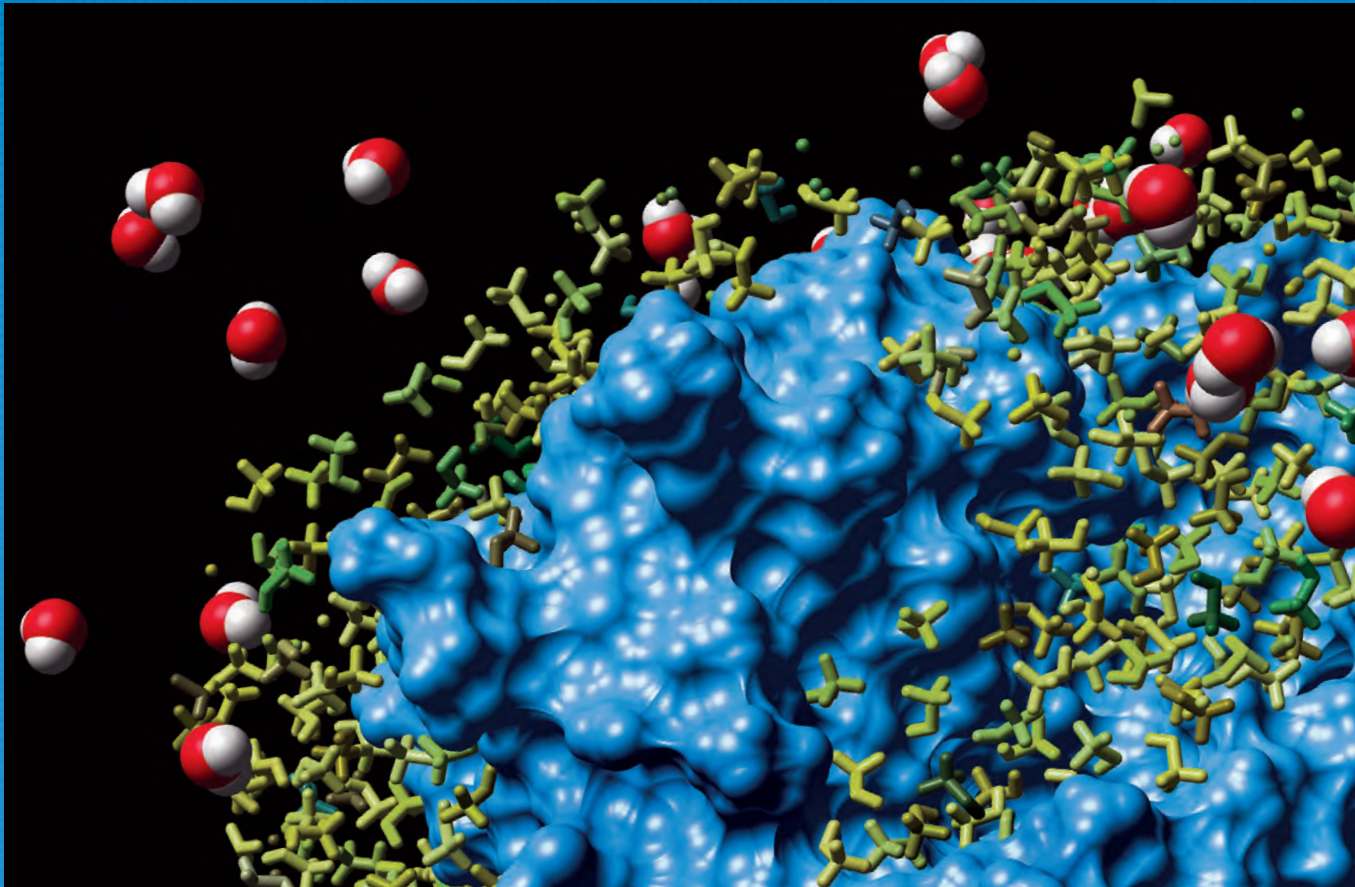


# Im digitalen Labor

Durch Computersimulationen die Welt verstehen



Wir arbeiten auf dem Gebiet der Simulationsforschung:



Universität Stuttgart

SFB  716

Sonderforschungsbereich 716  
Dynamische Simulation von  
Systemen mit großen Teilchenzahlen

### **Titelbild**

Computermodell eines Proteins (Candida Antarctica Lipase B) in organischem Lösungsmittel.

**SFB 716 PROJEKT C.1** | Modellierung des Einflusses von organischen Lösungsmitteln auf Lipasen

**Projektleitung** | Prof. Jürgen Pleiss, Institut für Technische Biochemie

### **SFB 716 PROJEKT D.4**

Visualisierung der Eigenschaften von Protein-Lösungsmittel-Systemen

**Projektleitung** | Prof. Thomas Ertl, Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart

## Impressum

### **Herausgeber**

Sonderforschungsbereich 716  
der Universität Stuttgart  
c/o Visualisierungsinstitut  
Allmandring 19, 70569 Stuttgart

V.i.S.d.P: Prof. Thomas Ertl,  
für den Vorstand des SFB 716

### **Konzept, Redaktion, Gestaltung**

Tina Barthelmes,  
Nora Hieronymus

### **Stand**

März 2016

### **Bildnachweis**

- S. 12 <http://de.wikipedia.org/wiki/ENIAC> (ENIAC),  
[http://de.wikipedia.org/wiki/John\\_von\\_Neumann](http://de.wikipedia.org/wiki/John_von_Neumann) (von Neumann),  
<http://de.wikipedia.org/wiki/Kernwaffe> (Atombombe),  
<http://de.wikipedia.org/wiki/Atomkrieg> (Kalter Krieg),  
[http://de.wikipedia.org/wiki/Bernie\\_Alder](http://de.wikipedia.org/wiki/Bernie_Alder) (Alder)
- S. 13 [http://en.wikipedia.org/wiki/WP-3D\\_Orion](http://en.wikipedia.org/wiki/WP-3D_Orion) (Grand Challenges)
- S. 22 Universität Stuttgart, Institut für Strahlwerkzeuge,  
Forschungsprojekt TopSpin (Spindüse)
- S. 23 <http://de.wikipedia.org/wiki/Pelton-Turbine> (Turbine)

Alle weiteren Bilder:

Sonderforschungsbereich 716,  
Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart



# Im digitalen Labor

Durch Computersimulationen die Welt verstehen

Informationsheft über aktuelle Projekte der Simulationsforschung,  
herausgegeben vom Sonderforschungsbereich 716 der Universität Stuttgart  
„Dynamische Simulation von Systemen mit großen Teilchenzahlen“

---

Wir arbeiten auf dem Gebiet der Simulationsforschung:



Universität Stuttgart

SFB  716

Sonderforschungsbereich 716  
Dynamische Simulation von  
Systemen mit großen Teilchenzahlen



# Vorwort

Liebe Leserin, lieber Leser,

in zahlreichen Fachgebieten sind Simulationen heute ein unverzichtbares Instrument in der Forschung und Entwicklung. Moderne Rechnerarchitekturen oder gar Höchstleistungsrechner machen Computersimulationen von zunehmend komplexer und größer werdenden Systemen möglich. Zehntausende von Prozessoren verarbeiten darauf innerhalb einer Sekunde mehr als eine Billion Rechenoperationen.

Doch auch wenn die moderne Computertechnik schnell und viel rechnen kann, versteht sie nur spezielle Sprachen und Rechenoperationen. Viele Prozesse aus der Technik und unserer Natur lassen sich jedoch nicht so leicht in Algorithmen und Formeln ausdrücken. Mit dieser Herausforderung sieht sich die aktuelle Simulationsforschung konfrontiert.

Obwohl Simulationen inzwischen ein Standardwerkzeug in der Forschung sind, werden sie noch immer aktiv weiterentwickelt. Naturwissenschaftler, Ingenieure und Informatiker arbeiten gemeinsam an neuen leistungsfähigen Algorithmen, um komplexe Vorgänge realistischer und in überschaubaren Zeiten simulieren zu können.

Die nächsten Seiten informieren Sie über die Möglichkeiten von Computersimulationen, ihre Vorteile und Grenzen, und zeigen zahlreiche Beispiele für ihre Anwendung auf.

Viel Spaß beim Lesen!

Prof. Christian Holm  
Sprecher des Sonderforschungsbereiches 716

Prof. Thomas Ertl  
Vorstandsmitglied des Sonderforschungsbereiches 716

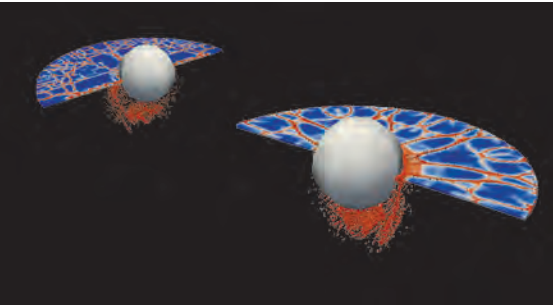


Prof. Christian Holm  
Professor für Computerphysik,  
Sprecher des SFB 716



Prof. Thomas Ertl  
Professor für Visualisierung und  
Interaktive Systeme,  
Vorstandsmitglied des SFB 716

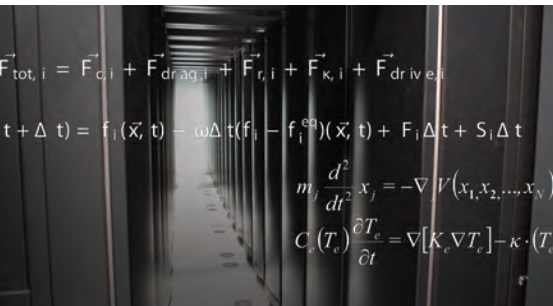
# Inhalt



**Virtuelle Welten** ..... 7  
Simulationen in Forschung und Entwicklung



**Ein Blick zurück** ..... 12  
Computersimulationen gestern und heute



**Schlaues Rechnen** ..... 15  
Vom Umgang mit großen Datenmengen



**Verborgenes sichtbar machen** ..... 17  
Von abstrakten Daten zu klaren Bildern

**Computermodell statt Labor? ..... 19**

Simulationen in der Biotechnik

**Vom Tüfteln zur Konstruktion ..... 21**

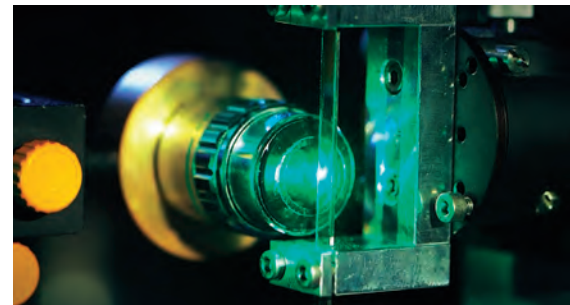
Simulationen für Maschinen und technische Verfahren

