (wie z. B. ein *in vitro*- oder *in vivo*-Experiment) gewonnen werden können.

Das Positionspapier baut auf dieses Basisverständnis auf und nimmt dabei den gesamten Simulationsprozess in den Blick, der – idealtypisch – in drei Phasen zu untergliedern ist, beginnend mit (1) der Modellbildung und Modellimplementierung mithilfe einer Simulationssoftware über (2) die Durchführung von Simulationsexperimenten oder anderen simulationsgestützten Anwendungen (wie beispielsweise numerische Optimierung) bis hin zur (3) Interpretation der gewonnenen Simulationsergebnisse einschließlich der damit verbundenen Verifikations- und Validierungsfragen. Das Schaubild veranschaulicht zugleich, dass in den Simulationsprozess Messdaten zur Stützung der Modellbildung einfließen

Abbildung 1: Die drei wesentlichen Phasen des Simulationsprozesses



|¹ Der Begriff der Optimierung wird hier nicht – wie umgangssprachlich üblich – im Sinne von „Verbesserung“ genutzt. Vielmehr wird hier auf eine numerische Methode verwiesen, die auf Modelle und deren Simulationen zurückgreift.

Quelle: Wissenschaftsrat

|⁵ So definierte in den 1970er Jahren R. E. Shannon den Begriff der Simulation (vgl. Shannon, R. E.: Systems Simulation: The Art and Science. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1975.).

und am Ende des Prozesses qualifizierte Simulationsdaten zusammen mit ihrem Entstehungskontext den wissenschaftlichen Fachgemeinschaften zur Verfügung gestellt werden. Abbildung 1 fasst den Simulationsprozess und die damit verbundenen Rückkopplungsschleifen im Zuge von Verifikation und Validierung zusammen.

Am Anfang des Simulationsprozesses steht das Modell, das auf die vereinfachte Abbildung eines Wirklichkeitsausschnittes zielt, so zum Beispiel eines biologischen, physikalischen, technischen oder sozialen Systems |⁶, das gegen seine Umgebung in definierter Weise abgegrenzt ist. Dieses zunächst informelle Modell gilt es mathematisch nachzubilden. Dazu müssen wesentliche Größen des „Realsystems“ (oft Zustandsgrößen genannt) und ihre wechselseitigen dynamischen Beziehungen mithilfe theoretisch fundierter oder empirischer Gesetzmäßigkeiten in Form mathematischer Relationen beschrieben werden. Erst die fachspezifische Theorie ermöglicht die Erarbeitung eines theoretischen Modells im Sinne einer sinnhaft vereinfachten Abstraktion der abzubildenden Phänomene. Diese Relationen können vielfältiger Natur sein und etwa nicht-lineare Differenzialgleichungssysteme oder diskrete Zustandsübertragungsfunktionen umfassen. |⁷ Im Rahmen der Modellbildung ist stets Rechenschaft abzulegen über die im Zuge des Abstraktionsprozesses zugrunde gelegten Annahmen und über die Wechselwirkungen des modellierten Systems mit seiner Umgebung. Diese Reflexion, in einigen Wissenschaftsfeldern auch Qualifizierung genannt, trägt entscheidend zur Qualität der Simulationsergebnisse und ihrer angemessenen Nutzung bei.

Das Modell wird zusammen mit numerischen Algorithmen |⁸ in *Software* – auch als *Simulationscode* |⁹ bezeichnet – umgesetzt, um schließlich Simulationsexperimente durchzuführen. Dazu werden heute häufig unterstützende Modellierungs- und Simulationswerkzeuge benutzt, die generischer Natur oder auf ein bestimmtes Anwendungsgebiet abgestimmt sind. Im Rahmen der Verifikation wird geprüft, ob die Simulationssoftware das Modell richtig umsetzt und ob sie sich spezifikationskonform verhält. Schließlich wird das Simulationsmodell validiert, indem die Adäquatheit seiner Ableitung und mathematischen Formulie-

|⁶ Unter System wird hier eine Gesamtheit von Elementen verstanden, die miteinander oder aufeinander bezogen interagieren und daher als Einheit betrachtet werden können.

|⁷ Vgl. auch: acatech (Hrsg.): Technikzukünfte. Vorausdenken – Erstellen – Bewerten (acatech IMPULS), Heidelberg u. a.: Springer Verlag 2012, S. 25.

|⁸ Unter einem Algorithmus wird eine Verfahrensvorschrift zur Lösung einer Aufgabe verstanden. Diese Vorschrift besteht aus wohl definierten Einzelschritten, die als Grundlage für die Entwicklung eines Computerprogramms genutzt werden können.

|⁹ *Code* wird in diesem Zusammenhang als Befehlsfolgen eines Programms verstanden im Unterschied zu Daten. Vielfach ist Simulationscode der umgangssprachlich eingesetzte Begriff für Simulationssoftware.

rung und auch die Verlässlichkeit der berechneten Vorhersagen anhand von Messdaten und Plausibilitätsbetrachtungen geprüft werden. |¹⁰ Der Simulationsprozess unterliegt dabei einer steten Rückkopplung der drei idealtypisch unterschiedenen Phasen.

Simulationen werden, wie eingangs skizziert, mittlerweile in einer Vielzahl von Disziplinen eingesetzt. Das Positionspapier verwendet dafür den Begriff der simulationsgestützten Wissenschaften (*simulation-based sciences*) (vgl. Abbildung 1). Allerdings hat sich über die Implementierung von Simulation in den Fachdisziplinen hinaus ein eigenes Feld, das der Simulationswissenschaft (*simulation science*) herausgebildet. Im Zentrum dieses Feldes steht die Entwicklung von Methoden, Konzepten und Werkzeugen für den gesamten Simulationsprozess, die vor allem auch auf die modernen Rechnerarchitekturen vom Arbeitsplatzrechner mit einem oder mehreren Standardprozessoren bis hin zu Hoch- und Höchstleistungsrechnern abgestimmt sind. Simulationswissenschaft entwickelt sich an der Schnittstelle von numerischer Mathematik, Informatik und Modellbildung. |¹¹ Dabei wird sie vor allem über die Modellbildung immer auf den Austausch mit den Problemstellungen aus den Fachwissenschaften angewiesen bleiben. Genau darin liegt eine zentrale Herausforderung für die weitere Entwicklung der Simulationswissenschaft.

Simulationen stellen eine Form der Erkenntnisproduktion dar, deren besondere Reichweite und Implikationen vielfach noch nicht ausreichend wahrgenommen und reflektiert worden sind. Seit dem 19. Jahrhundert hat sich mit der Physik als Leitdisziplin das Erkenntnisideal ausgeprägt, exaktes, möglichst mathematisierbares und damit eindeutig reproduzierbares Wissen zu schaffen. Die simulationsgestützte Erforschung komplexer Systeme entspricht diesem Erkenntnisideal nur zum Teil. Modelle beispielsweise zur Berechnung des ökonomischen Wachstums oder der Bevölkerungsentwicklung können – trotz aller Steigerung der Komplexität und damit trotz der immer größeren Realitätsnähe – die Zu-

|¹⁰ „The accuracy of the predictions depends on the validity of each component model, the completeness of the set of all the models, the veracity of the solution method, the interaction between component modes, the quality of the input data, the grid resolution, and the user’s ability to correctly set up the problem, run it, and interpret the results“ (Post, D. E.; Votta, L. G.: Computational Science Demands a New Paradigm, in: Physics Today January 2005, S. 35-41, hier S. 39). „A validated model is one where tests have been performed which would have shown it to be invalid but which failed to do so“ (Borg et al.: The concept of validation of numerical models for consequence analysis, in: Reliability Engineering & System Safety, Nr. 125 (Mai 2014), S. 36-45).

|¹¹ Ob es sich bei diesem Feld bereits um eine homogene Disziplin handelt, ist umstritten. Vor einigen Jahrzehnten zeichneten sich vergleichbare Entwicklungen im Fall der Informatik (*computer science*) ab. Diese hat sich aus der Mathematik und der Elektrotechnik heraus zu einem eigenen Fach emanzipiert.

kunft nicht exakt vorhersagen |¹², sondern lediglich approximativ ein Bild möglicher Zustände schaffen. Denn Simulationen gehen von einer Vielzahl theoretischer Annahmen und gemessener Daten aus, fügen diese zu einem komplexen Modell zusammen und erzeugen in der Verknüpfung von Theorie, Experiment und Messung Erkenntnisse. Dabei können komplexe Systeme äußerst sensibel auf geringste Veränderungen in den Parametern oder den exogenen Größen reagieren, die zu erheblichen Abweichungen in der Dynamik des Systems im Vergleich zum ursprünglich erzielten Ergebnis führen können.

Vor diesem Hintergrund erklärt sich die besondere Bedeutung von Verifikation und insbesondere Validierung. Simulation als neues Instrument wissenschaftlicher Erkenntnisproduktion erfordert auch neue Praktiken der Prüfung: Während Hypothesen und Prognosen anhand von Beobachtungen und Experimenten „realweltlich“ überprüft werden können, transferiert die Simulation die Überprüfung vielfach ins „Virtuelle“. Denn ein Teil der mittels Simulation erzeugten Prädikationen können nicht länger durch eine Überprüfung in der Wirklichkeit, sondern allein durch alternative Simulationsansätze auf ihre Angemessenheit hin geprüft werden. In diesem Sinne werden Simulation und Simulationswissenschaft in letzter Konsequenz einen Teil der Erkenntnisproduktion in eine Ebene oberhalb empirischer Beobachtungen und analytisch behandelbarer Modelle transportieren, so dass diese Form der Wissenschaft „zunehmend im Semiotischen digitaler Rechner und computerbasierter Messinstrumente stattfindet“. |¹³ Die Implikationen von Modellierung und Simulationen als neuer Form wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns bedürfen wissenschaftstheoretischer Reflexion insbesondere hinsichtlich von Unsicherheiten und Überprüfbarkeit.

A.III ZUM POTENZIAL VON SIMULATION

III.1 Funktionen von Simulation

Heute übernehmen Simulationen vielfältige Funktionen im Forschungs- und Entwicklungsprozess sowie in der industriellen Anwendung. Sie erlauben (1),

| ¹² Vgl. hierzu: Gramelsberger, G.: Computersimulationen – Neue Instrumente der Wissensproduktion, in: Mayntz, R.; Neidhardt, F.; Weingart, P.; Wengenroth, U. (Hrsg.): Wissensproduktion und Wissenstransfer. Wissen im Spannungsfeld von Wissenschaft, Politik und Öffentlichkeit. Bielefeld: transcript 2008, S. 75-95, hier S. 87, und vgl. auch dies.: „Simulation - Analyse der organisationellen Etablierungsbestrebungen der epistemischen Kultur des Simulierens am Beispiel der Klimamodellierung“, in: Halfmann, J.; Schützenmeister, F. (Hrsg.): Organisationen der Forschung. Der Fall der Atmosphärenwissenschaft, Wiesbaden 2009, S. 30-52, S. 36.

| ¹³ Vgl. hierzu auch Gramelsberger (2008), a. a. O. S. 92.

mögliche Szenarien für die Zukunft zu entwerfen und Wechselwirkungen verschiedenster Faktoren über eine Vielfalt von Skalen in Raum und Zeit zu untersuchen. Damit verbunden ist die Sensibilisierung (*awareness*) der gesellschaftlichen Entscheidungsträger für bestimmte Phänomene und Einflussgrößen. In vielen Fällen werden Simulationen explizit mit dem Ziel durchgeführt, Interventionsmöglichkeiten zu erarbeiten oder zu prüfen, welche Folgen das Unterlassen möglicher Interventionen in der Zukunft hat. |¹⁴ Darüber hinaus können Simulationen (2) der Theoriebildung dienen. So werden beispielsweise quantentheoretisch basierte Simulationen durchgeführt, um verbesserte molekulardynamische oder thermodynamische Modelle zur Vorhersage von physikalisch-chemischen Materialeigenschaften zu entwickeln und zu parametrisieren. Simulationen können (3) zur Optimierung bestehender Produkt- oder Prozesssysteme wie auch realwissenschaftlicher Experimente eingesetzt werden. Beispielhafte Anwendungen sind die dynamische Simulation und Optimierung des An- und Abfahrens von Kraftwerken, die rechnergestützte Analyse und Optimierung des Flughafenbetriebs oder die Analyse verschiedener Applikationsstrategien von Pflanzenschutzmitteln. Simulationen dienen (4) der Analyse großer Datenmengen, um ein tieferes Verständnis der gemessenen Daten und ihrer Zusammenhänge zu gewinnen. Häufig sollen auf diese Weise Muster in den Daten oder Zusammenhänge zwischen Größen entdeckt werden, die als Grundlage der anschließenden Modellidentifikation, also der Ermittlung von Modellstrukturen und deren Parametern, genutzt werden können. In diesem Sinne ist Simulation mit dem Thema *Big Data* verwoben. Simulationen sind zudem (5) Grundlage der Präsentation und Kommunikation komplexer Zusammenhänge, beispielsweise im Zuge der Visualisierung einer chemischen Reaktion im Klassenzimmer. Schließlich werden (6) sogenannte Echtzeitsimulationen |¹⁵ zur

|¹⁴ So wurde zum Beispiel der Zusammenhang der Schädigung der Ozondecke durch die Emission von Fluorchlorkohlenwasserstoffen (FCKW) und das gesundheitliche Gefährdungspotenzial durch zunehmende UV-Strahlung zunächst durch Simulationen untersucht und damit die Wirksamkeit internationaler politischer Umweltkonventionen bestätigt (vgl. Slaper, H. et al.: Estimates of ozone depletion and skin cancer incidence to examine the Vienna Convention achievements, in: *Nature*, Vol. 384, 21 November 1996, S. 256-258). Ein Beispiel für die Untersuchung über mögliche Folgen politischer Entscheidungen hinsichtlich der Steuerung von CO₂-Emissionen zur Vermeidung von globalen Umweltschäden bieten interdisziplinäre Klima-, Umwelt- und sozialwissenschaftliche Simulationen (vgl. Arnell, N. W. et al.: A global assessment of the effects of climate policy on the impacts of climate change, in: *Nature Climate Change*, Vol. 3, May 2013, S. 512-519).

|¹⁵ Bei sogenannten Echtzeitsimulationen kommt es darauf an, die „virtuelle“ Zeit des Simulationsvorgangs möglichst mit der „realen“ Zeit zur Deckung zu bringen. Wenn der Pilot beispielsweise den Steuerknüppel des Flugsimulators bewegt, muss der Simulator nicht nur in der gleichen Weise sondern auch in der gleichen Zeit wie das physische Flugzeug reagieren. In den meisten anderen Simulationen ist die „virtuelle“ Zeit des Simulationsvorgangs nicht an die Zeit des realen Systems gebunden. Wird beispielsweise die Entwicklung einer Population simuliert, verfolgt die Simulation auch das Ziel, diese lange, zum Teil sogar Jahrzehnte dauernde Entwicklung sehr schnell, möglichst in wenigen Minuten zu berechnen.

