

University of Stuttgart  
SFB 716

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

Nr. 4 – 2017

# SFB 716.JOURNAL

Aktuelle Informationen aus dem  
Sonderforschungsbereich 716 –  
Dynamische Simulation von  
Systemen mit großen Teilchenzahlen

Einen Schritt weiter: Die dreidimensionalen Abbildungen lassen sich auch per 3D-Druck visualisieren, um haptisch begreifbar zu machen.

## AUS DEM INHALT

Wissenschaftsausstellung „Im digitalen Labor“ | Zahlreiche Auszeichnungen für SFB-716-Forscher | Präsenz auf Fachtagungen und öffentlichen Veranstaltungen | Interne Veranstaltungen | Nachwuchsförderung | Pressespiegel

Liebe Leserinnen und Leser!



wir sind mittlerweile im elften Jahr des SFB 716 angekommen. Und auch aus dem Jahr 2017 lässt sich über jede Menge spannende Themen berichten. Erfahren Sie mehr darüber in unserer aktuellen Ausgabe des SFB 716.Journals.

Die Forschung im SFB 716 ist ausgezeichnet. Und das ist wortwörtlich zu nehmen, denn unsere SFB-716-Mitglieder wurden mit zahlreichen Preisen bedacht. Wir freuen uns, dass wir nun bereits zum zweiten Mal einen eigenen SFB-716-Doktorandenpreis vergeben konnten. Mit Dr. Stefan Kesselheim und Dr. Michael Krone fanden sich dafür gleich zwei würdige Preisträger. Eine besondere Auszeichnung ging an Prof. Siegfried Schmauder: Er hat die Ehrendoktorwürde der Ovidius-Universität Constanta in Rumänien erhalten. Wir gratulieren allen Preisträgern!

Im Frühsommer 2017 fand die Wissenschaftsausstellung „Im digitalen Labor – Durch Computersimulationen die Welt verstehen“ statt – ein Projekt unserer Öffentlichkeitsarbeit, um das Verständnis in der Gesellschaft für unser Forschungsthema zu fördern. Hier wurden zahlreiche im SFB 716 gewonnene Ergebnisse genutzt, und viele unserer Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter beteiligten sich an der Umsetzung, denen ich an dieser Stelle nochmals meinen herzlichsten Dank ausdrücken will. Aus gutem Grund widmen wir daher der Ausstellung einen mehrseitigen Sonderbeitrag.

Zahlreiche Veranstaltungen innerhalb des SFB 716 sowie für Fachpublikum und Öffentlichkeit wurden organisiert, Vorträge auf der ganzen Welt gehalten.

Vernetzung wird beim SFB 716 großgeschrieben – zwischen den Teilprojekten und unseren Doktorandinnen und Doktoranden, aber auch in der Community weltweit und mit der Industrie. Die dabei entstandenen Kooperationen und Synergien haben unsere Forschungsarbeit in großem Maße bereichert.

Zum Ende des SFB 716 gilt es, die Strategien zu eruieren, wie wir diese Infrastrukturen und gewonnenen Erkenntnisse auch über das Ende unseres Forschungsverbundes hinaus sinnvoll und konstruktiv einsetzen können. Als letztes großes Gemeinschaftsprojekt steht im Herbst 2018 die große Abschlusskonferenz auf dem Programm.

Ich freue mich, gemeinsam mit Ihnen ins letzte SFB-716-Jahr zu starten.

Und nun viel Vergnügen beim Lesen!

Prof. Christian Holm  
Sprecher des SFB 716

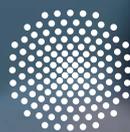
TITELTHEMA	3
AUSZEICHNUNGEN	4
VERANSTALTUNGEN	6
WISSENSCHAFTSAUSSTELLUNG	8
KURZ BERICHTET	11
KONFERENZEN & WORKSHOPS	12
PERSONALIA	15
AUSBLICK/IMPRESSUM	16

**Wir haben ein neues Logo!**

alt:

SFB  716

neu:



**University of Stuttgart**  
SFB 716

Bitte laden Sie die neuen Vorlagen für Poster und Vortragsfolien im internen Bereich auf [www.sfb716.uni-stuttgart.de](http://www.sfb716.uni-stuttgart.de) herunter oder fordern Sie sie an bei Nora Hieronymus (Ö).

## Der Computersimulation auf der Spur – Die Wissenschaftsausstellung „Im digitalen Labor“

Simulationen sind allgegenwärtig. Ob Biowissenschaften, Medizin, Maschinenbau, Physik, Chemie oder Materialforschung – wissenschaftlicher Fortschritt ist heute ohne Computersimulationen für einen Großteil der Forschungsgebiete kaum noch denkbar. Neben Theorie und Experimenten gelten sie als das dritte Standbein der Forschung. Sie ermöglichen Erkenntnisse in Bereichen, die uns sonst verwehrt blieben, und lassen uns in die Zukunft blicken.

Diesem spannenden Thema und bedeutenden Forschungsschwerpunkt der Universität Stuttgart widmete sich nun eine Wissenschaftsausstellung, die als Gemeinschaftsprojekt vom SFB 716 und vom Exzellenzcluster SimTech realisiert wurde. Unter dem Motto „Im digitalen Labor – Durch Computersimulationen die Welt verstehen“ ermöglichte sie vom 9. Mai bis 30. Juli 2017 im Planetarium Stuttgart der breiten Öffentlichkeit vielfältige Einblicke in die Entwicklung, Methoden und Funktionsweisen von Simulationen.