**Von Rissen und Brüchen ..... 23**

Simulationen erklären Materialdefekte

**Sonderforschungsbereich 716 ..... 25**

Simulationsforschung an der Universität Stuttgart

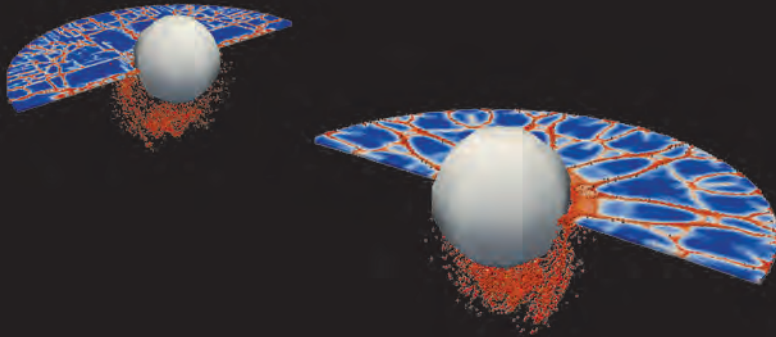






# Virtuelle Welten

## Simulationen in Forschung und Entwicklung



**Simulationen sind heute ein wichtiges Instrument zahlreicher Fachbereiche. Ob in Medizin, Maschinenbau, Physik und Chemie oder Materialforschung – Fortschritt ist heute ohne Simulationen kaum noch denkbar. Sie ergänzen entwickelte Theorien und Experimente und ermöglichen Einblicke in Bereiche, die uns sonst verwehrt blieben.**

### Forschung am Computer

In Simulationen wird ein Vorgang oder ein Objekt mit all seinen Veränderungen am Computer nachgebildet. Dabei wird die Realität soweit virtuell rekonstruiert, wie es die verfügbaren Mittel zulassen und die konkreten Fragestellungen erfordern. Wollen Wissenschaftler beispielsweise herausfinden, ob ein neuer Werkstoff den Beanspruchungen beim späteren Einsatz standhält, genügt es meist, kleine Materialproben zu betrach-

ten. Demgegenüber untersuchen Fahrzeugingenieure ihre Entwicklungen monatelang zunächst am Computer, bevor ein erster Prototyp gebaut wird.

In digitalen Experimenten können einzelne Parameter sowie mögliche Effekte und Auswirkungen bei verschiedenen Einflüssen virtuell getestet werden. Auf diese Weise lassen sich wichtige Details bereits im Vorfeld klären und neue Erkenntnisse finden.

Unter welcher Belastung bricht ein Material? Hier haben Wissenschaftler am Computer virtuell getestet, wann eine poröse Steinplatte durch das Auftreffen eines Gegenstandes zum Brechen kommt.

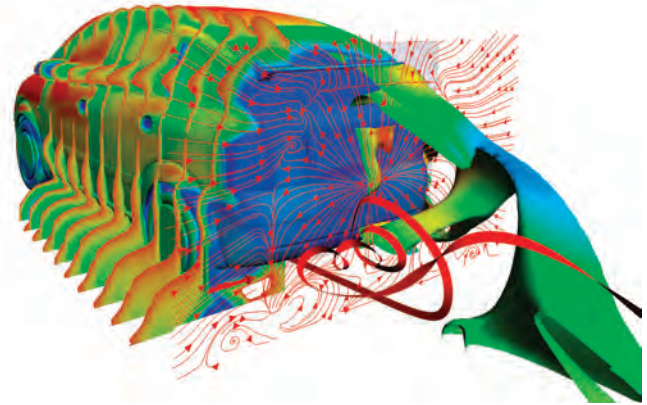
**SFB 716 PROJEKT D.7** | Gitterfreie Mehrskalen-Methoden für Festkörpersimulationen

**Projektleitung** | Prof. Marc A. Schweitzer, Institut für Numerische Simulation, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

## Wann wird simuliert?

Die Einsatzbereiche für Computersimulationen sind breit gefächert. Kaum ein Fachgebiet arbeitet heute ohne digitale Experimente: Mediziner, Biochemiker und Physiker, aber auch Materialwissenschaftler oder Ingenieure des Maschinenbaus und der Produktions- und Verfahrenstechnik sind auf sie angewiesen. Und das nicht ohne Grund, denn Simulationen bieten zahlreiche Vorteile:

- ▶ Simulationen liefern Einblicke in ansonsten unzugängliche Bereiche,
- ▶ Simulationen können in kürzerer Zeit und mit geringeren Kosten wichtige Erkenntnisse liefern,
- ▶ Simulationen erlauben eine zielgerichtete Analyse von Prozessen.



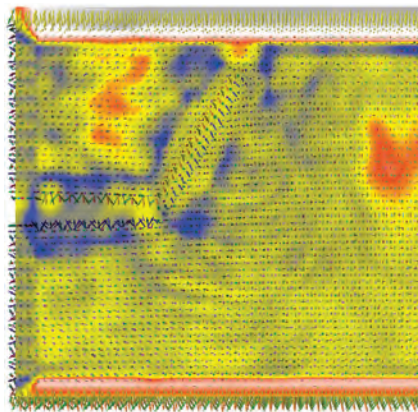
Ein neues Fahrzeug durchläuft in seiner 48-monatigen Entwicklung rund 1.000 Simulationen pro Woche, um das Verhalten beim späteren Einsatz zu testen. Erst dann wird ein Prototyp gebaut. Vorher wären reale Versuche zu aufwändig und kostspielig.

**SFB 716 PROJEKT B.1** | Molekulardynamik großer Systeme mit weitreichenden Wechselwirkungen

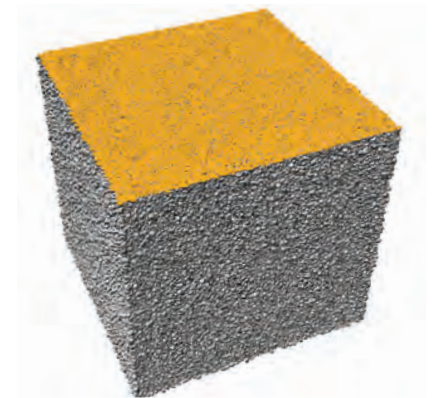
**Projektleitung** | Prof. Hans-Rainer Trebin, Institut für Theoretische und Angewandte Physik

**SFB 716 PROJEKT B.3** | Mesoskopische Simulation poröser Materialien mit körniger Mikrostruktur

**Projektleitung** | Prof. Rudolf Hilfer, Institut für Computerphysik



Der Ursprung von Rissen und Brüchen liegt meist tief im Inneren eines Materials. Zur Ergründung des Verlaufes solcher Defekte werden kleinste Materialproben auf atomarer Ebene untersucht. Für unser Auge ist dieser Bereich nicht zu erkennen, Simulationen sind dazu der einzige Weg.



Bei einem Erdölfund wird das vorhandene Gestein auf seine Durchlässigkeit untersucht. Ist diese ausreichend groß, wird ein Abbau gestartet. Simulationen, hier von einem Fontainebleau-Sandstein, können die erforderlichen Informationen liefern.

## Simulationen werden eingesetzt, wenn ...

### ... Versuche an der Größe des System scheitern.

Teilweise unterbindet die Größe eines Systems oder eines Prozesses die Untersuchung in Experimenten. So sind Nanopartikel viel zu klein und geologische oder astronomische Vorgänge viel zu groß, um sie überhaupt beobachten zu können oder gar Messungen vorzunehmen. Am Computer lassen sich die Vorgänge dennoch untersuchen.

### ... Versuche teuer sind.

Reale Tests zum Verhalten von Maschinen und Werkzeugen unter heftigen Schwingungen oder von Tragflächen eines Flugzeuges beim geplanten Einsatz können viel Geld und Zeit kosten. Simulationen ermöglichen hier Untersuchungen bei wesentlich weniger Aufwand.

### ... ein reales System noch nicht existiert.

Wo Vorhersagen über neue, noch gar nicht real existierende Materialien erforderlich sind, können Simulationen Eigenschaften bestimmen, etwa um das am besten geeignete Material für eine spezielle Anwendung zu finden.

### ... Simulationen leichter modifizierbar sind.

Simulationen kommen auch dann zum Einsatz, wenn ein Prozess virtuell wesentlich leichter modifiziert oder reproduziert werden kann als in einem realen Versuch. In numerischen Berechnungen können einzelne Parameter leicht konstant gehalten oder angepasst werden, etwa Temperaturen oder Druck. Im realen System ist das oft aufwendiger und teurer.

### ... Versuche an der Dauer eines Prozesses scheitern.

Wenn Prozesse sehr schnell oder sehr lange dauern, können viele Eigenschaften nicht oder nur sehr schwer beobachtet oder gemessen werden. Wie sich auch sehr große oder kleine Systeme am Rechner untersuchen lassen, kann auch die Zeit virtuell sehr schnell oder langsam ablaufen.