Schulung unter anderem von Anlagenfahrern in Kraftwerken und Chemiewerken oder zum Pilotentraining eingesetzt.

III.2 Bedeutung von Simulation

Aufgrund dieser funktionalen Vielfalt und des breit gefächerten Einsatzes steigt die Bedeutung von Simulation in Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft. Insbesondere zwei Entwicklungen tragen darüber hinaus zur Steigerung der Bedeutung und der Attraktivität von Simulationen bei.

Erstens werden Simulationen immer leistungsfähiger: Aufgrund der steigenden Rechnerleistungen und der Weiterentwicklung numerischer Algorithmen können Simulationen immer schneller durchgeführt werden und erlauben zunehmend exaktere „Abbilder“ immer komplexer werdender Systeme bei immer verlässlicheren Prognosen ihrer Entwicklung.

Zweitens wird der Einsatz von Simulationen – nicht nur als Ergänzung sondern auch als Ersatz für bestimmte Experimente – immer attraktiver, weil selbst sehr leistungsfähige Simulationsexperimente deutlich kostengünstiger als Realexperimente sind. So ersetzen mittlerweile Simulationsexperimente allein aus Kostengründen entsprechende Laborexperimente: möglicherweise können in Zukunft auch Sicherheitsanalysen wie zum Beispiel die Prüfung von Bremsleistungen unter Rückgriff auf Simulationen erfolgen.

Diese Leistungssteigerung ermöglicht es, in allen Wissenschaften wie auch in Wirtschaft und Gesellschaft immer komplexer werdende Fragen zu bearbeiten. Viele dieser Fragen lassen sich nicht allein empirisch, (real-)experimentell oder theoretisch bearbeiten. Klimawandel, Ausbreitung von Krankheiten, nicht linear zusammenwirkende Prozesse in der industriellen Produktion oder demografische Entwicklungen sind komplexe Fragestellungen, bei denen es insbesondere auf ein Verständnis der zeitlichen und räumlichen Dynamik und der Interaktion vieler verschiedener Faktoren auf unterschiedlichen Skalen ankommt. Zum Teil eröffnen sie einen experimentellen Zugang zu diesen Fragestellungen, der – wie zum Beispiel im Fall des Klimawandels, der Wirkstoffforschung oder des Katastrophenschutzes – ohne Computersimulationen nicht möglich wäre.

Aufgrund dieser Entwicklung haben sich in Deutschland unterschiedliche Ausbildungsangebote entwickelt, wenn auch nicht systematisch und flächendeckend. Gerade in ingenieurwissenschaftlichen Fächern werden auf Bachelorebene simulationstechnische Ausbildungsanteile vermittelt und auf Masterebene eigene Vertiefungen angeboten. Auch in einigen neurowissenschaftlichen oder umweltwissenschaftlichen Studiengängen wird simulationsbasiertes Arbeiten vermittelt. Eigene simulationswissenschaftliche Studiengänge hingegen werden nur an wenigen Hochschulen wie beispielsweise am *Stuttgart Research Centre for*

Simulation Technology (SRC SimTech), das ein Bachelor- und Masterprogramm in *Simulation Technology* entwickelt hat, angeboten. Eine deutliche Förderung hat das simulationswissenschaftliche Feld im Kontext der Exzellenzinitiative erfahren. Nicht nur Exzellenzcluster und Graduiertenschulen |¹⁶ sondern auch zwei der geförderten Zukunftskonzepte haben Simulation ins Zentrum gerückt. |¹⁷

Deutschland gehört heute zu den weltweit führenden Standorten der simulationsgestützten Wissenschaften und der Simulationswissenschaft. |¹⁸ Dies hängt nicht allein mit Forschung und Lehre zusammen, sondern wird auch durch entsprechende Kooperationen mit der Wirtschaft befördert. In vielen Bereichen der Industrie ist simulationswissenschaftliches Arbeiten eine Selbstverständlichkeit, die nicht allein im Forschungs- und Entwicklungsbereich zum Tragen kommt, sondern auch in der Produktion, der Logistik oder im Vertrieb. Die solche Technologien bestimmenden Aufbau- und Ablaufsysteme werden immer komplexer und sind damit ohne eine rechnergestützte Analyse, die überwiegend auf Simulationen zurückgreift, nicht mehr zu durchdringen.

|¹⁶ So stehen simulationswissenschaftliche Fragen in zwei von 43 Exzellenzclustern („Ozean der Zukunft“ an der Universität Kiel und „*Origin and Structure of the Universe*“ an der Technischen Universität München) sowie in drei von 45 Graduiertenzentren („Aachener Graduiertenschule für computergestützte Natur- und Ingenieurwissenschaften“ an der RWTH Aachen, die „*Graduate School of Excellence in Computational Engineering*“ an der TU Darmstadt und die „Heidelberger Graduiertenschule der mathematischen und computergestützten Methoden für die Wissenschaften“ an der Universität Heidelberg) im Mittelpunkt.

|¹⁷ Im Konzept „*RWTH 2020: Meeting Global Challenges*“ ist einer der fünf Forschungsbereiche der *Jülich Aachen Research Alliance* (JARA) eine Kooperation der RWTH mit dem Forschungszentrum Jülich, der Bereich „Simulationswissenschaften mit Hochleistungsrechnern“. Im Konzept „*Heidelberg: Realising the Potential of a Comprehensive University*“ vernetzt das simulationswissenschaftlich arbeitende „Interdisziplinäre Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen“ (IWR) die unterschiedlichen Forschungsfelder an der Universität Heidelberg.

|¹⁸ Ein Indiz für diese führende Stellung liefern bibliometrische Analysen. Demnach firmierte Deutschland Ende des letzten Jahrzehnts bei der Analyse der Publikationstätigkeit als drittstärkste Einzelnation im Vergleich mit den USA und ausgewählten europäischen und asiatischen Ländern (den EU12 und den fünf „*Asian tigers*“ AS5 (China, India, Singapore, South Korea und Taiwan)) (vgl. World Technology Evaluation Center, Inc. (WTEC), Panel Report on International Assessment of Research and Development in Simulation-based Engineering and Science, 2009, hier S. 385). Die Datengrundlage waren Originaldaten des *Science Citation Index* (SCI) der Jahre 1996-2005. Zusätzlich wurden einige Daten von *Web of Science* (WoS) verwendet.

B. Analysen und Empfehlungen

Der Wissenschaftsrat ist von dem hohen Potenzial von Simulation und Simulationswissenschaft für den Fortschritt in einer Vielzahl von wissenschaftlichen Feldern und für Innovationen in Wirtschaft und Gesellschaft überzeugt. Die Empfehlungen zielen darauf ab, dieses Potenzial in den einzelnen Fachwissenschaften sowie in der Simulationswissenschaft durch die Schaffung adäquater Strukturen im Wissenschaftssystem in Deutschland weiterzuentwickeln.

Sein besonderes Augenmerk richtet der Wissenschaftsrat auf die Ausbildungssituation. Denn trotz des großen Potenzials von Simulation als neues Erkenntnisinstrument lassen sich weltweit Defizite in der Ausbildung beobachten. |¹⁹ Vor diesem Hintergrund werden zunächst Empfehlungen zur Förderung von Lehre und Ausbildung (B. I) entwickelt. Anschließend setzt sich der Wissenschaftsrat mit Fragen der Infrastruktur (B. II) und Karriereperspektiven in diesem Feld (B. III) auseinander. Abschließend erarbeitet er Vorschläge für Strukturen von simulationsgestützten Wissenschaften und Simulationswissenschaft an Hochschulen (B. IV) sowie Empfehlungen zur Förderung von Forschung und Transfer (B. V).

|¹⁹ 2009 hatte eine breit angelegte, auf Basis von 59 Vor-Ort-Besuchen in Europa und Asien erarbeitete US-Studie die zentrale Herausforderung für den internationalen Raum formuliert: „*Demand exceeds supply. There is a huge demand in the European Union and Asia for qualified SBE&S (d. h. Simulation-Based Engineering and Science) students who get hired immediately after their MSc degrees by industry or finance*“ (World Technology Evaluation Center, Inc. (WTEC), Panel Report on International Assessment of Research and Development in Simulation-based Engineering and science, 2009, S. XXXVII).

Die Hochschulen stehen aufgrund der hohen Dynamik im simulationswissenschaftlichen Feld vor der Herausforderung, auf unterschiedlichen Ebenen – je nach Situation des Faches und je nach Profil der Hochschule – ein angemessenes Ausbildungsangebot zu erarbeiten und dynamisch weiterzuentwickeln. Dabei können die Hochschulen aufgrund der jungen Geschichte des Feldes nicht auf einen großen Erfahrungsschatz zurückgreifen. Erst Mitte des vergangenen Jahrzehnts haben die ersten Studierenden einen fachlich einschlägigen Abschluss (Diplom, Bachelor oder Master) erworben.

Derzeit sind die unterschiedlichen Studienangebote auch terminologisch nicht immer deutlich und systematisch voneinander zu unterscheiden. Erst ein Blick in das jeweilige Curriculum offenbart die Ausrichtung und Schwerpunktsetzungen des jeweiligen Studiengangs. Der Wissenschaftsrat sieht hier eine Aufgabe der Fachbereiche und Fachgesellschaften, zu einer curricularen und einer terminologischen Klärung beizutragen.

Angesichts der Bedeutung und der zu beobachtenden dynamischen Entwicklung von Simulation hält der Wissenschaftsrat den Ausbau eines differenzierten Studienangebots für dringend erforderlich. Dabei sollte unabhängig von den im Einzelnen formulierten differenzierten Ausbildungsangeboten (vgl. I.1 – I.5) der gesamte Simulationsprozess (vgl. Abbildung 1) in der Ausbildung vermittelt werden. Zu dieser umfassenden Vermittlung gehört es auch, den Studierenden einen reflektierten und kritischen Umgang mit Modellbildung und Simulation zu vermitteln, damit ihnen die mit der Simulation verbundene besondere Form der wissenschaftlichen Erkenntnisproduktion (vgl. A.II) einschließlich der damit einhergehenden Chancen und Risiken deutlich wird. |²⁰ Dies beginnt bereits bei der Vermittlung von Modellierungsmethoden und eines fundierten Modellverständnisses, in der auch die Limitierungen und inhärenten Vereinfachungen der jeweiligen Modelle und die Grenzen ihrer Übertragbarkeit mit reflektiert werden sollten. Zugleich sollten Fragen der Verifizierung der Simulationssoftware und der Validierung der Simulationsmodelle explizit mit berücksichtigt werden. Darüber hinaus gilt es, die der Modellbildung und Simulation inhärenten Unsicherheiten und Risiken zu kommunizieren und zu reflektieren. Diese reflexive und kritische Kompetenz im Umgang mit Simulation ist entscheidend, um das Potenzial von Simulationen richtig einschätzen zu können. Eine solche Einschätzung ist von unmittelbarer Relevanz beispielweise für die

|²⁰ Vgl. dazu auch: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen in Deutschland bis 2020, Berlin 2012, v. a. S. 36.

medizinische Praxis oder für die Entwicklung technischer Produkte. Diese Empfehlung richtet sich an alle Ausbildungsangebote – unabhängig davon, ob sie im Rahmen einer Fachwissenschaft, auf Bachelor- oder Masterniveau oder aber im Rahmen eines Studiengangs „Simulationswissenschaft“ realisiert werden.

Im Folgenden werden nunmehr Leitlinien für unterschiedliche Ausbildungsangebote entwickelt, ohne ein konkretes Curriculum für die einzelnen Studiengänge zu entwerfen, denn dieses bedarf der jeweils fachspezifischen Ausgestaltung.

