

# Vom Zählen zum Messen: Morphologie chemisch-kinetischer Modelle *more geometrico*

Dirk Lebedz

Institut für Numerische Mathematik, Universität Ulm

Die Geometrie ist vor der Erschaffung der Dinge, gleich ewig wie der Geist Gottes selbst und hat in ihm die Urbilder der Erschaffung der Welt geliefert. (Johannes Kepler [25])  
Es gibt einen Aspekt der Mathematik, der mich mehr fasziniert als alles andere, es ist weder Zahl noch Größe, sondern über allem Form. (Alexander Grothendieck [18])

## I. EINLEITUNG

**Morphologie** (von griech. *morphé*) ist die Lehre von Form und Gestalt, durchaus im abstrakten Sinne von Struktur. Die moderne axiomatische Mathematik inkorporiert einen solchen abstrakten Strukturbegriff. Das verleiht ihr das Attribut einer exakten symbolischen Modellsprache für Relationen mit breitgefächertem Anwendungsspektrum. **Form- und Kausalbegriffe** bilden die Fundamente mathematisch-naturwissenschaftlicher Argumentation und des Explikations- und Prädiktionspotentials ihrer Modelle. Sie muss daher ihren Ausgangspunkt in der Annahme intellektuell zugänglicher kosmischer Ordnungsrelationen nehmen.

In der modernen Mathematik spielen morphologische Invarianten mathematischer Konstruktionen eine wichtige Rolle. Abbildungen zwischen Vektorräumen, welche die lineare Struktur erhalten (also z.B. verträglich mit der Addition von Vektoren sind), nennt man 'Morphismen'. **Geometrie** als eine Möglichkeit der quantitativen mathematischen *Formalisierung* von Morphologie ist einer der Ausgangspunkte der modernen Naturwissenschaft mit Wurzeln in der griechischen Antike. Ein anderer ist die Zahlentheorie, beide besonders prominent in der Mathematik und Philosophie des Pythagoras. In der Geometrie steht der Begriff des **Messens** (z.B. Längen von Strecken, Winkel, Inhalte von Flächen, ...), ein genuin kontinuierlicher Prozess, im Vordergrund, in der Zahlentheorie der des **Zählens**, ein diskreter Prozess.

Descartes [8] hat sich systematisch um eine Übersetzung geometrischer Fragestellungen in Zahlen und Gleichungen, also eine Algebraisierung der (messenden) Geometrie, bemüht. Ein Zusammenhang von **kontinuierlichen** mit **diskreten mathematischen Konzepten**, eine weit reichende Fragestellung in der modernen physikalischen Modellbildung [35], ist insbesondere zentral für die Quantenmechanik und ihre mathematischen Modelle. Das Feld der 'Geometrischen Quantisierung' (siehe z.B. [56]) hat einen Bezug zur Mathematik von Morphologieaspekten. In diesen Beispielen geht es um einen Transfer '**Geometrie** → **Zahl**'.

Dieser Artikel beschäftigt sich mit Zusammenhang und Wechselspiel eines messenden und eines zählenden Blickpunkts auf Modelle der **chemischen Reaktionskinetik**. Vor diesem Hintergrund stellt sich die Frage, ob und in welchem Sinne ein *geometrischer* Formbegriff in der gegenwärtigen mathematisch-physikalischen Modellierungspraxis naturwissenschaftlicher Phänomene im Sinne eines entgegengesetzten Transfers '**Zahl** → **Geometrie**' als ein zeitgemäßes wissenschaftliches Paradigma (Morphologieparadigma) aufgefasst werden kann. Die Geometrie spielt dabei die Rolle eines deskriptiven, nicht-ontologischen mathematischen 'Abbildes' quantitativer Zusammenhänge physikochemischer Phänomene. Die Diskussion am Beispiel eines Modells chemischer Reaktionskinetik geht hier über formhaft-substantielle Attribute von Materie in dem Sinne hinaus, dass ein **Prozess**, die chemische **Wechselwirkung** von Materie modellhaft *more geometrico* formalisiert wird. Die Ursache für den Prozess wird interpretiert als geometrisch modellierte abstrakte **chemische Kraft** und die Dynamik des Reaktionsprozesses als Wirkung. Eine unseren intuitiven Anschauungen imprägnierte geometrische Form kann im Sinne einer *visio intellectualis* durchaus als archetypisch aufgefasst werden ('*Geometria est archetypus pulchritudinis mundi*' [25]). Das verleiht der Geometrie mit Blick auf einen **a priori Rahmen mathematischer Modellierungskonzeptionen** möglicherweise einen symbolischen Primatstatus gegenüber anderen *formae*. Siehe hierzu z.B. [27], S. 220, und dortige Verweise auf [40].

Geometrische Eigenschaften können in einer mathematischen Modelltheorie zu Repräsentanten von abstrakten physikalischen Kräften werden, die als kausale Ursachen für dynamische Prozesse interpretierbar sind. Das generelle Potential einer derartigen Funktionalität geometrischer Modelle mit physikalischem Wirklichkeitsbezug sieht schon Bernhard Riemann in seinem Habilitationsvortrag [47] im Jahre 1854 und auch Immanuel Kant stellt 100 Jahre zuvor den Bezug zwischen der Geometrie des Raumes und wirkenden physikalischen Kräften [23], [24] her. Die moderne Physik hat in vielen Teilbereichen diese Auffassung in ihren Modelltheorien umgesetzt (z.B. [14]). Das prominenteste Beispiel ist die Einstein'sche Gravitationstheorie.

In der chemischen Reaktionskinetik sind geometrische Ansätze weit weniger verbreitet. Das zentrale Thema dieses Artikels ist eine Umsetzung des Geometrieparadigmas

für die chemische Reaktionskinetik entlang der oben dargelegten Linien. Im **atomistischen Bild** sind die kausal-mechanistischen kinetischen **Modelle chemischer Reaktionen algebraischer Natur** und haben die Form von Reaktionsraten/geschwindigkeits-Gleichungen, die sich aus einer statistischen Betrachtung der Anzahl reaktiver Molekülstöße mit Hilfe elementarer wahrscheinlichkeitstheoretischer Überlegungen auf der Basis von Stoßhäufigkeiten ergeben. Diese algebraischen Gleichungen haben den **Charakter des Zählens** und sind mathematisch gesehen Differentialgleichungen, d.h. sie beschreiben, wie sich lokal die Anzahl verschiedener Moleküle in einem infinitesimalen Volumen eines Fluids (Gas oder Flüssigkeit) mit der Zeit verändert. Der paradigmatische Grundgedanke des Modellierungsansatzes ist hier zunächst ein Kausalzusammenhang zwischen einem energetisch qualifizierten Molekülstoß und dadurch induzierter chemischer Reaktion. In der Terminologie von Aristoteles ist das eine klassische *causa efficiens*, eine Wirkursache. Ein global **geometrisches Bild** der chemischen Kinetik, das im Folgenden referiert wird, muss den Anspruch erheben, die mathematischen Eigenschaften des Gesamtsystems und deren physikalische Modellinterpretation vollständig in den Charakteristika der Geometrie, d.h. ihren metrischen Eigenschaften, abzubilden. Ein derartiger Modellansatz hat operativ genuin den **Charakter des Messens**.