### ... Versuche zu gefährlich sind.

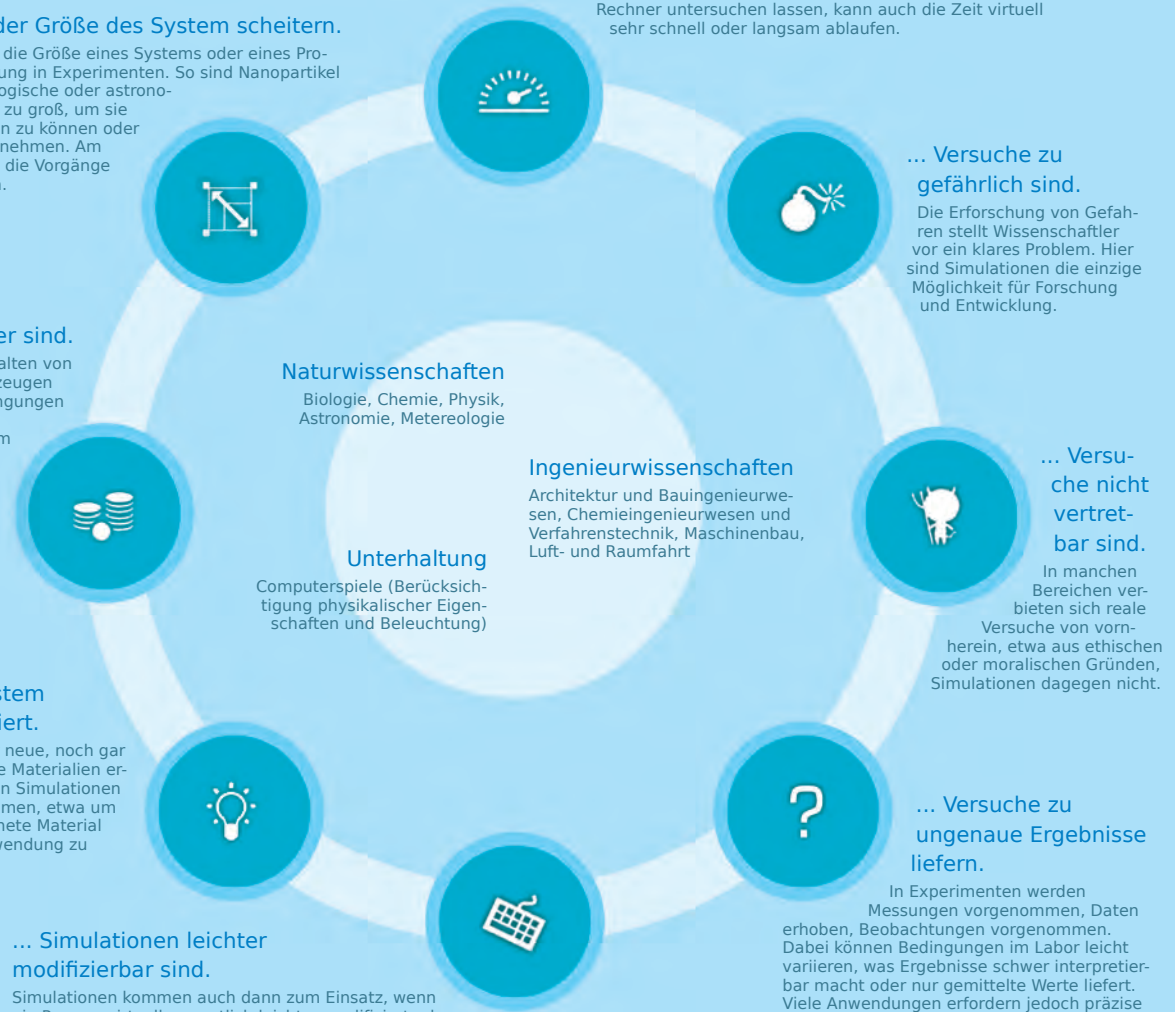
Die Erforschung von Gefahren stellt Wissenschaftler vor ein klares Problem. Hier sind Simulationen die einzige Möglichkeit für Forschung und Entwicklung.

### ... Versuche nicht vertretbar sind.

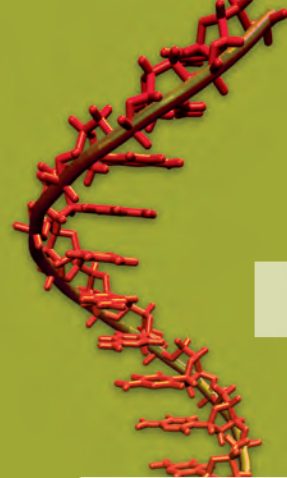
In manchen Bereichen verbieten sich reale Versuche von vornherein, etwa aus ethischen oder moralischen Gründen, Simulationen dagegen nicht.

### ... Versuche zu ungenaue Ergebnisse liefern.

In Experimenten werden Messungen vorgenommen, Daten erhoben, Beobachtungen vorgenommen. Dabei können Bedingungen im Labor leicht variieren, was Ergebnisse schwer interpretierbar macht oder nur gemittelte Werte liefert. Viele Anwendungen erfordern jedoch präzise Aussagen, wie sie Simulationen bereitstellen.



# Fragen durch Simulationen beantworten – so geht's!



**Realer Prozess bzw. Theorie**  
 Hier:  
 Erbgutanalyse per  
 DNA-Translokation

Die Vision: Mit winzig kleinen Nanoporen den exakten Aufbau eines DNA-Strangs auslesen. Dazu wird die DNA durch die Nanopore gefädelt, während eine Spannung zwischen den trennenden Reservoirs angelegt ist. Dieser Prozess ist schon länger Gegenstand aktueller Forschung. Es ist bekannt, dass die Basenpaare während des Transportvorgangs individuelle Signaturen ausgeben, wodurch man ihre exakte Abfolge und damit die Struktur der DNA ablesen könnte.

Bevor der Arzt ein Gerät in den Händen hält, das innerhalb kurzer Zeit das Ergebnis ausgibt, sind jedoch noch viele Fragen zu beantworten.

**Um die Details solcher Verfahren und ihre Realisierbarkeit zu klären, werden Simulationen eingesetzt.**

Habe ich eine Erbkrankheit?

Schnellere Analyse, rascher Befund, individuelle Therapie.

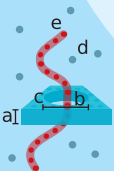
Wie verändern die Salzkonzentrationen den Vorgang?

Verstärken spezielle Moleküle an der Pore die Strompulse?

Welche Porengröße und -materialien sind geeignet?

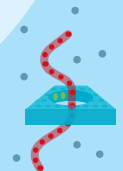
## Modellierung

Einflussgrößen bestimmen, Wechselwirkungen formulieren



## Integration

Einarbeiten der Erkenntnisse in den Prozess



## Numerik

Modell entwickeln und in Algorithmen übersetzen

$$F = m \cdot a$$

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2}$$

$x = ?$

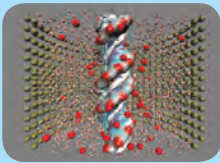
## Implementierung

Entwicklung einer Simulationssoftware

```
00110010010101
11100100101010
1101010 x = ? 01
11001000101101
```

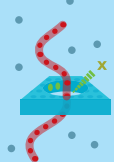
## Visualisierung

Veranschaulichung abstrakter Simulationsergebnisse



## Analyse

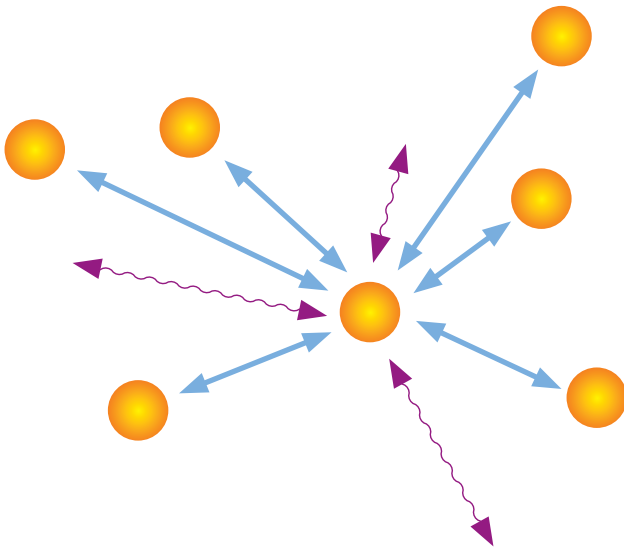
Auswertung der Ergebnisse, Vergleich mit Experimenten



### Ein Weg zum Computermodell – die Teilchen

Es gibt verschiedene Herangehensweisen, einen Prozess am Rechner zu rekonstruieren. Eine davon ist die Betrachtung der Teilchen. Dies können Atome, Moleküle, Sandkörner, Kristalle oder gar Planeten sein, ebenso Teile, in die sich ein System zerlegen lässt, etwa Elemente einer Flüssigkeit oder Körner eines Gesteins.

In der Simulation wird das Verhalten jedes einzelnen Teilchens berechnet. Dabei werden alle Kräfte, die zwischen den Teilchen wirken sowie äußere Einflüsse mit Hilfe der Physik und Mathematik beschrieben.



Methodik von Teilchensimulationen: Berechnung der Bahn eines jeden Teilchens unter Berücksichtigung aller kurz- und langreichweitigen Kräfte.

Je mehr Teilchen berücksichtigt werden, desto umfangreichere Daten gilt es zu verarbeiten. Beispielsweise enthält ein winzig kleines Tröpfchen Druckertinte mit einem Volumen von  $10^{-9}$  Kubikzentimetern etwa hundert Billionen Atome, das ist eine 1 mit 14 Nullen. Allein für die Speicherung der Positionen all dieser Atome würde man einen Höchstleistungsrechner benötigen. Will man darüber hinaus untersuchen, wie und wann der Farbtropfen auf dem Papier landet, müsste man für jeden weiteren Zeitschritt die neuen Positionen errechnen und abspeichern. Es wird schnell klar, dass diese enorme Flut an Informationen heute nicht so leicht verarbeitbar ist und sich nur sehr kleine Systeme abbilden lassen.

### Grenzen von Simulationen

Die begrenzten Rechenkapazitäten setzen Simulationen Grenzen, ebenso wie die Zeit und die Gelder, die man für die Entwicklung eines Computermodells zur Verfügung hat. Daher müssen Computermodelle soweit vereinfacht werden, dass sie berechenbar bleiben und dabei dennoch sinnvolle Ergebnisse liefern.