I.1 Modul „Simulationswissenschaft“ in grundständigen Studiengängen

In bestimmten Fächern aus dem natur- und ingenieurwissenschaftlichem Bereich ist die Vermittlung von simulationswissenschaftlichen Grundkompetenzen bereits Bestandteil der Ausbildung und gehört in Einzelfällen zum Kern dieser Fächer – vergleichbar der Statistik, die seit einigen Jahrzehnten zum Kernbestandteil und damit zur Pflichtlehre in vielen Fächern zählt. Allerdings ist selbst in den Ingenieurwissenschaften, wo Simulation in der industriellen Praxis routinemäßig angewandt wird, ein solches Angebot keineswegs flächendeckend implementiert. Der Wissenschaftsrat hält es aufgrund des Potenzials und der Dynamik im Feld der Simulation für notwendig, die Vermittlung simulationsgestützten Arbeitens als Pflichtmodul flächendeckend in die grundständige Bachelorausbildung der natur- und ingenieurwissenschaftlichen Fächer zu integrieren. Er empfiehlt allen solchen Fächern eine Verankerung als Pflichtveranstaltung, in denen die Forschung routinemäßig mit komplexen Modellen operiert. Darüber hinaus sollten auch andere Fächer prüfen, ob sie in Zukunft simulationswissenschaftliche Anteile in das grundständige Curriculum von Bachelorstudiengängen als Pflicht- oder als Wahlveranstaltung integrieren können.

Perspektivisch wird mit der Integration simulationswissenschaftlicher Ausbildungsteile ein Mehrwert für eine Vielzahl von Fächern geschaffen – von den Umweltwissenschaften über die Medizin bis hin zur Ökonomie, um einige Beispiele zu nennen. Einige Hochschulen haben bereits simulationswissenschaftliche Module auch in umweltwissenschaftlichen Studiengängen integriert, so zum Beispiel im Rahmen des Masterstudiengangs „*Earth System Science*“ (M.Sc.) an der Universität Hohenheim |²¹, oder – seltener noch – in den Wirtschafts- und Sozialwissenschaften.

Die Studiengänge sollten dadurch jedoch nicht überfrachtet und/oder die Studienzeit verlängert werden. Daher empfiehlt der Wissenschaftsrat, mit der In-

|²¹ <https://www.uni-hohenheim.de/78628>, Abruf vom 06.06.2014.

tegration eines Moduls „Simulationswissenschaft“ gleichzeitig auch die mathematische und informatische Grundausbildung so umzuorientieren, dass sie den simulationswissenschaftlichen Kompetenzaufbau unterstützt.

An Simulation interessierte Studierende fordern vielfach ein, gezielter bezogen auf ihr Fach theoretisch ausgebildet zu werden. Es ist dabei entscheidend, die mathematische, informatische und simulationswissenschaftliche Grundausbildung mit den in den Fachwissenschaften vorhandenen Fragestellungen und Methoden zu verzahnen und insbesondere die simulationswissenschaftliche Grundausbildung auf die Anforderungen der Modellbildung auszurichten. Lehrende aus dem jeweiligen Fach können die Relevanz dieser Methoden für Ausbildung, Forschung und fachnahe Anwendungen sowie für Berufsbilder anhand von konkreten Beispielen vermitteln und dadurch vermehrt Studierende für simulationswissenschaftliches Arbeiten gewinnen. Die Integration eines solchen Moduls in grundständige Studiengänge ist auch vor dem Hintergrund wünschenswert, dass entsprechende Kenntnisse bisher kaum in der Schule vermittelt werden. Darüber hinaus kann ein Kontakt mit Simulationswissenschaft in einem grundständigen Studiengang auch den Wunsch nach einer Vertiefung in der Masterphase wecken.

1.2 Bachelor in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft

Neben der Integration eines simulationswissenschaftlichen Moduls in grundständige Ausbildungsgänge sollten Bachelorstudiengänge mit einem entsprechenden simulationswissenschaftlichen Schwerpunkt insbesondere in den Natur- und Ingenieurwissenschaften entwickelt werden. Dabei sollte auch hier der fachwissenschaftliche Kompetenzaufbau mit der vertieften Vermittlung simulationswissenschaftlicher Kompetenz verzahnt werden. Ziel ist es, ein grundsätzliches Verständnis für Problemlösungen in der Fachwissenschaft mittels eines simulationswissenschaftlichen Zugangs zu gewinnen. Zum Kern eines solchen Studiengangs sollten mehrere Pflichtmodule gehören, die die gesamte Bandbreite des Simulationsprozesses (vgl. Abbildung 1) abdecken. Im Wahlpflichtbereich ließen sich dann sowohl simulationswissenschaftliche als auch fachwissenschaftliche Vertiefungen anschließen.

Simulationsgestützte Studienangebote können auch Teil eines mathematischen oder informatischen Bachelorstudienganges sein, um aus der jeweiligen theoretischen Perspektive einen Zugang zur Simulationswissenschaft zu eröffnen.

Dabei ist zu berücksichtigen, dass nicht jede Hochschule einen Studiengang in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft einrichten kann. Denn dies hängt nicht allein vom Entwicklungs- und Forschungsstand der jeweiligen Disziplin ab. Vielmehr ist ein entsprechender Ausbau nur sinnvoll, wenn er ins Profil der Hochschule bzw. der Fakultät passt, d. h. mit einer entsprechenden Schwerpunktsetzung im Fach und/oder in der Hochschule einhergeht. Dies spiegelt

sich in der Regel in einer entsprechenden Kompetenz der Professorinnen bzw. Professoren wider.

Für eine Übergangs- bzw. Startphase, in der sich ein Fach oder eine Fakultät perspektivisch zu einer entsprechenden Schwerpunktsetzung entschließt, ohne dass bereits simulationswissenschaftlich ausgerichtete Professuren vorhanden sind, sollte geprüft werden, ob die relevanten Expertisen an der eigenen Hochschule oder über Kooperationen mit anderen Hochschulen bzw. außeruniversitären Einrichtungen eingeholt werden können. Darüber hinaus empfiehlt der Wissenschaftsrat den Fachbereichs- und Hochschulleitungen, den Aufbau simulationswissenschaftlicher Kompetenz zu unterstützen. Im Sinne einer strategischen Berufungspolitik können Hochschulleitungen fach- und fakultätsübergreifende Stellenpools bilden, die sie für eine simulationswissenschaftliche Profilierung der Hochschule nutzen können. Dadurch können auch diejenigen Fächer rasch entsprechende Angebote entwickeln, die bisher nicht über eine eigene Professur mit einem simulationswissenschaftlichen Schwerpunkt in ihrem Fach verfügen.

Im Anschluss an einen Bachelor in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft sollte sowohl der Übertritt in einen Master der entsprechenden Fachwissenschaft als auch in einen Master in Simulationswissenschaft möglich sein.

1.3 Bachelor in Simulationswissenschaft

Die Einrichtung eigener simulationswissenschaftlicher Studienangebote ist in Deutschland nur an wenigen Standorten insbesondere an Technischen Universitäten erfolgt. Als eine der ersten Universitäten in Europa bot die ETH Zürich Ende der 1990er Jahren einen entsprechenden grundständigen Studiengang an.

Ziel des Bachelorstudiengangs in Simulationswissenschaft sollte eine fundierte Methodenkompetenz mit Blick auf den gesamten Simulationsprozess sein. Dies schließt die Modellbildung (Abstraktion und Umsetzung eines fachwissenschaftlichen Problems zum Beispiel in Differenzialgleichungen), die Entwicklung von Simulationstools sowie die Durchführung von Simulationen einschließlich der Verifikations- und Validierungsprozesse ein.

Zu den Inhalten, die zu einer fundierten simulationswissenschaftlichen Ausbildung gehören, zählen sowohl mathematische Grundkenntnisse (Analysis, lineare Algebra, nichtlineare Gleichungen, Differenzialgleichungen, Wahrscheinlichkeitstheorie, Statistik) als auch Grundkenntnisse der Informatik (Programmierung, *Software Engineering*, *High Performance Computing*, Parallelisierung). Dabei sollte darauf geachtet werden, dass die Studierenden lernen, sowohl Programme und Software selbst zu entwickeln als auch mit komplexeren *Codes*, wie sie beispielsweise in der Industrie zur Anwendung kommen, vertraut zu werden. Die Verankerung in einem oder zwei Anwendungsfächern ist essentiell

und sollte über Pflichtmodule in hinreichender Tiefe realisiert werden. Weitere Wahlpflichtmodule in den jeweiligen Fachwissenschaften sind wünschenswert.

Im Unterschied zu einem Bachelorstudiengang in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft bilden die mathematischen, informatischen und simulationswissenschaftlichen Grundlagen in ihrer ganzen Breite bei möglichst großer Tiefe den Kern der Ausbildung. Das Anwendungsfach im Umfang von etwa einem Viertel bis einem Drittel des gesamten Studienangebotes dient der substantiellen Integration von Methoden- und Problemlösungskompetenz. Ein Bachelorstudiengang, der ohne Rückgriff auf ein Anwendungsfach konzipiert wird, erscheint nicht zielführend. Zu den verbindlichen Studienzielen sollte die Vermittlung von Problembewusstsein bezüglich der Aussagekraft von Modellen und deren Validierung zählen. Auch die Vermittlung von Kenntnissen zur Software- und Datensicherheit sowie zu *intellectual property rights* gehören zu den verbindlichen Studieninhalten. Dabei sollten diese Inhalte in ihrer internationalen Dimension verortet werden.

Auf einen simulationswissenschaftlichen Bachelor kann ein Master in Simulationwissenschaft oder in ein fachwissenschaftlich anschlussfähiger Master folgen. Der fachwissenschaftlich ausgerichtete Master kann auf die Anwendung oder aber auf den Ausbau einschlägiger methodischer Kompetenzen in Mathematik (z. B. Numerische Analysis partieller Differenzialgleichungen) oder Informatik (z. B. *High Performance Computing* (HPC)) ausgerichtet sein.

1.4 Master in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft

Der Eintritt in einen Master in einer simulationsgestützten Fachwissenschaft sollte sowohl im Anschluss an einen simulationswissenschaftlich, mathematisch oder informatisch orientierten Bachelor als auch im Anschluss an einen Bachelor in der jeweiligen Fachwissenschaft möglich sein. Schon jetzt wurden auch in den Lebenswissenschaften, insbesondere in den Neurowissenschaften, entsprechende Studiengänge auf Masterebene entwickelt, so zum Beispiel der als Kooperationsstudiengang der Technischen Universität Berlin und der Humboldt-Universität zu Berlin angebotene Master in *Computational Neuroscience* (M.Sc.) |²².

Um den Übergang aus den unterschiedlichen Bachelorstudiengängen in den simulationsorientierten Masterstudiengang zu erleichtern, bedarf es in der Regel einer Reihe von Lehrangeboten, welche die simulationswissenschaftlichen Grundlagen vermitteln. Einerseits wird den Studierenden dadurch der Einstieg erleichtert, andererseits werden die Vorkenntnisse der Studierenden aus den

²² Vgl. <https://www.bccn-berlin.de/Graduiertenprogramm/Masterprogramm/>, Abruf vom 02.06.2014.

unterschiedlichen Fachwissenschaften auf einen gemeinsamen Stand gebracht, so dass eine homogenere Basis für die nachfolgende gemeinsame vertiefende Lehre vorhanden ist. Zudem sollten für die Masterabschlüsse Angebote entwickelt werden, Forschungsarbeiten unter Einsatz simulationswissenschaftlicher Methoden durchzuführen.

1.5 Master in Simulationswissenschaft

Ein Master in Simulationswissenschaft sollte an einen Bachelorabschluss in einer Fachwissenschaft, der Mathematik oder Informatik oder aber an einen simulationswissenschaftlichen Bachelorabschluss anschließen. Die Ausgestaltung des Masterprogramms ist standortabhängig. Je nach Profil der Hochschule oder auch der vorhandenen Infrastruktur lassen sich unterschiedlich profilierte Masterprogramme entwickeln. Ziel eines solchen Masters sollte grundsätzlich das selbstständige Arbeiten mit einer Vielzahl von Methoden der Simulationswissenschaft sein. Ein besonderer Schwerpunkt sollte in dieser Ausbildungsphase auf die Modellbildung und die Softwareprogrammierung gelegt werden. Zugleich sollte die selbstständige kritische Analyse des Simulationsprozesses sowie die Kommunikation der Ergebnisse mit den damit verbundenen Unsicherheiten in einem solchen Masterstudiengang vermittelt werden. Ferner sollten Daten- und Softwaresicherheit sowie das Spannungsfeld zwischen internationalen Kooperationen und *intellectual property rights* im Studium in geeigneter Form thematisiert werden. Für die Abschlussarbeit sollten vielfältige Forschungsthemen einschließlich Methodenentwicklung angeboten werden.