Sowohl der Kausal- als auch der Formbegriff spielen im wissenschaftlichen Denken seit seinen Anfängen in der Antike eine zentrale Rolle. Im Anschluß an Cassirer [6] soll hier insbesondere auch der duale Charakter von *forma* und *causa* beispielhaft expliziert werden. Der Formbegriff im geometrischen Sinne hat eine lange Tradition in der Naturphilosophie und damit auch in der denkmodellhaften Rezeption der Wirklichkeit und ist insbesondere von Platon mit metaphysischer Bedeutung aufgeladen worden (z.B. platonische Körper - *corpora regularia* - und ihre Bedeutung im Dialog Timaios [42]). Systematisch behandelt wird der Formbegriff bei sowohl Platon als auch Aristoteles und hat dort einen direkten Bezug zur Relation von Sein (*forma*) und Werden (*causa*) [21]. 'Was ist das, was immer ist und kein Werden hat, und was ist das, was immer wird, niemals aber ist?' (Vortrag des Timaios [42]). Für die ionischen Vorsokratiker stand die Suche nach der **Ursache von Dynamik**, dem Werden, im Vordergrund (*rerum cognoscere causas* [7]). Platon fasst das **Erkennen der Form** (ewiges Sein und ein direktes Korrelat der Platon'schen Idee) als höchstes wissenschaftliches Ziel auf, das nur möglich sei, wenn exklusiv-polare Auffassungen von Sein und Werden überwunden werden. Das hat einen überraschend aktuellen Bezug bekommen mit der Chaos-Forschung des 20. Jahrhunderts [41], [17]. Hier haben sich anstelle von statischen gerade dynamische Formen im Zusammenhang mit sog. selbstorganisierenden (also spontan-autonom strukturbildenden) dynamischen Systemen als zentrale Elemente

einer Vielzahl komplexer Formen herausgestellt (dissipative Strukturen, siehe z.B. [41], [48]). Mit den dynamischen Strukturen, die durch die Dynamik selbst generiert und stabilisiert werden, wird schon in der Wortschöpfung eine Interpretation von *causa* und *forma* als polare Gegensätze dialektisch überwunden. Aristoteles bezeichnet eine derartige Verschmelzung der Pole mit dem Begriff **Formursache** (*causa formalis*).

Der Niedergang dieser integrativen Auffassung begann in der Renaissance auf Basis der Entwicklung neuer Erkenntnisideale *in statu nascendi* der modernen, mathematisierten Naturwissenschaft. Er schien nach dem durchschlagenden Erfolg der systematischen mechanischen Dynamik Galileis auf Basis gezielter idealisierter Experimente, Keplers Formulierung von quantitativen Gesetzen für die Planetenbewegung und als Höhepunkt der axiomatisierten Modellierung der Mechanik in Newtons Principia [39] final besiegelt zugunsten eines Primats mechanischer Kausalität im Sinne einer konsequenten Elimination des Formbegriffs aus der fundamentalen Physik. Alleinige Gültigkeit des Kausalbegriffs liegt für Hobbes sogar definitorisch im Wesen der Philosophie (siehe [7], S. 448, Fußnote 3). Cassirer sieht an dieser Stelle eine Ursache für die wachsende Kluft zwischen Natur- und Kulturwissenschaften, da in letzteren ein rein mechanistischer Kausalitätsbegriff mit reduktiv-analytischem Explikationscharakter fehlt, welcher die moderne Naturwissenschaft methodisch prägt [7].

Der Erfolg des **feldtheoretischen Modellcharakters** und des damit korrelierten Wellenbilds von **elektromagnetischen Phänomenen** (Maxwell-Theorie [37]), darunter das Licht, markierte Mitte des 19. Jh. einen Wendepunkt im bis dahin in der mechanischen Physik dominierenden Bild materieller Teilchen und ihrer Dynamik in Raum und Zeit. Empirisch-experimentelle Befunde (Entwicklung der Quantentheorie) um 1900 schließlich identifizierten anschauliche, i.W. exklusive Wellen- und Teilchenvorstellungen als sich nicht notwendig gegenseitig ausschließende im gewissen Sinne dual-komplementäre, idealisierte Modelle zur begrifflichen Beschreibung bestimmter Phänomene der physikalischen Wirklichkeit unter ganz speziellen experimentellen Rahmenbedingungen. Die mathematische Abstraktion beider Beschreibungen ist in zentraler Hinsicht konsistent im Sinne einer formalen Zusammenführung (*Uniformisierung*) anschaulich dualistisch-exklusiver Blickpunkte, die sich auf der Ebene der rein mathematischen abstrakten Modellform eben nicht notwendig ausschließen müssen. Die mathematische *Formalisierung* zeigt also hier resolventen Charakter in dualen, aber konsistenten *Formulierungen* und Interpretationen von abstrakten Modellen. Ein ähnliches historisch präquantenmechanisches Beispiel von großer Bedeutung und zentralem Einfluß auf die Entwicklung der modernen mathematischen Modelltheorien der Naturwissenschaften ist im frühen 19. Jh. die Hamilton-Jacobi-Theorie im Rahmen der Lagrange-Hamilton-Fassung klassischer Newton-

Mechanik mit ihren Wirkungswellen und ihrer Formalanalogie zur Relation von Wellen- und Strahlenoptik. Diese Theorie hat später de Broglie und Schrödinger (z.B. [22]) inspiriert, in einer mechano-optischen Analogie Begriffe wie Materiewellen und Wellenmechanik zu prägen, zentrale Ausgangspunkte für die Entwicklung der Quantenmechanik. Das Königsbeispiel für eine moderne naturwissenschaftliche Theorie, die in physikalischem Inhalt und mathematischem Modell eine vollendete Verschmelzung von *causa* und *forma* exemplifiziert, ist **Einsteins geometrodynamische Gravitationstheorie** [11], die ihren Ursprung ebenfalls um die Jahrhundertwende 1900 hat. Die Gravitationskraft als modellhafte *causa* für mechanische Bewegungen löst sich hier vollkommen in *forma geometrica causalis* der **Raumzeitmannigfaltigkeit** auf. Dynamik, in diesem Fall die zeitparametrisierte räumliche **Bewegung von Materie**, wird durch ein rein geometrisches Charakteristikum der Raumzeit vollständig bestimmt, die **Geodäten** (Kurven extremer Länge gemessen in einer nicht-euklidischen Metrik, die wiederum durch die Masseverteilung im Raum bestimmt ist). Eine Standard-Textbuchreferenz zum geometrischen Blickpunkt auf die allgemeine Relativitätstheorie ist auch heute noch 'Gravitation' [38]. Die Einstein'sche **Feldtheorie der Gravitation** ist eine durch und durch geometrische, in der die Rollen von Bühne und Akteur (kausale Dynamik von Materie in Raum und Zeit) inseparabel verschmelzen [54]. Die Materie bestimmt die Geometrie der Raumzeitmannigfaltigkeit und damit die Gesetze ihrer eigenen Bewegung durch Wechselwirkung mit dem Raum in Form einer Rückkopplung. Dadurch sind alle Aspekte (Gravitation, Trägheit, Raum und Zeit, Materie und ihre Bewegung) irreduzibel miteinander verbunden, eine Separation ist - auch im mathematischen Modell - ohne weitere Näherungsannahmen i.A. nicht mehr möglich. Genau das ist der Hintergrund des **Äquivalenzprinzips**, der **Entsprechung und Identifikation von träger und schwerer Masse** und eine tiefliegende mathematisch-geometrische Interpretation der physikalischen Phänomene, die rein empirisch betrachtet rätselhaft bleibt.

Interessant ist hier, daß der geometrische Bezug vor dem Hintergrund der zentralen Forderung der Unabhängigkeit (Invarianz) der physikalischen Gesetze vom (beliebig wählbaren) Bezugssystem in Raum und Zeit auf sehr natürliche Art und Weise ins Spiel kommt. Geometrische Eigenschaften selbst stellen sich schließlich im Modell als die zentralen Invarianten heraus (**Kovarianzprinzip**). Dieser Aspekt ist gleichsam konstitutiv für das gesamte Theoriegebäude. Nicht zuletzt wohl wegen des mit ihr verbundenen erkenntnistheoretisch revolutionär-paradigmatischen Moments bezeichnete J.J. Thompson die allgemeine Relativitätstheorie als 'eine der größten Errungenschaften in der Geschichte des menschlichen Denkens'.

