

Foresight-Prozess – Im Auftrag des BMBF

Bericht

Zukunftsfelder neuen Zuschnitts

Auszug

Transdisziplinäre Modelle und
Multiskalensimulation

Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation

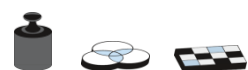
Virtuelle Systemuntersuchungen sind mittlerweile in technischen und sozialwissenschaftlichen Forschungsfeldern unerlässlich geworden. Bisher wurden Systemuntersuchungen für die Hypothesenbildung über komplexe Sachverhalte in physikalischen, chemischen sowie biologischen Zusammenhängen eingesetzt. Damit werden sie für Projekte in der anwendungsorientierten Forschungs- und Entwicklungspraxis besser nutzbar. Anwendungsorientierte Projekte bearbeiten komplexe Phänomene trotz begrenzten Wissens über Details funktioneller Zusammenhänge. Um diese Projekte zeitnah und mit vertretbarem Aufwand bearbeiten zu können, müssen Systemuntersuchungen mithilfe von Experimenten durchgeführt werden. Überall dort, wo Entwicklungen und ihr jeweiliges biotisches, soziales, technologisches und sonstiges Umfeld sich in komplexen Verhältnissen überschneiden können, müssen folglich unterschiedliche Beobachtungen und abstrahierte Modelle zusammengeführt werden.

Die Herausforderung besteht in Zukunft darin, Erkenntnisse zwischen benachbarten oder bisher noch voneinander unabhängigen Disziplinen mittels geeigneter Translationsprozesse auszutauschen. Durch die Kombination neuer Erkenntnisse können innovative Simulationsmethoden ab der Atomebene sowie Algorithmen für bestehende und künftige Problemfelder entwickelt werden. Beispiele für Forschungsfragen und Entwicklungsfelder sind:

- Wie und anhand welcher Modelle sind ökosystemische Zusammenhänge wie z. B. der Klimawandel zu simulieren, um einen Erkenntnisfortschritt über die Zusammenhänge der Systeme zu erzielen? Wie können Simulationen für Prognosen genutzt werden?
- Wie wären Phänomene selbstorganisierter Komplexität, wie z. B. das Verhalten organischer Zellen, ab der Atomebene so zu modellieren und zu simulieren, dass daraus weitere Durchbrüche in der medizinischen Diagnose und Therapie erzielt werden können?

1.1 Das Zukunftsfeld

Die Lebensbedingungen der Menschen werden infolge der Globalisierung immer komplexer und unübersichtlicher. Labile Gleichgewichte in Politik, Wirtschaft und Gesellschaft sind Themen, die den Menschen täglich beschäftigen. Der Verlust gewohnter Besitzstände einerseits sowie Chancen für kreative Innovationen und ihre Stimulation im Hinblick auf neue Märkte andererseits folgen Prinzipien von Chaos, Ordnung und Selbstorganisation. Diese entstehen in der



Natur und in der Gesellschaft nach den Gesetzen komplexer dynamischer Systeme. Solche Systeme werden bereits erfolgreich in Technik- und Naturwissenschaft untersucht. Durch die Erforschung von Modellen und Simulationsverfahren von der Atomebene über die Mesoebene bis hin zu makroskopischen Phänomenen können bei gezielter Komplexitätsreduktion je Ebene lückenlose Begründungszusammenhänge angestrebt werden. So wäre die Berechenbarkeit des Simulationsmodells gegeben. In atomaren und molekularen Systemen der Physik und Chemie, in zellulären Organismen und ökologischen Systemen der Biologie sowie in neuronalen Netzen der Gehirnforschung und den Rechnernetzen im Internet wird deutlich, dass der Erkenntnisgewinn wesentlich vom Verständnis der hochdynamischen Wechselwirkungen der jeweiligen Systembausteine abhängig ist. Dasselbe gilt für Anwendungen in den Wirtschafts- und Sozialwissenschaften. Eine Vielzahl von Methoden zur Modellierung und Simulation von Systemen sind bereits in den Wissenschaftsgebieten vorhanden, werden aber bisher überwiegend für die eigene Fachdisziplin (weiter-) entwickelt (vgl. Ionescu et al. 2009; Ehlers, W. 2009).

Da die Berechenbarkeit von Simulationsmodellen von der Rechnerleistung abhängt, ist der wissenschaftliche Fortschritt in vielen Disziplinen ebenfalls von der Weiterentwicklung der Computertechnologie und ihrer Rechenkapazität abhängig. Dabei dürften in Zukunft Rechenleistungen benötigt werden, die jenseits von Petaflops/s liegen werden. Die Nutzung solch einer konzentrierten Rechenkraft erfolgt über Supercomputer, die mithilfe mehrerer Prozessoren parallel an Aufgaben rechnen können. Die heutigen Kapazitäten an Rechnerleistung und Vernetzung (vgl. auch »Grid« bzw. »Cloud Computing«) bei der Simulation von komplexen Systemen und ihrem Verhalten ermöglichen nur holzschnittartige Einblicke. Durch weitere Forschungsaktivitäten könnte die Komplexität in Systemen durch Modellbildung und Simulation wesentlich besser bewältigt werden. Gelingen hier Durchbrüche, könnten Phänomene mit weit mehr Parametern als bisher virtuell simuliert und in realitätsnäheren Abbildungen sowie exakteren Prognosen dargestellt werden. Einen wichtigen Beitrag wird auch die theoretische Systemforschung leisten können, indem sie weitere Voraussetzungen für das konzeptionelle Verständnis schafft.