Digitale und analoge Interaktionen luden dazu ein, das Thema Computersimulation in all seinen Facetten spielerisch zu entdecken. Ob der Riss im Aluminium, das Strömungsverhalten eines Flusses oder die Abspaltung von Fettmolekülen – jede Menge anschauliche



Was braucht man, um zu simulieren? Bei der Wissenschaftsausstellung „Im digitalen Labor“ gab es viel zu entdecken.

und optisch ansprechende Visualisierungen machten die Vielzahl der Anwendungsbereiche deutlich.

Im Rahmenprogramm boten Vorträge von Wissenschaftlern Einblicke in verschiedene Forschungsbereiche, die mit Computersimulationen arbeiten – etwa zu den Themen Teilchensimulationen, Crashtests oder Astronomie.

Zudem wurde speziell für die Planetariumskuppel ein Animationsfilm über Computersimulationen erstellt.

**Lesen Sie mehr dazu ab Seite 8!**

### Resümee: Projektziel erreicht!

Unsere Ausstellung war ein voller Erfolg – Über 10.500 Gäste haben sie besucht! Auch die Rahmenveranstaltungen erfreuten sich großer Beliebtheit: Insgesamt lauschten etwa 370 Wissenschaftsinteressierte den Programmpunkten der zusätzlich angebotenen Vortragsreihe.

Dafür sorgten die zahlreich in Institutionen (nicht nur der Universität Stuttgart) und bei Veranstaltungen verteilten Flyer und aufgehängten Plakate, die Pressearbeit, die vielfachen Ankündigungen auf Webseiten und in Newslettern und die Social-Media-Postings.

Und nicht zu vergessen: die Mund-zu-Mund-Propaganda, das „Spread-the-Word“, die persönlichen Empfehlungen der Mitarbeiter des SFB 716 und weiterer Menschen, die die Ausstellung im beruflichen und privaten Umfeld publik gemacht haben.

Dafür ein großes Dankeschön!



# AUSZEICHNUNGEN

## Ehrendoktorwürde für Prof. Schmauder



Prof. Siegfried Schmauder,  
Foto: Uli Regenscheit.

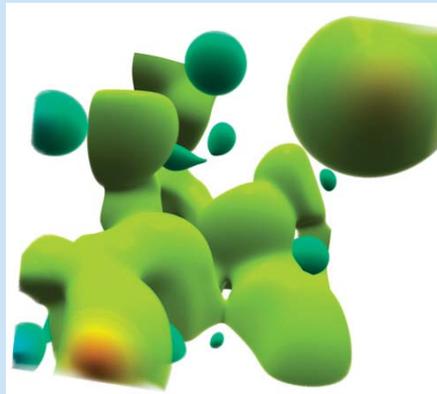
Prof. Siegfried Schmauder (Teilprojekt B.2, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)) hat die Ehrendoktorwürde der Ovidius-Universität Constanta (Rumänien) für seine wissenschaftlichen Leistungen verliehen bekommen, insbesondere zur Multiskalensimulation des mechanischen Verhaltens von metallischen, bionischen, polymeren und Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen bei statischer sowie bei Ermüdungsbeanspruchung.

**i** Teilprojekt B.2 | IMWF,  
Mai 2017

## Honorable Mention Award CVM 2017

Auf der Computational Visual Media Conference (CVM) 2017 im chinesischen Tianjin erhielt das Paper „Vox-Link—Combining sparse volumetric data and geometry for efficient rendering“ von Dr. Daniel Kauker (ehem. D.3), Dr. Martin Falk, Dr. Guido Reina (D.3), Prof. Anders Ynnerman und Prof. Thomas Ertl (D.3, D.4) einen Honorable Mention Award.

**i** Teilprojekt D.3 | VISUS,  
April 2017



Datensatz aus wenigen Messpunkten in Kronecker-Darstellung. Dieser wird durch Kriging in ein Volumen überführt, welches als lichte Per-Voxel-Linked-List gespeichert ist. Dieses Format kann direkt auf der GPU ausgewertet und dargestellt werden.

## Zweiter ERC-Grant für Prof. Wrachtrup



Prof. Jörg Wrachtrup.

Bereits zum zweiten Mal hat der Europäische Forschungsrat (European Research Council, ERC) dem Physiker Prof. Jörg Wrachtrup (B.6, 3. Physikalisches Institut) einen der renommierten ERC-„Advanced In-

vestigator Grants“ für erfahrene exzellente Forschende verliehen. Mit dem neuen, mit 2,5 Millionen Euro dotierten Grant möchte er zeigen, wie man mit Quantensensoren elektrische Felder mit bisher unerreichter Empfindlichkeit und räumlicher Auflösung verfolgen kann. Das Forschungsprojekt mit dem Titel „Abbildung elektrischer Felder einzelmolekularer Ladungen mittels Quantensensoren“ knüpft an die bisherige Forschung Wrachtrups zur Nutzung atomarer Defekte in Diamanten für die Quantentechnologie an. (Quelle: Pressemitteilung Universität Stuttgart)

**i** Teilprojekt B.6 | 3PI, Mai 2017

## Doktorandenpreis 2016 des SFB 716



Die Preisträger: Dr. Stefan Kesselheim, Dr. Michael Krone.