Analogiebezüge zu den Grundkonzepten der allgemeinen Relativität und ihrer Mathematik werden im Kontext der

folgenden Ausführungen zur Entwicklung einer geometrischen Theorie chemischer Reaktionskinetik wiederholt hergestellt. Die Verbindung zwischen beiden Feldern wird im Folgenden mit dem Begriff **mechano-chemische Analogie** bezeichnet. Dabei wird die Dynamik eines chemischen Reaktionssystems identifiziert mit der Bewegung eines Massenpunktes auf einer Mannigfaltigkeit (abstrakte 'Fläche' in einem geeigneten Raum), die durch die kinetischen Modellgleichungen bestimmt wird.

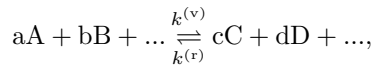
Der Versuch einer Entwicklung universeller physikalischer Theorien auf der Basis der paradigmatischen Grundgedanken der allgemeinen Relativitätstheorie während des 20. Jahrhunderts war lange Zeit von geometrischen Überlegungen geprägt, das gilt sowohl für die Suche nach einer allgemeinen Feldtheorie (z.B. Einstein, Weyl, Heisenberg u.a.) und einer Theorie der Materie (Weyl) als auch einer allgemeinen Geometrodynamik (Wheeler [53]). Diese Ansätze spannen den Bogen von der klassischen Physik bis hin zur Quantenfeldtheorie. Interessante philosophische Betrachtungen - sowohl aus der systematischen als auch der historischen Perspektive - zu Weyls Theorie der Materie, einer vereinheitlichten, universellen Feldtheorie, der Wheelerschen Geometrodynamik bis hin zu Theorien der Quantengravitation finden sich in [51].

Der Fortgang der Wissenschaft stellt sich vor diesem Hintergrund weniger als reine Entdeckungsgeschichte, sondern vielmehr als Entstehungsgeschichte von paradigmatischen Denkmethode und Denkstilen [13], [26] und ihrer Abarbeitung an empirischen Phänomenen dar. Dabei ist die Rolle der *forma* genuin die einer *forma intellectualis*, laut Cassirer ([5], S. 82) eben nicht Deskriptum starrer Strukturen, sondern gerade das aktiv-kreative Moment der modellierenden Wissenschaft, also eine vitale, dynamische Form, ein methodologisch-intellektuelles Analogon zu den oben genannten dynamischen Strukturen in der Chaos-Forschung. Cassirer sieht die Aufgabe der Physik vor diesem Hintergrund darin, empirisch-experimentelle Phänomene (*Data*) und theoretisch-naturwissenschaftliche Denkformen fortschreitend aufeinander zu beziehen. Als zeitgenössisches Beispiel eines solchen Prozesses kann auch die in Kap. II und III nachgezeichnete **Morphogenese einer geometrischen Feldtheorie chemischer Reaktionskinetik** vor dem Hintergrund einer mechano-chemischen Analogie rezipiert werden.

## II. ZÄHLEN: ATOMISTISCH-ALGEBRAISCHE MODELLE CHEMISCHER REAKTIONSKINETIK

Die **originäre Form chemisch-kinetischer Modelle** sind Ratengleichungen für zeitliche Stoffmengen- bzw. Konzentrationsänderungen der am Reaktionsgeschehen beteiligten chemischen Spezies. In elementarkinetischer Modellierung (Stoßtheorie unter Annahme massiv-materieller Gestalt von Atomen und Molekülen) bilden die einzelnen Geschwindigkeitsgleichungen **molekulare Stoßprozesse** wahrschein-

lichkeitstheoretisch ab, Stoßhäufigkeiten werden unter der Annahme statistischer Unabhängigkeit der thermischen Molekülbewegungen (entweder in der Gasphase oder in flüssiger Lösung) als proportional zur Zahl der vorhandenen Moleküle der jeweils reagierenden chemischen Spezies angenommen. D.h. man **zählt** in diesem algebraischen Modellsatz im Prinzip reaktive Molekülstöße pro Zeiteinheit. Ein Einzelreaktionsschritt mit beteiligten chemischen Spezies A, B, ... läßt sich formal folgendermaßen notieren:



Hoch gestellte (v) und (r) beziehen sich auf Vorwärts- bzw. Rückwärts-Reaktionen.

Die Änderungsrate (Ableitung nach der Zeit) der Konzentration [A] z.B. wird über eine Differentialgleichung 1. Ordnung (**Kinetisches Geschwindigkeitsgesetz**)

$$\frac{d[A]}{dt} = -k^{(v)} \cdot [A]^a [B]^b \dots + k^{(r)} \cdot [C]^c [D]^d \dots \quad (1)$$

$$k^{(v,r)} = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) - \text{Arrhenius Gesetz} -$$

beschrieben.

Die ganzen Zahlen  $a, b, \dots$  repräsentieren im Falle von Elementarreaktionen gerade die Molekularität der Reaktion, d.h. wieviele Moleküle jeder Spezies an einem der Reaktion notwendig und kausal vorausgehenden einzelnen Stoßkomplex beteiligt sind,  $t$  ist die Zeit. Die Vorfaktoren  $k_i$  (Ratenkoeffizienten) enthalten im einfachsten und i.A. üblichen Arrhenius-Modell einen sterischen Faktor  $A$ , der die räumlich-geometrischen Voraussetzungen eines reaktiven Stoßes nicht-kugelförmiger Moleküle heuristisch erfasst sowie eine exponentielle Abhängigkeit des Stoßerfolges (im Sinne einer kausal induzierten Reaktion durch Öffnung und Neuknüpfung chemischer Bindungen innerhalb der stoßenden Moleküle) von einem reaktionsschrittspezifischen Parameter (Aktivierungsenergie  $E_A$ ) und der Temperatur  $T$  des Systems.

Mathematisch sind diese elementarkinetischen Gesetze vom sog. Massenwirkungstyp **polynomiale Differentialgleichungen**, also klassisch **algebraische Modelle**, welche aus Summen und Differenzen von Potenzen der Variablen bestehen. Die Modelle sind **nichtlinear**, d.h. hier, es kommen Produkte von Spezieskonzentrationen vor. Und da das Reaktionsphänomen i.d.R. aus einer Vielzahl von Einzelreaktionsschritten (zusammen genommen genannt Reaktionsmechanismus) mit einer Vielzahl beteiligter chemischer Spezies A, B, ... besteht, sind sie **hochdimensional und hochgradig gekoppelt**. Das macht es i.A. unmöglich, eine geschlossene analytische Lösung zu berechnen. Stattdessen werden numerische Computersimulationen auf der Basis von Näherungsalgorithmen eingesetzt. Der konzeptuelle strukturelle Informationsgewinn aus einer großen Menge

numerisch berechneter Lösungskurven (quantitative Zeitverläufe der Konzentrationen aller chemischer Spezies) allein ist jedoch gering und letztlich lediglich eine Sammlung einer Vielzahl von virtuell generierten Daten (**Zahlen**). Eine Interpretation ist hier ohne ein 'morphologisches Ordnungskonzept' schwer vorstellbar.

Ein ausgezeichnete 'Punkt' in den Modellen ist das sog. chemische Gleichgewicht, algebraisch betrachtet eine Nullstelle der rechten Seite der elementarkinetischen Differentialgleichungen vom Typ (1). Hier werden alle Reaktionsraten  $\frac{d[A]}{dt}, \frac{d[B]}{dt}, \dots$  null und die Reaktion ist vollständig abgeschlossen in dem Sinne, daß sich makroskopische Quantitäten (Spezieskonzentrationen) in der Zeit nicht mehr verändern. Im elementarkinetischen Modell wird der Gleichgewichtspunkt unter geeigneten Bedingungen an das System zeitasymptotisch (d.h. im Grenzwert  $\lim_{t \rightarrow \infty}$ ) erreicht. Seine geometrische Bedeutung wird im folgenden Absatz diskutiert.