1.2 Ausgangssituation im Zukunftsfeld heute (2009)

Der Stand der Forschung bei der Modellierung und Simulation von komplexen Systemen ist durch Einzelstrategien gekennzeichnet, die aus verschiedenen Disziplinen, Theorien und Diskretisierungskonzepten stammen. Dabei werden methodische Gebiete wie die Molekulardynamik, Moderne Mechanik, Numerische Mathematik, Systemanalyse, Datenmanagement, Visualisierung und das Hochleistungsrechnen untersucht. Im Zukunftsfeld Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation sollten deshalb relevante Entwicklungen aus mehreren



Forschungsfeldern zusammengeführt und gebündelt werden, um Synergieeffekte zu erzielen.

In der System- und Komplexitätsforschung werden in vielen Bereichen Phänomene im Sinne von »Systeme-in-Kontexten« untersucht, um zu neuen Ansätzen für die Modellierung z. B. des Verhaltens in Verkehrssystemen oder in Gefahrensituationen etc. zu kommen. Auf Basis dieser Konzepte lassen sich Ansätze und Werkzeuge entwickeln, die in der disziplinübergreifenden Bearbeitung wie etwa der Analyse oder Darstellung, Konzeption und Steuerung von untersuchten Sachverhalten konkret adaptiert werden können. Die Schwierigkeiten bestehender Modellierung und Simulation liegen in der Ausgestaltung und Verifikation so genannter Zustandsräume¹ und relevanter Parameter für konkrete Sachverhalte sowie in der simulationsgeeigneten mathematischen Formalisierung der jeweiligen Beziehungen von Elementen in einem Gesamtsystem. Darüber hinaus fehlt es an theoretisch umfassenden, konsistenten und gleichzeitig auf Modelle und Simulationen anwendbaren Theorien komplexer Systeme.

Beispielsweise kann in Bezug auf ein Klimamodell das Ergebnis für die nächsten Jahre, Jahrzehnte oder sogar Jahrhunderte bei jeder minimalen Veränderung der Ausgangswerte oder der Einbeziehung neuer Variablen völlig anders ausfallen. Entscheidend für die Qualität der Prognosen ist das dahinter stehende Modell des Systems: Sind nicht alle relevanten Variablen bekannt, die Vernetzungen untereinander intransparent oder Ausgangsparameter und ihre Entwicklung falsch berechnet, stimmen die Prognosen nicht. Hier muss besonders viel Aufwand in die Modellbildung investiert werden, um näherungsweise Rechnungen und Voraussagen zu ermöglichen (vgl. auch Mainzer 2009 – alpha Forum).

Es besteht eine Wechselwirkung zwischen neuen Erkenntnissen im jeweiligen Fachgebiet und der Möglichkeit, daraus verbesserte Modelle und Simulationen abzuleiten, die dann wieder die Forschung im Fachgebiet anregen. Damit hängt die Schnelligkeit des Erkenntniszuwachses wesentlich vom Umfang und der Präzision von Modellen und Simulationsergebnissen ab.

Des Weiteren gibt es erste Ansätze, neue IKT-Entwicklungen und aktuelle Erkenntnisse aus anderen Wissenschaften, z. B. aus der Neurophysiologie, stärker in Simulationen zusammenzuführen. Gleichzeitig werden neue Simulationstechniken bzw. neuartige Algorithmen mittels parallel geschalteter Rechner weiterentwickelt. Konkret geschieht dies meist – und mit bis zu einigen Tau-

¹ Hierin werden dynamische Systeme im Zeitbereich beschrieben

send Prozessoren – auf der Basis konventioneller Architekturen. Die Entwicklung alternativer Computerarchitekturen benötigt auch hier Erkenntnisse benachbarter Disziplinen wie z. B. aus der Materialforschung, Biotechnologie oder aus der numerischen Mathematik.