**2016 wurde zum zweiten Mal im Rahmen des SFB 716 ein Doktorandenpreis ausgelobt. Und diesmal können sich gleich zwei Kandidaten freuen: Für ihre herausragenden Dissertationen erhalten Dr. Stefan Kesselheim (für „Simulations of DNA Translocation through Nanopores“, ehemals Teilprojekt C.5, ICP) und Dr. Michael Krone (für „Interactive Visual Analysis of Biomolecular Simulations“, Teilprojekt D.4, VISUS) den jeweils mit 1.000 Euro dotierten Preis.**

Die Auswahlkommission – Jun.-Prof. Maria Fyta (B.6, C.9), Jun.-Prof. Niels Hansen (A.9), Jun.-Prof. Dirk Pflüger (D.9), Dr. Guido Reina (D.3) und Apl. Prof. Johannes Roth (B.5) – begründet ihre Wahl neben der fachlichen Exzellenz unter anderem auch mit dem umfangreichen Einsatz der Preisträger für den SFB 716.

**i** Teilprojekte C.5, D.4 | ICP, VISUS, Dezember 2016

## i3D-Third Best Paper

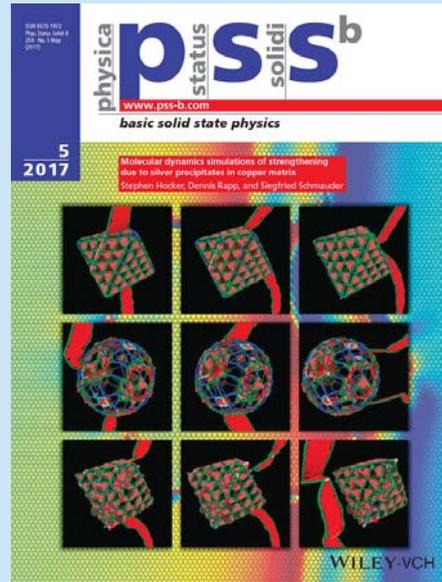
Das Paper „Feature Based Volumetric Terrain Generation“ von Michael Becher und den SFB-716-Mitgliedern Dr. Michael Krone, Dr. Guido Reina und Prof. Thomas Ertl gewann im Februar 2017 den dritten Platz beim Best Paper Award der i3D 2017 (ACM SIGGRAPH Symposium on Interactive 3D Graphics and Games) in San Francisco.

**i** Teilprojekte D.3, D.4 | VISUS,  
Februar 2017

## Coverbild für Publikation des Teilprojekts B.2

Das Cover der Maiausgabe des Journals Physica Status Solidi (Phys. Status Solidi B 254, No. 5 (2017)) schmückte mehrere Abbildungen aus der im Heft erschienenen Arbeit „Molecular dynamics simulations of strengthening due to silver precipitates in copper matrix“ von Dr. Stephen Hocker, Dennis Rapp und Prof. Siegfried Schmauder.

Die Publikation wurde im Rahmen des Teilprojekts B.2 am Institut für



Phys. Status Solidi B 254, No. 5 (2017).

Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF) erstellt.

Prof. Schmauder hat zudem zusammen mit Immanuel Schäfer das Buch „Multiscale Materials Modeling – Approaches to Full Multiscaling“ (De Gruyter, Berlin/Boston 2016) herausgegeben.

**i** Teilprojekt B.2 | IMWF, Mai 2017

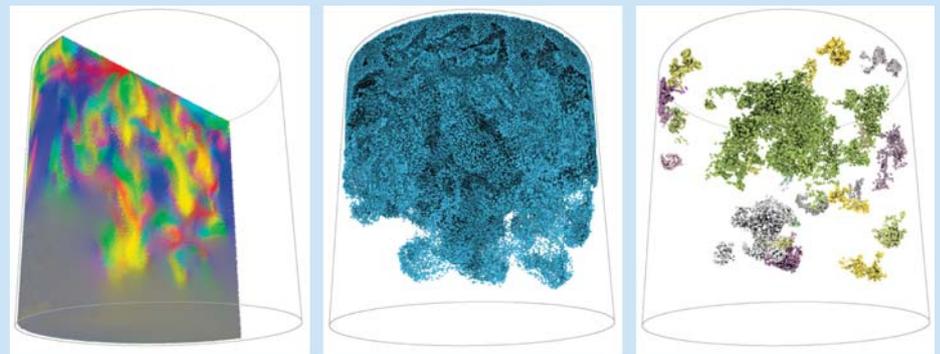
## Voller Erfolg auf der IEEE VIS 2016

Die internationale Forschungsgemeinschaft der Visualisierung kommt alljährlich auf der IEEE VIS zusammen, der wichtigsten Konferenz in diesem Bereich. Ende Oktober 2016 war es in Baltimore wieder soweit. Hier konnten sich gleich mehrere SFB-716-Wissenschaftler über hochkarätige Auszeichnungen freuen.



M. Krone und G. Reina bei der Überreichung des Best Paper Award des „Visualization in Practice“-Workshops durch VIP-Chair Daniela Oelke.

Für seine Dissertation „Interactive Visual Analysis of Biomolecular Simulations“ wurde Dr. Michael Krone (D.4) beim IEEE VGTC Visualization Pioneers Group Doctoral Dissertation Award mit einer Honorable Mention ausgezeichnet – für eine „überragende Forschungsarbeit im Bereich der wissenschaftlichen Visualisierung, mit maßgeblichem Einfluss auf die Anwendung in der Bioinformatik,“ so die begeisterte Begründung der



Aus der Gewinnerarbeit SciVis Contest 2016: Partikelbasierte Überblicksvisualisierungen der Wettbewerbsdaten.