### III. MESSEN: VON MIKROSKOPISCHEN ZU MAKROSKOPISCHEN MODELLEN - DIMENSIONSREDUKTION KINETISCHER MODELLE *more geometrico*

Die ersten systematischen Versuche, mit Hilfe mathematischer Modelle das dynamische Verhalten **makroskopischer physikalischer Systeme** (repräsentiert durch Modelle mit wenigen Variablen) auf Basis **mikroskopischer Zustände** (Modelle mit vielen Variablen) theoretisch zu verstehen, gehen auf Ludwig Boltzmann zurück [1], [2]. Der **Skalenübergang** von *mikro* zu *makro* wird von Boltzmann statistisch begründet, indem er in seiner kinetischen Gastheorie der Moleküle Wahrscheinlichkeiten für Makrozustände proportional zur Zahl der mit diesen Makrozuständen konsistenten Mikrozustände einführt und dann solche Makrozustände identifiziert, die eine sehr hohe Wahrscheinlichkeit haben, also durch eine Vielzahl von Mikrozuständen realisiert werden, und einem relativ scharfen Verteilungsmaximum entsprechen. Das Ergebnis der Beschreibung solcher Makrozustände mit Hilfe einer im Vergleich zu den mikroskopischen Realisierungen sehr kleinen Anzahl von Parametern/Variablen ist eine Modellreduktion (Dimensionsreduktion), die ein mikroskopisch komplexes System (viele Variablen) nach einer kurzen, transienten Phase (schnelle Zeitskala) mit Hilfe der Mittelwerte einiger weniger makroskopischer Variablen beschreibt (langsame Zeitskala). Im Boltzmann-Bild entsprechen die Mikrovariablen den Orten und Impulsen einzelner Moleküle (Größenordnung  $10^{23}$  Teilchen), die Makrovariablen thermodynamischen Systemgrößen wie Druck, Temperatur, Volumen und Teilchenzahl. Das in dieser Arbeit nachgezeichnete **Modellreduktionskonzept** für dynamische Systeme chemischer Reaktionskinetik ist eine geometrisch formulierte Analogie eines derartigen Skalenübergangs, eine Fortführung der Boltzmann'schen gastheoretischen Grundgedanken hin zu che-

mischen Reaktionssystemen mit einer Vielzahl von chemischen Spezies, die auf unterschiedlichsten Zeitskalen in Elementarreaktionsschritten wie in Kap. II ausgeführt miteinander reagieren. Der Boltzmann'sche Skalentransfer bezieht sich auf den komplexitätsreduzierenden Übergang von der mechanischen Bewegung einzelner Moleküle im Reaktionsgeschehen (beschrieben durch die zeitliche Entwicklung von Wahrscheinlichkeitsdichten) zu den algebraisch-kinetischen Modellen für Mittelwerte von Spezieskonzentrationen (kinetische *mean-field*-Modelle). Die ganze Verteilungsfunktion wird also durch ihren Mittelwert ersetzt.

Die hier referierte Modellreduktion chemisch-kinetischer *mean-field* Modelle zielt in einem Folgeschritt darauf, das Systemverhalten nicht mehr auf der Basis aller beteiligten chemischen Spezies als Zustandsvariablen, sondern mit Hilfe einer echten Teilmenge aller Spezies zu beschreiben, welche eine 'verallgemeinerte Fläche' (Teilmenge, genannt **Mannigfaltigkeit**) des Phasenraums parametrisiert (rote Kurve in Abb. 1: 1-dimensionale Mannigfaltigkeit, gelb-umrandete Fläche: 2-dimensionale Mannigfaltigkeit). Es folgt zunächst eine nicht ganz präzise, aber **illustrative Erläuterung der grundlegenden Modellvorstellungen**, die einer derartigen **Geometrisierung der Modellreduktion** chemischer Kinetik zugrunde liegen. Im Anschluss werden diese in etwas technischeren Begriffen formalisiert und präzisiert.

Man stelle sich eine Menge kleiner Kugeln vor, die an den Anfangspunkten eines Reaktionsverlaufs - bestimmt durch gegebene Anfangskonzentrationen der beteiligten chemischen Spezies - an bestimmten Stellen auf einer multidimensionalen Fläche liegen und festgehalten werden, jede einzelne Kugel an einer anderen Position. Beim Start der chemischen Reaktion werde alle diese Kugeln losgelassen und beginnen sich zu bewegen (entlang der blauen Kurven in Abb. 1). Geschwindigkeit und Richtung der Bewegung werden bestimmt durch die Geometrie der Gesamtfläche, in **Analogie zu rollenden Massekugeln auf gekrümmten 2-dim. Flächen im 3-dim. Raum angetrieben durch die Schwerkraft**. Abhängig von der globalen Geometrie der Fläche werden die Kugeln die Tendenz haben, steile Berghänge schnell herunterzulaufen und sich in **Senken/Tälern der 'geometrischen Landschaft' zu sammeln**, und dann entlang der Talsole (z.B. gelb umrandete Fläche in Abb. 1) weiterlaufen. In einem bestimmten Tal werden also nach einiger Zeit mehrere Kugeln laufen und sich dabei nahekommen, wobei eine Kollision ausgeschlossen sein soll. Hat eine Kugel eine Talsole erreicht, wird sich ihr weiterer Weg nicht mehr deutlich von anderen Kugeln unterscheiden, welche auf ihrem vorhergehenden Weg dieselbe Talsole erreicht haben. Und die Kugeln werden aufgrund von Reibung langsamer werden, weil ihr Weg nicht mehr so steil ist. Vergisst man die Historie und die verschiedenen Ausgangspunkte der Kugeln, wird man also nicht mehr alle Kugeln brauchen, um die zukünftige Dynamik

des Reaktionsgeschehens abzubilden, es reicht im Prinzip eine Kugel pro Talsole, welche den Weg vieler anderer Kugeln nach Erreichen dieser Talsole in guter Näherung repräsentiert. Im weiteren Verlauf werden die Kugeln aus mehreren Tälern sich in anderen, noch tiefer gelegenen Tälern (z.B. rote Kurve in Abb.1) sammeln wie kleine Flüsse, die in größere münden. Es ist daher naheliegend, dass die Zahl der Freiheitsgrade (Zahl der Koordinaten), die für die Modellierung der Langzeitdynamik des Systems benötigt werden, sukzessive kleiner wird. Geht die Zeit gegen Unendlich, verschwinden alle Kugeln in einem Abfluss, der dem chemischen Gleichgewichtspunkt entspricht. Dann ist das System statisch (0-dimensional) und es wird nur noch eine einzige im Gleichgewichtspunkt fest liegende Kugel für eine Beschreibung benötigt.

Die zeitliche Bewegung einer Ausgangsmenge chemischer Zustände wird in der Theorie der Differentialgleichungen von Typ (1) ebenfalls ein (Phasen)Fluss genannt. Die Täler heißen in der Sprache der Geometrie **Mannigfaltigkeiten**. Auf ihnen bündeln die Flusslinien einzelner Zustände (blaue Linien in Abb. 1), so wie sich die Kugeln im oben illustrierten stark vereinfachten Analogie-Modell in Tälern sammeln. In diesem Sinne ersetzen die Mannigfaltigkeiten im reduzierten geometrischen Modell der chemischen Kinetik den **linearen Phasenraum** (3-dim. kartesisches Koordinatensystem mit den Spezieskonzentrationen als Axen in Abb. 1) der vollen Dimension  $n$  ( $n = 3$  in Abb. 1) in Form von nichtlinearen Kurven ( $k = 1$ ), Flächen ( $k = 2$ ) und i.A. in den Phasenraum der Dimension  $n$  eingebettete Untermannigfaltigkeiten der Dimension  $k < n$ . Wie die Täler im obigen Bild sind die Mannigfaltigkeiten durch die Geometrie des Gesamtsystems bestimmt und geometrische Kriterien zu ihrer Identifikation sind das Ziel der Modellreduktion. Der Zustand des Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt wird durch einen sog. Phasenpunkt (in Abb. 1 einen Punkt eindeutig festgelegt durch Koordinaten im 3-dim. Koordinatensystem) beschrieben, seine zeitliche Entwicklung im Verlauf der Reaktionsdynamik durch eine Linie (Phasenraumtrajektorie). Eine solche  $k$ -dimensionale Mannigfaltigkeit erlaubt die effektive Reduktion der Dimension des Modells von  $n$  auf  $k$  durch Abklingen (Relaxation) von  $n - k$  schnellen Modi (s. Abb. 1). Diese Modi entsprechen schnellen Anteilen der Reaktionsdynamik, also i.W. schnellen Elementarreaktionsschritten in Gleichung (1). In der geometrischen Illustration der Abb. 1 gehören schnelle Modi zu einer schnellen Dynamik orthogonal zur 1-dim. bzw. 2-dim. Mannigfaltigkeit, die langsamen zu tangentialen Richtungen der Mannigfaltigkeit. Der Modellreduktionsansatz erfordert als Prämisse die Annahme, dass nach kurzen, zeittransienten Initialphasen das mikroskopisch komplexe System bestehend aus einer Vielzahl von Molekülen und ihrer mechanischen Bewegung eben so weit relaxiert, d.h. hier chemisch abreagiert, ist, dass eine makroskopische Beschreibung der Dynamik mit einer **reduzierten Zahl**

