
Der Einsatz von Computersimulationen in den Naturwissenschaften

Peter F. Meier

Computersimulationen ermöglichen die Untersuchung von mathematisch formulierbaren Modellsystemen, die analytisch nicht lösbar sind und bei denen herkömmliche Näherungsverfahren versagen. Aufgrund des exponentiellen Wachstums der Leistungsfähigkeit von Computern haben numerische Verfahren in den letzten Jahren an Bedeutung gewonnen. Dies wird aufgezeigt anhand von Berechnungen der Elektronenstruktur von Molekülen und Festkörpern und von Monte-Carlo-Simulationen.

1 EINLEITUNG

In vielen Disziplinen der Naturwissenschaften fanden in den letzten Jahrzehnten enorme methodologische Änderungen statt, die in direktem oder indirektem Zusammenhang mit der Proliferation von Computerleistung stehen. In diesem Beitrag soll der Einsatz von Computersimulationen beschrieben werden. Damit ausgegrenzt sind alle Aspekte, bei denen der Rechner zum Erfassen von Messdaten oder zur Steuerung und Regelung von Experimenten verwendet wird. Das charakteristische Element der Computersimulation ist weniger der Gebrauch von Rechnern, sondern die bewusste Anwendung numerischer Methoden anstelle von analytischen Rechnungen, so dass ein möglichst grosses Gebiet der Natur durch rechnerische Behandlung erfasst werden kann. Im englischen Sprachgebiet hat sich für diese Disziplin der Begriff «computational science» durchgesetzt. Es gibt Studiengänge, Fachzeitschriften und Konferenzen für «computational physics» und «computational chemistry». Die deutschen Begriffe «Computerphysik» oder «computergestützte Chemie» sind dagegen allgemeiner, umfassen sie doch auch das Erfassen und Verarbeiten von Daten bei komplexen Experimenten (was in der Hochenergiephysik bereits zu einem Spezialgebiet wurde) oder das automatisierte Steuern von chemischen Produktionsvorgängen.

Die zunehmende Bedeutung von Computersimulationen hängt natürlicherweise eng mit dem exponentiellen Wachstum der Leistungsfähigkeit von Rechnern zusammen, welche im nächsten Abschnitt kurz dokumentiert wird. Die Methodologie der *computational sciences* wird dann anhand von zwei Beispielen beschrieben: *ab-initio*-Rechnungen in Quantenchemie und Festkörperphysik und Monte-Carlo-Methoden zur Untersuchung von Phasenumwandlungen. Weitere

Anwendungsgebiete sowie grundsätzliche Überlegungen werden in den Schlussbemerkungen kurz erwähnt.

2 HOCHLEISTUNGSRECHNER

Die ersten Computersimulationen in den Naturwissenschaften wurden vor etwas mehr als 50 Jahren durchgeführt. Im Rahmen des Manhattan-Projekts wurden in Los Alamos in den USA auf elektromechanischen Rechenmaschinen umfangreiche Berechnungen zu Streuung und Transport von Neutronen in Materie sowie zur Ausbreitung von radioaktivem Fallout nach einer Kernexplosion vorgenommen. Zur Konstruktion von thermonuklearen Waffen wurde dann der erste elektronische Grossrechner (ENIAC) verwendet. Die Programmierung erfolgte noch manuell durch Umstecken von Kabeln in einer Schalttafel. Im Jahre 1952 wurde der erste Computer (MANIAC I) gebaut, bei dem von Neumanns Konzept eines automatischen Rechners realisiert wurde. Die Berechnungen wurden Schritt für Schritt vollzogen gemäss einem Instruktionssatz, der in der gleichen Art elektronisch im Speicher deponiert wurde wie die Datensätze.

Reelle Zahlen werden in der Maschine durch Gleitkomma-Zahlen oder «floating point numbers» dargestellt. Eine Addition oder Multiplikation zweier Gleitkomma-Zahlen ist eine «floating point operation» (FLOP). Die Anzahl solcher Operationen, die pro Sekunde bewältigt werden kann, wird mit FLOPS abgekürzt. 1956 betrug die maximale Leistung 10 000 FLOPS, was eine Verbesserung um einen Faktor 1000 gegenüber den Geschwindigkeiten der elektromechanischen Rechner bedeutet.