Die Absolventinnen und Absolventen dieser Studiengänge sind auch im außerakademischen Arbeitsmarkt sehr nachgefragt. Allerdings ist es für die wissenschaftliche Weiterentwicklung des Feldes von Bedeutung, einen Teil von ihnen für eine wissenschaftliche Karriere zu gewinnen. Der Wissenschaftsrat sieht hier eine besondere Aufgabe der Hochschullehrerinnen und -lehrer, Kandidatinnen und Kandidaten, die entweder in einer Fachwissenschaft, in der Mathematik oder der Informatik mit einem Schwerpunkt in Simulation oder in Simulationswissenschaft abgeschlossen haben, auch für eine Promotion zu begeistern.

B.II INFRASTRUKTUR

Simulationsgestützte Vorhersagen haben über das Smartphone oder Navigationsgerät weitgehend unbemerkt Einzug in den Alltag vieler Menschen und über den Rechner in den Alltag von Industrie, Dienstleistung, Forschung und Entwicklung gehalten. Der Einsatz von Simulation setzt folglich nicht immer enorme Rechnerkapazitäten, wie sie im *High Performance Computing* (HPC) Bereich realisiert werden, voraus, sondern kann kontextabhängig über die gesamte Bandbreite der zur Verfügung stehenden Rechnerleistungen zu ausreichend

genauen und nützlichen Ergebnissen führen. Der Großteil der Simulationen wird auch in Forschung und Entwicklung an „normalen“ Rechnern durchgeführt, die heute natürlich deutlich leistungsfähiger sind als noch vor wenigen Jahren. Der Einsatz von HPC ist für die Lösung ausgewählter, extrem komplexer Fragestellungen allerdings unerlässlich. Diese Anwendungen sind von großer Bedeutung, weil häufig gerade sie zu den Durchbrüchen in der Forschung wesentlich beitragen.

Seit Beginn des 21. Jahrhunderts ist das Bewusstsein für die Bedeutung von Infrastrukturen für den wissenschaftlichen Fortschritt in unterschiedlichen Feldern deutlich gestiegen. Infrastrukturen werden als essentiell für die wissenschaftliche Entwicklung und die Wettbewerbsfähigkeit im Allgemeinen und nicht länger nur in besonderen Nischen verstanden. Mit diesem Bewusstseinswandel geht die Einsicht einher, dass Infrastrukturen nicht allein technische Einrichtungen wie Rechner, Speicher und Datennetze umfassen (vgl. B.II.1), sondern auch weitergehende Anforderungen hinsichtlich der Pflege und Entwicklung von Methoden und Software (vgl. B.II.2) sowie der Archivierung und Verfügbarkeit von Simulationsmodellen und -daten |²³ (vgl. B.II.3) damit verbunden sind. |²⁴ Vor diesem Hintergrund sind die Möglichkeiten des *Cloud-Computing* und entsprechende Dienste zu antizipieren und bei der Gestaltung der Infrastrukturen zu berücksichtigen.

II.1 Technische Einrichtungen

Die enorme technologische Entwicklung – von den immer leistungsstärkeren Tischgeräten bis hin zu den beständig wachsenden Höchstleistungsrechnern – bildet eine wesentliche Voraussetzung für den Erfolg von simulationsbasierter Wissenschaft. Dabei ist die Weiterentwicklung des Einsatzes von Simulationen in den unterschiedlichen Fachdisziplinen und der Simulationswissenschaft selbst auf die ganze Bandbreite von Rechnern und Rechenleistungen angewiesen. Es hängt von der Problemstellung und dem Anwendungskontext ab, auf welchen Typ von Rechner mit welcher Rechenleistung zurückgegriffen werden muss. Ein großer Teil der Simulationen kann an leistungsstarken Tischgeräten durchgeführt werden. In der Medizin beispielsweise zielen die Forschungen auf die Anwendung im klinischen Alltag und damit auch auf einen Einsatz von

|²³ Während man sich herkömmlich bei dem Begriff „Daten“ vielfach allein auf experimentelle Daten bezieht, hat sich mittlerweile jedoch die Rede von Simulationsdaten (*simulation data* oder *simulated data*) eingebürgert, wenn Ergebnisse oder Zwischenergebnisse eines Simulationsprozesses gemeint sind. Man spricht auch von *Simulation Data Management*.

|²⁴ Vgl. hierzu auch Wissenschaftsrat: Bericht zur wissenschaftsgeleiteten Bewertung umfangreicher Forschungsinfrastrukturvorhaben für die Nationale Roadmap (Pilotphase), Braunschweig 2013, v. a. S. 99 ff.

Simulationen an Tischgeräten des ärztlichen Personals. Komplexere Simulationen wiederum, wie beispielsweise in der Klimaforschung, den Materialwissenschaften oder der Biologie, benötigen Hoch- oder sogar Höchstleistungsrechner. Die Möglichkeiten zur Skalierung im Einsatz unterschiedlicher Rechnertypen sind für den Erfolg im Feld der Simulationen von großer Bedeutung.

Es ist entscheidend, dass der Zugang an Hochschulen zu den unterschiedlichen Rechnertypen grundsätzlich offen ist und auch der Lehre und Methodenentwicklung zur Verfügung steht. Mittelfristig kann möglichen Engpässen durch eine verbesserte Organisation und Finanzierung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern begegnet und vor allem durch eine gezielte Weiterentwicklung der für diesen Bereich notwendigen Algorithmen und Software entgegen gewirkt werden.

II.2 Entwicklung und Pflege von Methoden und Software

Die Entwicklung neuer Methoden und Software ist für das Feld der Simulation in seiner Breite ausschlaggebender als die Leistungssteigerung der Hardware. Nach dem Moore'schen Gesetz verdoppelt sich die Prozessorleistung alle zwei Jahre; verbesserte Algorithmen hingegen können nachgewiesenermaßen zu Beschleunigungen um einen höheren Faktor in vergleichbaren Zeitspannen führen.

Derzeit lässt sich weltweit beobachten, dass im Bereich der Hoch- und Höchstleistungsrechner ein Missverhältnis zwischen der Förderung von Investitionen in den „Hardware“-Bereich und der gezielten Förderung des Betriebs einschließlich der Entwicklung von Methoden, Algorithmen und Software besteht. Dabei sollte ein besonderes Augenmerk auf die Entwicklung von effizienten Algorithmen für massiv parallele Systeme im Hoch- und Höchstleistungsbereich gelegt werden. Ohne eine solche passgenaue Entwicklung von technischer Rechnerleistung sowie Modellen, Algorithmen und Software kann das Potenzial der Rechner, insbesondere der Hoch- und Höchstleistungsrechner, nicht effektiv genutzt und das Potenzial des simulationswissenschaftlichen Feldes nicht ausgeschöpft werden.

Hinzu kommt, dass auch die Fachwissenschaftlerinnen und Fachwissenschaftler auf Beratung sowohl bei der Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechner als auch bei der anschließenden Archivierung und Bereitstellung von Simulationsdaten angewiesen sind. Dies unterstreicht die Notwendigkeit, die Förderung in Zukunft auf „Paketlösungen“ hin zu orientieren, die eine Förderung der technischen Infrastrukturen immer mit der Förderung des entsprechenden Fachpersonals zur weiteren Entwicklung sowie zu Betrieb und Nutzung bzw. Nutzungsunterstützung der Infrastrukturen mit einschließen. Die Investition in „Köpfe“ ist der entscheidende Faktor für die zukünftige Entwicklung des Feldes und sollte prioritär behandelt werden. Vor diesem Hintergrund besteht auch der

Bedarf, in diesem Feld vermehrt akademische Karrierewege zu eröffnen (vgl. B.III.2).

II.3 Archivierung und Verfügbarkeit von Simulationsmodellen und -daten

Die Archivierung und Verfügbarkeit von Daten aus Simulationen dient nicht nur der Qualitätssicherung von Erkenntnissen, sondern ist eine wichtige Anforderung an die Weiterentwicklung des Feldes, z. B. um Daten mehrfach und für verschiedene Fragestellungen verwenden und Validierungen von Simulationsmodellen vornehmen zu können. In den „Empfehlungen zur Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen in Deutschland bis 2020“ hat der Wissenschaftsrat übergreifende Empfehlungen zum Umgang mit Informationsinfrastrukturen und zum Datenmanagement entwickelt. |²⁵ Das Management von Simulationsdaten und -modellen wirft jedoch spezifische Fragen auf, die beispielsweise über Fragen von *open access* bzw. *open data* hinausgehen.

Management und Bereitstellung von Simulationsdaten sind – im Unterschied zu gemessenen Daten der ‚realen‘ Welt – immer an das zugrundeliegende Simulationsmodell und an die in den Simulationsexperimenten gewählten Bedingungen gebunden. Simulationsdaten sind vielfältig, können enorm große Mengen umfassen und stammen oft aus unterschiedlichen wissenschaftsfeldspezifischen Simulationswerkzeugen. Daher liegen sie zumeist in verschiedenen Formaten vor. In der industriellen Entwicklung von Fahrzeugen muss beispielsweise sichergestellt werden, dass Simulationsdaten aus den Bereichen numerische Strömungsmechanik (*Computational Fluid Dynamics* (CFD)), *Crash Tests* und *Noise-Vibration-Harnesh* (NVH)-Untersuchungen – alle drei in unterschiedlichen Formaten) zusammengeführt werden können. Die Simulationsdaten müssen für ihre effektive Nutzung wiederum mit Messdaten verknüpft werden, was die Anforderungen hinsichtlich Kompatibilität und Überführbarkeit der unterschiedlichen Formate noch erhöht.

Für die Archivierung und Verfügbarkeit von Simulationsdaten sind mehrere Herausforderungen zu bewältigen: Zunächst können nicht alle Simulationsdaten aus der enorm großen Datenmenge, die im Zuge von Simulationen produziert werden, archiviert werden. Es bedarf eines Selektionsprozesses, in dem entschieden wird, welche Daten bei Bedarf nachberechnet werden müssen und welche besser gespeichert werden sollten. Dabei ist es Aufgabe der jeweiligen wissenschaftlichen Fachgemeinschaft, sich über Kriterien für die Auswahl von

|²⁵ Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen in Deutschland bis 2020, Berlin 2012, v. a. S. 53 ff.

zu speichernden „wertvollen“ Simulationsdaten zu verständigen und einen Prozess zur Auswahl der Daten zu organisieren. Einige Fachgemeinschaften haben dies bereits begonnen. |²⁶ Der Wissenschaftsrat begrüßt einen solchen Prozess und empfiehlt sowohl den Fachgemeinschaften als auch den Trägern von Informationsinfrastrukturen, sich über Kriterien und Prozesse einer solchen Auswahl zu verständigen. |²⁷

Die Bereitstellung und Wiederverwendung von Simulationssoftware und -modellen steht vor besonderen Herausforderungen, weil hier nicht nur die softwaretechnische Kompatibilität und Interoperabilität sichergestellt, sondern insbesondere auch die zugrunde liegenden Modellannahmen nachvollziehbar dokumentiert werden müssen. |²⁸

Darüber hinaus müssen für eine weitere Verwendung von Simulationsdaten die Metadaten des gesamten Prozesses dokumentiert werden. Diese Dokumentation stellt aufgrund der Komplexität des Simulationsprozesses – von der Modellbildung bis zur Dateninterpretation – eine besondere Herausforderung dar. Im Simulationsprozess sind die verwendeten Modelle, Algorithmen und Implementierungen sowie die wählbaren Parameter und Konfigurationsdaten zu dokumentieren, um die Qualität der Ergebnisse des durchgeführten Simulationsprozesses bewerten zu können. Hierfür sollten die wissenschaftlichen Fachgemeinschaften in enger Zusammenarbeit mit simulationswissenschaftlichen Expertinnen und Experten Standardisierungen entwickeln, die nicht nur die Datenformate (Syntax), sondern auch die für eine fundierte Interpretation nötige Bedeutung der Daten (Semantik) festlegen. Es ist dabei auch empfehlenswert, geeignete Standards und gegebenenfalls *Targets* (Datensätze, Experimente, Ringversuche) für eine Validierung von Simulationsmodellen in Kooperation mit übernationalen Konsortien zu vereinbaren. |²⁹

|²⁶ Vgl. zum Beispiel http://badc.nerc.ac.uk/data/BADC_Model_Data_Policy.pdf (Abruf vom 12.02.2014) und die dort entwickelte *policy* zur Archivierung von Simulationsdaten im Rahmen des britischen *Natural Environment Research Council* (NERC).

|²⁷ Der Rat für Informationsinfrastrukturen, dessen Förderung für eine Pilotphase von vier Jahren gesichert ist, hat ein umfangreiches Aufgabenspektrum (*Hosting* und Langzeitarchivierung, digitale Transformation und kulturelles Erbe, Unterstützung von Selbstorganisationsprozessen in der Wissenschaft, Förderung der Vernetzung entsprechender Infrastruktureinrichtungen etc.) zu bewältigen.

|²⁸ Entsprechende Lösungsvorschläge sind im Kontext der Simulation verfahrenstechnischer Prozesse erarbeitet und industriell umgesetzt worden (siehe z. B. Braunschweig, B.; Gani R. (Hrsg.): *Software Architectures and Tools for Computer-Aided Chemical Engineering*, Vol. 11, Kap. IV, 4, Amsterdam 2002).

|²⁹ Vgl. <https://rd-alliance.org/> (Abruf am 09.07.2014).