Oft ergibt sich ein enges Zusammenspiel zwischen Experiment und Simulation, etwa bei der Entwicklung eines Lasers oder neuer Biostoffe für spezielle Anwendungen. Hier werden die Erkenntnisse aus den Computerberechnungen mit jenen aus den Versuchen im Labor wechselseitig abgeglichen, um ein präziseres Ergebnis zu erhalten.

Sind experimentelle Versuche jedoch unmöglich, etwa wenn neue medizinische Verfahren erst entwickelt werden oder Prozesse zu klein für reale Beobachtungen oder Messungen sind, bieten Simulationen den einzigen Zugang zum Beantworten offener Fragen. Aber auch hier ist die ständige Überprüfung der Modelle für den jeweiligen Anwendungsfall ein wichtiger Bestandteil der Simulationsforschung.

# Ein Blick zurück

## Computersimulationen gestern und heute

Links: 1945 schuf der erste elektronische Großrechner ENIAC die Voraussetzung für die ersten einfachen numerischen Simulationsberechnungen.

Rechts: Heute bieten in Deutschland viele Supercomputer die Möglichkeit, komplexe Simulationsberechnungen durchzuführen. Einer dieser Großrechner steht am Höchstleistungsrechenzentrum in Stuttgart.



**Die Entwicklung von Computersimulationen begann in den 40er Jahren und ist eng mit dem Fortschritt in der Rechentechnik verbunden. Während zunächst vor allem militärische Anwendungen im Fokus standen, eroberten Simulationen nach und nach auch die Politik, die Naturwissenschaften oder den Fahrzeugbau.**



► Der Mathematiker John von Neumann verfasst ein Manifest über die Notwendigkeit des Digitalrechners. Anstoß ist die Stagnation der analytischen mathematischen Methoden, um partielle Differentialgleichungen zu lösen, vornehmlich in der Strömungsdynamik. Das ist das Geburtsjahr einer grundlegend neuen Methodik, der Computersimulation.



► Simulationen werden immer wichtiger, angetrieben vom zunehmend eskalierenden Kalten Krieg. Die Komplexität der Probleme und das Risiko bei Fehlentscheidungen ist groß. Die konkurrierenden Systeme wollen ihre Produktivkraft steigern und ständig neue Hochrisikotechnologien wie Kernkraft, Flugzeuge oder Raumfahrt entwickeln. Simulatoren werden vor allem gebraucht, um Menschen zu Bedienern von Maschinen zu machen. So sollen Großkatastrophen vermieden werden.

1945  
Universalsrechner ENIAC

1945  
Notwendigkeit Digitalrechnen

1945  
Erste Simulationen

1945 - 1952  
Whirlwind Flugsimulation

1955  
Stellenwert steigt

1957  
Simulationsstudie in den USA

1957  
Erste molekulare Simulationen

1960  
Weitere Supercomputer



► Computersimulationen werden 1945 erstmals auf dem ersten rein elektronischen Universalrechner ENIAC im Rahmen der amerikanischen Forschung an der Wasserstoffbombe genutzt. Kontrollierte Laborexperimente sind in diesem Bereich kaum möglich. Stochastische Simulationen werden eingesetzt und ermöglichen erst die Konstruktion der Wasserstoffbombe.

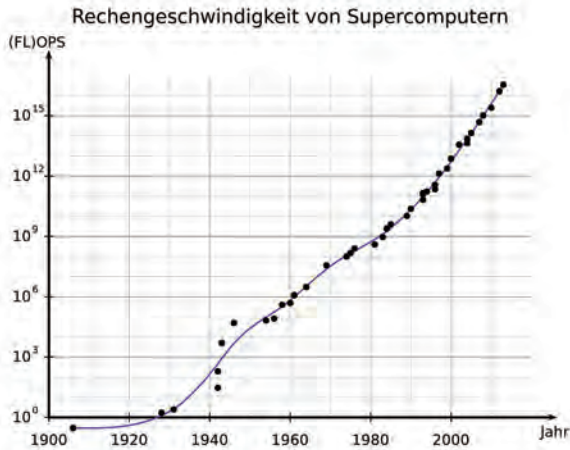
► Der erste Artikel über Moleküldynamik-Simulationen, bei denen jedes Atom oder Molekül eines Systems abgebildet wird, entsteht 1957. Die Wissenschaftler B. J. Alder und T. E. Wainwright studieren in den USA ein Modell mit einigen hundert Teilchen, die untereinander elastische Stöße ausführen, und berechnen zugehörige Phasendiagramme, wobei sie die Existenz eines Phasenwechsels von flüssig nach fest entdecken. Sie gelten als Erfinder dieser Simulationsmethode.



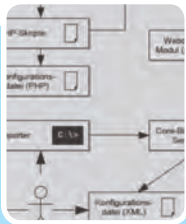
### Großrechner ermöglichen erste Simulationen

Der erste rein elektronische Universalrechner wurde 1942 im Auftrag der amerikanischen Armee entwickelt und 1945 fertiggestellt. Noch im gleichen Jahr wurden die ersten Computersimulationen darauf gerechnet. Die kontinuierliche Weiterentwicklung der Computertechnologie, vor allem steigende Rechengeschwindigkeiten und Speicherkapazitäten, erweiterten die Möglichkeiten für numerische Berechnungen.

Angetrieben vom zunehmend eskalierenden Kalten Krieg und dem damit verbundenen Wettrüsten der beteiligten Systeme wurden in den 50er Jahren Simulationen immer wichtiger. Die Komplexität der Probleme und das Risiko, bei Fehlentscheidungen entweder vom Feind überrannt oder gleich nuklear ausgelöscht zu werden, war einfach zu groß. Die befeindeten Blöcke versuchten, ihre Entscheidungs- und Planungsprozesse zu optimieren. Im Fokus stand die Steigerung der Produktivkraft sowie das Vorantreiben ständig neuer Hochrisikotechnologien wie der Kernkraft, der Flugzeug-

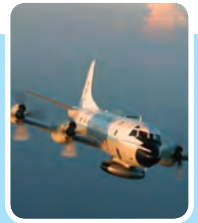


Entwicklung der Rechengeschwindigkeit von Supercomputern (Quelle: <http://de.wikipedia.org/wiki/Supercomputer>).



► Der Prozess der formalisierten Modellbildung wird zunehmend schwieriger. Geoffrey Gordon stellt zur Vereinfachung 1962 ein neues Modell in Form von Blockdiagrammen vor. Diese werden noch heute in der Informatik benutzt.

► Aufwändige, öffentlichkeitswirksame Simulationen, die nur mit Großrechnern gelöst werden können, stehen bis zu den 80er Jahren im Vordergrund. Dazu zählen beispielsweise Vorhersagen von Wetter- und Klimaveränderungen, für die Flugzeuge die Daten zur numerischen Berechnung sammeln, aber auch die Entwicklung pharmazeutischer Wirkstoffe oder die effizientere Öl- und Gasgewinnung. Man verspricht sich durch Simulationen bedeutende wissenschaftliche Fortschritte.



1961 Simulatics-Projekt

1962 Blockdiagramme

1964 Lennard-Jones-Potential

1965 Exponentielle Steigerung

1967 Steigende Daten

1970 Standardwerkzeug

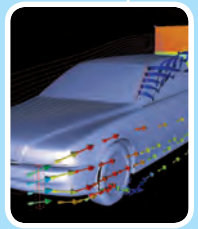
1980 Grand Challenges

2000 Rechenzeiten

► Mitte der 60er kommt es zur exponentiellen Steigerung der Nutzung von Simulationen. Begründet ist dies in den vereinfachten Möglichkeiten ihrer Konzeption, der zunehmenden Ausbreitung von preiswerten und leistungsfähigen Computern sowie politischen, militärischen und ökonomischen Umständen. Eine treibende Kraft bei der Entwicklung von Computersimulationen ist General Motors. Simulationen erleichtern das Produktdesign, also die Erzeugung von Modellen, aus denen reale Produkte entstehen.



► Neben der Hardwareausstattung treten effiziente Algorithmen, Software-Werkzeuge und Programmiermodelle immer mehr in den Vordergrund, um Computersimulationen von komplexen Phänomenen in vertretbarer Zeit realisieren zu können und mit möglichst geringem Speicheraufwand zu einem Ergebnis zu kommen. Realistischere und damit im allgemeinen komplexere Modelle erfordern schnellere, leistungsfähigere Algorithmen. Umgekehrt erlauben bessere Algorithmen die Verwendung komplexerer Modelle.



entwicklung oder der Raumfahrt. Man brauchte Simulatoren, welche die Menschen im Umgang mit diesen Maschinen trainierten, um so technologische Katastrophen zu vermeiden.

### Im Fokus: Methodenentwicklung

Ab den 60er Jahren wurden zahlreiche Methoden und Verfahren entwickelt, um große Computersimulationen effizienter durchführen zu können. Viele der noch heute angewendeten Standardwerkzeuge entstanden – etwa das sogenannte Lennard-Jones-Potential für molekulare Simulationen, Blockdiagramme zur einfacheren Modellbildung oder Nachbarschaftslisten, mit denen die steigenden Datenmengen von großen Teilchensimulationen produziert wurden.

### Standardwerkzeug in Forschung und Entwicklung

Nach und nach erobern Simulationen unterschiedlichste Gebiete, die sich von der Politik über die Naturwissenschaften bis hin zum Fahrzeugbau erstreckten. Simulationen werden zum Instrument industrieller Produktionsprozesse sowie der Unternehmens- und Zukunftsforschung. 1970 bezeichnet der amerikanische Informatiker J. C. R. Licklider die Entstehung von Computersimulationen sogar als das wichtigste Ereignis für Wissenschaft und Technologie seit der Erfindung des Schreibens.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup> Licklider, J. C. R. (1967): Interactive Dynamic Modeling. In: Shapiro, George/Rogers, Milton (Hg.), Prospects for Simulation and Simulators of Dynamic Systems, New York, London, S. 281-289.