Die seitdem weitere Zunahme der erreichbaren Maximalleistungen ist in Abb. 1 dargestellt. Aus der halblogarithmischen Darstellung ist ersichtlich, dass ungefähr alle sechs Jahre mit einem Zuwachs um einen Faktor 10 gerechnet werden kann. Ein analoges exponentielles Wachstum gilt seit einiger Zeit auch für die Leistungsfähigkeit von Arbeitsstationenrechnern und Personalcomputern.

Diese Zunahmen in den Rechengeschwindigkeiten wurden aufgrund unterschiedlicher technologischer Fortschritte möglich. Die Computer der ersten Generation waren Maschinen mit Vakuumröhren. Bei der zweiten Generation wurden einzeln gepackte Transistoren verwendet (1958). Die 3. Generation erschien 1966 und brachte Maschinen mit integrierten Schaltungen, d. h. logische Schaltungen bestehend aus vielen Transistoren und andern elektronischen Elementen, alle auf einem kleinen (20 mm^2) Stück (Chip genannt) eines halbleitenden Materials. Da die vielen Schaltungen in einem kleinen Plättchen eingelagert sind, spricht man von integrierten Schaltungen. Die 4. Generation zeichnet sich durch die Verwendung von «large scale integration» (LSI) aus: Tausende von Transistoren wurden auf einen Chip verpackt. Die Verpackungsdichte wurde dann stark gesteigert und erreicht heute einige Millionen.

Als Hochleistungsrechner oder Supercomputer werden seit einiger Zeit diejenigen allgemein verwendbaren Rechner bezeichnet, die zur momentan leistungs-

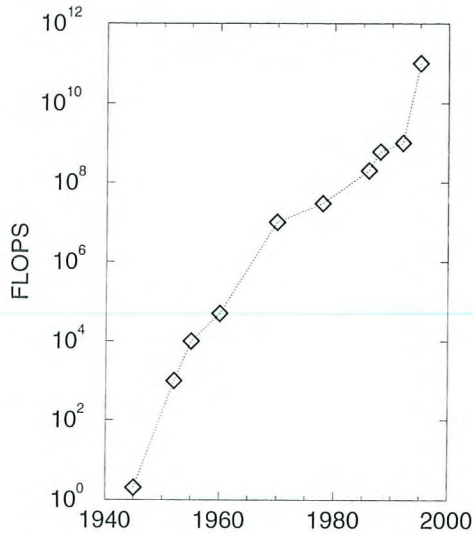


Abb. 1. Zeitliche Entwicklung der Computerleistung.

stärksten Klasse gehören. In jüngster Zeit werden die hohen Verarbeitungsgeschwindigkeiten durch Vektorisierung oder Parallelisierung erreicht; auch Kombination beider Methoden ist möglich. Ein Parallelrechner besitzt mehrere Prozessoren (Knoten), die unabhängig voneinander arbeiten können, aber untereinander Daten austauschen. Vektorrechner basieren auf Prozessen, welche Rechnungen mit Elementen eines Zahlenvektors nach dem Fließbandprinzip durchführen.

3 MEHRELEKTRONEN-PROBLEME

Die Zustände eines Systems von Kernen und Elektronen, die untereinander durch die elektrostatische Coulombkraft in Wechselwirkung stehen, werden durch die Quantenmechanik beschrieben. Demzufolge lassen sich die mikroskopischen Eigenschaften von Molekülen und Festkörpern im Prinzip durch Lösen der Schrödingergleichung, welche 1926 an der Universität Zürich aufgestellt wurde, bestimmen, wobei noch das Ausschließungsprinzip von Pauli berücksichtigt werden muss. Die Zustände eines Systems mit einem einzelnen Elektron können noch analytisch berechnet werden, diejenigen von Atomen und Molekülen mit mehreren Elektronen nicht. Heitler und London gelang 1927 als Mitarbeiter von Schrödinger in Zürich die erste erfolgreiche Berechnung eines Moleküls. Sie bestimmten näherungsweise den Grundzustand des Wasserstoffmoleküls und konnten damit das Phänomen der chemischen Bindung erklären. Seit dieser ersten *ab-initio*-Rechnung (d. h. ohne experimentelle Anleihe) hat sich das Gebiet der Quantenchemie ständig weiter entwickelt. In der einfachsten Näherung wird

nach Hartree und Fock das Mehrelektronenproblem auf die Bestimmung der Wellenfunktionen von Einelektronenzuständen zurückgeführt, wobei der Einfluss der übrigen Elektronen durch ein gemitteltes Feld berücksichtigt wird. Da dieses Feld seinerseits von den Lösungen der Einelektronengleichungen abhängt, muss das resultierende Gleichungssystem selbstkonsistent berechnet werden. Man beginnt mit einem vernünftig gewählten Potential, löst die Gleichungen, bestimmt daraus ein neues Potential, und so fort, bis sich die Resultate nicht mehr ändern.