Die Archivierung von Simulationsdaten, der für den Kontext der Simulationen relevanten Messdaten und der zugehörigen Metadaten sollte zentral ermöglicht werden, um die Nachhaltigkeit der Simulationen sowie die Nutzbarkeit von Erkenntnissen zu erhöhen. Auch eine dezentrale Archivierung ist möglich, wenn sie einen zentralen Zugriff über geeignete Benutzungsschnittstellen ermöglicht. Eine diesbezügliche Architekturentscheidung hängt sowohl von den institutionellen, infrastrukturellen wie auch von den fachwissenschaftlichen Randbedingungen ab.

B.III KARRIEREPERSPEKTIVEN IN DER WISSENSCHAFT

Absolventinnen und Absolventen mit simulationswissenschaftlichen Kompetenzen haben sehr gute Karriereaussichten auch außerhalb des Wissenschaftssystems: in der Industrie, im Dienstleistungsgewerbe oder in der Verwaltung. So werben beispielsweise Banken gezielt in naturwissenschaftlich orientierten Zeitschriften um Absolventinnen und Absolventen der Physik oder der Mathematik mit simulationswissenschaftlicher Expertise. Vielfach können sie schon vor Beendigung ihres Studiums mit einem Arbeitsangebot rechnen. Mit großer Wahrscheinlichkeit werden sich kurz- bis mittelfristig auch in weiteren wirtschaftlichen und gesellschaftlichen Bereichen sehr gute Perspektiven auftun, so zum Beispiel in der personalisierten Medizin oder im Finanzsektor, da man auch dort in Zukunft vermehrt simulationsbasiert arbeiten wird. Die Wissenschaft sieht sich einem harten Wettbewerb um die besten „Köpfe“ ausgesetzt.

Zugleich gibt es in diesem neuen, dynamisch sich entwickelnden Feld noch keine etablierten Karrierewege. Vor diesem Hintergrund bedarf es – gerade angesichts der Notwendigkeit, simulationsbasiertes Arbeiten in den Wissenschaften auszubauen – attraktiver Karriereperspektiven für den Nachwuchs innerhalb der Wissenschaft.

III.1 Wissenschaftlicher Nachwuchs

Solange sich noch keine klaren Profile herausgebildet haben, bietet die Spezialisierung in einem neuen methodisch orientierten Forschungsfeld wie der Simulationswissenschaft nicht nur Chancen, sondern auch Risiken für die einzelne Wissenschaftlerin oder den einzelnen Wissenschaftler. Wie auch in anderen *emerging* oder *converging fields* stehen Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler vor der Aufgabe, dass sie sich zumeist sowohl in ihrer Herkunftsdisziplin als auch in der Simulationswissenschaft als qualifiziert erweisen müssen, um erfolgreich zu sein. Strategisch lässt sich durch eine entsprechende inhaltliche Ausrichtung der Promotions- und der Postdoc-Phase – zunächst in der Herkunftsdisziplin und anschließend in der Simulationswissenschaft oder umgekehrt – aus Sicht des oder der Einzelnen damit umgehen. Hier sieht der

Wissenschaftsrat auch eine besondere Verantwortung der betreuenden Hochschullehrinnen und -lehrer, den wissenschaftlichen Nachwuchs auf diesem Weg zu beraten und zu unterstützen. Aufgabe der Hochschulen ist es, für Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler in diesem Feld *Tenure Track*-Professuren bereitzustellen.

Bisher existieren in den Fachwissenschaften erst wenige Professuren mit einem dezidiert simulationswissenschaftlichen Schwerpunkt. Es ist allerdings lediglich eine Frage der Zeit, so die Überzeugung des Wissenschaftsrates, bis sich simulationsbezogene Schwerpunktsetzungen in vielen Disziplinen herausgebildet haben und weitere Professuren eingerichtet werden.

Auch in der Simulationswissenschaft sind bisher nur an wenigen Standorten eigens ausgewiesene Professuren – typischerweise in den Ingenieurwissenschaften – etabliert. Wie im Fall der Fachwissenschaften geht der Wissenschaftsrat davon aus, dass mit der Zeit weitere Hochschulen einen Schwerpunkt in diesem Bereich ausbilden. Selbstverständlich wird und soll sich ein solches simulationswissenschaftliches Angebot nicht flächendeckend entwickeln. Zum jetzigen Zeitpunkt jedoch erscheint der bestehende Ausbau noch nicht ausreichend, um die Methoden- und Theorieentwicklung in der Simulationswissenschaft ausreichend voranzutreiben und das Potenzial auszuschöpfen.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt den Fakultäten – auch als Signal an den wissenschaftlichen Nachwuchs –, Professuren entweder möglichst breit auszuschreiben oder gezielt mit einem simulationswissenschaftlichen Profil zu versehen. Die thematisch (*open topic*)^{|30} und hinsichtlich der Eingruppierung (*open rank*)^{|31} offene Ausschreibung ist gerade für ein Feld wie dieses sinnvoll, da bisher noch kaum etablierte Ausbildungswege existieren und damit möglicherweise auch wenig Kandidatinnen und Kandidaten mit einem ausgeprägten simulationswissenschaftlichen Kompetenzprofil auf dem Markt sind. Eine *open topic*- und *open rank*-Ausschreibung vergrößert daher den Pool möglicher Kandidatinnen und Kandidaten.

Angesichts des Bedeutungszuwachses von Forschungsinfrastrukturen (vgl. B.II) hat sich der Wissenschaftsrat auch dafür ausgesprochen, Professuren mit einer besonderen Leitungsverantwortung für Forschungsinfrastrukturen einzurich-

^{|30} *Open topic* bedeutet, dass die Ausschreibung nicht fachlich gebunden erfolgt, sondern sich an Exzellenz und Innovationskraft für das Feld der Simulationswissenschaft orientiert.

^{|31} *Open rank* bedeutet, dass die Ausschreibung ohne Spezifizierung der Stelle erfolgt, d. h. es kann sich um eine Professur mit *Tenure Track*-Option oder um eine W2- bzw. W3-Professur handeln. Je nach Qualifikation der Bewerberin oder des Bewerbers wird die Professur eingestuft bzw. dotiert werden.

ten und auszuschreiben. |³² Mit Blick auf die simulationsgestützte Forschung würde dies bedeuten, dass die Verantwortung für die mit der Infrastruktur verbundenen Leitungsaufgaben einen großen Anteil der Arbeitszeit ausmachen wird und gegebenenfalls dafür das Lehrdeputat zu reduzieren ist. |³³

III.2 Akademische Karrierewege jenseits der Professur

Die Vorhaltung und das Management von Infrastrukturen, die Erarbeitung von Modellierungsmethoden und Algorithmen, die Entwicklung und Pflege von Software, die Archivierung und Bereitstellung von Simulations- und damit im Zusammenhang stehenden Messdaten sowie die Betreuung von Nutzern und Nutzerinnen im Zuge der Simulation oder der Nutzung von Simulationsarchiven (vgl. hierzu auch B. II) verlangen jeweils spezifische simulationswissenschaftliche Kompetenzen. Dafür werden – insbesondere an den Hochschulen – adäquat dotierte und dauerhaft zu besetzende Stellen benötigt, die es erlauben, den Erkenntnisprozess in den Fachwissenschaften durch Nutzerberatung und Weiterentwicklung der Simulationssoftware professionell zu unterstützen.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt daher, den Aufbau simulationswissenschaftlichen Personals jenseits der Professur gezielt voranzutreiben – und zwar in mehrere Richtungen: (1) Es bedarf hochqualifizierter Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die Simulationswerkzeuge, seien es Modellierungsmethoden, seien es Algorithmen, sei es Software entwickeln und für andere Nutzer bereitstellen können. |³⁴ Im Wettbewerb mit den außerwissenschaftlichen Sektoren ist hier eine angemessene Dotierung unabdingbar. Da es sich um Daueraufgaben handelt, sollten die Stellen ebenfalls dauerhaft vergeben werden.

Neben die Entwicklung von Simulationswerkzeugen tritt (2) die nachhaltige Pflege von Software. Große außeruniversitäre Forschungseinrichtungen verfügen zwar im Vergleich zu Hochschulen schon heute über Möglichkeiten, Ressourcen für diese Aufgaben einzusetzen. Allerdings sollten die Kooperationspo-

|³² Zu flexiblen Schwerpunktsetzungen von Professuren vgl. Wissenschaftsrat: Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems, Braunschweig 2013, u. a. S. 62 ff.

|³³ Hierzu vgl. auch: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zu Karrierezielen und -wegen an Universitäten, Dresden 2014.

|³⁴ Dieser Bedarf lässt sich weltweit beobachten: „*Students are trained primarily to run existing codes rather than to develop the skills in computational mathematics and software engineering necessary for the development of the next generation of algorithms and software*“ (World Technology Evaluation Center, Inc. (WTEC), Panel Report on International Assessment of Research and Development in Simulation-based Engineering and science, 2009, S. XXVII). Dies gilt auch mit Blick darauf, dass die schon bestehenden technischen Möglichkeiten von Hoch- und Höchstleistungsrechnern bisher noch nicht ausgeschöpft werden können, weil die entsprechenden Algorithmen und die entsprechende Software dafür noch nicht ausreichend entwickelt sind.

tentiale zwischen Hochschulen und außeruniversitären Einrichtungen gezielter ausgelotet und fruchtbar gemacht werden. Außeruniversitäre Einrichtungen, aber insbesondere Hochschulen sollten für diese Aufgaben vermehrt adäquate Stellen bereitstellen. Es handelt sich um Dienstleistungsaufgaben auf sehr hohem Niveau und über lange Zeiträume, die angemessen dotiert und gewürdigt werden sollten.

Außerdem (3) wird die Organisation von Simulationsprojekten mit fortschreitender Komplexität immer aufwändiger. Daher erfordern diese Prozesse ein besonderes Management, das bisher vernachlässigt wurde. „*Computational science and engineering is making the same transition that experimental science made in 1930 through 1960 in that it is moving from ‘few-effect’ single-discipline codes developed by small teams (1 to 3 scientists) to ‘many-effect’ codes tying together many disciplines, and developed by larger teams (10, 20 or more)*“. |³⁵ Vor diesem Hintergrund müssen zunehmend wissenschaftsnahe Aufgaben zur Organisation und Koordinierung des gesamten Simulationsprozesses erfüllt werden. Auch dabei handelt es sich um Daueraufgaben.

Im Feld der simulationsbasierten Wissenschaften schaffen diese Aufgaben Karrierewege für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die in den Hochschulen und Forschungseinrichtungen jenseits der Professur angesiedelt sind. Zuletzt hatte der Wissenschaftsrat im Kontext der Vorbereitung der Roadmap für Forschungsinfrastrukturen auf vergleichbare Personalanforderungen aufmerksam gemacht. |³⁶

B.IV STRUKTURBILDUNGEN AN HOCHSCHULEN

Hochschulen sind die zentralen Orte im Wissenschaftssystem, um Studierende und den wissenschaftlichen Nachwuchs auszubilden. Insbesondere in einem Feld, das sich neu konstituiert und mit einem Mangel an Absolventinnen und Absolventen mit Simulationskompetenz zu kämpfen hat, ist es entscheidend,

|³⁵ Behr, M.; Bischof, C.: Conquering Complexity Through Modeling and Simulation, in: Interdisciplinary Forums RWTH Aachen Studies, Aachen 2010. S. 47, und dazu auch Post, D. E.: Mitigating the risks facing largescale computational science (September 2005), S. 9 (https://www.ll.mit.edu/HPEC/agendas/proc05/Day_1/Presentations/1650_Post.pdf, Abruf am 18.06.2014).

|³⁶ Vgl. Wissenschaftsrat: Bericht zur wissenschaftsgeleiteten Bewertung umfangreicher Forschungsinfrastrukturvorhaben für die Nationale Roadmap (Pilotphase), Braunschweig 2013, v. a. S. 119 f., und ders.: Empfehlungen zur Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen in Deutschland bis 2020, Berlin 2012, v. a. S. 67 ff. Vgl. hierzu auch Wissenschaftsrat: Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystem, Braunschweig 2013, und ders.: Empfehlungen zu Karrierezielen und -wegen an Universitäten, Dresden 2014.

dass sich simulationsgestütztes Arbeiten auch an den Hochschulen etabliert. Die Hochschulen stehen dabei vor drei großen Herausforderungen: (1) Fachwissenschaftliche Forschung und Simulationswissenschaft entwickeln allein in ihrer Verschränkung ihr besonderes Potenzial. Das Feld der Simulationswissenschaft sollte sich (2) als ein eigenständiges weiterentwickeln und muss dabei (3) eine nachhaltige Pflege und Weiterentwicklung von Methoden, Modellen und Simulationssoftware einschließlich ihrer Validierung und Verifikation sicherstellen.

Um diese drei zentralen Herausforderungen an den Hochschulen meistern zu können, bedarf es einerseits einer engen Kooperation von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus den Fachdisziplinen mit ihren Kolleginnen und Kollegen aus dem Feld der Simulationswissenschaft. Andererseits bedarf es, wie oben entworfen, eigener simulationswissenschaftlicher Studiengänge, die in der Regel fakultätsübergreifend realisiert werden sollten.