Gutachter. „Die Struktur und Ausarbeitung der Dissertation ist bemerkenswert.“

Gewinner des IEEE VIS 2016 Scientific Visualization Contest ist die Arbeit „Visual and Structural Analysis of Point-based Simulation Ensembles“ über die Visualisierung von viskosen Fingern in einer Salzlösung. Zum Gewinnerteam gehören auch SFB-716-Wissenschaftler – vom VISUS Patrick Gralka, Dr. Guido Reina (beide D.3), Karsten Schatz, Dr. Michael Krone (beide D.4) und Prof. Thomas Ertl (D.3, D.4) sowie vom Institut für Chemische Verfahrenstechnik Manuel Hirschler (A.6).

Der SciVis Contest stellt jedes Jahr die Aufgabe, geeignete Visualisierungen für einen bestimmten vorher festgelegten Datensatz zu entwickeln und damit diese Daten visuell zu analysieren. 2016 galt es,

die Entwicklung von sogenannten viskosen Fingern in einer Salzlösung zu visualisieren. Die Einreichung des Gewinnerteams 2016 überzeugte als umfassendster Beitrag. Besonders hervorgehoben wurde die Möglichkeit, zusätzliche Berechnungsergebnisse in die partikelbasierten Ausgangsdaten zu integrieren, sowie die unter den Einreichungen einzigartige Einbeziehung der Vortizität.

Auch der Best Paper Award des „Visualization in Practice“-Workshops ging an SFB-716-Mitglieder: Dr. Michael Krone und Dr. Guido Reina heimsten (gemeinsam mit Dr. Sebastian Grottel, Christoph Müller und Prof. Thomas Ertl) den Award für „MegaMol for Fun and Profit“ über die im SFB 716 entwickelte Software MegaMol ein.

**i** Teilprojekte D.3, D.4, A.6 | VISUS, ICVT, Oktober 2016

# VERANSTALTUNGEN INNERHALB DES SFB 716

## Winter School der SFB-716-Doktoranden

Die 2016 vom Doktoranden-Netzwerk organisierte Winter School fand in Garmisch-Partenkirchen statt. Das viertägige Programm umfasste eine bunte Mischung aus interdisziplinärem Austausch und gemeinsamen Freizeitaktivitäten.



Winter School 2016.

Die Nachwuchswissenschaftler präsentierten ihre Arbeitsfelder und aktuellen Forschungsthemen. Im fachbezogenen Teil wurde ein breites Themen-Spektrum abgedeckt.

Georg Rempfer vom Institut für Computerphysik (C.5) gab eine Einführung in die klassische Störungstheorie, eine Approximationsmethode zur numerischen Näherung der Lösung komplizierter Gleichungen. Diese Methode wird auf dem Gebiet der quantenmechanischen Computersimulationen genutzt, um die Lösung der dort auftretenden Differenzialgleichungen approximativ zu bestimmen.

April Cooper vom Institut für Theoretische Chemie (C.6) gab einen Einblick in die Funktionsweise neuronaler Netze, ein in vielen Bereichen weit verbreitetes Verfahren für maschinelles Lernen. Im Rahmen des SFB 716 werden diese zur Approximation von Potentialflächen benutzt, welche daraufhin in Simulationsanwendungen – wie z. B. der Berechnung von Reaktionsratenkonstanten – verwendet werden können, um diese drastisch zu beschleunigen.

Michael Lahnert vom Institut für Parallele und Verteilte Systeme (D.8) gab einen Überblick über die Verwendung von git, einem weit verbreiteten Versionskontrollsystem,

das zur projektübergreifenden, gemeinsamen Entwicklung der im SFB 716 entwickelten Simulationssoftware verwendet wird. (AC)

**i** Doktoranden-Netzwerk, März 2017

## Summer School zu Simulationssoftware

Insgesamt etwa 60 Gäste aus der ganzen Welt und den verschiedensten Fachbereichen besuchten die einwöchige Summer School „Particle-based Simulations for Hard and Soft Matter“. Organisiert wurde sie vom SFB 716 am Institut für Computerphysik, unterstützt von CECAM und dem Exzellenzcluster SimTech.



Summer School 2017.

In vielen Vorträgen, Diskussionen, Workshops und praktischen Übungen informierten sich die Teilnehmerinnen und Teilnehmer über den aktuellen Stand der Simulationsforschung und hatten die Möglichkeit, die innerhalb des SFB 716 entwickelten Simulationswerkzeuge in Theorie und Praxis kennenzulernen, um sie für ihre Forschung nutzen zu können.

Mit den Softwarepaketen ESPResSO, IMD und Pasimodo – entwickelt für teilchenbasierte vergrößerte Molekulardynamik-Simulationstechniken für harte und weiche Materie – wurden spezielle Methoden wie Lattice-Boltzmann, Dissipative Particle Dynamics (DPD) und Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) ebenso präsentiert wie verbesserte elektrostatische Algorithmen, die Entwicklung von Kraftfeldern und die Erstellung grobkörniger Modelle. Die Visualisierungssoftware MegaMol konzentriert sich auf die GPU-beschleunigte Visualisierung teilchenbasierter Datensätze mit interaktiver explorativer Analyse von

Molekulardynamik-Simulationen. Die diskutierten Themen umfassten Beispiele weicher Materie, aus der Festkörperphysik und aus technischen Anwendungen.

Die praktischen Übungen mit MegaMol behandelten Anwendungen aus der Thermodynamik und Strukturbiochemie. Zudem gaben Vorträge Aufschluss über z. B. wissenschaftliches Programmieren mit Python oder Multiskalenmethoden.

**i** Oktober 2016

## Statusseminar 2016

Im September 2016 traf sich das SFB-716-Team zum jährlichen Statusseminar in Bad Herrenalb.