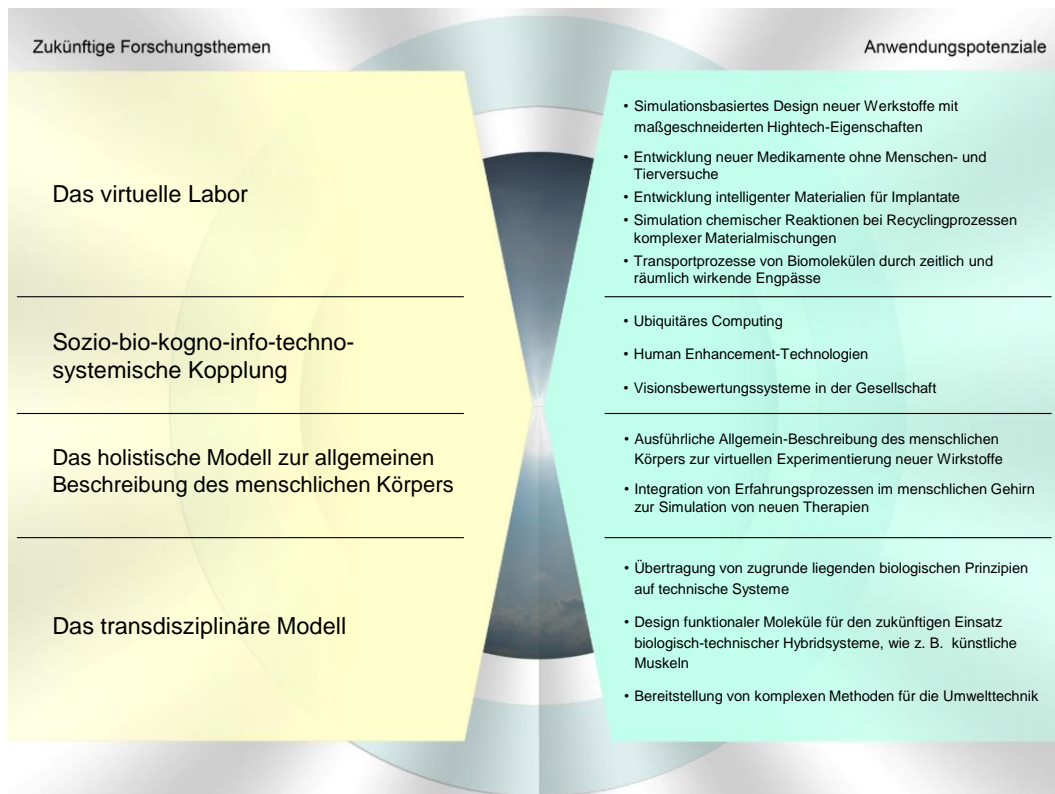


Abbildung 1: Zukünftige Forschungsthemen und Anwendungspotenziale im Zukunftsfeld »Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation«

1.3 Langfristperspektive des Zukunftsfeldes

In Zukunft wird es notwendig sein, Methoden zu entwickeln, die die Durchlässigkeit zwischen verschiedenen Disziplinen verbessern, um auf diese Weise neue wissenschaftliche Leistungen und Erkenntnisse zur Lösung von Problemen zu nutzen. Können komplexe wissenschaftliche Phänomene nicht modelliert werden, weil die Zusammenhänge eines Systems nicht verstanden werden, wird es notwendig sein, das System ab der untersten Komplexitätsebene zu untersuchen. Ziel wird es jedoch sein, nicht aufwendig auszuprobieren, sondern durch virtuelle Simulationen komplexe Phänomene zu verstehen und je nach Problem verlässliche Vorhersagen treffen zu können (siehe Abbildung 1).

Obwohl das Zukunftsfeld Modellbildung und Simulation schon seit Längerem beforscht wird, kann sich jetzt eine neue Qualität ergeben. Dies betrifft insbe-



sondere das Zusammenbringen der naturwissenschaftlichen und technischen Gebiete, z. B. im Bereich der Atome (ab-initio), Moleküle und nanoskaligen Phänomene. Hier sind durch fachübergreifende Modelle Durchbrüche zu erwarten. Eine methodisch fundierte »Translationsforschung«, die Ziele, Inhalte und Grenzen der Übertragbarkeit untersucht, ist dabei eine wesentliche Voraussetzung.

Der Komplexitätsforschung fällt die Aufgabe zu, beim Übergang von einer Skalengröße zur nächsten Methoden bereitzustellen, die es erlauben, die notwendige Komplexitätsreduktion unter Beibehaltung der wesentlichen Systemgrößen vorzunehmen. Eine disziplinenübergreifende Anwendung komplexer Systeme ist beispielsweise das menschliche Gehirn. Das Gehirn wird als ein komplexes System von Neuronen (Nervenzellen) aufgefasst. Die Neuronen interagieren elektrisch oder neurochemisch über Synapsen und verschalten sich zu Aktivitätsmustern. Dabei wird die Dynamik von Gehirnzuständen durch Gleichungen von makroskopischen Ordnungsparametern modelliert, die den neuronalen Verschaltungsmustern entsprechen. Die Neurochemie, als Disziplin der Neurowissenschaften, untersucht die Aktivität beteiligter Moleküle bei neuronischer Tätigkeit mittels biochemischer, molekularbiologischer, elektrophysiologischer und mikroskopischer Methoden. Biochemische Reaktionsgeschwindigkeiten sind von den Zeitkonstanten in der Chemie und der Quantenphysik abhängig (vgl. u. a. Marx, Hutter 2009; Mainzer 2007, 2009; Luther et al. 2004).

Eine effiziente Modellierung benötigt Simulationsmethoden, die den jeweils relevanten Längen- bzw. Zeitskalen angepasst sind. Allerdings gelingt es bisher nur ansatzweise, Simulationsmodule aus unterschiedlichen Längenskalen (aber auch Zeitskalen) miteinander zu verbinden. Dieser Zusammenhang soll anhand der Abbildung 2 verdeutlicht werden.