Mit dem Einsatz von Hochleistungsrechnern konnten auch Methoden verwendet werden, die über die Hartree-Fock-Approximation hinausgehen und sogenannte Korrelationseffekte numerisch behandeln. Heute ist man zum Beispiel in der Lage, die Gleichgewichtsstrukturen von Molekülen mit einigen Hundert Elektronen zu bestimmen. Die Genauigkeit der berechneten Abstände der Atome ist im allgemeinen besser als 1%. Es muss aber auch erwähnt werden, dass die Berechnung von Korrelationseffekten immer noch ein aktuelles Forschungsgebiet ist.

Es gibt viele Anwendungsmöglichkeiten dieser quantitativen und qualitativen Zunahme in der Berechenbarkeit von Grundzuständen von Molekülen. Am spektakulärsten ist die Methode des «drug design» (Medikamente vom Reissbrett), bei der man versucht, mittels Computern zu erfahren, welche Moleküle am besten zu welchem Substrat im Körper passen, um so gezielt neue Arzneimittel zu entwerfen. Für entsprechend grosse biochemische Moleküle kann man allerdings keine *ab-initio*-Rechnungen durchführen; man ist auf halbempirische Methoden angewiesen.

In der Festkörperphysik wurde das Mehrelektronenproblem ebenfalls nach dem Näherungsverfahren von Hartree und Fock gelöst. In jüngster Zeit wird hingegen vermehrt die Methode der Dichtefunktionale verwendet, die auf Hohenberg und Kohn zurückgeht. Dabei wird anstelle der Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen ihre totale Dichte $n(r)$ als grundlegende Variable eingeführt. Ein Variationsverfahren für die totale Energie erlaubt dann eine exakte Bestimmung von $n(r)$, die aber wiederum nur mit grossem numerischem Aufwand und durch Entwicklung der Dichte in eine Reihe von Basisfunktionen möglich ist. Ausserdem sind die Potentiale, die den Austausch und die Korrelation bestimmen, nur näherungsweise bekannt.

Als Beispiel für die Genauigkeit heutiger Rechnungen ist in Abb. 2 die berechnete innere Energie für Silizium in Funktion der Gitterkonstanten aufgetragen. Die gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert schafft Vertrauen in Rechnungen, bei denen die Abhängigkeit der Gitterkonstante vom Druck untersucht wird. Bei sehr hohen Drucken, die von geophysikalischer Bedeutung, aber einem Laborexperiment nicht zugänglich sind, findet man, dass die Diamantstruktur nicht mehr die stabilste Struktur ist.

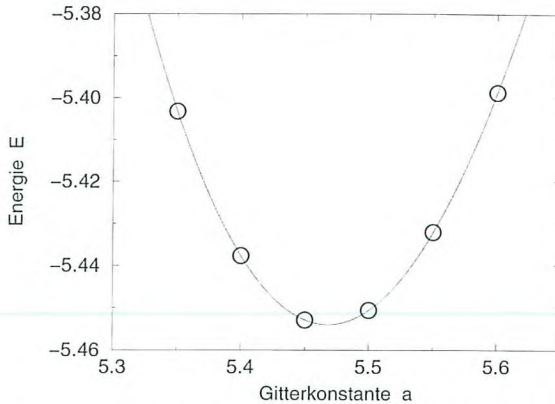


Abb. 2. Berechnete Energie pro Atom (in eV) in einem Siliziumkristall in Funktion der Gitterkonstanten a (in Å). Aus der Krümmung der Kurve erhält man für den Kompressionsmodul einen Wert von $B = 0.94$ (in Mbar). Die experimentellen Werte sind $a_0 = 5.43$ Å und $B = 0.99$ Mbar.