SFB-716-Team beim Statusseminar.

Dabei standen der Austausch zwischen den Teilprojekten sowie die Intensivierung der Zusammenarbeit im Mittelpunkt. Die Projekte B.2, D.3, D.5, C.1, C.9 und Ö präsentierten in Vorträgen ihren aktuellen Stand, zudem waren alle Projekte an den Postersessions beteiligt. Auch der Status Quo der innerhalb des SFB 716 entwickelten Software-Pakete ESPResSO, IMD und MegaMol wurde vorgestellt.

Die eingeladenen externen Wissenschaftler Dr. Marc Baaden (Laboratoire de Biochimie Théorique, Paris), Dr. Thomas Kraska (Department für Chemie, Universität zu Köln), Dr. Gerhard König (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr) und Dr. Christian Brandl (Institut für Angewandte Materialien, KIT) vermittelten in Plenarvorträgen neue Impulse.

**i** Alle Teilprojekte, September 2016

# VERANSTALTUNGEN FÜR DIE ÖFFENTLICHKEIT

## Von Luftpumpen und Simulationswerkzeugen – Girls' Day 2017

Der deutschlandweite Girls' Day am 27. April 2017 hat einen neuen Rekord gebrochen – erstmalig gab es mehr als 10.000 Angebote für Mädchen von Klasse 5 bis 10, in technische und natur- sowie ingenieurwissenschaftliche Studiengänge und Berufe hineinzuschneppen. (Quelle: [girls-day.de](http://girls-day.de))



Girls' Day Frühjahr 2017.

Auch an der Universität Stuttgart wurden zahlreiche Workshops angeboten. Im Rahmen des SFB 716 fand der Workshop „Fest, flüssig, gasförmig – Was ist das eigentlich?“ statt – eine Kooperation des Instituts für Technische Thermodynamik und Verfahrenstechnik (ITT) und des Instituts für Computerphysik (ICP).

Mädchen der Klassenstufen 6 und 7 lernten zuerst im Labor des ITT ganz alltägliche physikalische Phänomene in der Praxis kennen. Hier experimentierten sie mit Gläsern, Eiern und Luftpumpen, um das Verhalten von Luft, Temperatur und Druck in verschiedenen Zuständen zu analysieren. Sie lernten, was hinter Begriffen wie Kompression oder adiabatisch steckt.

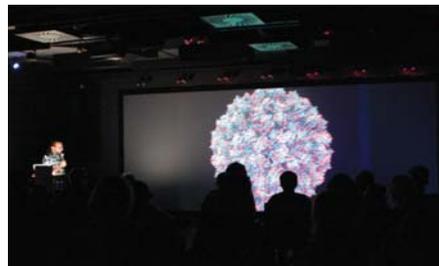
Später am ICP erfolgten Einblicke in die Computersimulation: die Schülerinnen führten mit dem Lennard-Jones-Simulator eigene Teilchensimulationen durch. Sie erfuhren, welche Wichtigkeit die Computersimulation als drittes Standbein in der Forschung neben Experiment und Theorie besitzt, für welche Anwendungen sie eingesetzt wird und dass

man für die Teilchensimulation unter Umständen einen Höchstleistungsrechner benötigt.

**i** Teilprojekte A.7, C.5 | ITT, ICP, April 2017

## Einblick in die Welt der Teilchensimulationen beim Tag der Wissenschaft 2017

Im Juli öffnete die Universität Stuttgart zum alljährlichen Tag der Wissenschaft ihre Türen für das interessierte Publikum. Auch Mitarbeiter des SFB 716 präsentierten ihre Forschung.



Virus an der Powerwall; im digitalen Labor.

Auf der VISUS-Powerwall bestaunten die Besucher interaktive Visualisierungen, und im digitalen Labor erfuhren sie jede Menge über simulierte T-Zellen, Viren und Laserablationen.

Zudem fand im Physikgebäude am Pfaffenwaldring 53 eine Ausstellung des Instituts für Computerphysik (ICP) statt, die über die molekularen Zustandsformen von Stoffen informierte. Ein Vortrag von Jun.-Prof. Maria Fyta (ICP) handelte von „Computerphysik und (Bio) Nanotechnologie“.

Auch zahlreiche weitere am SFB 716 beteiligte Institute boten eige-

ne Programme zum Tag der Wissenschaft an, darunter das Institut für Raumfahrtsysteme (IRS), das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), das Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik (ITT) und das Institut für Parallele und Verteilte Systeme (IPVS).

**i** diverse Teilprojekte und Institute, Juli 2017

## Was es mit den Teilchen auf sich hat – Kids Week 2017

Regelmäßig in den Osterferien organisiert der Förderverein Kinderfreundliches Stuttgart bei der „Kids Week“ diverse Veranstaltungen und Workshops. Bei diesen können Kinder in und um Stuttgart selbst aktiv werden und zahlreichen (nicht nur) wissenschaftlichen Geheimnissen auf die Spur gehen.



Kids Week Frühjahr 2017.

Im Rahmen des SFB 716 wurde der Workshop „Fest, flüssig, gasförmig – Physik erforschen“ angeboten. Am ITT erfuhren die jungen Nachwuchswissenschaftler anhand verschiedener Mitmach-Experimente, was Teilchen sind, welche Kräfte der Natur auf sie wirken und wie sie sich bei kalten und warmen Temperaturen verhalten. Da diese Teilchen natürlich nicht mit bloßem Auge zu sehen sind, wurden sie anschließend anhand von Simulationen im Computerpool des ICP für die Kids sichtbar gemacht.