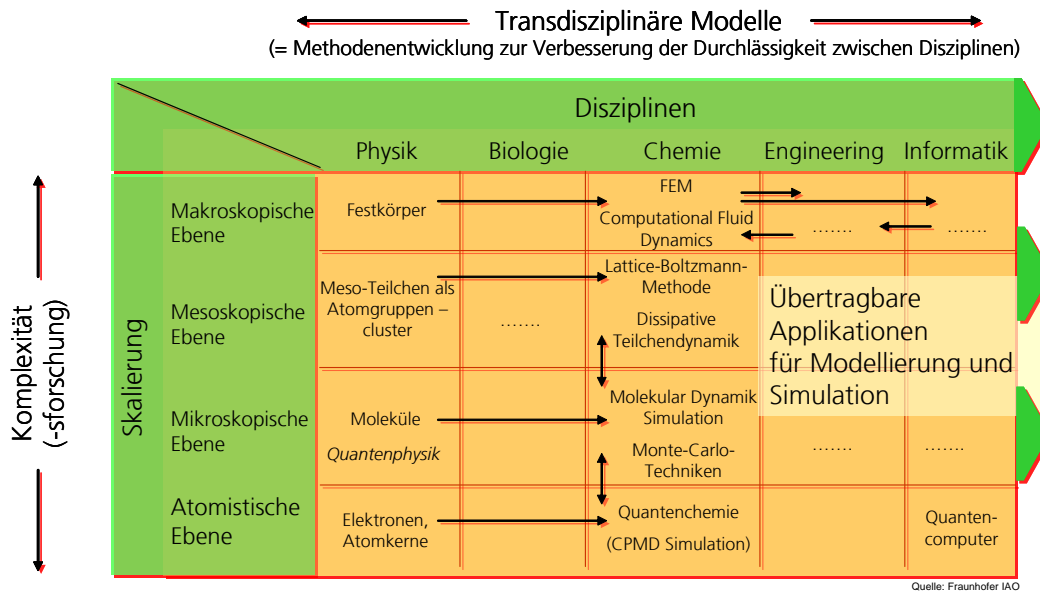


Abbildung 2: Modellierung und Simulation als Bindeglied zu Komplexität und Disziplinen

Über die beispielhaft genannten Disziplinen in der Abbildung hinaus können und sollen weitere Disziplinen in die Betrachtung einfließen. Als Bindeglied ist zum einen die System- und Komplexitätsforschung zu nennen, zum anderen ein Teilforschungsgebiet der Mathematik, das sich in diesem Kontext mit generischen Ansätzen des mathematischen Modellierens beschäftigt. Ein weiterer Aspekt ist die Entwicklung informations- und kommunikationstechnischer Voraussetzungen, um Systemmodelle zu simulieren und damit virtuell experimentieren zu können. Damit korrespondiert, dass informations- und kommunikationstechnische Anwendungen zukünftig Modelle aus immer mehr parallelen oder sequenziell vernetzten Abläufen integrieren sollen.

Dies impliziert, dass in zehn und mehr Jahren Paralleloperationen in Größenordnungen mit bis zu mehreren Millionen Prozessoren gesteuert werden müssen, um die für solche Simulationen erforderliche Rechenkapazität zu realisieren. Dieser Anforderung wird man mittelfristig mit Rechnern bisheriger Architekturen nicht gerecht werden können. Für einige Entwicklungsfelder (Biodektektion, Kryptografie) sollten sich in 10 bis 15 Jahren Anwendungspotenziale grundlegend anderer, genuin paralleler Architekturen wie jener des biomolekularen oder des Quantencomputers deutlicher abzeichnen oder realisieren lassen (vgl. EC 2008; Schinarakis 2008).