Für eine enge Kooperation können – je nach Profil der Hochschule und der Ausrichtung der jeweiligen Fächer – sich kleinere oder größere Zusammenschlüsse entwickeln. Zwei oder mehrere Fachgebiete können beispielsweise gemeinsam Simulationslabore einrichten, um für eine spezifische Aufgabenstellung interdisziplinäre Kompetenz an der Schnittstelle von Fachwissenschaft, Numerischer Mathematik und Praktischer Informatik aufzubauen. |³⁷ Die Schaffung gemeinsamer Simulationslabore kann zentral für die beteiligten Fächer Simulationskompetenz auf hohem Niveau bereitstellen und dadurch einen Mehrwert in den Fachwissenschaften schaffen. So könnten sich beispielsweise Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit einer besonderen Expertise im Bereich des *process systems engineering* (PSE) zusammenschließen und voneinander profitieren. Aber auch die Simulationswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler können in enger Kooperation mit unterschiedlichen Fachwissenschaften ihre Modelle und Algorithmen an konkreten Problemstellungen weiterentwickeln, so dass sie gleichermaßen von der Zusammenarbeit profitieren. Insofern trägt ein Simulationslabor sowohl zur Förderung der Fachwissenschaften als auch zur eigenständigen Entwicklung der Simulationswissenschaft bei.

Um die Verschränkung von fachwissenschaftlichem simulationsgestütztem Arbeiten und simulationswissenschaftlicher Weiterentwicklung zu etablieren, erscheint eine quer zu den Fakultäten liegende Organisationseinheit eine geeignete Institutionalisierungsform darzustellen. An wenigen Standorten in Deutschland hat sich eine solche fakultätsübergreifende Struktur bereits stär-

|³⁷ Vgl. hierzu als Beispiel: <http://www.scc.kit.edu/forschung/5960.php> (Abruf am 09.07.2014).

ker institutionalisiert. Sie wird vielfach mit dem Begriff des Zentrums belegt. |³⁸
 Eine solche quer zu den Fakultäten liegende Struktur – im weiteren Verlauf kurz Simulationszentrum genannt –, sollte folgende Anforderungen erfüllen:

- _ Zentren dieser Art sollten die Fachkultur der Simulationswissenschaft in der Schnittmenge mit anderen Anwendungsfeldern vorantreiben. Dies kann befördert werden, indem Hochschulen den Zentren die Aufgabe übertragen, eigene Abschlüsse zu entwickeln und ihre Qualitätssicherung zu übernehmen. Sie erlangen dadurch die Möglichkeit, eigenen Nachwuchs auszubilden wie auch das dringend in den Anwendungsfächern benötigte Personal bereitzustellen. Je nach Möglichkeit der Kooperation zwischen den Fachbereichen, benötigen sie dazu eventuell das Recht, Bachelor- und Masterabschlüsse zu verleihen sowie Promotionsverfahren durchzuführen.
- _ Um die Verschränkung mit den Fachwissenschaften strukturell sicherzustellen, sollten im Zentrum arbeitende Professorinnen und Professoren zugleich einer Fakultät bzw. einem Fachbereich angehören. Für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus außeruniversitären Einrichtungen gilt dabei, dass die Beteiligung an der Lehre in den Fakultäten kapazitätsneutral erfolgt.
- _ Größere Zentren sollten langfristig auch unabhängig von den Fakultäten agieren können. Diese Unabhängigkeit erlaubt ihnen, eine eigene Forschungsstrategie und ein eigenes Ausbildungsprofil zu entwickeln. Folglich ist es notwendig, eine auf die Erfordernisse von Forschung und Ausbildung in diesem Zentrum bezogene Berufungspolitik zu betreiben.
- _ Um in dieser Weise strategiefähig zu sein, sollte ein solches Zentrum eine direkte Exekutivanbindung haben, in der Regel folglich dem Präsidium bzw. dem Rektorat der Hochschule zugeordnet sein.
- _ Damit ist verbunden, dass es langfristig oder gar dauerhaft angelegt, entsprechend nachhaltig finanziert ist und eine eigene Governancestruktur ausbildet. Konkret bedeutet dies, dass Simulationszentren auch über ein eigenes Budget und einen eigenen Personalstamm verfügen sollten.
- _ Ein solches Zentrum sollte einer stringenten Qualitätskontrolle unterliegen. Insbesondere für die Phase der Etablierung empfiehlt sich die Begleitung durch einen wissenschaftlichen Beirat, der die Leitung der simulationswissen-

|³⁸ Ob eine solche Einheit als Zentrum, Institut oder *School* bezeichnet wird, ist zweitrangig. In den USA werden solche Einheiten vielfach *Schools* genannt und sind in der Regel einem beruflichen Tätigkeitsfeld zugeordnet, so zum Beispiel *Medical Schools* für den Bereich Medizin oder *Law Schools* für den Rechtsbereich (vgl. hierzu Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Differenzierung der Hochschulen, Lübeck 2010, S. 43).

schaftlichen Einheit und das Präsidium bzw. das Rektorat der Hochschule berät. Eine regelmäßige Evaluierung ist wünschenswert.

Die führende Rolle der Vereinigten Staaten im Bereich des *High Performance Computing* geht wesentlich darauf zurück, dass schon früh entsprechende Zentren geschaffen wurden, die unterschiedliche Kompetenzprofile und Menschen unterschiedlicher disziplinärer Herkunft zusammenführen. Im Simulationsfeld finden sich in Deutschland mittlerweile entsprechende Initiativen wie beispielsweise die *Jülich Aachen Research Alliance – Section High Performance Computing* (JARA-HPC) oder das *Stuttgart Research Centre for Simulation and Technology*.

In den „Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems“ hat der Wissenschaftsrat das grundsätzliche Problem von Hochschulen adressiert, „starke, quer zu den Fakultäten angesiedelte Leistungsbereiche mit einer nachhaltigen Perspektive zu entwickeln und langfristig zu halten“. |³⁹ Im Zuge der Novellierung von Hochschulgesetzen beginnen einige Länder, die rechtlichen Voraussetzungen für langfristig angelegte und quer zu den Fakultäten etablierte Zentren mit der Möglichkeit zu eigenverantwortlicher Lehre und Nachwuchsqualifizierung zu schaffen. Damit ist eine wesentliche Voraussetzung erfüllt, um die Entwicklung der Simulationswissenschaft als eigenständiges wissenschaftliches Feld voranzutreiben. An dieser Stelle appelliert der Wissenschaftsrat an die Länder, in den Landeshochschulgesetzen entsprechende Regelungen für die eigenständige Verantwortung von Abschlüssen und akademischen Graden – zumindest im Rahmen von Experimentierklauseln – für solche Zentren vorzusehen.

Simulationswissenschaft ist ein neu entstehendes wissenschaftliches Feld, das von seiner Grundorientierung auf Anwendungsfragen ausgerichtet und damit auf die enge Kooperation mit unterschiedlichen Fachdisziplinen angewiesen ist. Daher sollte im Personalbestand ein bestimmter Kern an Professorinnen und Professoren aus den unterschiedlichen Disziplinen wie der Numerischen Mathematik, der praktischen Informatik mit Schwerpunkt in *Software Engineering*, Datenstrukturen und Parallelisierung einerseits und andererseits eine bestimmte Zahl an Fachwissenschaftlerinnen und Fachwissenschaftlern mit Modellierungsexpertise, die gleichzeitig auch die Problemstellungen aus den Fachwissenschaften liefern können, zusammengesetzt sein. Der Wissenschaftsrat bekräftigt, dass die Förderung eines entsprechenden Kompetenzaufbaus nicht primär „von der Maschine“ her entwickelt wird, sondern den gesamten Simulationsprozess im Auge haben sollte.

|³⁹ Vgl. Wissenschaftsrat: *Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems*, Braunschweig 2013, S. 64. Der Wissenschaftsrat hat in diesem Zusammenhang das Förderformat des Liebig-Zentrums entwickelt.

V.1 Forschung

Simulationsgestütztes Forschen ist auf das intensive Zusammenwirken von Fachwissenschaften und Simulationswissenschaft angewiesen. Die Weiterentwicklung der Simulationswissenschaft selbst kann nur mit hoher Qualität vorangebracht werden, wenn die Fachwissenschaften mit den Methodenwissenschaften eng zusammenwirken. Hier bestehen oft noch Defizite. Einerseits nehmen die Fachwissenschaften die numerisch-mathematischen Fortschritte für ihre fachbezogenen Simulationen bisweilen zu spät oder unzureichend wahr, so dass auf veraltete simulationswissenschaftliche Methoden und Werkzeuge zurückgegriffen wird. Gleichmaßen fehlt es den Methodenentwicklerinnen und -entwicklern allein an fachwissenschaftlichen Kenntnissen, so dass die spezifischen klimawissenschaftlichen Problemstellungen auch von ihnen nicht adäquat bearbeitet werden können. Erst durch eine Fachgrenzen überschreitende Kooperation kann es zu einer deutlichen Leistungs- und Produktivitätssteigerung in diesem Feld kommen.

Vor diesem Hintergrund erklärt sich auch der Erfolg von simulationswissenschaftlichen Schwerpunkten in der Exzellenzinitiative. Sie ermöglichte, simulationsgestützt arbeitende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit Expertinnen und Experten aus der Mathematik, Informatik und Simulationswissenschaft zusammenzuführen und entsprechende Initiativen mit einer größeren Risikobereitschaft zu realisieren. Insofern hat die Exzellenzinitiative zu einer Institutionalisierung des Feldes und zugleich zu einer Leistungssteigerung in diesem Bereich beigetragen. Aus simulationsbezogener Projektförderung, zum Beispiel in Form von Sonderforschungsbereichen, konnten sich im Rahmen von Exzellenzclustern oder Zukunftskonzepten stabilere Strukturen entwickeln. In Einzelfällen entstand ein Simulationszentrum mit eigener Lehre, eigenen Ausbildungs- und Karrierewegen (vgl. B.IV). |⁴⁰

Im Folgenden werden auf der Basis dieser Analyse und der grundlegenden Einschätzung Empfehlungen zu Förderformaten, zum spezifischen Förderbedarf und zur Begutachtungs- und Publikationspraxis entwickelt.

V.1.a Zum Förderbedarf

Simulationswissenschaft bezieht sich auf den gesamten Simulationsprozess: von der Konzeptentwicklung, Modellbildung und mathematischen Modellierung

|⁴⁰ Vgl. hierzu auch die Beispiele in den Fußnoten 16 und 17.

über die Ausarbeitung von Algorithmen und Simulationssoftware einschließlich ihrer Verifikation bis hin zur Validierung und Interpretation der Simulationsergebnisse. Vielfach existiert noch die Vorstellung, dass primär die Ausarbeitung der Problemstellung, die Beschreibung der Modellsysteme und ihre Wechselwirkungen sowie die mathematische Modellierung als genuine Forschung zu verstehen sei. Der anschließende Prozess der Modellimplementierung und Softwareentwicklung wie auch die notwendigen Schritte zur Verifikation der Software oder zur Validierung der Simulation werden vielfach nicht als genuine Forschungsarbeit betrachtet. Diese Vorstellung gilt es zu korrigieren.

Vor dem Hintergrund dieser grundlegenden Einschätzung lassen sich mit Blick auf die drei idealtypisch unterschiedenen Phasen des Simulationsprozesses (vgl. Abbildung 1) spezifische Desiderate formulieren.

Derzeit mangelt es an ausreichender Forschung zu methodischen Fragen der Modellbildung (unabhängig von der jeweiligen fachlichen Problemstellung) und des Modellierungsprozesses, so dass sich mittlerweile Modellierung als Engpass für das Fortschreiten der Simulationswissenschaft in einigen wissenschaftlichen Feldern und insbesondere auch in der industriellen Anwendung erweist. Die rechnergestützte Entwicklung und Implementierung von adäquaten Modellen wie auch deren Verknüpfung mit Messdaten treiben die Forschungen wesentlich voran. Denn adäquate Modelle können sowohl im Einzelfall die Umsetzung eines physischen Modells in ein mathematisches auf Seiten der Fachwissenschaften erleichtern oder auch in anderen Kontexten erneut eingesetzt werden. Hier bedarf es der Förderung methodischer und technischer Forschung im Kontext des Modellierungsprozesses einschließlich einer transparenten Modelldokumentation.

In der zweiten Säule des Simulationsprozesses liegt ein entscheidendes Defizit darin, dass professionelles *Software Engineering* nicht ausreichend erfolgreich insbesondere in andere (fach-)wissenschaftliche Felder implementiert wird. Dies sollte verstärkt gefördert und dabei darauf geachtet werden, Software auch breit, d. h. mehrfach in anderen wissenschaftlichen Feldern anzuwenden oder deren Komponenten direkt oder nach einer Modifikation in einer anderen Software wiederzuverwenden. Professionelles *Software Engineering* ermöglicht diese Mehrfachnutzung und Wiederverwendung, insofern dadurch sichergestellt werden kann, dass der Software ausreichend dokumentiert und offen für Erweiterungen ist. Heute wird Software vielfach im Rahmen von Promotionsarbeiten oder Arbeiten in der Postdoc-Phase entwickelt und mit dem Weggang der Entwicklerinnen und Entwickler nicht länger gepflegt und fortentwickelt, so dass sie bald nicht mehr nutzbar sind. Erfolgt die Softwareentwicklung ohne Beteiligung von Informatikerinnen oder Informatikern bzw. Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern mit fundierten informationstechnischen Kenntnissen, gehen aufgrund dieser Defizite wertvolle simulationswissenschaftliche Erkennt-

nisse und Ergebnisse wie auch mit hohem Aufwand implementierte Software für die Fachwissenschaften verloren. Denn wenn diese Software von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler genutzt werden, die an ihrer Entwicklung nicht beteiligt waren, können ihre inhärenten Begrenzungen nicht immer angemessen eingeschätzt werden.