an **Zustandsparametern** zulässig und mit Blick auf die Dynamik auf langen Zeitskalen ausreichend ist. Visualisiert man die in Kap. II. vorgestellten algebraischen Modelle der chemischen Kinetik im sog. Phasenraum erhält man typischerweise das Bild aus Abb. 1:

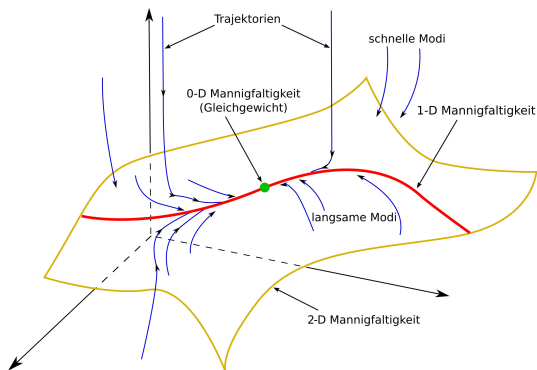


Abb. 1. (aus [10]) Schematische Abbildung eines 3-dimensionalen Phasenraums; 0-dimensionale (grüner Punkt: chemisches Gleichgewicht), 1-dim. (rote Kurve) und 2-dim. (gelbumrandete Fläche) langsame invariante Mannigfaltigkeiten (SIM, *slow invariant manifolds*) im 3-dimensionalen Phasenraum; blaue Kurven (Trajektorien): Lösungen der kinetischen Modellgleichungen (1) für verschiedene Anfangswerte der chemischen Spezieskonzentrationen, Koordinatenachsen: Konzentrationen chemischer Spezies

Die einzelnen Trajektorien (blaue Kurven), stellen Lösungen des Systems kinetischer Differentialgleichungen (1) zu verschiedenen Anfangswerten (Anfangskonzentrationen aller beteiligten chemischen Spezies) dar, die in positiver Zeit in Pfeilrichtung ausgehend von einem festen Anfangswert durchlaufen werden und im Grenzwert unendlicher Zeit den Gleichgewichtspunkt (grüner Punkt in Abb. 1) erreichen. Die Durchlaufgeschwindigkeit wird dabei im gewissen Sinne zunehmend kleiner und man beobachtet auf dem Weg ins Gleichgewicht i.d.R. ein geschachteltes **Bündelverhalten von Trajektorien** im durch die Koordinatenachsen aufgespannten Phasenraum. In der Illustration der Abb. 1 bedeutet das, dass beliebige die Reaktionsdynamik beschreibende blaue Kurven in der Zeit (in Pfeilrichtung) auf Mannigfaltigkeiten sukzessive kleiner werdender Dimension zulaufen, also von diesen Mannigfaltigkeiten 'attrahiert' werden, hier zuerst durch die gelb umrandete Fläche, dann entlang dieser Fläche durch die in dieser Fläche liegende rote Kurve und schließlich den auf dieser Kurve liegenden grünen Punkt des chemischen Gleichgewichts. Das Ergebnis ist eine hierarchische Abfolge von dimensionsreduzierten Modellen, die immer mehr schnelle Modi durch Projektion auf die entsprechende Mannigfaltigkeiten eliminieren, indem die Dynamik orthogonal zur jeweiligen Mannigfaltigkeit als relaxiert betrachtet und die effektive Dynamik auf die tangentialen Richtungen der Mannigfaltigkeit beschränkt wird. Die Ursache für das Bündelverhalten auf niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeiten beruht auf der Tatsache,

daß es **Zeitskalendifferenzen** in den einzelnen Reaktionsschritten gibt und einige Schritte relativ zu anderen deutlich schneller ablaufen. Dies führt dazu, daß nach transienten Zeitphasen in guter Approximation die **schnellen Reaktions-schritte** in Relation zu den langsamen tatsächlich als **quasi-relaxiert** betrachtet werden können und sich dadurch die effektive Dimension des dynamischen Systems reduziert. Eine **Berechnung der langsamen attrahierenden Mannigfaltigkeiten** gegebener Dimension, auf denen Trajektorien (Kurven) bündeln, kann zu **Dimensionsreduktionszwecken** genutzt werden, indem man das System auf die Mannigfaltigkeit beschränkt und nur noch den tangentialen Anteil der Dynamik modelliert. Die Wahl der Dimension der Mannigfaltigkeit bestimmt dabei die Zahl der 'eliminierten' schnellen Zeitskalen.

Duale Blickpunkte (Zahl und Form/Geometrie) auf dasselbe Phänomen sind hier auf der einen Seite das algebraische Kriterium, daß einzelne Reaktionsschritte in dem Sinne äquilibrieren, daß einige Vorwärts- und Rückreaktionen (fast) gleichschnell ablaufen, d.h. Netto-Reaktionsraten - die rechten Seiten der kinetischen Gleichung (1) - (fast) null werden. Auf der anderen Seite steht die geometrische Eigenschaft des Bündelns von Trajektorien im Phasenraum auf Mannigfaltigkeiten wie in Fig.1 illustriert. Eine Eigenschaft des Gleichungssystems (1) wird also geometrisch-morphologisch abgebildet.

Das geometrische Phänomen des Bündelns von Trajektorien auf attrahierenden Mannigfaltigkeiten im Phasenraum ist eine intrinsische Eigenschaft der Lösungsmannigfaltigkeit (Menge aller Trajektorien) und damit unabhängig von ihrer Beschreibung durch Koordinaten (Axen in Abb. 1). Das Herausarbeiten der **intrinsisch-geometrischen Charakteristika der Lösungsmannigfaltigkeit**, die zu dem Bündelverhalten führen, ist Programmatik und Ziel der hier referierten Arbeiten zur Modellreduktion chemischer Kinetik *more geometrico*. Die formale Analogie zur allgemeinen Relativitätstheorie ist unverkennbar, denn die Lösungsmannigfaltigkeit (Abb. 1) ist eine 'nicht-ebene' (nicht-euklidische) und die Bewegung eines Phasenraumpunktes (Systemzustand als Funktion der Zeit) auf der Lösungsmannigfaltigkeit ähnelt der Bewegung eines Massenpunktes in der gekrümmten Raumzeit. Führt man formal den Begriff von abstrakten chemischen Kräften ein, die das Reaktionsgeschehen treiben, liegt eine Geometrisierung dieses Kraftbegriffs sogar näher als die metrische Feldtheorie der Gravitation in der Allgemeinen Relativitätstheorie, in der die Metrik via Feldgleichung zunächst bestimmt werden muß und an die gravitationsinduzierte Dynamik der Materie gekoppelt ist. In der hier entwickelten geometrodynamischen Theorie chemischer Kinetik ist die Riemann-Metrik im gewissen Sinne durch die kraftfeldrepräsentierende Geometrie der Lösungsmannigfaltigkeit festgelegt, da die kinetischen Differentialgleichungen (1) auf der Modellebene die einzige Information über das System liefern.