4 MONTE-CARLO-SIMULATIONEN

Monte-Carlo-Verfahren werden manchmal neben den traditionellen Aufteilungen der naturwissenschaftlichen Disziplinen in Experiment und Theorie als dritter Weg bezeichnet. Die spezielle Bedeutung von entsprechenden «Computer-Experimenten» ist, dass sie exakte Informationen über Modellsysteme liefern, die präzise definiert sind. Sie enthalten zwar statistische Fehler, die jedoch auf Kosten der Rechenzeit beliebig klein gemacht werden können. Analytische Theorien liefern nur in wenigen Fällen exakte Resultate; meistens müssen unkontrollierbare Näherungen verwendet werden. Geeignete Computersimulationen ermöglichen dann, die Güte der Approximationen zu überprüfen. Bei Experimenten ist andererseits oft das System nicht genügend genau bekannt. Manchmal entsteht sogar eine Kontroverse, ob ein beobachtetes Phänomen intrinsisch sei oder auf einem unbekanntem Effekt beruhe. Der direkte Vergleich zwischen analytischer Theorie und Experiment führt deswegen oft nicht zu einschlägigen Antworten. Computersimulationen sind nötig, um die Lücken zu schliessen. Sie liefern ausserdem meist detailliertere Informationen als Experimente und lassen auch die Berechnung bei Konditionen zu, die realen Experimenten nicht zugänglich (extreme Temperatur, Druck usw.) oder zu gefährlich sind. Die Strategie der Monte-Carlo-Simulation wird im folgenden am Beispiel eines Problems der statistischen Mechanik erläutert.

4.1 Ising-Modell

Die statistische Mechanik ist diejenige Theorie, mit welcher aus den mikroskopischen interatomaren Wechselwirkungen die makroskopischen Eigenschaften von kondensierter Materie und Gasen bestimmt werden können. Dies sei im

folgenden am bekannten Ising-Modell illustriert als Modell für die Phasenumwandlung einer paramagnetischen Substanz zu einem Ferromagneten unterhalb der Curie-Temperatur T_c . N magnetische Momente («Spins») S_j , welche die Werte $+1$ und -1 annehmen können, sind auf Gitterplätzen j lokalisiert. Die Austausch-Wechselwirkung der Elektronen führt dazu, dass sich die Spins auf benachbarten Gitterplätzen vorzugsweise parallel einstellen. Für eine gegebene Konfiguration k der Spins, d. h. jedem Platz j ist ein Wert S_j zugeordnet, wird das Modellsystem festgelegt durch die Energie

$$E_k = -J \sum_{i,j} S_i S_j - B \sum_j S_j. \quad [1]$$

Dabei ist J die sogenannte Austauschkonstante, und der zweite Term beschreibt die Zeeman-Wechselwirkung zwischen den Spins und einem äusseren Magnetfeld. Die Zustandssumme bei vorgegebener Temperatur T wird bestimmt durch Summation über alle möglichen Spinkonfigurationen k :

$$Z = \sum_{k=1}^K \exp[-E_k/k_B T]. \quad [2]$$

k_B ist die Boltzmann-Konstante, und $K = 2^N$ ist die Anzahl der möglichen Spinkonfigurationen. Dieses Modell ist (im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$) für eine Kette von Spins exakt lösbar. In zwei Dimensionen kennt man eine analytische Lösung, wenn $B = 0$ ist: Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c entsteht spontan eine Ordnung (ferromagnetisches Verhalten), die bei $T = 0$, wenn alle Spins parallel stehen, maximal ist. In drei Dimensionen gibt es keine analytische Lösung; hingegen sind durch Monte-Carlo-Simulationen viele Resultate bekannt.

Die Anzahl K der Summanden ist für $N > 30$ so gross, dass die Zustandssumme nicht direkt berechnet werden kann. Man nähert deshalb Z an, indem man eine endliche Anzahl Summanden verwendet. Die Auswahl der entsprechenden Konfigurationen geschieht im Monte-Carlo-Verfahren folgendermassen. Es wird eine Sequenz von Konfigurationen erzeugt: $k_1 \rightarrow k_2 \rightarrow k_3 \rightarrow \dots$. Ausgehend von einer beliebigen Startkonfiguration k_1 wird der Reihe nach für jeden Gitterplatz j mittels einer Zufallszahl entschieden, ob der Wert des Spins S_j beibehalten oder geändert ($S_j \rightarrow -S_j$) wird. Man könnte dafür auch Roulette-Zahlen verwenden (schwarz = ändern, rot = behalten), daher der Name «Monte Carlo». Nach N -maligem Würfeln erhält man eine Konfiguration, die zur Berechnung von Z verwendet wird. Dann wiederholt man das Ganze und bestimmt die nächste Konfiguration. Dieses blinde Würfeln ist jedoch nicht sinnvoll; man weiss, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Energie ein extrem scharfes Maximum aufweist, so dass man auf diese Art nur selten einen Zustand erzeugt, der für die