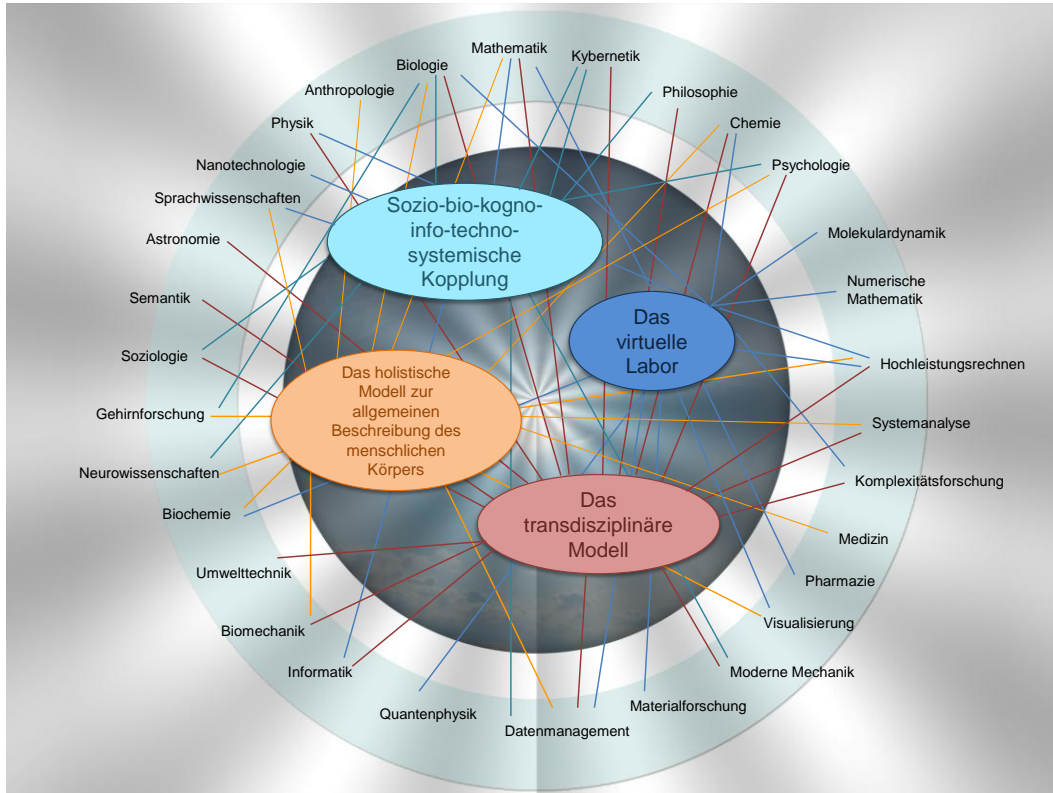


Abbildung 3: Zukünftig beteiligte Forschungsrichtungen

Eine weitere Entwicklungsperspektive dieses Zukunftsfeldes besteht darin, Simulation mit menschlichen Erfahrungsprozessen zu koppeln. Derzeit wird Simulation zur Darstellung von Sachverhalten verwendet. Künftig sollen Erfahrungsprozesse des menschlichen Gehirns verstanden und in die Simulation integriert werden. Für Letzteres ist jedoch die Berücksichtigung ethischer Grundsätze zu beachten, welche ebenfalls aufgrund der wachsenden Bedeutung des Konvergenzkonzepts auf EU-Ebene sowie in anderen Staaten eine wichtige Rolle spielen (vgl. Coenen 2008, S. 29). Damit kann die Modellierung und Simulation menschlichen Verhaltens als Methode der Mensch-Maschine-System-Forschung weiterentwickelt werden (vgl. auch Kindsmueller et al. 2004).

Schwerpunkte zur weiteren Vertiefung im Zukunftsfeld neuen Zuschnitts **Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation** in jeweiligen Kontexten von spezifisch natur-, technik-, sozial- oder kognitionswissenschaftlicher Untersuchungen könnten folgende Bereiche sein:

1. Theoretische Forschung sowie Modellbildung zu Systemen und systemisch heterogenen Verbänden (vgl. sozio-bio-kogno-info-techno-systemische Kopplungen)²
2. Forschung zu Verfahrens- und ggf. Technikentwicklungen für skalenübergreifende Simulationen in dem unter 1. genannten Bereich
3. Konzeptionelle Begleitung und »Wissensübertragung« von 1. und 2. in spezifisch konkreten Entwicklungsanwendungen über diverse wissenschaftliche und ggf. professionelle Disziplinen hinweg

Die drei genannten Punkte gingen aus Befragungen in den Bereichen der Simulationsforschung, IT, Natur- sowie Geisteswissenschaften sowie Desk Research hervor (vgl. auch Rogers 2003a; Saage 2006, 2007; Nordmann et al. 2006).

1.4 Warum ist das Zukunftsfeld relevant?

Die Relevanz des Themas ergibt sich aus den bislang zumindest nicht ausreichend beantworteten Forschungsfragen. Modellierungsmethoden und Simulationstechnologien erweisen sich für die Lösung komplexer Probleme in vielen Bereichen des Lebens als sehr notwendig. Diese beeinflussen die Entwicklungen in Wirtschaft und Industrie. Darüber hinaus erhöhen neue Entwicklungen auf dem Gebiet der Modellierungs- und Simulationstechnik sowie Hardwaremodule die Erwartungen von Wissenschaft und Industrie. Die nachfolgend angeführten Beispiele stellen Herausforderungen in der Forschung dar, die bisher nur ansatzweise bewältigt werden konnten. Hierzu wurden Expertenmeinungen der »SimTech – Cluster of Excellence in Simulation Technology« der Universität Stuttgart verwendet sowie Erkenntnisse aus der Forschung der Max-Planck Gesellschaft sowie internationale Studien und Fachliteratur (vgl. auch Marx, Hutter 2009; Hergersberg 2008; Thumann, Schnappauf 2008, Besold, Kremer 2004):

- Modelle und Simulationen von Phänomenen (selbst)organisierter Komplexität³
- Weiterentwicklung von Quantensimulatoren zum besseren Verständnis des Phänomens der Hochtemperatur-Supraleitung und zur Entwicklung geeigneter widerstandsfreier Stromleitungsmaterialien
- Computerbasierte Berechnung biochemischer Prozesse zur Entwicklung neuer Medikamente ohne Tier- und Menschenversuche

² Beispielhaft seien an dieser Stelle Anwendungspotenziale des ubiquitären Computing, »Human-Enhancement«-Technologien sowie Visionsbewertungssysteme in der Gesellschaft genannt.

³ Beispiele sind das Verhalten und die Zustände organischer Zellen wie Nerven-, Leber- oder Hautzellen.



- Simulationsbasierte Modellierung neuer Werkstoffe mit maßgeschneiderten Hightech-Eigenschaften
- Systembiologische Betrachtung von technischen und natürlichen Systemen
- Verschmelzung verschiedener Einzellösungen in der Biomechanik zur ausführlichen Allgemein-Beschreibung des menschlichen Körpers
- Bereitstellung komplexer und umfassender Methoden für die Umwelttechnik
- Computersimulation molekularer und zellulärer Biosysteme für die Transportprozesse von Biomolekülen durch zeitlich und räumlich wirkende Engpässe

Für die meisten dieser Felder existiert eine Vielzahl jeweils disziplinärer Modelle. Die Zusammenführung disziplinärer Modelle geht immer mit der Frage einher, in welcher informationellen Aggregation sich solche Modelle und Simulationen sozial vermitteln, kognitiv verarbeiten und erkenntnisleitend nutzen lassen. In welchen Kontexten sind also die Modelle gültig?