Ein **metrisch-feldtheoretischer Zugang zur chemischen Reaktionskinetik** scheint vor diesem Hintergrund durchaus natürlich. In multizeitskaligen kinetischen Modellen kann man rein formal schnelle Elementarreaktionsschritte mit starken chemischen Kräften, langsame mit schwachen assoziieren.

Der hier thematisierte **geometrische Modellreduktionsansatz chemischer Reaktionskinetik** [30] identifiziert nun dasjenige Objekt (Mannigfaltigkeit und Teilmenge der gesamten Lösungsmannigfaltigkeit) festgelegter, aber frei gewählter Dimension, welches das Bündelverhalten der Trajektorien im Phasenraum auf der Basis der Zeitskalenseparation der einzelnen Elementarreaktionsschritte bestmöglich beschreibt (s. Abb. 1). Die Identifikation und analytische bzw. numerische Berechnung basieren vollständig auf geometrischen Konzepten, Ideen und Begriffen und der Formulierung und Lösung eines **Variationsprinzips** [28], [31], [32], [19]. Dabei werden Lösungstrajektorien (s. Abb. 1) mit Hilfe quantitativer geometrischer Kriterien (Zielfunktion) miteinander verglichen und ein Minimum der Zielfunktion identifiziert. Das entspricht einer Optimierung der Lösungstrajektorie, z.B. der Berechnung einer Geodäten (Trajektorie kürzester Länge gemessen in einer geeigneten Metrik).

**Kovarianz** (d.h. definierte Transformationsgesetze beim Übergang zwischen Koordinatensystemen) ist im geometrischen Bild der Modellreduktion, um mit Cassirer zu sprechen, ein regulatives Prinzip, analog zur Kovarianz in der Allgemeinen Relativitätstheorie und von zentraler Bedeutung für unseren Ansatz. Im Bild der Abb. 1 bedeutet Kovarianz, dass die mathematische Bestimmung die 1-dim. (rote Kurve, festgelegt durch eine Zahl/Koordinate als Funktion der Zeit) und 2-dim. (gelbe Fläche, festgelegt durch ein Paar von Zahlen/Koordinaten) Mannigfaltigkeiten intrinsisch geometrisch sein muss und nicht von der Wahl des (1-dim. bzw. 2-dim.) Koordinatensystems abhängen darf. Man kann die rote Kurve und gelbe Fläche beispielsweise durch eine beliebige Wahl einer Koordinatenachse bzw. einer Koordinatenebene parametrisieren und über den Graphen einer mathematischen Funktion beschreiben, ohne dass sie ihre bestimmenden geometrischen Eigenschaften ändern, die durch das Bündelverhalten von Trajektorien charakterisiert sind. Die Wahl der Koordinaten ist eine reine Konvention zur zahlenmäßigen Beschreibung und unabhängig von diesem Bündelverhalten. Im Gegensatz zu Einsteins Vorgehensweise in der Allgemeinen Relativitätstheorie mit seiner Bezugssystemargumentation ist das Kovarianzprinzip im Kontext Modellreduktion aber nicht primär physikalisch motiviert, sondern im Anschluss an die Modellmorphogenese (Phasenraumgeometrie) rein formalgeometrisch, denn die Lösungsmannigfaltigkeit und ihre Mannigfaltigkeiten wie die SIM haben eben intrinsische geometrische Eigenschaften, die unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems (Parametrisierung der Mannigfaltigkeiten) zu definieren sind. Für die Modellreduktion heißt

das, dass die lokal gewählte Parametrisierung der SIM (Variablen des reduzierten Modells) keinen Einfluss auf die definierenden Eigenschaften der SIM haben darf. Ein **notwendiges geometrisches, kovariantes Kriterium für die SIM** wurde kürzlich erhalten, das **Verschwinden der sog. Zeit-Schnittkrümmungen** im erweiterten Phasenraum [19]. Dieses Kriterium übersetzt die Eigenschaft der Invarianz der SIM (d.h. Trajektorien, die auf der SIM starten, bleiben auch auf der SIM) in ein punktweise auswertbares kovariantes geometrisches Kriterium. Für Spezialfälle wird im selben Artikel unter Bezugnahme auf [33] auch ein **hinreichendes Kriterium** zur Identifikation der SIM entwickelt, dessen Verallgemeinerung auf andere Modelle dynamischer Systeme, die Bündelverhalten von Trajektorien im oben illustrierten Sinne zeigen, steht jedoch noch aus. Jüngste Arbeiten ([10], [45], [34]) zeigen die Bedeutung von geometrisch motivierten Symmetrieüberlegungen in diesem Kontext sowie die Möglichkeit, in Spezialfällen die SIM als Geodäte bzgl. einer geeigneten Metrik aufzufassen (Lebiedz und Poppe 2018).

Interessant ist eine mögliche Interpretation der Lösung eines Variationsproblems (Extremum einer Zielfunktion) als duale Formulierung eines kausalen Kraft-Wirkungsmodells. In der klassischen Mechanik ist die damit verbundene Möglichkeit einer koordinatenunabhängigen Modellierung der Newton'schen Dynamik als Lagrange-Hamilton-Formalismus bekannt geworden. Ganz im Sinne einer Leibniz'schen 'Beste-aller-Welten-Idee' ist in der **Lagrange-Hamilton-Formulierung** die *causa efficiens* (Wirkursache im Sinne einer Newton'schen Kraft) zu einer *causa finalis* (Zweckursache, Minimierung einer Zielfunktion, Prinzip der kleinsten Wirkung) geworden. Beide Formulierungen sind unter geeigneten Voraussetzungen mathematisch dual und daher im gewissen Sinne äquivalent zueinander. Im Kontext der Modellreduktion dynamischer Systeme *more geometrico* zeigt sich insbesondere in einem analogen Dualismus erstmalig die Möglichkeit, für ein spezielles Differentialgleichungsmodell eine SIM exakt mit Hilfe eines Variationsprinzips zu charakterisieren [33], [9]. Die Hamilton-Mechanik schließlich lässt sich vollständig auf geometrische Aspekte reduzieren, das ist erstmalig von Jacobi umgesetzt worden [36]. Damit ist eine Verbindung zwischen dem geometrischen Bild von Geodäten in einer geeigneten Riemann-Metrik und einer variationellen Formulierung als Extremalprinzip hergestellt.

Eine Geometrisierung mechanischer Theorien entlang dieser Linie hat Historie im 19. Jahrhundert. So z.B. im Versuch von Hertz [20], den Kraftbegriff aus der Mechanik zu eliminieren unter Reformulierung der klassischen Mechanik in Begriffen der Differentialgeometrie. Auch Schrödinger in seinen Notizbüchern *Hertz'sche Mechanik und Einstein'sche Gravitationstheorie* und *Tensoranalytische Mechanik I-III* dokumentierte Arbeiten waren inspiriert von seinem Interesse an einer Erweiterung der klassischen

Mechanik unter Bezugnahme auf Ideen der analytischen Mechanik (Lagrange-Hamilton), Einstein's allgemeiner Relativitätstheorie, Boltzmann's Statistischer Mechanik. Sie hatten u.a. das Ziel eines fundamentaleren Verständnisses der 'alten Quantentheorie' von Niels Bohr. Ihre Wurzeln haben die modernen **Geometrisierungsbemühungen klassisch-mechanischer Modelle** aber schon in der bereits erwähnten Hamilton'schen Formulierung der Lagrange'schen *Mécanique analytique* (1788) und ihrer Erweiterung durch Jacobi. Die weitere Entwicklung dieser Ideen bis zu Hertz ist eng verbunden mit der nicht-euklidischen Riemann'schen Geometrie und Grundkonzepten der Differentialgeometrie, die in der Mathematik mit Gauß und Riemann systematisch beginnen. Eine ausführliche Darstellung dieser Geometrisierungshistorie mit Blick auf die klassische Mechanik findet sich in Lützen [36].