## Grand Challenges

In den Folgejahren stehen aufwändige und öffentlichkeitswirksame Simulationsaufgaben im Vordergrund, die nur mit Hilfe von Großrechnern gelöst werden können – die sogenannten Grand Challenges. Dazu zählen die Vorhersage von Wetter- und Klimaveränderungen, die Entwicklung pharmazeutischer Wirkstoffe, die Kernfusion oder die effizientere Öl- und Gasgewinnung. Man verspricht sich von den Simulationen einen bedeutenden wissenschaftlichen, technischen, ökonomischen und gesellschaftlichen Fortschritt.

## Simulationsforschung heute

Inzwischen tritt neben der stetig weiterentwickelten Rechentechnik immer mehr die Entwicklung von effizienten Algorithmen, Software-Werkzeugen und Programmiermodellen in den Vordergrund. Denn auch die schnellsten Rechner können ohne das passende Werkzeug keine Simulationen erstellen.

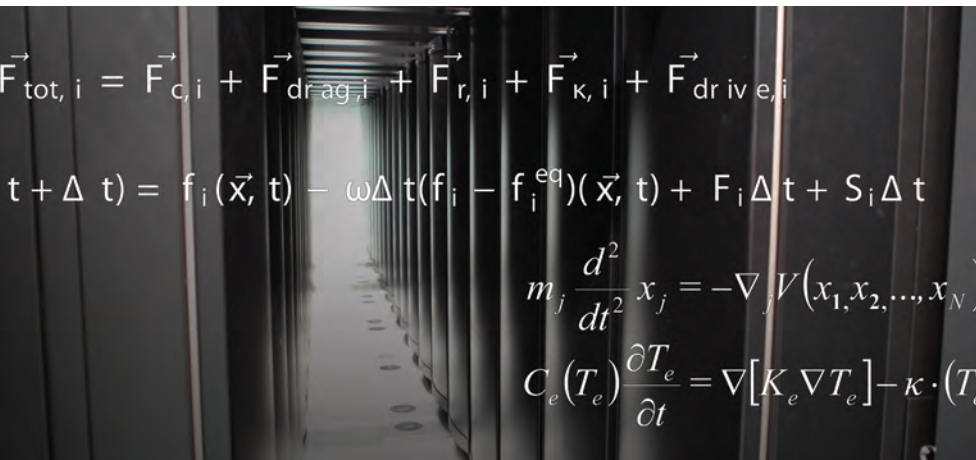
Das Ziel der aktuellen Simulationsforschung ist es, Computersimulationen auch in vertretbarer Zeit realisieren zu können und mit möglichst geringem Speicher- und Rechenaufwand zu einem Ergebnis zu kommen. Realistischere und damit im Allgemeinen komplexere Modelle erfordern schnellere, leistungsfähige Algorithmen. Umgekehrt erlauben bessere Algorithmen die Verwendung komplexerer Modelle.

Immer detailreichere und größere Prozesse wollen die Wissenschaftler auf diese Weise untersuchbar machen.



# Schlaues Rechnen

## Vom Umgang mit großen Datenmengen



**Moderne Computer rechnen zwar schnell, aber längst nicht alles. Sie verstehen nicht jede Sprache und sind auf spezielle Rechenoperationen beschränkt. Viele wissenschaftlich interessante Prozesse aus der Technik und Natur lassen sich jedoch nicht so leicht in Zahlen, Algorithmen und Formeln ausdrücken. Hier setzt die Arbeit der Simulationsforschung an.**

### Alles Berechnung!

Eine Computersimulation berechnet möglichst genau, wie sich ein System über einen bestimmten Zeitraum verhält. Dafür werden beispielsweise sogenannte Bewegungsgleichungen für alle vorhandenen Teilchen gelöst, und zwar für jeden einzelnen Zeitschritt.

Hierbei muss man zunächst herausfinden, welche Kräfte überhaupt wirken. Doch wie genau wird das Verhalten eines einzelnen Atomes oder eines Nanoparti-

kels beeinflusst – und zwar innerhalb einer Femtosekunde, die 14 Größenordnungen kürzer ist als eine Sekunde? Um das zu beschreiben, entwickeln Simulationsforscher aufbauend auf vorhandenen Theorien und experimentellen Messungen immer wieder neue Simulationsmodelle.

### Computer optimal nutzen

Große Simulationen werden normalerweise nicht auf handelsüblichen Desktop-Computern durch-

Einer der schnellsten Großrechner Deutschlands steht am Höchstleistungsrechenzentrum in Stuttgart. Dieser hat eine Spitzenleistung von über einem Petaflop – das sind eine Billion Rechenoperationen pro Sekunde. Damit Simulationen auf solchen Systemen laufen, braucht es geeignete Modelle und eine spezielle Programmierung.

### SFB 716 PROJEKT D.2 |

Performante Vielteilchensimulation auf verschiedenen Rechnerarchitekturen

Projektleitung | Prof. Michael Resch, Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart

geführt, sondern auf riesigen Rechen-Clustern aus vielen Tausend Prozessoren oder Grafikkarten. Damit diese vielen Computer richtig miteinander kommunizieren, die Berechnung korrekt aufgeteilt wird und sich die Rechenoperationen nicht gegenseitig behindern, muss die Simulation wohlüberlegt programmiert werden. Bereits vorhandene Simulationssoftware muss oft angepasst und verbessert werden, um mit der kontinuierlichen Weiterentwicklung der Hardware mithalten zu können.

## Große Systeme – große Daten

Gerade für große Systeme werden Simulationen schnell sehr aufwändig. Denn je mehr Teilchen betrachtet werden, desto mehr Kräfte sind zu berechnen. Daher werden neben den immer schneller werdenden Großrechnern auch clevere Algorithmen entwickelt. Damit wollen die Experten den Rechenaufwand durch mathematische Tricks minimieren.

Würde man für ein System mit einer Milliarde Teilchen alle Positionen über einen Zeitraum von 100.000 Zeitschritten speichern – durchaus eine realistische Größe – dann bräuchte man dafür allein über 270 Terabyte Speicherplatz. Deshalb versuchen Forscher, schon im Voraus genau zu überlegen, welche Informationen sie

Auf dem Stuttgarter Supercomputer wurde diese Laserablation mit mehreren Milliarden Atomen simuliert, um das vom Laser abgetragene Material zu analysieren. Das ist wichtig, um den Laser für den geplanten Einsatz, etwa in der Medizin oder Materialverarbeitung, so zu entwickeln, dass unerwünschte Beschädigungen durch das ausgeschleuderte Material vermieden werden.

**SFB 716 PROJEKT B.5** | Laserablation: Von einfachen Metallen zu komplexen Materialien

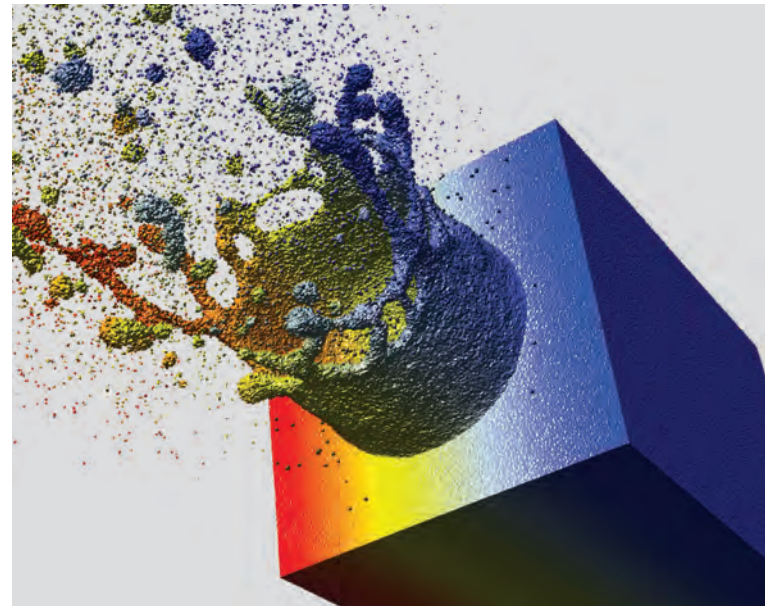
**Projektleitung** | Dr. Johannes Roth, Institut für Theoretische und Angewandte Physik

überhaupt benötigen, und speichern nur das Nötigste ab. Trotzdem ist der Rechen- und Speicherbedarf von Computersimulationen beeindruckend, und Rechenzentren wie das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart rüsten ihre Hardware stetig weiter auf.

## Rechenspiele für reale Simulationen

Eine recht berühmte Teilchensimulation namens „Illustris“ hat 2014 großen Wirbel gemacht, als die Entwicklung eines großen Teils des sichtbaren Universums von kurz nach dem Urknall bis zu Galaxienbildungen simuliert wurde. Die Wissenschaftler verwendeten dafür über sechs Milliarden Teilchen und äußerst komplexe Wechselwirkungen. Der Weltrekord für Teilchensimulationen liegt sogar noch um einen Faktor 1.000 höher, bei 4 Billionen Teilchen – eine 4 mit 12 Nullen.

Auch in Stuttgart simulieren Wissenschaftler große Systeme. Ein Beispiel ist die Bestrahlung von Metall mit einem Laserstrahl, wofür mehrere Milliarden Teilchen berücksichtigt wurden. Im Vergleich dazu werden für hochrealistisch aussehende Computereffekte in heutigen Kinofilmen üblicherweise ein paar zehntausend kleine Flächen simuliert, also millionenfach weniger.



# ■ Verborgenes sichtbar machen

Von abstrakten Daten zu klaren Bildern



Dreidimensionale interaktive Visualisierungen ermöglichen es, die Ergebnisse von Computersimulationen hinsichtlich der relevanten Fragestellungen zu analysieren. Dazu entwickeln Informatiker geeignete Visualisierungsmethoden.