**i** Teilprojekte A.7, C.5 | ITT, ICP, April 2017

## Simulationsforschung zum Anfassen – Die Ausstellungsinteraktionen

**Wissenschaft erscheint für viele Laien oft staubtrocken, und besonders ein Thema wie Computersimulation ist nicht leicht begreifbar zu machen. Es lag daher nahe, für die Wissensvermittlung bei der Ausstellung nach Medien zu greifen, die beim Verständnis für die dargestellte Forschung helfen.**

Neben zahlreichen analogen Interaktionen wie Lege- und Drehspielen sowie Klapptürchen wurden eine Reihe elektronischer Geräte integriert, die den Zugang zum Publikum erleichtern. Denn Tablet-PCs oder Spielekonsolen wie die Xbox Kinect gehören mittlerweile zum Alltag.

Fürs Tablet wurde eine Simulation des menschlichen Ganges implementiert. Durch Ändern von Parametern wie Gewicht, Geschlecht

oder Stimmung konnten die Besucher den Gang selbst beeinflussen. Wie ein Virus von einer groben 2D-Form zum feindetailliert und schattenreich dargestellten 3D-Objekt wird, zeigte die selbst durchklickbare Anwendung an einem weiteren Tablet an der Wissensstation zur Visualisierung.

Medien wie der Leap Motion Controller oder die Xbox Kinect machten es nicht einmal notwendig, die Geräte zu berühren. Per Gestensteuerung ließen sich die Effekte beim Bestrahlen eines Metallblocks durch einen Laserstrahl sowie die Abspaltung von Fettmolekülen durch das Enzym Lipase selbst steuern und von allen Seiten anschauen. Für diesen spielerischen Zweck wurde die im SFB 716 entwickelte Visualisierungssoftware MegaMol angepasst – ein Pionierprojekt, das die weitere Vertiefung lohnt!

Für die technische Realisierung der digitalen Interaktionen sorgten neben René Trefft (im Rahmen seiner Masterarbeit) sein Betreuer Dr. Michael Krone und April Cooper vom SFB-716-Team.

Auch diverse Ausstellungsexponate erleichterten den Zugang zum Thema. So lässt sich die für Computersimulationen erforderliche Rechenleistung mit dem aus dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart ausgeliehenen Blade aus dem Supercomputer Hermit gleich viel besser veranschaulichen. Eine Einspritzdüse von Bosch stellte den fertig entwickelten Prototyp neben den ebenfalls dargestellten vorangegangenen visualisierten Simulationsdaten für den Gebrauch in benzin- und gasbetriebenen Fahrzeugen dar.

Über die gewonnenen Erfahrungen mit der Präsentation des Themas Computersimulationen im Rahmen einer Wissenschaftsausstellung anhand von analogen und



Legespiel; Blade aus dem HLRS; Station zur Visualisierung mit Tablet; Gestensteuerung.

digitalen Interaktionen sowie der Kuppelprojektion wurde eine Publikation erstellt, die auf der Konferenz SIGRAD 2017 in Norrköping in Schweden vorgestellt wurde.

Krone, M.; Schatz, K.; Hieronymus, N.; Müller, C.; Becher, M.; Barthelmes, T.; Cooper, A.; Currie, S.; Gralka, P.; Hlawatsch, M.; Pietrzyk, L.; Rau, T.; Reina, G.; Trefft, R.; Ertl, T.: From Visualization Research to Public Presentation – Design and Realization of a Scientific Exhibition. In: Proceedings of SIGRAD 2017 (2017). (Noch nicht erschienen).

### Ein paar Zahlen ...

Gesamtanzahl

Ausstellungsbesucher: 10.538

Besucher Vortragsreihe: 368

Gesamtanzahl Ankündigungen  
und Berichte: 290

- Printpresse: 35
- Online: 182
- Newsletter: 37
- Social-Media-Postings: 35

Reichweiten:

- Auflage Printpresse: 691.670, potentielle Reichweite: ca. 1.800.000 Leser
- Empfängerzahl Newsletter: 91.496
- Webseite [www.imdigitalenlabor.de](http://www.imdigitalenlabor.de) Seitenansichten März bis Juli: 10.712
- Verteilte Werbemittel (Flyer, Plakate, Planetariumsprogramme): 68.400 potentielle Reichweite: 450.000

## Simulation auf 360° – Die Kuppelprojektion

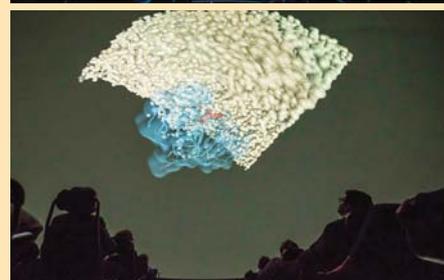
**Zusätzlich zur Ausstellung wurde eigens für die Planetariumskuppel der 360°-Animationsfilm „Im digitalen Labor“ produziert. Er lieferte einen kurzen Einstieg in die Welt der Computersimulationen und wurde vom VISUS und zahlreichen SFB-716-Wissenschaftlern in Zusammenarbeit mit dem Planetarium Stuttgart erstellt.**

Die Visualisierungssequenzen offenbarten die außerordentliche Vielfalt der in der Simulationsforschung behandelten Themen: Aus dem SFB 716 waren die Laserablation, der Riss im Aluminium, die DNA-Sequenzierung und das Enzym Lipase zu bestaunen.