Energie wesentlich beiträgt. Statt dessen erzeugt man eine Sequenz $k_1 \rightarrow k_2 \rightarrow k_3 \rightarrow \dots$ so, dass man möglichst rasch zu Konfigurationen kommt, die wesentlich beitragen. Dies geschieht durch eine geeignete Auslese (die natürlich von der Temperatur abhängt) von Konfigurationen k_i . Man erreicht so, dass man eine repräsentative Mittelung macht: Konfigurationen mit einem grossen thermodynamischen Gewicht werden auch am stärksten berücksichtigt¹.

Mit dieser repräsentativen Auswahl der Konfigurationen, bei der diejenigen bevorzugt werden, die wesentlich zur Energieverteilung beitragen (importance sampling), hat man im wesentlichen eine exakte Methode zur Berechnung der thermodynamischen Grössen. Zu berücksichtigen ist lediglich der statistische Fehler, der aufgrund der endlichen Anzahl Berechnungen auftritt. Hingegen kann man mittels Computersimulation immer nur ein endlich grosses System, z. B. ein Quadrat aus $N = L \times L$ Gitterplätzen, berechnen, wobei zur Vermeidung von Oberflächeneffekten periodische Randbedingungen eingeführt werden können. Phasenübergänge sind aber verknüpft mit Singularitäten der freien Energie $F = -k_B T \ln Z$ und treten erst im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ auf. Für endliches N gibt es keine spontane Magnetisierung, und die Divergenzen der spezifischen Wärme und der Suszeptibilität sind verschmiert. Diese Probleme können teilweise durch analytische Verfahren (Skalierung bei endlichen Längen) gelöst werden. So kennt man heute die Curie-Temperatur T_c des dreidimensionalen Ising-Modells. Computersimulationen haben auch viele weitere Aufschlüsse gegeben, so etwa über den Abfall der Magnetisierung gegen die Oberfläche hin oder den Einfluss von Störstellen.

Monte-Carlo-Simulationen zur Untersuchung von Phasenumwandlungen im Ising-Modell und vielen verwandten Systemen haben parallel mit der Entwicklung der Leistungsfähigkeit von Computern zugenommen. Die entsprechenden Simulationstechniken können heute bereits auf PCs und Arbeitsstationen von Studierenden im Rahmen der Ausbildung in computergestützter Physik gelernt werden.

4.2 Problem des Handelsreisenden (traveling salesman problem)

Praktische Anwendungen haben diese Monte-Carlo-Verfahren bei Optimierungsproblemen erfahren. Als Beispiel sei das «traveling salesman problem» erwähnt. Ein Kaufmann muss eine Anzahl N von Städten S_1, S_2, \dots, S_N hintereinander besuchen, wobei er jeden Ort einmal und nur einmal betreten soll. Beginn und gleichzeitig Ende der Reise ist irgendeine der vorgegebenen Städte. Welche Route

1 Ein mögliches Verfahren besteht darin, dass man die Differenz Δ der Energien der Konfigurationen k_j und k_{j-1} vergleicht. Ist Δ negativ (Energieabsenkung), wird k_j als neue Konfiguration akzeptiert. Andernfalls berechnet man $M = \exp[-\Delta/k_B T]$ und vergleicht diesen Wert mit einer im Intervall $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahl r . Ist $M > r$, wird k_j auch akzeptiert. Andernfalls wird k_j verworfen und in einem weiteren Schritt eine neue Konfiguration als Kandidatin für k_j ermittelt.

führt zu minimalen Reisekosten? Im abstrakten Modell sind diese Kosten proportional zur zurückgelegten Luftdistanz angenommen.