#### IV. PHILOSOPHISCHE BEZÜGE EINES MORPHOLOGIE-PARADIGMAS PHYSIKALISCHER MODELLIERUNG

Die Axiomatisierung der Mathematik hat die Geometrie von Bezügen zu Anschaulichkeit und Wirklichkeit losgelöst und als formal-logisches Konstrukt intrinsisch etabliert. In dem Augenblick aber, in dem den axiomatisch implizit definierten Begriffen [12], [50] der Geometrie Gegenstände einen Komplex von physikalischen Phänomenen zugeordnet werden, wird sie in eben diesem Sinne zur NATURwissenschaft mit empirischem Bezug. Einstein nennt sie in diesem Fall in seinem Artikel 'Geometrie und Erfahrung' [12] praktische Geometrie in Abgrenzung zur rein axiomatischen Geometrie. Es bleibt erstaunlich, dass sich durch eine solche **Zuordnung** die **empirisch-erfahrbaren** und experimentell untersuchbaren **Strukturen der Physik** an vielen Stellen so erfolgreich **auf die der Geometrie abbilden** lassen. Im Kontext der in diesem Artikel reflektierten Entwicklung einer geometrischen Feldtheorie der chemischen Kinetik mit dem Ziel Modellreduktion, kann man angelehnt an die Argumentation in [49] die Wahl des Modellierungsparadigmas 'Geometrie' für den theoretischen Modellierungsrahmen als eine (von mehreren möglichen) auffassen. Im Blickpunkt eines **Paradigmakonventionalismus**, wie er z.B. von Henri Poincaré [44], [43] und später Carnap [3] und Reichenbach [46] (siehe jeweils auch [4]) für die physikalische Geometrie und ihren Wirklichkeitsbezug im Kontext mechanischer Vorgänge in Raum und Zeit vertreten wurde (siehe auch [15]), ist diese Wahl nicht zwingend und sogar i.W. frei (also in der wissenschaftlichen Praxis *de facto* eine Konvention). Die Zuordnung der geometrischen Begriffe zu physikochemischen Entitäten ist jedoch in Folge der als Ausgangspunkt gegebenen originär algebraischen Modelle der chemischen Kinetik nicht mehr frei und nicht ohne empirischen Bezug. Die Wahl des Modellierungsparadigmas muss sich also *a posteriori* rechtfertigen vor dem Hintergrund der zu untersuchenden physikalischen/mathematischen Fragestellung.

Die Kunst der Modellierung besteht darin, das Gesamtsystem aus (paradigmatisch gewählten) begrifflich-formalen Konstrukten der Mathematik einerseits und einem Phänomenkomplex (das ist bei der oben diskutierten Modellreduktion die Lösungsmannigfaltigkeit der algebraischen Differentialgleichungsmodelle (1)) andererseits soweit zur Deckung zu bringen, dass eine zu untersuchende Fragestellung (hier die Dimensionsreduktion der Modelle durch Projektion auf sinnvoll zu definierende Mannigfaltigkeiten) erfolgreich gelöst oder zumindest durch neue Einsichten ihrer Lösung näher gebracht werden kann. Das entspricht i.W. der weiter oben referierten Auffassung Cassirers, die erfolgreiche **Modellbildung als Prozess eines wechselseitigen Bezugs von Denkformen und empirischen Daten** zu verstehen, wenn man die 'empirischen Daten' hier als gegebene Lösungsmannigfaltigkeiten von Differentialgleichungen auffasst. Da die Geometrie ein Archetypus des Zusammenspiels von Form und empirischen Phänomenen in Raum und Zeit ist, liegt sie als Wahloption für einen Modellierungsrahmen tatsächlich in der Mathematik besonders nahe. Vor dem Hintergrund von Analogieargumenten ist zu bemerken, dass hier im Kontext der Modellreduktion chemischer Kinetik *more geometrico* die empirisch zugänglichen Phänomene bereits theoretischer Natur ist, repräsentiert durch das virtuelle Experiment, das Eigenschaften der Lösungsmannigfaltigkeit auf der Basis des originären algebraisch-kinetischen Modells von Differentialgleichungen mit Hilfe von Methoden der mathematischen Analysis oder Numerik/Computersimulation untersucht. Eine zentrale Bedeutung kommt hier wie in Einsteins Allgemeiner Relativitätstheorie [11] der Objektivität des Modellreduktionsansatzes zu, d.h. der Tatsache, dass die SIM als Mannigfaltigkeit nicht von der Wahl der Koordinaten (ihrer Parametrisierung) abhängen kann. Objektivität im Sinne einer Bezugssystem-unabhängigen Modellierung physikalischer Phänomene hat hier einen direkten Bezug zum regulativen Prinzip Kovarianz. Die Kovarianz ist also eine Bedingung an den mathematischen Rahmen einer geeigneten theoretischen Beschreibung. In Anknüpfung an Gedanken der Allgemeinen Relativitätstheorie bedeutet das physikalisch, dass alle möglichen Blickpunkte von Beobachtern in verschiedenen Bezugssystemen (Bewegungszuständen) auf ein physikalisches Phänomen in einer erkenntnistheoretisch befriedigenden und praktikablen Theorie zusammen geführt werden müssen. Arthur Eddington bezeichnete das mit dem in der Wortprägung eng an das Konzept der Modellbildung angelehnten Begriff **World Building** und dessen 'Sprache' im Kontext der Allgemeinen Relativitätstheorie ist die Tensoranalysis und Differentialgeometrie von Mannigfaltigkeiten. Dasselbe gilt für die hier skizzierte Modellreduktion dynamischer Systeme *more geometrico*.

Für tiefere Diskussionen von geometrischen Konzepten der Modellbildung und ihres Wirklichkeitsbezugs im Kontext der Allgemeinen Relativitätstheorie und damit auch



des paradigmaanalogen Themas dieses Artikels verweisen wir auf die umfangreiche Darstellung in [49], insbesondere einen Bezug zu transzendental-idealistischen Gesichtspunkten von Weyl und Eddington.

Im Gegensatz zur Geometrie der Raumzeit in Einsteins Allgemeiner Relativitätstheorie und den damit verbundenen Diskussionen um erkenntnistheoretische und ontologische Bezüge und Interpretationen, ist der reine Symbolcharakter der Geometrie und die damit verbundene **symbolische Konstruktion der Wirklichkeit** [52] im vorliegenden Fall der Geometrisierung chemisch-kinetischer Modelle unbestritten. Sie ist ein klassisches Beispiel für den Praxisbezug der Cassirer'schen **Theorie der symbolischen Formen** [6]. Bei der symbolischen Konstruktion wird ein **Netz von Symbolen mit einer inneren Beziehungsstruktur** als Gesamtsystem mit einer Reihe von korrelierten Phänomenen in Verbindung gebracht. Hier mit dem Ziel, eine wissenschaftliche Fragestellung innerhalb des Symbolstrukturnetzwerks abbilden und ggf. beantworten zu können bzw. ihrer Lösung näher zu bringen. Dabei müssen individuelle, z.B. geometrisch konstruierte, Komponenten des Symbolnetzwerks keinesfalls *realiter* mit Phänomenelementen korrespondieren, sondern vielmehr das Symbolsystem als Ganzes einen Bezug zu der wissenschaftlichen Fragestellung haben, welche den Anlass zur Modellbildung gegeben hat. Eine derartige Form von symbolischer Modellkonstruktion ist ein rein kreativer Prozess des problemlösenden Denkens, der vollkommen unabhängig von ontologischen Annahmen ist.

#### DANKSAGUNG

Der Autor dankt der Klaus-Tschira-Stiftung für die finanzielle Unterstützung des Projekts 'Robuste, effiziente Modellreduktion multi-zeitskaliger chemischer Reaktionsmechanismen mit Hilfe numerischer Optimierung'.