Bezogen auf die dritte Säule liegt ein Defizit in der Verifikation des Codes und der Validierung des Modells bzw. des gesamten Simulationsprozesses (vgl. A.II). Ohne Verifizierung und Validierung sind Simulationen jedoch nicht zuverlässig zu bewerten. Je größer und je komplexer die Simulation und die zugrunde gelegten Modelle und die Software sind, desto schwieriger ist es, sie zu verifizieren und zu validieren. Neben der Verbesserung des methodischen Fundaments ist es auch erforderlich, die Verifikations- und Validierungsverfahren und -ergebnisse zu dokumentieren. Schon seit längerem wird daher ein Paradigmenwechsel bezüglich der Bewertung von Validierungsexperimenten und somit in ihrer Förderung gefordert. „*Even when experimenters are interested in validating a code, few mechanisms exist for funding such an experiment. It's essential that the scientific community provide support for code-validation experiments*“. |⁴¹

Bisher fehlt den Hochschulen, zum Teil auch den außeruniversitären Einrichtungen, das entsprechende wissenschaftliche Personal, um die Aufgaben der nachhaltigen und verlässlichen Pflege, der Verifikation und Validierung von Software und der Nutzerunterstützung überhaupt leisten zu können (vgl. auch B.III.2). Daher kann einmal entwickelte Software kaum von einer größeren Nutzergemeinde über eine längere Zeit eingesetzt werden. Hinzu kommt, dass neue Algorithmen und neue Software, die auf einem Rechner mit einem Prozessor entwickelt wurden, nicht einfach auf einen *multicore desktop*-Rechner oder gar einen Höchstleistungsrechner mit Tausenden oder Millionen von *Cores* transferiert werden können, ohne Leistungseinbußen – die verfügbare Kapazität kann nicht entsprechend genutzt werden – in Kauf zu nehmen. Für diese „Portierung“ von Software ist weitere Entwicklungsarbeit erforderlich.

Die Weiterentwicklung, Verwertung und Pflege von Software kann nicht eigenständigen Unternehmen übertragen werden, denn potentielle industrielle Nutzer verhalten sich zurückhaltend hinsichtlich einer Zusammenarbeit mit einem *Spin-off*-Unternehmen. Insofern industrielle Nutzer die notwendige Nachhaltigkeit und Verlässlichkeit in der anschließenden Pflege und Weiterentwicklung der Software auch in der ausgegründeten Einheit nicht gewährleisten sehen, ist eine Ausgründung aus einer staatlich geförderten Einrichtung zu kommerziel-

|⁴¹ Post, D. E.; Votta, L. G.: Computational Science Demands a New Paradigma, in: Physics Today January 2005, S. 35-41, hier S. 40.

ler Nutzung nicht immer zielführend. Eine weitere Möglichkeit, einmal entwickelte Software in der Wissenschaft effektiver zu nutzen und weiterzuentwickeln, liegt im Aufbau sogenannter *Community Codes*, an dessen Entwicklung nicht nur eine Gruppe oder einzelne Wissenschaftler beteiligt sind, sondern eine ganze wissenschaftliche Fachgemeinschaft. |⁴² In den USA übernehmen die *national laboratories* vielfach diese Aufgabe.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt den Förderorganisationen, bei der Förderung von Simulationsvorhaben sowohl den gesamten Prozess und damit die Förderung des dafür notwendigen, zum Teil auch technischen Personals für diese Aufgaben mehr Aufmerksamkeit zu schenken. Darüber hinaus sollten gezielt und vermehrt Methodenentwicklungs-, Verifikations- und Validierungsstudien gefördert werden.

Zugleich richtet er die Empfehlung an die Leitungen von Hochschulen und außeruniversitären Einrichtungen wie auch an deren Zuwendungsgeber, den oben genannten simulationswissenschaftlichen Spezifika gerecht zu werden, indem sie für diese Aufgaben angemessene Ressourcen insbesondere im Personalbereich gegebenenfalls durch Umschichtung bereitstellen oder aber im Rahmen von wettbewerblichen Verfahren einwerben.

V.1.b Zu den Förderformaten

Aus Sicht der Forschung erlauben stabilere Kooperationsformate eine bessere Integration von simulationswissenschaftlichen Ansätzen in die Fachwissenschaften und zugleich einen Austausch über Fragen der Modellbildung und Modellierung über die Grenzen der Fachwissenschaften hinweg. Zur Förderung mittel- bis langfristig angelegter interdisziplinärer Kooperationsstrukturen stehen unterschiedliche Förderinstrumente zur Verfügung: Sie reichen von Forschergruppen und Sonderforschungsbereichen über verschiedene Graduiertenschultypen bis hin zu Formaten, die im Kontext der Exzellenzinitiative

|⁴² Der Begriff des *Community Code* ist noch nicht weit verbreitet. Daher hier eine kurze Erläuterung: Es handelt sich dabei um ein numerisches Programm. Die entsprechende Fachgemeinschaft hat sich für seine Weiterentwicklung und Pflege als *Community Code* auf Regeln geeinigt, die festlegen, wer den *Code* verändern darf und unter welchen Bedingungen die Änderungen im *Code* akzeptiert werden. Jede neue Version des *Codes* durchläuft bestimmte Tests, bevor die Änderungen allgemein akzeptiert werden und dann der Fachgemeinschaft als *release* zur Verfügung gestellt werden. So gibt es in der Klimaforschung seit den 80er Jahren ein *Community Climate Model* (CCM), das zunächst im Rahmen der Atmosphärenforschung entwickelt worden ist, dann aber auch auf Landoberfläche, Ozeane und Eis hin ausgeweitete wurde. Daher hat sich der Name auch verändert hin zu *Community Earth System Model* (CESM) – am NSAR (*National Center for Atmospheric Research*) in Boulder, Colorado, angesiedelt (vgl. <http://www.cesm.ucar.edu/models/ccsm4.0/clm/>, Abruf vom 10. 06. 2014). Es handelt sich dabei um eines von mehreren in der Klimaforschung eingesetzten Modellen.

(Exzellenzcluster, Zukunftskonzept) entwickelt worden sind und nunmehr weiterentwickelt werden. Es besteht kein grundsätzlicher Mangel an projektförmig geförderten Kooperationsformaten. Allerdings fehlt es an einer Förderung nachhaltiger, d. h. langfristiger oder dauerhafter Kooperationsformate im nationalen und internationalen Kontext. Dabei ist es wichtig, dass auch Formate entwickelt werden, in denen deutsche Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sich an internationalen Projekten mit Hilfe nationaler Fördermöglichkeiten beteiligen können.

Der Wissenschaftsrat hat in seinen „Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems“ zur Profilbildung und zu Zentren an Hochschulen bereits Vorschläge entwickelt (vgl. auch B. IV). Darüber hinaus hat er für Institutionen übergreifende Kooperationen, den Aufbau themenorientierter wie auch so genannter regionaler Verbünde empfohlen. |⁴³ In solchen Verbänden können nicht allein gemeinsame Forschungen realisiert, sondern auch Infrastrukturen aufgebaut, gemeinsam genutzt und weiterentwickelt werden. Beispiele solcher Verbundinitiativen sind das Deutsche Klimarechenzentrum (DKRZ) |⁴⁴ in Zusammenhang mit dem Deutschen Klima-Konsortium (DKK), das die wesentlichen Akteure der deutschen Klima- und Klimafolgenforschung in Deutschland zusammenführt, oder das Forschungszentrum Matheon, an dem fünf Berliner Einrichtungen grundlegende Fragestellungen der Simulationswissenschaft aus einer mathematischen Perspektive heraus bearbeiten. |⁴⁵

Des Weiteren hat der Wissenschaftsrat Empfehlungen zur Implementierung eines Rates für Informationsinfrastrukturen gegeben, die derzeit umgesetzt werden. |⁴⁶ Grundlegende Aspekte der strategischen Weiterentwicklung von Infor-

|⁴³ Vgl. Wissenschaftsrat: Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems, Braunschweig 2013, S. 92 ff. und S. 102.

|⁴⁴ Das DKRZ bezeichnet sich selbst als Serviceeinrichtung: „Als überregionale Serviceeinrichtung betreiben wir ein Rechenzentrum für die Durchführung von Klimasimulationen. Ferner hält das DKRZ alle für die Verarbeitung und Auswertung einschlägiger Daten notwendigen technischen Einrichtungen vor, pflegt und entwickelt allgemein für die Klimaforschung relevante Anwender-Software, berät und unterstützt seine Nutzer in DV-Fragen und beteiligt sich an nationalen und internationalen Projekten und Kooperationen mit dem Ziel der Verbesserung der Infrastruktur für die Klimamodellierung. Damit bildet das DKRZ die herausragende Forschungsinfrastruktur für die modellbasierte Simulation des globalen Klimawandels und seiner regionalen Effekte“ (<https://www.dkrz.de/about/aufgaben>, Abruf vom 06.06.2014).

|⁴⁵ Das DFG-Forschungszentrum Matheon will mit seiner interdisziplinären Forschung „einen starken Einfluss der modernen angewandten Mathematik auf die Innovationszyklen in Schlüsseltechnologien erzeugen und die Aufmerksamkeit auf diejenigen Technologiefelder legen, in denen Mathematiker in Berlin in der Vergangenheit bereits herausragende Kompetenz bewiesen haben und interdisziplinäre Kooperationen in Forschung und Industrie etabliert wurden.“ (siehe auch <http://www.matheon.de>, v. 22.05.2014).

|⁴⁶ Im November 2013 hat die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) beschlossen, einen Rat für Informationsinfrastrukturen zunächst als vierjähriges Pilotprojekt einzurichten. „Der Rat soll sich auf der

mationsinfrastrukturen, ihren Datenbanken und Nutzerkonzepten im Bereich der Simulation fallen in seinen Aufgabenbereich.

V.1.c Begutachtungspraxis

Bei der Begutachtung von Simulationsvorhaben sind zwei entscheidende Herausforderungen zu bewältigen, nämlich (1) die Bewertung multidisziplinärer Projekte und (2) die Anerkennung der Spannbreite wissenschaftlichen Arbeitens in allen Aspekten des ganzen Simulationsprozesses.

Die Qualität multidisziplinärer Projekte ist immer schwieriger zu beurteilen als die eines Antrags in einer Einzeldisziplin. Simulationsprojekte sind häufig multidisziplinär angelegt und führen Erkenntnisse und Methoden verschiedener Fachgemeinschaften zusammen. Weil über die Disziplingrenzen hinweg kein gemeinsamer methodischer Kanon vorausgesetzt werden kann, steht die Bewertung aus Sicht der Fachwissenschaft aber auch aus Sicht der Simulationswissenschaft vor besonderen Herausforderungen. Der Wissenschaftsrat vertraut an dieser Stelle auf die notwendige Flexibilität in der etablierten Begutachtungspraxis, befürwortet die Etablierung von interdisziplinären Gutachterpanels und plädiert für eine hohe Selbstreflexivität in der Gutachterpraxis.^{|47} Es ist gängige Praxis, gezielt Sachverständige aus den unterschiedlichen wissenschaftlichen Feldern zu rekrutieren, um eine angemessene und faire Bewertung des Forschungskooperationszusammenhangs sicherzustellen. Bei kooperativen Forschungsformaten ist dies unabdingbar.

Für eine angemessene Bewertung simulationsgestützter Projekte ist es entscheidend, die gesamte Spannbreite wissenschaftlicher Forschungsformen in den Blick zu nehmen. Bisher wurden die unterschiedlichen wissenschaftlichen Leistungen verzerrt bewertet. Methoden- und Softwareentwicklung wurde vielfach als wissenschaftlich weniger herausfordernd wahrgenommen. Diese wissenschaftsimmanente Hierarchie in der Wertschätzung verschiedener Formen wissenschaftlichen Arbeitens wirkt sich auch auf die Förder- und Begutachtungspraxis aus. Hier sind daher nicht allein die Förderer gefragt, sondern auch die

Systemebene den strategischen Zukunftsfragen dieses Wissenschaftsbereiches widmen, die Selbstorganisationsprozesse in der Wissenschaft stärken und Möglichkeiten zur Kooperation von Einrichtungen/Initiativen ausloten. Er wird Wissenschaft und Politik in Fragen der Weiterentwicklung der Informationsinfrastrukturen beraten. Dem 24-köpfigen Gremium sollen sowohl Nutzer und Betreiber von wissenschaftlichen Informationsstrukturen als auch öffentliche Zuwendungsgeber angehören. Die Finanzierung des Rates erfolgt gemeinsam durch Bund und Länder“ (vgl. http://presseservice.pressrelations.de/standard/result_main.cfm?aktion=jour_pm&r=550902&quelle=0&pfach=1&n_firmanr_=101645&sektor=pm&detail=1, Abruf vom 28.04.2014).