Die Zahl der möglichen Routen beträgt $(N - 1)!/2$. Für $N > 20$ ist eine direkte Lösung, bei der alle möglichen Routen untersucht werden, hoffnungslos. Ein neues numerisches Verfahren, dieses Problem für grosse N zu lösen, ist in den letzten Jahren entwickelt worden, das sogenannte *simulated annealing* (simuliertes Tempern). Ausgangspunkt waren Untersuchungen über Spingläser. Wie im Ising-Modell sind dabei die Wechselwirkungen durch Gleichung [1] vorgegeben; die entsprechenden Plätze j sind jedoch ungeordnet (Glas). Dementsprechend sind auch die Austauschparameter J zwischen benachbarten j verschieden. Bei diesem Spinglas-Modell ist im Gegensatz zum Ising-Modell der Grundzustand nicht bekannt, und viele Zustände sind hochgradig entartet. Falls man dasselbe Vorgehen bei der Monte-Carlo-Simulation wie für das Ising-Modell durchführt, gelangt man in der Sequenz der Konfigurationen $k_i \rightarrow k_{i+1} \rightarrow \dots$ in ein Gebiet, wo die Energie nur ein lokales Minimum aufweist. Um auch andere Konfigurationen zu finden, die gleiche oder sogar tiefere Energie haben, muss man das System zwischendurch «aufheizen», indem man nach einer gewissen Zeit Δt die Simulationstemperatur T um ΔT ändert. Ist $\Delta T > 0$, so erhöht sich automatisch die Übergangswahrscheinlichkeit in eine Konfiguration mit einer höheren Energie, so dass der Algorithmus eine Chance hat, aus dem Tal mit lokalem Minimum über einen Pass in ein anderes Tal zu gelangen. Durch geschickte Wahl von Δt und ΔT erreicht man eine ausgewogene Mittelung über alle repräsentativen Konfigurationen. Dieses Verfahren des *simulated annealing* kann auch erfolgreich auf das

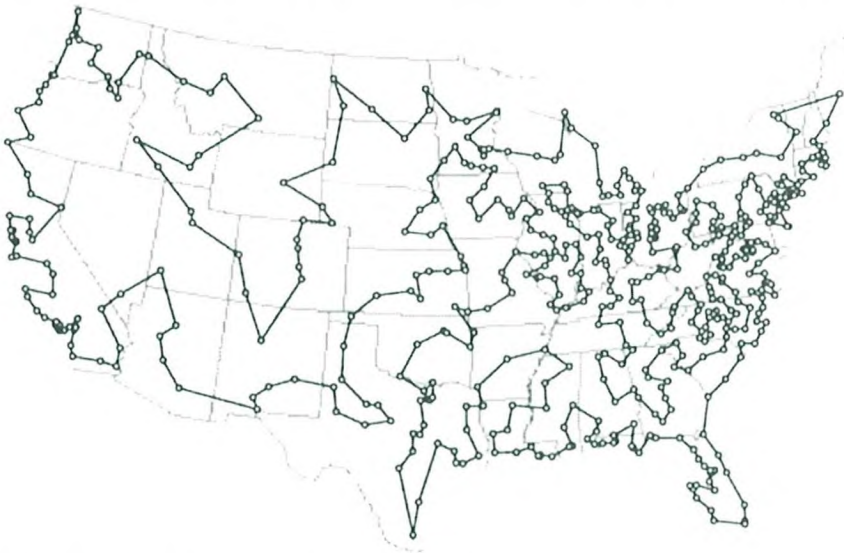


Abb. 3. Optimierte Tour für die 532 grössten Städte der USA.

Problem des Handelsreisenden angewendet werden (siehe Abb. 3). Es ist klar, dass damit keine Gewähr besteht, in endlicher Zeit tatsächlich die beste Route zu finden. Für viele praktische Probleme ist es jedoch bereits wichtig, eine möglichst günstige Lösung zu finden.

In der Tat steckt in diesem Verfahren des *simulated annealing* ein gewaltiges Potential an Anwendungsmöglichkeiten für die Optimierung von Transportproblemen verschiedenster Art. Um dies einzusehen, muss man die Regeln des oben dargestellten Problems ändern. In der Praxis müssen ja meistens auch andere Bedingungen eingehalten werden: so soll zum Beispiel der Kunde in Stadt S_j vorzugsweise vor dem in S_k besucht werden. Ferner sind oft diverse Zeitfenster zu beachten, d. h. gewisse Orte können nur zu gewissen Zeiten besucht werden. All diese Einschränkungen werden im mathematischen Modell durch Nebenbedingungen beschrieben, die durch Einführen von Lagrangemultiplikatoren bei der Optimierung mitberücksichtigt werden.

