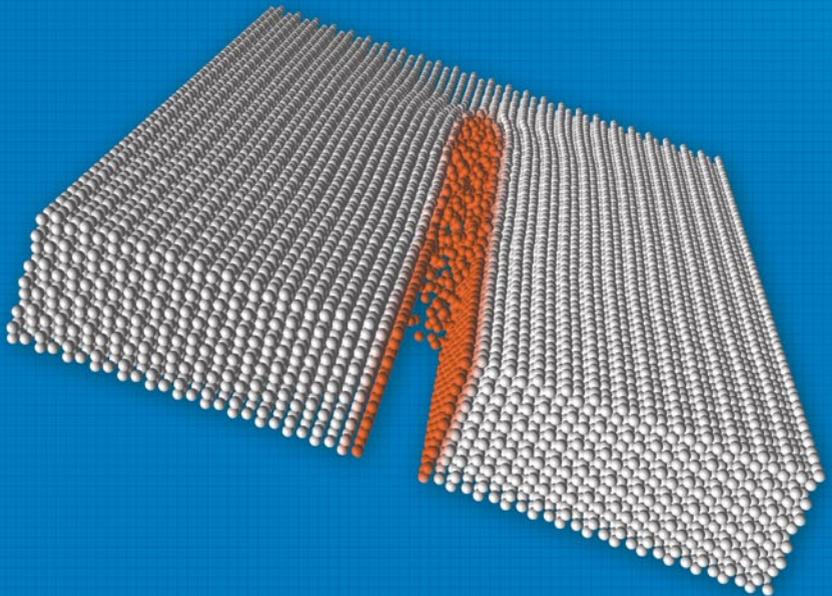


Universität Stuttgart

# Sonderforschungsbereich 716 Dynamische Simulation von Systemen mit großen Teilchenzahlen

AUF EINEN BLICK



SFB  716

Dynamische Simulation von  
Systemen mit großen Teilchenzahlen

Abbildung: Rissausbreitung in  
Aluminiumoxid, 75.000 Teilchen

# FORSCHUNGSPROGRAMM

## Entwicklung neuartiger Werkzeuge für komplexe Vielteilchensimulationen

Der Sonderforschungsbereich (SFB) 716 der Universität Stuttgart ist ein Verbundprojekt aus 13 Instituten. Darüber hinaus sind das Höchstleistungsrechenzentrum sowie das Visualisierungszentrum in das Projektnetzwerk eingebunden.

In rund 20 Teilprojekten forschen seit 2007 Wissenschaftler verschiedener Disziplinen gemeinsam an der Weiterentwicklung von Methoden zur dynamischen Simulation von Vielteilchensystemen.

### Simulationen in der Forschung

Dynamische Simulationen haben heute in vielen Bereichen unseres Lebens Einzug gehalten und sind aus Medizin, Biochemie und vielfältigen Entwicklungs- und Produktionsprozessen nicht mehr wegzudenken. Die Vorteile liegen auf der Hand: das Beantworten von Fragestellungen aus Technik und Natur durch Simulationstechnologien hat nicht nur einen ökonomischen Mehrwert und ergänzt experimentelle Analysen, sondern macht viele Untersuchungen überhaupt erst möglich.

### Entwicklung neuer Simulations- und Analysewerkzeuge

Die Mitarbeiter des SFB 716 wollen spannende, wissenschaftlich relevante Phänomene in Simulationen am Computer nachvollziehen. Ihr Blick richtet sich auf die Grundbausteine von Materie – die einzelnen Teilchen. Sie be-

rechnen das Verhalten eines jeden einzelnen Teilchens unter dem Einfluss seiner Nachbarpartikel und seiner äußeren Umgebung. Auf diese Weise lassen sich genaue Informationen über Struktur und Dynamik eines Vielteilchensystems erzielen. Damit verbunden ist jedoch auch die Verarbeitung von komplexen und sehr umfangreichen Datenmengen.

Die Vision ist es, die zahlreichen zwischen den Teilchen wirkenden Kräfte realitätsnah zu beschreiben und die räumliche und zeitliche Ausdehnung der simulierten Systeme zu steigern. Dafür entwickeln die Experten präzise und effizient implementierbare Kraftfelder, Vergrößerungen und Beschleunigungsverfahren und optimieren bestehende Algorithmen. Moderne Hardware-Architekturen kommen zum Einsatz und schließlich werden die riesigen Datenmengen mit geeigneten Visualisierungswerkzeugen interaktiv ausgewertet.

### Zusammenspiel verschiedener Fachgebiete

An diesen Zielen arbeiten Wissenschaftler des Maschinenbaus, der Physik, der Biochemie sowie der Informatik. Die enge Kooperation der unterschiedlichen Fachrichtungen spielt dabei eine bedeutende Rolle.

Im Mittelpunkt der Projektarbeiten stehen Strömungen und thermodynamische Prozesse, unterschiedliche Materialien und deren Verhaltensweisen sowie Problemstellungen in der Biochemie und Biophysik.

## Erprobung von Simulationsansätzen in verschiedenen Fachgebieten

### Vier Projektbereiche

Die Projekte sind in vier Bereiche unterteilt.