**Das Ergebnis von Computersimulationen sind Datensätze. Immer mehr Details, größere Systeme und längere Zeiträume wollen Experten zahlreicher Disziplinen betrachten, um neue Erkenntnisse zu gewinnen. Antworten in dieser Datenflut zu finden, gleicht zunehmend der Suche nach einer Nadel im Heuhaufen. Bilder oder Grafiken der abstrakten Informationen sind dazu unerlässlich. Sie machen sichtbar, was dem menschlichen Auge sonst verborgen bliebe.**

## Was ist Visualisierung?

Die abendliche Wetterkarte, die Navigation im Auto oder die Wahlergebnisse der aktuellen Bundestagswahl – in unserem Alltag zeigen uns oft Bilder, was in aufwändigen Messungen, umfangreichen Datensammlungen oder komplizierten Berechnungen zusammengestellt wurde.

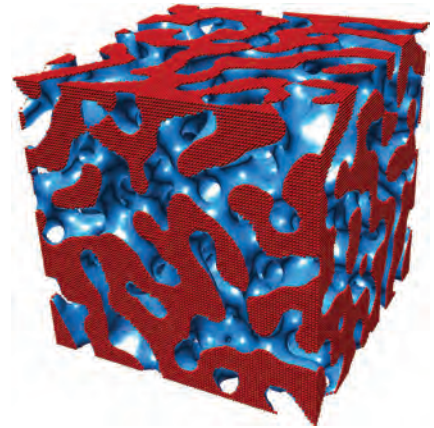
Wissenschaftlern und Entwicklern ergeht es nicht anders. Komplexe Informationen oder Prozesse

untersuchen sie am einfachsten in grafischen Darstellungen. Doch was muss passieren, damit die Wetterkarte über den Bildschirm flackert oder ein Ingenieur seine Idee am Rechner begutachten kann?

Dank der Visualisierung – einem noch recht jungen Teilgebiet der Informatik – werden in Computersimulationen erzeugte Datensätze in visuelle Abbildungen umgewandelt. So werden die scheinbar

Links: Visualisierung eines Virus. Seine äußere Struktur wurde durch spezielle Verfahren hervorgehoben. So wurden Hohlräume sichtbar, an denen medizinische Wirkstoffe andocken können.

Rechts: Eine Membran, wie sie in Dialyseapparaten zu finden ist. Die Visualisierung zeigt die durchlässige Struktur. Durch Berechnungen wurden konkrete Aussagen über die Größe der verzweigten Bahnen und die damit verbundene Filterung beim späteren Einsatz möglich.



#### SFB 716 PROJEKTE D.3 UND D.4

Visualisierung von Systemen mit großen Teilchenzahlen, Interaktive Visualisierung der Eigenschaften von Protein-Lösungsmittel-Systemen

**Projektleitung** | Prof. Thomas Ertl, Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart, Prof. Jürgen Pleiss, Institut für Technische Biochemie

unüberschaubaren Informationen interpretierbar und analysierbar. Dazu beschäftigen sich Visualisierer mit folgenden Schwerpunkten:

#### Daten sichtbar machen

Zunächst muss man sich im Klaren sein, welche Daten für eine spezielle Fragestellung zu betrachten sind. Die Simulation eines Proteins in einem Lösungsmittel speichert rund 100 Millionen Atome über Millionen von Zeitschritten ab. Würde man all diese Teilchen in einem Bild anzeigen, würde man nichts mehr sehen.

Die Informationen müssen also auf das Wesentliche reduziert werden. Das umgebende Lösungsmittel wird ausgeblendet, Oberflächen transparent dargestellt und Strukturen hervorgehoben. Erst so kann man das Protein und seinen Aufbau erkennen, beispielsweise um he-

rauszufinden, wo Medikamente andocken sollten, um schnell wirken zu können. Visualisierungsforscher entwickeln hierfür spezielle Techniken, um die relevanten Details gleichzeitig darstellen zu können.

#### Berechnungen zur Analyse durchführen

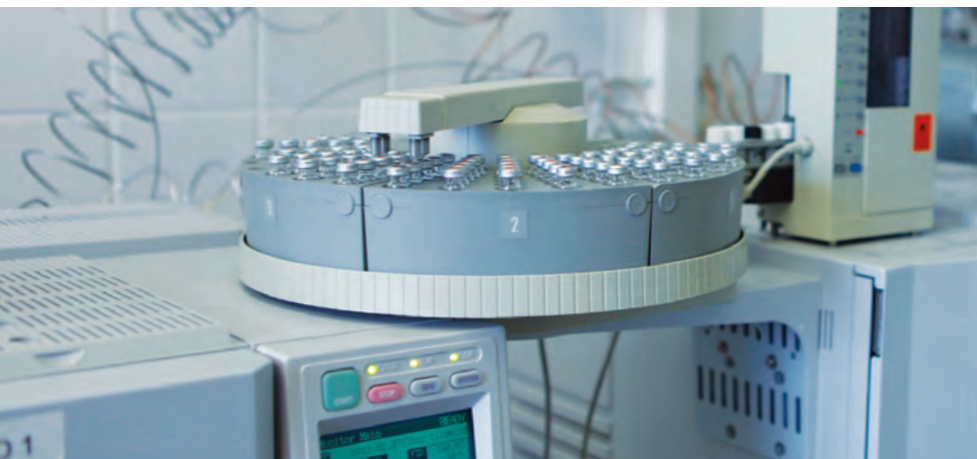
Bleiben dabei Fragen offen, etwa exakte Zahlen zur Oberfläche oder Größe des Proteins, können diese zeitgleich ermittelt werden. Auch können die Simulationsdateien mit externen Informationen angereichert werden, etwa mit bereits vorhandenen Daten über mögliche Andockstellen für bestimmte Moleküle. So werden dank der Visualisierung abgerundete, aussagekräftige Antworten möglich und die Simulation leichter mit Experimenten vergleichbar.

#### Interaktiv, live und in 3D

Visualisierungen sind meist interaktiv und dreidimensional. So lassen sie sich von allen Seiten betrachten, einzelne Parameter können ein- und ausgeblendet und Besonderheiten hervorgehoben werden. Die Anzeige auf hochauflösenden Großprojektionsleinwänden vermittelt zudem einen umfassenden Eindruck aller Details. Mit interaktiven Echtzeitgrafiken werden konzeptionelle Überlegungen und mögliche Umsetzungsvarianten schon frühzeitig erlebbar.

# ■ Computermodell statt Labor?

## Simulationen in der Biotechnik

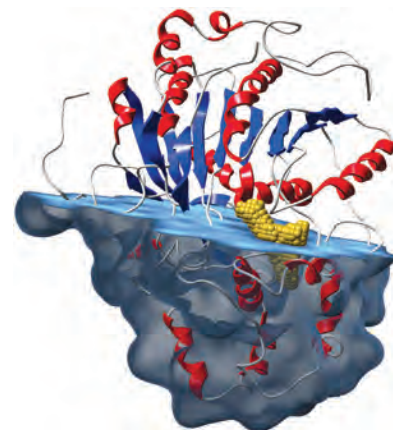


**Werden neue Biostoffe oder medizinische Verfahren entwickelt, forschen Naturwissenschaftler oft im Nanobereich, der dem menschlichen Auge auch mit den modernsten Mikroskopen nicht zugänglich ist. Auch Messungen sind hier nicht oder nur unter hohem Aufwand möglich. Daher werden für solche Prozesse zunehmend Computersimulationen eingesetzt.**

### Proteine als molekulare Maschinen

Proteine sind nicht nur Bausteine unserer Zellen, sie sind auch molekulare Maschinen, die Stoffe binden, elektrische Ladungen transportieren oder chemische Reaktionen katalysieren. Ob und wie diese Aufgaben ausgeführt werden, hängt von zahlreichen Einflüssen ab. Sowohl das Lösungsmittel, in dem sich ein Protein befindet, als auch hohe Temperaturen oder Drücke können die Struktur und Dynamik von Proteinen

verändern und sie an ihren Aufgaben hindern. Um herauszufinden, wodurch ein Molekül inaktiviert wird und wie man es entsprechend stabilisieren kann, werden virtuelle Modelle entwickelt. So können beispielsweise die Effekte äußerer Bedingungen getestet oder Bindungsstellen besser erkannt werden. Die Erkenntnisse fließen unter anderem in die Entwicklung geeigneter Biokatalysatoren zur Herstellung von Biodiesel ein oder in die Produktion von Substanzen für Kosmetik- oder Chemieprodukte.



Computermodell eines Fett bindenden Enzyms – einer Lipase. Am Rechner lässt sich der Mechanismus beobachten, mit dem das Protein seine Aufgabe erfüllt.

**SFB 716 PROJEKT C.1** | Modellierung des Einflusses von organischen Lösungsmitteln auf Lipasen

Projektleitung | Prof. Jürgen Pleiss,  
Institut für Technische Biochemie

## Nanoporen, die unser Erbgut scannen

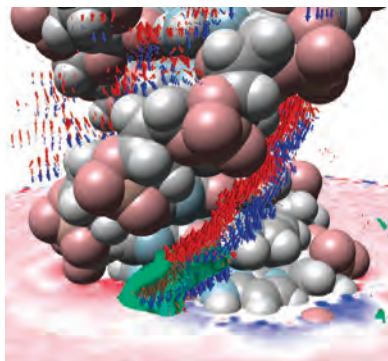
Aber auch neue Ideen für die Medizin werden im virtuellen Labor erforscht. Ein Beispiel dafür ist die sogenannte DNA-Sequenzierung, die künftig das menschliche Erbgut wesentlich schneller und kostengünstiger analysieren könnte als bisher. Bei diesem Verfahren wird die DNA durch eine Nanopore gefädelt, wobei die verschiedenen Basenpaare spezifische Elektropulse ausgeben. Deren Auslesen durch ein Gerät könnte zügige Aussagen über vorhandene Erbkrankheiten liefern, so dass eine Therapie umgehend und zielgerichtet gestartet werden kann.

Zwar können die DNA-Moleküle derzeit schon in die Nanoporen eingefädelt werden, jedoch sind wichtige Details zur exakten Analyse der Erbinformationen noch völlig unklar, etwa der erforderliche Aufbau der Nanopore oder die Zusammensetzung des umgebenden Lösungsmittels. In Simulationen versuchen Wissenschaftler nun, das Zustandekommen des Stroms sowie die grundlegenden Mechanismen des Transportes besser zu verstehen und zur Realisierung der Idee beizutragen.