^{|47} Die DFG hat die Frage der Einrichtung eines eigenen Fachkollegiums im Jahr 2013 intensiv diskutiert und sich entschieden, derzeit kein solches Fachkollegium einzurichten.

peers der jeweiligen Fachgemeinschaften, ihr Urteil den neuen Forschungsformen anzupassen.

Um diese Neubewertung, die in unterschiedlichen Bereichen greifen sollte – von der Begutachtung eines Forschungsvorhabens bis hin zur Bewertung von Forschenden im Laufe ihrer Karriere –, zu erleichtern, sollte die Implementierung idealerweise als *open source code* offengelegt werden. Damit steht die Software für eine umfassende Qualitätsprüfung durch die wissenschaftlichen Gemeinschaften zur Verfügung. Zugleich können gerade auch jüngere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in dieser Weise ihre Arbeit öffentlich machen, so dass sie als genuin wissenschaftliche Leistung anerkannt und dokumentiert werden kann sowie über die zugehörige Publikation hinaus mittels der möglichen Wiederverwendung der Software einen weit höheren Impact erzielt.

V.2 Transfer

Mit dem Begriff des Transfers werden die vielseitigen Interaktionen von Wissenschaft mit den unterschiedlichen Bereichen in Wirtschaft, Politik und Gesellschaft bezeichnet. Vielfach ist in der Betonung der notwendigen engen Kooperation von Simulationswissenschaft mit konkreten Problemstellungen, die nicht allein aus der Fachwissenschaft, sondern auch aus der Industrie und der Verwaltung stammen können, hingewiesen worden. Angesichts der großen Bedeutung, die Simulationen schon jetzt in der industriellen Entwicklung von Produkten und Prozessen wie auch in der Projektsteuerung spielen, bieten sich durch intensive Kooperationen zwischen Unternehmen und wissenschaftlichen Einrichtungen vielfältige Möglichkeiten, Anwendungsfragen und Methodenentwicklung noch besser miteinander zu verschränken. Der Wissenschaftsrat geht davon aus, dass solche Kooperationen grundsätzlich ein großes Wertschöpfungspotential eröffnen. Inwieweit es über die bereits bestehenden Förderangebote für Kooperationen zwischen Unternehmen und wissenschaftlichen Einrichtungen hinaus dazu besonderer Förderinstrumente bedarf, ist nicht Gegenstand dieses Positionspapiers und sollte gesondert geprüft werden.

An dieser Stelle sollen drei weitere Punkte aus dem Transferkontext aufgegriffen werden, nämlich die Frage der Weiterbildung, der effektiven Softwarenutzung und der Kommunikation in die Gesellschaft.

V.2.a Weiterbildung

Da es sich um ein relativ junges Feld handelt, verfügt das Personal aus dem Management oder aus den Forschungs- und Entwicklungsabteilungen der Industrie zum Teil noch nicht über die entsprechenden simulationswissenschaftlichen Kenntnisse. Hinzu kommt, dass es sich – wie der Blick auf den gesamten Simulationsprozess zeigt – um ein komplexes Feld mit einer hohen Entwicklungsdynamik

namik handelt. Beide Befunde begründen den hohen Weiterbildungsbedarf der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter in Wirtschaft und Verwaltung.

Hochschulen, insbesondere diejenigen, die über ein Profil in Simulationswissenschaft verfügen, sollten daher kostenpflichtige Weiterbildungsprogramme im Sinne von Zertifikatskursen und Studiengängen in diesem Feld entwickeln und anbieten. Wichtig ist, dass diese Angebote auf die Nachfrage von außen zugeschnitten sind. Weiterbildungsprogramme zielen darauf, die Nutzer und Nutzerinnen von Simulationswerkzeugen zu schulen. Gleichwohl stellt die Entwicklung entsprechender Kurse oder Studiengänge eine besondere Herausforderung dar, insofern ausreichende Kenntnisse in Mathematik, Informatik und in einer Fachwissenschaft (z. B. einer Ingenieurwissenschaft) vermittelt werden müssen.

V.2.b Softwarenutzung

Um eine einmal entwickelte Software testen, modifizieren und weiterentwickeln zu können, muss sie für andere potentiell Interessierte zugänglich sein. Bisher existieren leider nur wenige Plattformen, die neben der die Simulationsmethoden beschreibenden Publikation auch *Source Codes* oder eine ausführbare Version der Software zugänglich machen und diese im Rahmen des Begutachtungsprozesses einer Bewertung unterziehen. |⁴⁸

Die Wissenschaft hat ein großes Interesse an einer Publikation und Verfügbarkeit neu entwickelter Software – aus Gründen des wissenschaftlichen Fortschritts, der Qualitätssicherung und der angemessenen Anerkennung wissenschaftlicher Arbeit. Daher empfiehlt der Wissenschaftsrat den Urheberinnen und Urhebern von simulationswissenschaftlicher Software, die das Potenzial für eine weitergehende Nutzung hat, diese zur Weiterverwertung, idealerweise als *open source code*, verfügbar zu machen. Der Wissenschaftsrat sieht hier eine Aufgabe der Vorgesetzten, den Schritt der wie auch immer gestalteten Weiterverwertung zu begleiten und dabei mögliche wirtschaftliche Interessen der Beteiligten mit zu berücksichtigen, wie zum Beispiel in Form von *start-ups* oder anderen kommerziellen Verwertungen. Insgesamt ist das Feld der unterschiedlichen akademischen und kommerziellen Nutzung von Software sehr komplex, so dass eine intensive Begleitung von unterschiedlicher Seite (z. B. von Vorge-

|⁴⁸ Eines von wenigen Beispielen ist die Zeitschrift *Mathematical Programming Computation* (MPC), <http://mpc.zib.de/>, Abruf vom 06.06.2014: „*The journal’s review process includes the evaluation and testing of the accompanying software. Where possible, the review will aim for verification of reported computational results.*“ Mehrere Zeitschriften, wie beispielsweise SIAM J. Scientific Computing, ermöglichen Autoren die Einreichung von Software als Supplementary Material <http://www.siam.org/journals/sisc/supplementary.php>, Abruf vom 22.05.2014.

setzten, Hochschulen, Förderorganisationen etc.) für die entsprechende Weiterverwertung hilfreich und notwendig ist.

V.2.c Wissenschaftskommunikation

Gerade im Bereich der Simulation zeigt sich ein Dilemma: Einerseits können mit Hilfe von Simulation immer komplexere Fragen adressiert und beeindruckende Ergebnisse erzielt werden; andererseits bergen simulationswissenschaftliche Studien spezifische Unsicherheiten und Risiken, die für die breite Öffentlichkeit nicht ohne Weiteres ersichtlich sind. Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die simulationsbasiert forschen und arbeiten, tragen daher eine große Verantwortung, die erzielten Ergebnisse mit einer hinreichenden Transparenz und Differenziertheit zu kommunizieren.

Vor diesem Hintergrund unterstreicht der Wissenschaftsrat die Notwendigkeit, besonders sorgfältig und zugleich offensiv Wissenschaftskommunikation in diesem Feld zu betreiben. Es liegt im Verantwortungsbereich der simulationsbasiert arbeitenden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler und der Institutionen, in denen sie arbeiten, die Ergebnisse und ihre wissenschaftliche Bewertung in eine breitere Öffentlichkeit hin zu vermitteln.

C. Ausblick

Langfristig werden Simulationen viele und immer mehr Lebensbereiche durchdringen. Sie entwickeln sich zu einer ubiquitären Technologie. Die Begeisterung für den Einsatz dieser leistungsfähigen Methode darf nicht die Fallstricke, die damit verbunden sind, vergessen machen. Einsichten wie diese: „*A model is a model is a model*“ |⁴⁹ oder „*Essentially, all models are wrong, but some are useful*“ |⁵⁰ werden angesichts des Erfolgs von Simulationen und der vielfach beeindruckenden Visualisierung ihrer Ergebnisse in den Hintergrund gerückt. Daher sollte der Einsatz von Simulation damit verbunden sein, eine Sensibilität für die Fallstricke und ein Bewusstsein für die Grenzen dieser Technik zu schaffen.

Als Hochtechnologiestandort ist Deutschland darauf angewiesen, gezielt Menschen in und für dieses Feld auszubilden und Forschung mit und über Simulation zu fördern. Bisher ist Deutschland im internationalen Kontext, was Ausbildungsergebnisse und Infrastrukturvoraussetzungen angeht, gut bis sehr gut platziert. Allerdings steht die simulationsbasierte Wissenschaft gerade mit Blick auf die gut ausgebildeten Absolventinnen und Absolventen in einem harten Wettbewerb nicht allein mit der heimischen Industrie, sondern auch mit dem akademischen Markt in den europäischen Nachbarländern und den Vereinigten Staaten, zunehmend auch mit Asien. Es ist eine Frage der Zeit, bis auch die gezielten Investitionen der asiatischen Länder in Forschung und Ausbildung – nicht nur in *Hardware* – zu einem noch verstärkten Wettbewerb nicht zuletzt um gut ausgebildete Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler führen.

Das unwidersprochen hohe Potenzial und der große Bedarf an Simulationswissenschaft und Simulationen in unterschiedlichen Wissenschaften und Anwendungsfeldern lässt sich nur ausschöpfen bzw. befriedigen, wenn die Fachwissenschaften und ihre konkreten Fragestellungen mit der Simulationswissenschaft

|⁴⁹ Dierk Raabe in Anlehnung an Rosenblueth, A.; Wiener, N.: *The Role of Models in Science*, in: *Philosophy of Science*, Vol. 12, No. 4 (October 1945), S. 316-321 (auch: <http://www.jstor.org/stable/184253>).

|⁵⁰ Vgl. Box, G. E. P.; Draper, N. R.: *Empirical Model Building and Response Surfaces*, John Wiley & Sons, New York, NY, 1987.

und ihrer eigendynamischen Entwicklung verschränkt bleiben. Darin liegt die größte Herausforderung für die Entwicklung des Feldes als Ganzes: Auf Seiten der Fachwissenschaften können ohne systematische Verschränkung mit simulationswissenschaftlichem Wissen bestimmte Forschungswege gar nicht erst beschritten werden oder es besteht die Gefahr, dass mit Simulation und ihren Ergebnissen unreflektiert bzw. naiv umgegangen wird. Auf Seiten der Simulationwissenschaft fehlt ohne eine systematische Verschränkung mit Anwendungsfeldern möglicherweise die Verankerung in realen Fragestellungen.

Das Feld von Simulation und Simulationwissenschaften ist von einer sehr hohen Dynamik gekennzeichnet. Dies liegt nicht allein an den sich exponentiell entwickelnden Rechnerkapazitäten und Prozessorleistungen, d. h. an den technischen Voraussetzungen. Diese Dynamik rührt auch aus dem rasch fortschreitenden Einsatz in anderen wissenschaftlichen Feldern und Anwendungsfeldern bis in den Alltag hinein. Dabei sollte eine Sensibilität für die Grenzen und Risiken dieser neuen ubiquitären Technologie in ihren vielfältigen Funktionszusammenhängen geschaffen werden. Simulationwissenschaft als Wissenschaft komplexer Systeme korrespondiert in gewissem Sinne mit einer gesellschaftlichen Entwicklung, in der die „Risikogesellschaft“ oder die „reflexive Moderne“ verstärkt ein Bewusstsein ihrer eigenen Komplexität entwickelt. Diese ist verbunden mit der Vorstellung ihrer eigenen Kontingenz und Verletzbarkeit sowie der Begrenztheit des Wissens, das sie erzeugt, und der Handlungsmöglichkeiten, über die sie verfügt. |⁵¹ Daher sollte der Ausbau simulationswissenschaftlichen Arbeitens, wie es in den großen Simulationszentren angestrebt wird, gekoppelt werden mit einer gezielten Förderung der notwendigen kritischen Kompetenz in simulationsbezogener Forschung und Lehre und begleitet werden von einer systematischen Reflexion der Entwicklungen seitens der Sozial- und Geisteswissenschaften.

In Zukunft können sich weitere wissenschaftliche Felder herausbilden, die sich nicht ohne weiteres in die Fakultätsstruktur einer Hochschule oder in die Fächerklassifikation von Förderorganisationen einpassen lassen. Vor diesem Hintergrund verstehen sich die Empfehlungen des Wissenschaftsrates als paradigmatisch für *emerging* bzw. *converging fields*, die sich möglicherweise nicht zu einer „klassischen“ Disziplin entwickeln und stets mit fachwissenschaftlichen Problemstellungen verschränkt bleiben sollten. Die empfohlenen Spielräume, die eine Öffnung der rechtlichen Rahmenbedingungen an den Hochschulen

|⁵¹ Vgl. hierzu: auch Gramelsberger, G.: Computersimulationen – Neue Instrumente der Wissensproduktion, in: Mayntz, R.; Neidhardt, F.; Weingart, P.; Wengenroth, U. (Hg.): Wissensproduktion und Wissenstransfer. Wissen im Spannungsfeld von Wissenschaft, Politik und Öffentlichkeit. Bielefeld: transcript 2008, S. 75-95, hier S. 80.

oder eine Flexibilisierung der Förder- und Begutachtungswege schaffen, können in Zukunft vermutlich auch anderen in Entwicklung begriffenen, strukturell vergleichbaren wissenschaftlichen Feldern zugutekommen.