### Strömungsmechanik und Thermodynamik

Die Anwendungsgebiete erstrecken sich von der chemischen Prozess- und Verfahrenstechnik über die Medizin- bis hin zur Strömungstechnik aus dem klassischen Maschinenbau. Die Entwicklung neuer Simulationsmethoden für unterschiedliche Vorgänge aus diesen Bereichen ermöglicht es, diese zu untersuchen, besser zu verstehen und demzufolge zu optimieren.

Die Forscher konzentrieren sich unter anderem auf Nanopartikel, aus denen Nanomaterial für die Medizin hergestellt wird, oder auf spezielle Kristalle, die bei Filtern in der Ölindustrie Verwendung finden. Auch werden Vorgänge mit makroskopischen Teilchen untersucht, wie etwa die Rußentstehung bei Verbrennungen, oder Reibungsvorgänge mit Sand, die Maschinen oder Anlagen beschädigen können.

### Materialwissenschaften und Mechanik

Atomistische Computersimulationen spielen auch in der Mechanik und in den Materialwissenschaften eine zunehmende Rolle.

In diesem Projektbereich werden die Entstehung und der Verlauf von Rissen und Brüchen, Laserbestrahlung, Prozesssimulation und Festigkeitsermittlung unterschiedlicher Materialien beleuchtet.

### Biochemie und Biophysik

Die Simulation von Biomolekülen basiert auf komplexen, dynamischen Systemen und erfordert die Betrachtung langer Zeiträume sowie die Berücksichtigung großer Teilchenzahlen.

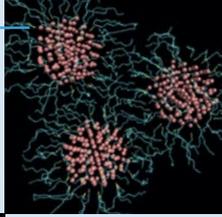
Zentrale Anwendungen sind die Untersuchung von Proteinen und DNA, etwa ihr struktureller Aufbau und ihr Verhalten in speziellen organischen Lösungsmitteln oder spezielle Transportprozesse durch Nanoporen.

### Skalierbare Algorithmen und effiziente Implementierung

Die für das Forschungsprogramm notwendigen Berechnungen sind nur mit umfangreichen Rechen-Clustern zu realisieren. Daher entwickeln die Wissenschaftler neue Modellierungsansätze, Speicher- und Verarbeitungsstrategien, die für massiv-parallele Umgebungen tragfähig sind und dabei skalierbare Leistung erzielen.

Ferner werden die erforderlichen Rechnerarchitekturen optimiert und innovative Visualisierungsansätze zur effizienten Analyse der immensen Datenflut entwickelt.

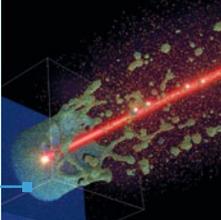
Wie sehen die Strukturen von Nanokristallen aus?



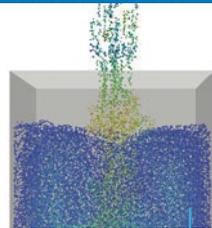
Mit Teilchensimulationen werden im SFB 716 verschiedene Phänomene aus Natur und Technik untersucht.

Diese beleuchten beispielsweise folgende Fragestellungen:

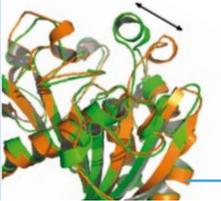
Wie verhalten sich Materialien bei der Bearbeitung mit Lasern?



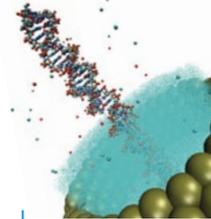
Welche Kriterien müssen Rechenarchitekturen für komplexe Teilchensimulationen erfüllen?



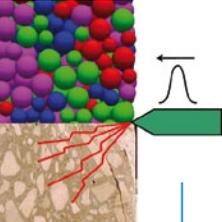
Wie kann das Verhalten von Proteinen optimal dargestellt werden?



Wie verhalten sich Proteine in industriell wichtigen, organischen Lösungsmitteln?



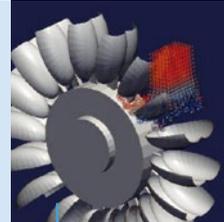
Was erzeugt in Getränkeabfüllanlagen unerwünschte Spritzer?



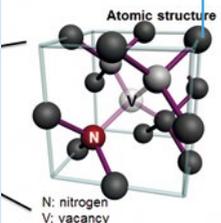
Wie lässt sich Diamant für den Einsatz in Biomarkern oder Sensoren gezielt verunreinigen?



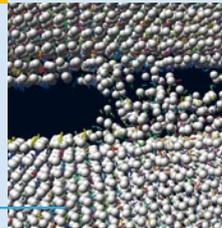
Wie verhalten sich Biomoleküle bei Transportprozessen in Nanoporen?



Wie verhält sich Beton, wenn es mit einem Meißel bearbeitet wird?



Warum und wie entstehen Risse in Festkörpern?



Wann entstehen Schäden an hydraulischen Maschinen?

Weitere Informationen unter

[www.sfb716.uni-stuttgart.de](http://www.sfb716.uni-stuttgart.de)

Förderung durch die

DFG