Simulation einer DNA, die durch eine Nanopore gefädelt wird. Anhand dieser Simulation untersuchen Wissenschaftler die von den Basenpaaren ausgehenden elektrischen Signaturen, anhand derer die DNA-Struktur abgelesen werden soll.

SFB 716 PROJEKT C.5 | Makromolekularer Transport durch nanoskalige Poren

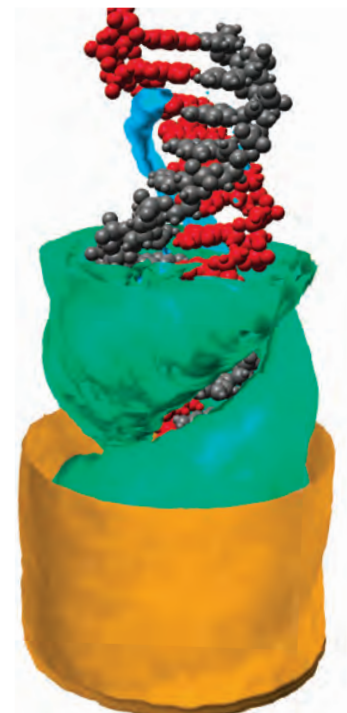
Projektleitung | Prof. Christian Holm, Institut für Computerphysik



## Und das Labor?

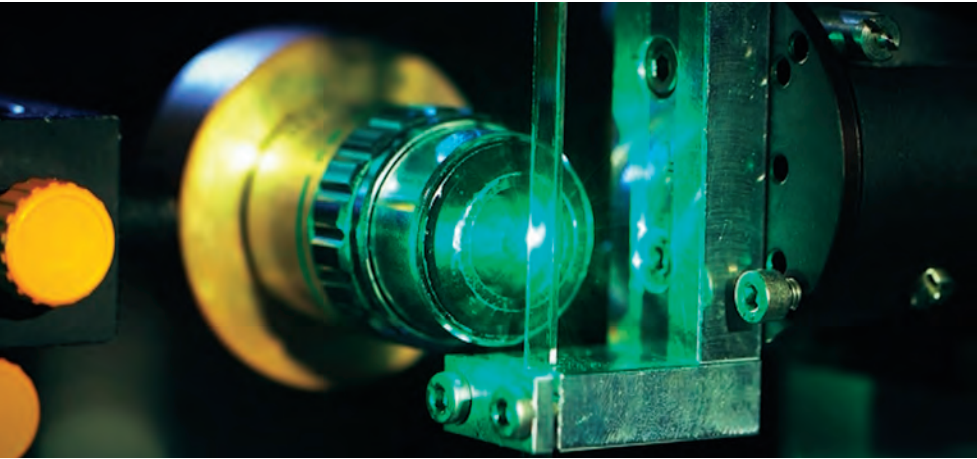
Simulationen sind sehr hilfreich, wenn es um die Entwicklung neuer oder optimierter Biostoffe oder medizinische Verfahren geht. Aber ohne Experimente geht es dennoch nicht. Theoretiker und Naturwissenschaftler müssen eng zusammenarbeiten und ihre Arbeiten im Labor und am Rechner miteinander verbinden. Simulationen können verschiedene Voraussetzungen innerhalb einer recht kurzen Zeit bewerten, etwa geeignete Substanzen bestimmen oder die Beschaffenheit einer Nanopore klären. Im Labor werden die tatsächlichen Effekte dann in zahlreichen Tests überprüft.

Simulationen vermeiden tausende zusätzliche Versuche und sparen damit viel Geld und Zeit. Andererseits können Simulationsforscher durch diesen Abgleich ihre Simulationsmethoden immer wieder überprüfen und weiterentwickeln.



# Vom Tüfteln zur Konstruktion

## Simulationen für Maschinen und technische Verfahren



Bei der Entwicklung neuer Maschinen und Produkte, industrieller Anlagen oder technischer Verfahren müssen viele Details geklärt, verschiedene Varianten abgewägt und unterschiedliche Beanspruchungen berücksichtigt werden. Der Weg von der Idee zur Konstruktion ist geprägt von unzähligen Fragen. Sei es in der Fahrzeugtechnik, der Luft- und Raumfahrt, der Physik oder der Verfahrenstechnik — Simulationen bieten die Möglichkeit, effizient zu optimalen Lösungen zu finden.

### Optimierte Laser

Laser werden für verschiedenste Anwendungen eingesetzt, angefangen vom Laserpointer über Schneide- oder Bohrwerkzeuge bis hin zum Laserskalpell. Das Ergebnis einer Bestrahlung hängt von deren Intensität, der Bündelung des Strahls sowie der Häufigkeit der eingesetzten Pulse ab.

Ein neuer Laser wird optimal auf seinen geplanten Einsatz abgestimmt. Schließlich gilt es, un-

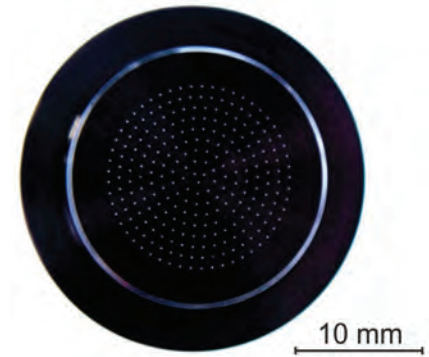
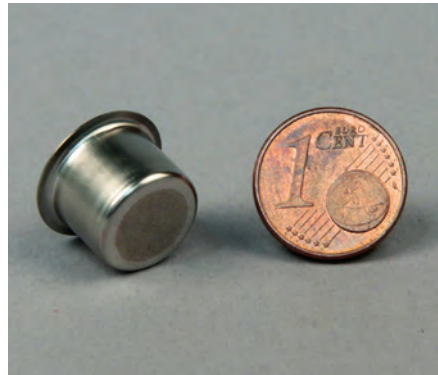
erwünschte Nebeneffekte bei Operationen oder bei der Materialverarbeitung zu vermeiden. Entwickler müssen dazu wissen, ob und wie ein Laserstrahl kleinste Materialpartikel ausschleudert. Präzise durchgeführte Bohrlöcher könnten durch diese wieder verstopfen, exakte Schnitte beschädigt oder das Umfeld der Bohrung beeinträchtigt werden. Am Computer können diese Vorgänge sehr genau nachvollzogen werden, und das bis zum einzelnen Atom.

Laser werden in sehr vielen Lebens- und Arbeitsbereichen, Forschungs- und Industriezweigen und medizinischen Aufgabenfeldern eingesetzt. Dabei müssen sie auf ihre spezielle Anwendung abgestimmt sein. In Computersimulationen können unerwünschte Nebeneffekte frühzeitig erkannt und bei der Entwicklung berücksichtigt werden.

**SFB 716 PROJEKT B.5** | Laserablation: Von einfachen Metallen zu komplexen Materialien

**Projektleitung** | Dr. Johannes Roth, Institut für Theoretische und Angewandte Physik

Simulationen liefern wesentliche Details zur Entwicklung von Lasern, die winzige Löcher durchführen sollen. Hier ein Beispiel: In dieser Spinddüse wurden knapp 2.000 Löcher auf einer Fläche gebohrt, die kleiner ist als ein Ein-Cent-Stück. Mit diesen Düsen lassen sich die feinsten direktgesponnenen Cellulosefasern der Welt spinnen, um damit Vliese oder Gewebe mit besonderen Sorptions- oder Filtereigenschaften herzustellen.



## Prozesse in Reaktortypen

Das gilt auch für Mischprozesse in Reaktortypen, etwa in einer Blasensäule. Diese sind in jeder Chemiefabrik zu finden, sei es in Laboren oder in Form von großen Techniktürmen. Darin steigen Gasbläschen in einer Flüssigkeit auf. Währenddessen laufen an den äußeren Schichten der Bläschen chemische Prozesse ab, bei denen sich die Stoffe miteinander verbinden.

Auf diese Weise entstehen rund 90 Prozent aller Produkte der Chemieindustrie, die in vielfältige Endprodukte einfließen: Kosmetik und Kleidung, Kunststoffartikel

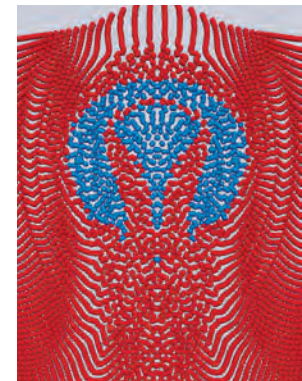
wie Plastikflaschen, Müllsäcke oder Folien und auch synthetische Kraftstoffe, wie sie für den Antrieb von Schiffen oder Raketen eingesetzt werden.

Um herauszufinden, welche Größe eine Blasensäule haben muss und welche Flüssigkeitsmengen oder Stoffkombinationen erforderlich sind, damit ein bestimmter Stoff entsteht, werden die atomaren Veränderungen an den Gasbläschen in Simulationen virtuell rekonstruiert und verschiedene Parameter getestet. Computersimulationen können dazu beitragen, den Umsatz und die Selektivität der Endprodukte von Blasensäulen besser vorhersagen zu können.

Blasensäulen – ein typischer Reaktortyp in der Chemie-Industrie zur Herstellung von Stoffen. Während Gasblasen in einer Flüssigkeit aufsteigen, entstehen an ihren Grenzschichten neue Produkte. In Simulationen lassen sich die atomaren Veränderungen der Reaktionen exakt nachvollziehen.

**SFB 716 PROJEKT A.6** | Simulation der Morphologieausbildung von offenporigen Materialien

**Projektleitung** | Prof. Ulrich Niekien, Institut für Chemische Verfahrenstechnik





# Risse und Brüche

Simulationen erklären Materialdefekte



Verschleißteile in einem Wasserkraftwerk können durch Kleinstpartikel beschädigt werden.