Für die Umsetzung der Animationen sorgten am VISUS Dr. Michael

Krone (D.4), Dr. Guido Reina (D.3), Karsten Schatz (D.4), Patrick Gralka (D.3) sowie Christoph Müller, Michael Becher, Dr. Marcel Hlawatsch und Steffen Currie mit Unterstützung von April Cooper (C.6, ITheoC) und mit Beratung und unter Verwendung von Simulationsdatensätzen von u. a. Apl. Prof. Jürgen Pleiss (C.1/D.4, ITB), Georg Rempfer und Florian Weik (beide C.5, ICP) und vielen weiteren.

Im Planetarium sorgten Ubbö Grassmann und Dr. Uwe Lemmer für die Adaptierung des Films auf die Planetariumskuppel und seine Finalisierung. Die Weltpremiere fand zur Ausstellungsvernissage statt. Gezeigt wurde der Film nach ausgewählten Planetariumsvorfüh-



Kuppelprojektion „Im digitalen Labor“ und im Rahmen der Vortragsreihe.

## Wissenschaft für alle – Die Vortragsreihe

**Die Möglichkeit, tiefer in die Welt der Simulationen einzutauchen, bekamen die Ausstellungsbesucher durch die im Rahmenprogramm angebotene populärwissenschaftliche Vortragsreihe.**

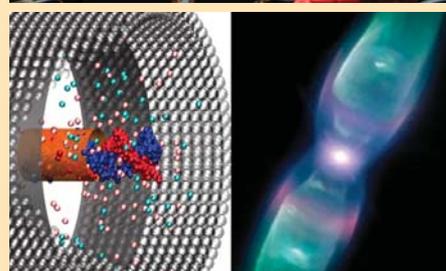
An sechs Terminen präsentierten renommierte Wissenschaftler aus verschiedenen Bereichen der Simulationsforschung ihre Arbeit. In den anschließenden Diskussionen ging es lebhaft zu, als sich die Referenten den zahlreichen, auch kritischen Fragen des Publikums stellten.

Prof. Christian Holm (Sprecher SFB 716, Projektleiter C.5) erläuterte in seinem Vortrag „Ganz klassisch mit Teilchen die Physik simulieren“ die Grundzüge der Molekulardynamiksimulation und die Entwicklung von Computern und Algorithmen seit 50 Jahren und stellte neue Methoden zur zuverlässigen Vorhersage von Materialeigenschaften

durch Simulationen vor. Konkret erläuterte er dies am Beispiel der DNA-Entschlüsselung.

Ins Weltall ging es mit dem Vortrag „3D-Visualisierung planetarischer Nebel“ von Prof. Daniel Weiskopf (Projektleiter D.5, Ö). Planetarische Nebel können mit Teleskopen betrachtet werden – aufgrund der immensen Entfernungen jedoch nur aus einer einzigen Perspektive. Für eine räumliche Visualisierung sind dreidimensionale Modelle nötig. Weiskopf stellte die Visualisierungspipeline und verschiedene Computergraphik-Verfahren vor, mit denen solche Modelle aus einzelnen Aufnahmen aufgebaut und dann effizient dargestellt werden können.

In weiteren Vorträgen sprachen Prof. Rainer Helmig über Simulationen für Maßnahmen zur Energiespeicherung, Jun.-Prof. Jörg Fehr über Crashtestsimulationen,



Die Vorträge fanden im Keplersaal des Planetariums statt. DNA-Sequenzierung; visualisierter Butterfly Nebula M2-9.

Jun.-Prof. Syn Schmitt und Prof. Oliver Röhrle über Simulationen des menschlichen Körpers sowie Prof. Michael Resch über die Wissenschaftstheorie der Simulation.

# SPECIAL – WISSENSCHAFTSAUSSTELLUNG

## Pressestimmen

■ „Die Schau „Im digitalen Labor“ in Stuttgart ermöglicht Laien den Zugang zu dem sperrigen wissenschaftlichen Feld der Simulationen.“

**VDI Nachrichten,**  
Nr. 21/26. Mai 2017, S. 28;  
**VDI Nachrichten online.**  
Von Jutta Witte.

■ „Mit vielen imposanten Beispielen aus unterschiedlichen Disziplinen und interaktiven Exponaten, an denen die Besucher selbst mit Computersimulationen spielen können.“

**Bild der Wissenschaft online,**  
Mai 2017.  
Von Ralf Butscher.

■ „Die Umsetzung ist gelungen: Bildschirme, Modelle, kleine Spiele locken einen von Pult zu Pult. Und auch komplexe Themen werden in verständlicher Sprache erklärt.“

**Lift – Das Stuttgartmagazin,**  
Nr. 7/Juli 2017, S. 66.

■ „Wissenschaft von ihrer schönsten Seite“

**Universität Stuttgart online,**  
Juni 2017.

■ „Bei der Ausstellung „Computersimulationen“ im Planetarium Stuttgart wird Wissenschaft greifbar gemacht.“

**SWR 4 Radio,**  
12. Mai 2017.  
Von Anke Kahle.



■ „Eine kleine, aber sehr instruktive Ausstellung zum Thema Simulationen für Forschung (...) und Technik“

**Physik Journal Facebook,**  
7. Juni 2017.

weitere Beiträge (Auswahl):

Im digitalen Labor.  
**Forschung Leben,**  
Nr. 08/2017, S. 8.

So funktioniert das digitale Labor. Ausstellung im Planetarium über Techniken der Simulation.  
**Stuttgarter Nachrichten** (auch u. a. Fellbacher Zeitung, Leonberger Kreiszeitung, Stuttgarter Zeitung),  
15. Mai 2017, S. 20.  
Von Jürgen Löhle.