Im Hinblick auf konkrete Problemfelder ist sogar von einer zunehmenden Relevanz des aktuellen Zukunftsfeldes auszugehen,

- weil die immanente Komplexität von Entwicklungsproblemen, etwa die der Mega-Cities oder vernetzter Verkehrssysteme (vgl. m4d 2009; Ziv, Cox 2007) weiter zunehmen wird und daher besser verstanden werden muss und
- weil auch in anderen Zukunftsfeldern (Lebenswissenschaften, Physik, Verkehr, Pharmazie etc.) durch weitere Entwicklungsfortschritte ein Bedarf an Modellen und Simulation erwartet wird (siehe auch andere Zukunftsfelder des BMBF-Foresight-Prozesses).

Für das BMBF ergibt sich damit ein Forschungsfeld, das in Querschnittstechnologie münden kann und somit für sehr unterschiedliche Referate Impulse geben könnte.

1.5 Akteure im Innovationssystem heute

Das aktuelle Zukunftsfeld beschäftigt sich mit generisch konzeptionellen und Darstellungsaspekten von Orientierungsrahmen. Diese Aspekte lassen sich in forschungs- und entwicklungsbezogene Aktivitäten und damit in diverse andere Gegenstandsbereiche übertragen. Aber sie müssen dafür spezifisch adaptiert werden. Potenziell interessante Akteure sind daher überall in diesen anderen disziplinären Feldern verteilt.



Eine besondere Rolle bei der Suche nach potenziell interessanten Akteuren spielt die Untersuchung transdisziplinärer Wissensgemeinschaften, Interessengruppen und Expertengremien, wie z. B.

- zur Theoretischen Physik und Chemie,
- zur Robotik und Biologie und zu anderen Naturwissenschaften,
- zu Neurowissenschaften und Technologie,
- zur Theoretischen und Angewandten Informatik,
- zu den Geisteswissenschaften,
- zur Analyse komplexer Systeme,
- über einschlägig ausgewiesene Institute im Bereich der technischen Kybernetik, der Kybernetik beobachtender Systeme und deren mathematisch-informationstechnischer Realisierung an Universitäten etc. sowie in Forschungsvereinigungen (Max Planck, Helmholtz, Fraunhofer usw.).

Bestimmte Organisationsprofile deuten ebenfalls auf potenziell interessante Akteure im aktuellen Zukunftsfeld hin (vgl. Tabelle 1).

Akteure Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation

- Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum	- Hochleistungsrechnerzentrum Stuttgart
- Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Zürich	- Max-Planck-Institut für Quantenoptik
- Exzellenzcluster »Simulation Technology« (SimTech) in Stuttgart	- Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse (ITAS) Karlsruhe
- wissenschaftliche und/ oder professionelle Inter- bzw. Multi-Disziplinarität (vgl. als historischer Prototyp eines institutionell kompakten Akteurs das Biological Computation Laboratory H. v. Foersters in Illinois)	- Bereich Translation (in Medizin und Pharmazie) des European Advanced Translational Research Infrastructure in Medicine und das Hannover Center of Translational Medicine (HCTM)
- Institute for Advanced Simulation (IAS) – Forschungszentrum Jülich	- ITAT (Institut für Theoretische und Angewandte Translationswissenschaft – Universität Graz, Österreich). In der Forschung konzentriert sich das ITAT auf drei Schwerpunktbereiche: Kultur- und sozialwissenschaftliche Übersetzungsforschung, Kommunal- und Gebärdensprachdolmetschen, Translationsprozessforschung, Translations- und Terminologiemanagement.
- Technische Universität Clausthal	
- Technische Universität München, Lehrstuhl für Philosophie und Wissenschaftstheorie	

Tabelle 1: Akteure Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation im Jahr 2009

1.6 Zukunftsfähige Akteurskonstellationen

Aus dem Zukunftsfeld »Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation« ergeben sich zahlreiche Herausforderungen. Für die Entwicklung von Lösungen wird aus Sicht der Fraunhofer Experten im Sinne einer Open Innovation als erforderlich angesehen, wissenschaftliche Institutionen aus verschiedenen Fachrichtungen, Institutionen mit Aktivitäten in der Thematik der Transdisziplinarität sowie Zentren, die sich mit der Entwicklung moderner Methoden auf allen Gebieten der Modellierungs- und Simulationswissenschaften beschäftigen, miteinander zu vernetzen. Mithilfe von geförderten Projekten und zuständigen Part-



nern könnten die Entwicklung und der Einsatz von Methoden zum Wissens-
transfer innerhalb dieses Netzwerkes sichergestellt werden.

Um mit neuen Aktivitäten innerhalb des genannten Zukunftsfeldes beginnen zu
können, bietet es sich an, eine Reihe potenzieller Partner aus bereits existieren-
den deutschen Institutionen einzubeziehen. Die Grundlage bilden erfahrene
Personen aus wissenschaftlichen Einrichtungen mit zukunftsorientierten Orga-
nisationsstrukturen, Zentren und Exzellenzcluster im Anfangsstadium sowie In-
stitutionen mit transdisziplinären Forschungsaktivitäten.