#### LITERATUR

- [1] L. Boltzmann *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*. In Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften 66, 275, K.-K. Hof- und Staatsdruckerei, Wien (1872)
- [2] L. Boltzmann *Vorlesungen über Gastheorie I und II*. Barth (Arthur Meiner), Leipzig (1896)
- [3] R. Carnap *Der Raum. Ein Beitrag zur Wissenschaftslehre*. Kant-Studien Ergänzungsheft 56, Reuther und Reichard, Berlin (1922)
- [4] M. Carrier *Raum-Zeit, Kap. 3.1.3 Die empirische Unterbestimmtheit der physikalischen Geometrie*. De Gryuter, Berlin New York (2009)
- [5] E. Cassirer *Zur Einstein'schen Relativitätstheorie - Erkenntnistheoretische Betrachtungen*. Gesammelte Werke, Felix Meiner Verlag (1920)
- [6] E. Cassirer *Philosophie der symbolischen Formen*. Gesammelte Werke, Felix Meiner Verlag (1923-29)
- [7] E. Cassirer *Zur Logik der Kulturwissenschaften - 5 Studien, Formproblem und Kausalproblem, 4. Studie 'Formproblem und Kausalproblem'*. Gesammelte Werke, Felix Meiner Verlag (1942)
- [8] R. Descartes *La Géométrie*. Anhang zu 'Discours de la méthode' (1637)
- [9] J. Dietrich *Trajectory based model reduction of dynamical systems using methods of optimal control*. Bachelorarbeit Universität Ulm (2015)
- [10] J. Dietrich *Symmetries of slow invariant manifolds*. Masterarbeit Universität Ulm (2018)
- [11] A. Einstein *Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie* Annal. Phys. 354, 769 (1916)
- [12] A. Einstein *Geometrie und Erfahrung*. Springer Berlin (1921)
- [13] L. Fleck *Entstehung und Entwicklung einer wissenschaftlichen Tatsache. Einführung in die Lehre vom Denkstil und Denkkollektiv*. (1935)
- [14] T. Frankel *The geometry of physics*. Cambridge University Press (2012)
- [15] M. Friedman *Geometry as a Branch of Physics: Background and Context for Einstein's 'Geometry and Experience.'* in D. B. Malament *Reading Natural Philosophy: Essays in the History and Philosophy of Science and Mathematics*. Open Court Chicago and La Salle (2002)
- [16] M. Friedman *Understanding space-time* Stud. Hist. Phil. Mod. Phys. 38, 216 (2007)
- [17] J. Gleick *Chaos - die Ordnung des Universums*. Droemer Knauer München (1998)
- [18] A. Grothendieck. *Säen und Ernten* (1983-1986)
- [19] P. Heiter and D. Lebedz. *Towards differential geometric characterization of slow invariant manifolds in extended phase space: Sectional curvature and flow invariance*. SIAM J. Appl. Dyn. Syst. 17, 732 (2018)
- [20] H. Hertz *Die Prinzipien der Mechanik*. Gesammelte Werke Bd. III, Barth, Leipzig (1894)
- [21] E. Jain, S. Grätzel. *Sein und Werden im Lichte Platons - Festschrift für Karl Albert*. Alber Freiburg München (2001).
- [22] C. Joas, C. Lehner *The classical roots of wave mechanics: Schrödinger's transformations of the optical-mechanical analogy*. Stud. Hist. Phil. Mod. Phys. 40, 338 (2009)
- [23] I. Kant *Gedanken von der wahren Schätzung der lebendigen Kräfte*. (1746)
- [24] I. Kant *Kritik der reinen Vernunft*. (1781)
- [25] J. Kepler. *Harmonices Mundi*. (1619)
- [26] T. S. Kuhn *Die Struktur wissenschaftlicher Revolutionen*. Suhrkamp Frankfurt (1967)
- [27] D. Laugwitz *Bernhard Riemann 1826-1866*. Birkhäuser Basel Boston Berlin (1996)
- [28] D. Lebedz, *Computing minimal entropy production trajectories: An approach to model reduction in chemical kinetics.*, J. Chem. Phys. 120 (2004), 6890-6897.
- [29] D. Lebedz *Entropy-related extremum principles for model reduction of dissipative dynamical systems*. Entropy 12, 706 (2010)
- [30] D. Lebedz, V. Reinhardt, J. Siehr *Minimal curvature trajectories: Riemannian geometry concepts for slow manifold computation in chemical kinetics*. J. Comput. Phys. 229, 6512 (2010)
- [31] D. Lebedz, J. Siehr and J. Unger, *A variational principle for computing slow invariant manifolds in dissipative dynamical systems*. SIAM J. Sci. Comp. 33 (2011), 703-720.
- [32] D. Lebedz and J. Siehr, *A continuation method for the efficient solution of parametric optimization problems in kinetic model reduction*. SIAM J. Sci. Comp. 35 (2013), A1584-1603 (2013)
- [33] D. Lebedz and J. Unger, *On unifying concepts for trajectory-based slow invariant manifold computation in kinetic multi-scale models*. Math. Comput. Modell. Dyn. Syst. 22 (2016), 87-112.
- [34] D. Lebedz, J. Dietrich, M. Heitel, J. Poppe. *Analytic continuation and differential geometry views on slow manifolds and separatrices*. 7th IWMRRF Trondheim, Norway (2019)
- [35] A. Lesne, *The discrete versus continuous controversy in physics*. Math. Struct. in Comp. Science 17, 1-39 (2007)
- [36] J. Lützen *Mechanistic images in geometric form - Heinrich Hertz's principles of mechanics.*, Oxford University Press (2005)
- [37] J. C. Maxwell *A dynamical theory of the electromagnetic field*. Phil. Trans. Royal Soc. London 155, 459 (1865)
- [38] C.W. Misner, K.S. Thorne, J.A. Wheeler. *Gravitation*. Freeman and Co. (1973)
- [39] I. Newton *Philosophiae naturalis principia mathematica*. (1687)
- [40] G. Nowak *Riemann's Habilitationsvortrag and the synthetic a priori status of geometry*. In Rowe and McCleary *The history of modern mathematics I*. Academic Press (1989)
- [41] I. Prigogine *Vom Sein zum Werden.*, Piper München Zürich (1992)
- [42] Platon *Timaios*.

- [43] H. Poincaré *Science and Hypothesis*. Walter Scott Publishing Co. (1905)
- [44] H. Poincaré *On the foundation of geometry* *The Monist* 9, 1 (1898)
- [45] J. Poppe, D. Lebedz. *Stretching-based diagnostics in a differential geometry setting*. Proceedings of 7th IWMRRF Trondheim, Norway (2019)
- [46] H. Reichenbach *Philosophie der Raum-Zeit-Lehre*. Gesammelte Werke, de Gruyter Berlin Leipzig (1928)
- [47] B. Riemann *Über die Hypothesen, welche der Geometrie zugrunde liegen*. In: *Abhandlungen der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen* 13, S. 133-150 (1868)
- [48] D. Ruelle, F. Takens *On the nature of turbulence*, *Comm. Math. Phys.* 20, 167 (1971)
- [49] T. Ryckman *The Reign of Relativity: Philosophy in Physics 1915-1925*. Oxford Studies in the Philosophy of Science (2005)
- [50] M. Schlick *Allgemeine Erkenntnistheorie, Kap. I Wesentliche Erkenntnis, Abschnitt 7 Implizite Definitionen*. Springer Berlin (1918)
- [51] N. Sieroka. *Geometrization versus transcendent matter: a systematic historiography of theories of matter*. *British Journal for the Philosophy of Science* 61, 769–802 (2010)
- [52] N. Sieroka *Umgebungen, Symbolischer Konstruktivismus im Anschluss an Hermann Weyl und Fritz Medicus*. Chronos Verlag (2010)
- [53] J. A. Wheeler *Geometrodynamics* Academic Press (1963)
- [54] H. Weyl *Raum, Zeit, Materie*. 5. Auflage, Springer Berlin Heidelberg (1923)
- [55] H. Weyl *Geometrie und Physik*. *Die Naturwissenschaften* 19(3), 5 (1931)
- [56] N.M.J. Woodhouse *Geometric Quantization*. Oxford University Press (1991)