**Welche Temperaturen, Drücke oder Spannungen dürfen auf einem Material lasten? Welche Beanspruchungen führen zu Rissen und Brüchen? Das sind Fragen, die bei der Entwicklung neuer Produkte in der Telekommunikation, Sensorik oder im Maschinenbau eine bedeutende Rolle spielen. Bruchfestigkeit ist dabei nicht nur ein Qualitätsmerkmal, sondern vor allem eine Sicherheitsanforderung. Simulationen werden oft eingesetzt, um mögliches Materialversagen präzise vorherzusagen.**

## Defekte in teuren Maschinen

Teure und aufwändig installierte Maschinen sollen möglichst lange im Einsatz bleiben und optimale Leistung erbringen. Daher werden die einzelnen Bauteile vor dem Einbau in umfangreiche industrielle Produktionsanlagen oder in Fahrzeuge grundlegend auf den geplanten Einsatz abgestimmt und hinsichtlich ihrer Haltbarkeit untersucht. Vor allem in hydraulischen Maschinen, die kontinuierlich dem

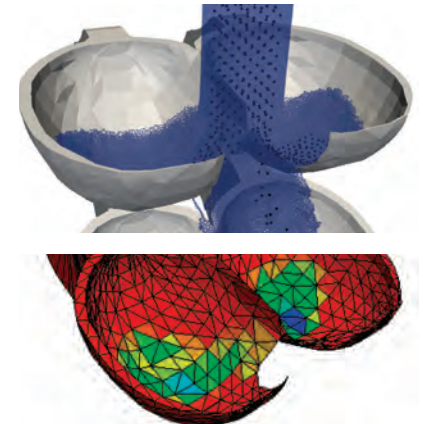
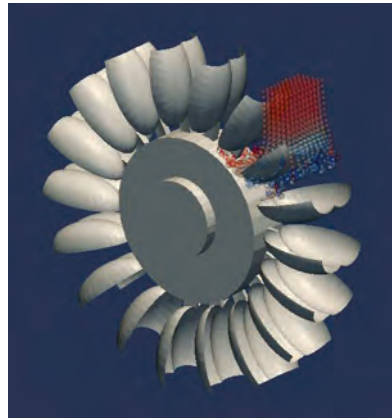
Einfluss von Flüssigkeiten ausgesetzt sind, können schnell unerwünschte Verklemmungen oder Oberflächenschädigungen auftreten.

Idealerweise werden solche Turbinen, Pumpen oder Motoren von reinem Wasser, Mineralöl oder anderen Fluiden durchströmt. In der Praxis befinden sich darin jedoch oft winzig kleine, harte Schwebeteilchen, die einzelne Bauteile auf

Simulation der Schädigung einer Turbine. Rechts oben ist der Aufprall eines Flüssigkeitsstrahles zu sehen, darunter die dadurch verursachte Schädigung.

**SFB 716 PROJEKT A.5** | Simulation abrasiver Schädigungsprozesse

**Projektleitung** | Prof. Peter Eberhard und Dr. Florian Fleißner, Institut für Technische und Numerische Mechanik



unterschiedliche Weise beschädigen und den Produktionsprozess stören oder gar verhindern können. Solche Vorgänge verlaufen in der Regel schleichend über mehrere tausend Betriebsstunden. Daher sind reale Tests ungeeignet, um die Systeme zu optimieren, und Simulationen werden unumgänglich.

### Haltbare Mikrochips

Doch auch viel kleinere Werkstoffe, etwa die Beschichtung von Mikrochips für Computer oder Handys, sind enormen Beanspruchungen ausgesetzt. Lange Laufzei-

ten erzeugen hohe Temperaturen, der Einbau einzelner Komponenten in ein Gesamtsystem führt zu mechanischen Spannungen.

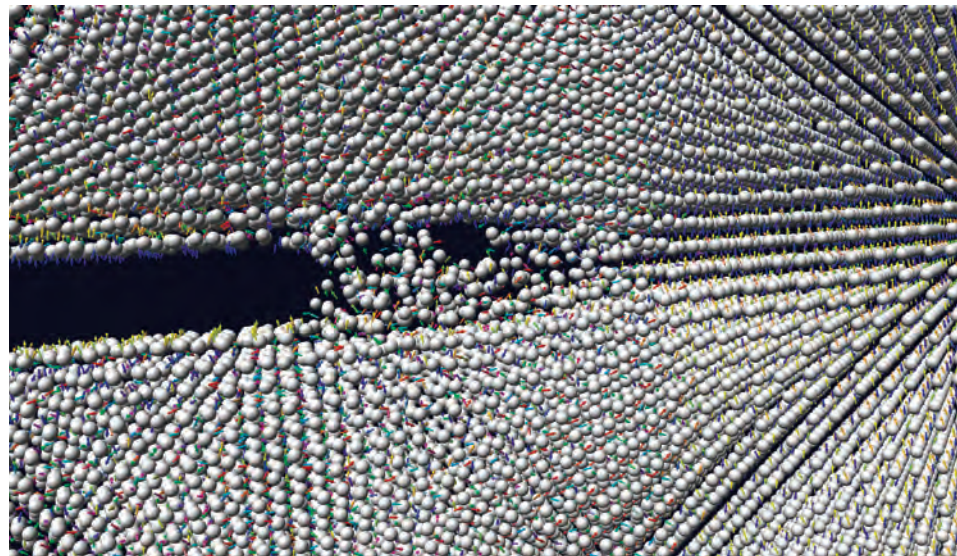
Dadurch können einzelne Materialschichten langfristig reißen und die Geräte zum Ärger des Benutzers unbrauchbar machen. Um solche Defekte vorherzusagen und die geeigneten Werkstoffe zu bestimmen, lösen Forscher die Materialien virtuell in die einzelnen Atome auf und untersuchen die auf dieser Ebene einwirkenden Kräfte und die daraus resultierenden Veränderungen.

Der Ursprung eines Risses im Atomgitter von Aluminiumoxid, das oft zur Beschichtung von Mikrochips eingesetzt wird.

### SFB 716 PROJEKTE B.1 UND B.2

Molekulardynamik großer Systeme mit weit reichenden Wechselwirkungen sowie von Oxid-Metall-Grenzflächen

**Projektleitung** | Prof. Hans-Rainer Trebin, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Prof. Siegfried Schmauder, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre



# Sonderforschungsbereich 716

## Simulationsforschung an der Universität Stuttgart

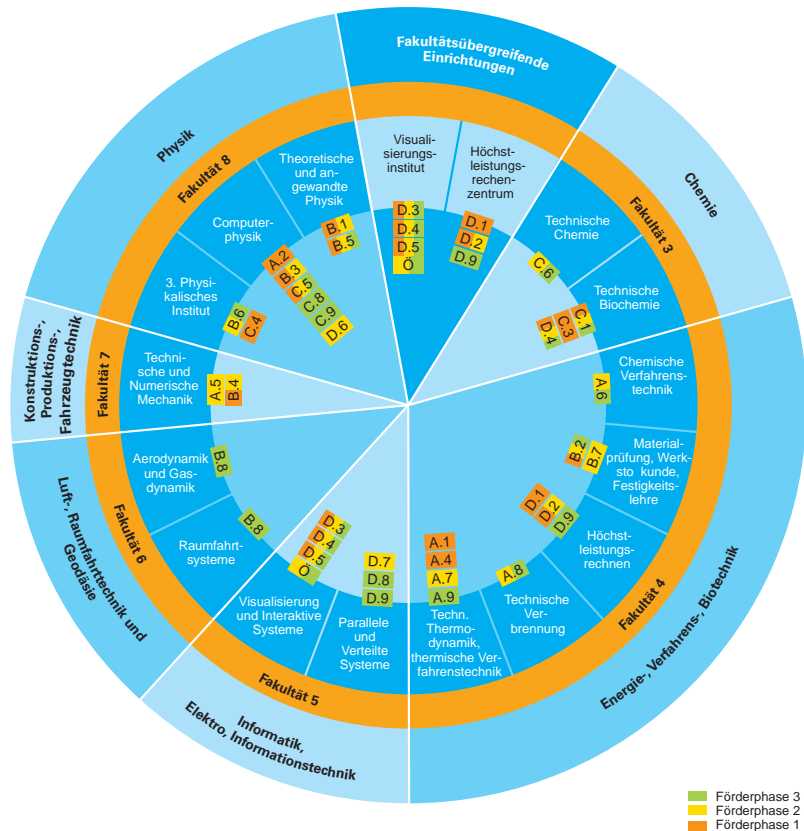
Im Sonderforschungsbereich 716 der Universität Stuttgart arbeiten seit 2006 Wissenschaftler aus verschiedenen Disziplinen gemeinsam an der Entwicklung neuer Werkzeuge für Teilchensimulationen. Damit wollen sie komplexe Prozesse aus Natur und Technik am Rechner untersuchbar machen.

Das Ziel des SFB 716 ist es, die zahlreichen, zwischen den Teilchen wirkenden Kräfte realitätsnah zu beschreiben und durch neue Methoden möglichst viele Teilchen über einen langen Zeitraum zu berücksichtigen. Für die Berechnung solcher umfangreicher Vielteilchensysteme kommen moderne Rechen-Cluster sowie Großrechner zum Einsatz. Darüber hinaus werden Methoden zur Visualisierung entwickelt, um die Datenmengen interaktiv darstellen und interpretieren zu können.

Innerhalb der bisherigen Laufzeit konnte der SFB 716 neuartige Simulationsalgorithmen entwickeln, die in exemplarischen Anwendungen wesentliche neue Erkenntnisse lieferten.

Diese Forschung wird seit 2006 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) ermöglicht.

17 Institute der Universität Stuttgart sind im SFB 716 beteiligt, um an ihrem gemeinsamen Forschungsprogramm zu arbeiten.



### Zahlen und Fakten

- Forschungsthema: Dynamische Simulationen für Systeme mit großen Teilchenzahlen
- 15 Institute aus fünf Fakultäten und zwei universitären Einrichtungen der Universität Stuttgart
- Aktuell 17 Forschungsprojekte
- Rund 50 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler
- Förderung seit 2006 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Weitere Informationen unter

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

Förderung durch die