Als wesentliche Akteure können genannt werden:

- Die Max-Planck-Gesellschaft, insbesondere die MPI für Meteorologie, Polymerforschung, Kohleforschung, Festkörperforschung, Hirnforschung sowie das MPI für Kognitions- und Neurowissenschaften, die laut Akteursanalyse zu den aktivsten Instituten der Max-Planck-Gesellschaft gehören. Darüber hinaus ist das MPI für Dynamik komplexer technischer Systeme, das MPI für Quantenoptik sowie das MPI für Physik komplexer Systeme zu nennen.
- Die international operierende Forschungsuniversität Bonn beschäftigt sich in ihrer mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät unter anderem mit dem Thema »Numerische Simulation«. Eine weitere durchaus wichtige Aktivität, mit dem Ziel, die interdisziplinäre Zusammenarbeit innerhalb der Universität zu stärken und herausragende Forschungsleistungen zu fördern, wird in der Erschließung so genannter »Interdisziplinärer Zentren« gesehen.
- Die Universität Stuttgart eröffnet insbesondere durch die Erschließung des Stuttgart Research Centre for Simulation Technology und Exzellenzclusters »Simulation Technology« (SimTech) neue Perspektiven bei der Weiterentwicklung wissenschaftlicher Methoden und Anwendungen auf allen Gebieten der Modellierungs- und Simulationswissenschaften. Mit der Bindung verschiedener Institutionen an die Universität Stuttgart wird der Ergebnistransfer in die wissenschaftliche Gemeinschaft sowie in die Anwendung angestrebt.
- An der Ruhr-Universität Bochum zeichnen sich die »Centres of Excellence« durch Internationalität und Interdisziplinarität aus, mit denen die Universität wegen der abgedeckten Bereiche eine Spitzenstellung einnimmt. Die Forschung an der Ruhr-Universität Bochum wird anhand von flexiblen, interdisziplinären »Research Departments (RD)« organisiert.
- Die Technische Universität Clausthal gehört mit ihren interdisziplinären wissenschaftlichen Einrichtungen und Arbeitsgruppen ebenfalls zu den aktivsten Institutionen auf dem Gebiet der »Transdisziplinären Modelle und Multiskalensimulation«. Insbesondere ist das Simulationswissenschaftliche Zent-



rum Clausthal-Göttingen zu nennen, welches das Thema »Simulation« gegenwärtig in einem fächerübergreifenden Verbund bearbeitet.

- Die Technische Universität München wird im Rahmen der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder gefördert und weist, zusätzlich zu den klassischen Kernbereichen einer Technischen Universität, leistungsfähige Verbindungen zu den Lebenswissenschaften auf.
- In den Forschungszentren der Universität Würzburg wird eine koordinierte Zusammenarbeit über Fächergrenzen hinweg angestrebt. Die Universität Würzburg sieht in der Interdisziplinarität eine »moderne Wissenschaft«. Vor diesem Hintergrund ist dort eine Reihe von Forschungszentren entstanden.

Zusätzlich zu den Ergebnissen aus der bibliometrischen Akteursanalyse sind wichtige deutsche Institutionen zu nennen, die einen starken Bezug zu relevanten Themen des Zukunftsthemas »Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation« aufweisen. Zu nennen sind:

- Das Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse (ITAS) beschäftigt sich mit der Verarbeitung und Vermittlung von Wissen über die Folgen menschlichen Handelns und der Bewertung dieser Folgen in Bezug auf die Entwicklung und den Einsatz von neuen Technologien. Dabei werden umweltbezogene, ökonomische, soziale sowie politisch-institutionelle Fragestellungen untersucht. Das ITAS ist in das Forschungsprogramm des Forschungszentrums Karlsruhe und der Helmholtz-Gemeinschaft deutscher Forschungszentren (HGF) eingebunden und kooperiert mit zahlreichen wissenschaftlichen Einrichtungen im In- und Ausland, vor allem im Rahmen von EU-Projekten.
- Das Zentrum für Interdisziplinäre Forschung (ZiF) der Universität Bielefeld fördert als »Institute for Advanced Study« der Universität Bielefeld interdisziplinäre und innovative Forschungsprojekte. Das ZiF verfolgt als unabhängige, thematisch ungebundene Forschungseinrichtung das Ziel, besonders innovative Forschungsfelder in den Überschneidungsbereichen von Natur- und Geisteswissenschaften zu identifizieren.
- Im Forschungszentrum Jülich bündelt das »Institute for Advanced Simulation (IAS)« auf dem Gebiet der Simulationswissenschaften und des Hochleistungsrechnens disziplinäre, methodische und technologische Kompetenzen. Das Ziel besteht darin, zukünftige Herausforderungen im Bereich der Simulationswissenschaften zu bewältigen.

Ein spannendes und nennenswertes strategisches EU-Projekt, welches die Kooperation und den Wissensaustausch zwischen Institutionen aus der Medizin fördert, verfolgt die Bildung einer »European Advanced Translational Research InfraStructure in Medicine (EATRIS)«. Ziel des Projektes ist es, mittels neuer An-



sätze Erkenntnisse der Grundlagenforschung aus verschiedenen europäischen Institutionen zu nutzen, um die Entwicklung klinischer Anwendungen voranzutreiben. Die Partnerstruktur besteht aus europäischen wissenschaftlichen Institutionen und Regierungspartnern, bei der das BMBF ebenfalls als Mitglied zu nennen ist.