Erste praktische Anwendung dieser Verfahren auf Transport- und Verteilprobleme sind schon im Gange. Dabei existiert in den meisten Fällen bereits eine Lösung. Die Transportunternehmen funktionieren und liefern Waren mit einer gegebenen Anzahl von Lastwagen und Chauffeuren. Durch *simulated annealing* kann aber in vielen Fällen eine bessere Lösung gefunden werden. Dabei muss die zur Gesamtenergie des physikalischen Systems analoge Kostenfunktion durch Ökonomen definiert werden. Ein mögliches Ziel ist immer die Reduktion der verbrauchten Treibstoffmenge.

5 SCHLUSSBEMERKUNGEN

Es muss die Frage aufgeworfen werden, ob Computersimulationen zum Verständnis von Naturphänomenen beitragen. Das Prinzip der chemischen Bindung wurde ja von Heitler und London anhand von einfachen Rechnungen zum Wasserstoffmolekül «erklärt», und als Beispiel für Phasenumwandlungen gibt es die analytische Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells. Auf diese Frage, die auch umformuliert werden kann in: «Wann habe ich etwas wirklich verstanden?», gibt es nur persönliche Antworten. Für die einen liefert nur eine analytische Lösung eines Problems eine Erkenntnis. Andere wiederum argumentieren, dass sie wohl eine analytische Lösung nachvollziehen können, aber dabei das Ergebnis nicht verstehen. Mein Verständnis wird gefordert durch sinnvolle Kombination von analytischen und numerischen Verfahren. Aufgrund der Analyse von Computersimulationen gewinne ich Einsichten in grundlegende Mechanismen der Natur, die ich dann vielleicht nicht analytisch vorrechnen kann, aber doch in einer Formulierung mit Worten logisch beschreiben oder anschaulich durch Graphiken darstellen kann.

Die Erforschung von Naturvorgängen durch Computersimulation gewinnt zunehmend an Bedeutung. Neben den erwähnten Beispielen gibt es eine Vielzahl von anderen Anwendungen wie Stabilitätsuntersuchungen von heißen Plasmen

bei Fusionsmaschinen, Turbulenz in Flüssigkeiten, Gittereichtheorien, Anwendungen der molekularen Dynamik auf Enzyme in der Biochemie und geophysikalische Simulationen. Für die Umweltbelastung von besonderer Bedeutung sind Simulationen für Strömungsprobleme (computational fluid dynamics), wo auch nur kleine Verbesserungen im Wirkungsgrad von Turbinen oder bei Verbrennungsmotoren grosse Einsparungen ermöglichen. In der Flugzeug- und Automobilindustrie wird heute mehr Geld für Simulationen als für Experimente im Windkanal verwendet. Computersimulationen sind unersetzbar beim Studium von Klimamodellen; denn es gibt keine paläoklimatischen Daten oder Messungen, um die Klimaänderungsrate vorauszusagen. Die globalen Klimamodelle berechnen die dreidimensionale Zirkulation der Ozeane und der Atmosphäre. Dabei müssen sowohl vertikal als auch horizontal Stützstellen eingeführt werden, an denen die Variablen über die entsprechenden Volumina gemittelt werden. Die Transportgleichungen werden dann auf diesem dreidimensionalen Gitter berechnet. Die heute mögliche horizontale Auflösung für ein globales Modell liegt bei etwa 500 km x 500 km. Dies ist viel zu grob für die Berücksichtigung von wichtigen Faktoren, so dass bereits bei der Modellbildung Kontroversen entstehen. Nur eine Steigerung in der Leistung einer neuen Generation von Supercomputern wird hier zu einer nachhaltigen Verbesserung führen können.

Nur scheinbar zeichnet sich mit dem Aufbau der *computational sciences* eine weitere Spezialisierung der Wissenschaften ab. Im Gegenteil, viele technische und methodologische Probleme sind für die meisten Computersimulationen gleich und führen zu einem regen Austausch von Ideen zwischen Biologen, Chemikern, Ingenieuren, Klimatologen, numerischen Mathematikern und Physikern. Diese Synergieeffekte sind äusserst wertvoll und fruchtbar.