1.7 Empfehlungen

Im Zukunftsfeld »Transdisziplinäre Modelle und Multiskalensimulation« wird eine Vielzahl von FuE-Bereichen sowie Fachdisziplinen angesprochen, die zur umfassenden Weiterentwicklung wissenschaftlicher Methoden und Anwendungen auf allen Gebieten der Modellierungs- und Simulationswissenschaften erforderlich sind. Dabei sollten Visionen realisiert werden wie z. B. »Das virtuelle Labor«, um zeit- und kostenaufwendige physische Experimente zur Entwicklung neuer Stoffe zu ersetzen, oder »Das holistische Modell zur allgemeinen Beschreibung des menschlichen Körpers«, um beispielsweise Wirkstoffe virtuell testen zu können. Die Herausforderung besteht darin, generische Ansätze zu entwickeln, die vorhandene sowie laufend neue Erkenntnisse aus verschiedenen Disziplinen sammeln und vernetzen, um diese Erkenntnisse zur Lösung von konkreten Problemen nutzen zu können. Gleichzeitig müssen die Geltungsbereiche der Modelle verdeutlicht werden: Wie weit ist ein Modell übertragbar? Wann sind Modelle überhaupt sinnvoll einsetzbar? Was kann simuliert werden? Wie ist die Kosten-Nutzen-Relation beim Einsatz von immer mehr Variablen? Wo sind die Grenzen?

Darüber hinaus sollen diese Ansätze die zur Lösung eines bestimmten Problems erforderlichen Disziplinen und deren Mitwirkung bei der Entwicklung einer neuen Methode innerhalb der Modellierungs- und Simulationswissenschaften identifizieren helfen. In verschiedenen Expertengesprächen wurde betont, dass an dieser Stelle Diskussionen mit potenziellen strategischen Partnern zur Ideengenerierung notwendig seien, um den Bedarf an erforderlichen Programmen und Projekten bestimmen zu können.

Das Thema Transdisziplinarität wird in der TAB-Studie »Konvergierende Technologien und Wissenschaften« vom März 2008 angesprochen. Der Stand der Debatte und die politischen Aktivitäten zu ‚Converging Technologies‘ werden gezeigt. In dieser Studie wird für den Bereich »Multi-, Inter- und Transdisziplinarität« empfohlen, die Aktivitäten zur Evaluation bereits abgeschlossener oder vorhandener Aktivitäten zur Förderung der Transdisziplinarität sowie gebietsübergreifender Technologieentwicklung unter der Perspektive von Konvergenz zu verstärken, auch unter Einbeziehung der EU-Ebene. Der Begriff »Konvergenz« beinhaltet die Prognose eines Zusammenwachsens mehrerer Technologien und die Zunahme von Synergieeffekten zwischen verschiedenen Wissenschaften. Insbesondere stehen Technologien wie Nano-, Bio-, Informations- und



Kommunikationstechnologien (IKT), Hirnforschung, Künstliche Intelligenz (KI), Robotik und andere verwandte Wissenschaften im Vordergrund. Hier wird die Notwendigkeit einer (politischen) Förderung von Forschung und Entwicklung in den Überschneidungsbereichen gesehen.

Bereits existierende Aktivitäten auf dem Gebiet der »Nano-Bio-Info-Cogno (NBIC)«-Felder bedürfen einer Bestandsaufnahme deutscher FuE-Landschaft und Förderaktivitäten aus Konvergenzsicht. Ziel ist es, Akteure zu identifizieren, die auf den jeweiligen Feldern Forschung und Entwicklung mit starkem Bezug zur Kopplung dieser Felder betreiben. Damit kann die Grundlage für die Untersuchung erweiterter interdisziplinärer Kopplungen wie die sozio-bio-kogno-info-techno-systemische Kopplung gelegt werden. Nach Ansicht der Themenkoordinatoren ist es sinnvoll, die Aktivitäten dieser Akteure zu beobachten, um aufkommende neue Ideen im Zuge von Förderaktivitäten anwenden zu können. Die Vernetzung der Akteure kann folglich zur Entwicklung von neuen Ansätzen zur Transdisziplinarität führen.

Die Bildung und Vernetzung neuer oder vorhandener Zentren in Deutschland mit internationalen Beziehungen, in welchen Aktivitäten auf dem Gebiet der transdisziplinären Forschung sowie im Bereich der Modellierungs- und Simulationwissenschaften stattfinden (sollen), wird ebenfalls aus Fraunhofer Sicht empfohlen. Zudem könnte es sich als vorteilhaft erweisen, Organisationseinheiten aufzubauen, die die Entwicklung neuer Ansätze zur fachübergreifenden Wissenssammlung und-nutzung ermöglichen und darüber hinaus ein Bindeglied zwischen diesen Zentren darstellen. Mit »fachübergreifend« ist an dieser Stelle das Wissen aus Natur-, Ingenieur-, Struktur-, Agrar-, Sozial-, Geistes-, Human-, Rechts- sowie Wirtschaftswissenschaften gemeint.