Ausstellung bietet Einblicke in Computersimulationen.  
**Stuttgarter Amtsblatt,**  
11. Mai 2017, S. 13.  
Von Monika Spiegel.

Durch Simulationen die Welt verstehen.  
**Stuttgarter Zeitung,**  
03. Mai 2017, S. 23.

Im digitalen Labor – Durch Computersimulationen die Welt verstehen.  
**DFG Magazin online,**  
11. April 2017.

Sie ist überall – Ausstellung zu Computersimulationen.  
**Lift Uni-Tipp,**  
Sommersemester 2017, S. 46.

**i** Teilprojekt Ö | VISUS

## Nachwuchs-Engagement

**Um den Nachwuchs fürs Studium zu begeistern, sind Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des SFB 716 auf zahlreichen Veranstaltungen aktiv.**

Im Juni gab Apl. Prof. Johannes Roth den Abiturienten der Rolf-Benz-Schule Nagold eine Präsentation über das Physikstudium: Neben der Physik im Allgemeinen und den Nobelpreisträgern stellte er auch den Aufbau des Studiums und die Berufschancen vor. Fürs Studium selbst musste er die Zuhörer einer weiteren Präsentation im Juni nicht mehr begeistern: Die etwa 40 Studierenden und Doktoranden aus Braunschweig wurden informiert über den Fachbereich Physik am Studienstandort Stuttgart und die Möglichkeiten der Zusammenarbeit, z. B. mit Max-Planck- und Fraunhofer-Institut.

**i** Teilprojekt B.5 | FMQ, Juni 2017

## Pressespiegel SFB 716 (Auswahl)



**März 2017 |** Über die Visualisierungsforschung – den „Blick auf das Unsichtbare“ – schreibt Eva Wolfangel in der **Bild der Wissenschaft** (4/2017) auf insgesamt sechs Seiten und thematisiert u. a. das VISUS und dessen Institutsleiter Prof. Thomas Ertl und Prof. Daniel Weiskopf, außerdem die Arbeit von Apl. Prof. Jürgen Pleiss (ITB) und Dr. Michael Krone (VISUS) zur Visualisierung des Verhaltens von Proteinen im Rahmen des SFB-716-Teilprojekts D.4.

**November 2016 | FORSCHUNG LEBEN** (7/2016) stellt mehrere Wissenschaftler des SFB 716 und ihre Forschung vor: Jun.-Prof. Maria Fyta (ICP) in „Entschlüsslerin – Maria Fyta liest Erbgut mithilfe von Gold und Diamanten aus“, Dr. Jens Smiatek (ICP) in „Mit Kreativität und Begeisterung. Dr. Jens Smiatek untersucht am Institut für Computerphysik (ICP) der Universität Stuttgart unterschiedliche DNA.“ sowie Jun.-Prof. Dirk Pflüger (IPVS) in „Was passiert, wenn...? – Mit Simulationen in die Zukunft blicken“

tek untersucht am Institut für Computerphysik (ICP) der Universität Stuttgart unterschiedliche DNA.“ sowie Jun.-Prof. Dirk Pflüger (IPVS) in „Was passiert, wenn...? – Mit Simulationen in die Zukunft blicken“

**September 2016 |** Über die Forschungsergebnisse von Teilprojekt C.9 – „Mit Gold und Diamanten das Erbgut entschlüsseln“ – berichteten **Gesundheitsindustrie BW (BioPro)** online und **ChemieXtra** online.

**i** Teilprojekt Ö | VISUS

## Zu den Ausstellungsmachern

*Die Ausstellung wurde realisiert von Nora Hieronymus (Teilprojekt Öffentlichkeitsarbeit des SFB 716) und Lisa Pietrzyk (Presse- und Öffentlichkeitsarbeit Exzellenzcluster SimTech). Umfangreiche Vorarbeit sowie Unterstützung vom Konzept bis zur Umsetzung lieferte Tina Barthelmes, die zudem für das grafische Konzept und die Gestaltung der gesamten Ausstellungs- und Werbemittelgrafik zuständig war.*

**Ein großes Danke** geht an die zahlreichen Mitglieder des SFB-716-Teams, die die Ausstellungsrealisierung auf vielfältigste Weise unterstützt haben: durch wissenschaftliche und technische Beratung, Programmierung und Verfügungstellung von Inhalten, tatkräftige Mithilfe bei Auf- und Abbau und vieles mehr. Insbesondere Michael Krone, April Cooper, Patrick Gralka, Tobias Rau, Karsten Schatz, Guido Reina, Jürgen Pleiss, Georg Rempfer, Florian Weik, Meike Kreidler, Claudia Lemke, Christian Holm, Daniel Weiskopf, Thomas Ertl und viele viele mehr ...

*Unterstützende Institutionen der Universität Stuttgart: alle am SFB 716 beteiligten Institute (insbesondere Visualisierungsinstitut (VISUS), Institut für Computerphysik (ICP), Institut für Technische Biochemie (ITB), Institut für Theoretische Chemie (ITheoC), Institut für Funktionelle Materie und Quantentechnologien (FMQ), Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Institut für Chemische Verfahrenstechnik (ICVT), Höchstleistungsrechenzentrum (HLRS)) sowie Internationales Zentrum für Kultur- und Technikforschung (IZKT), Industrial Consortium SimTech e. V. und zahlreiche an SimTech beteiligte Institute (wie Institut für Sport- und Bewegungswissenschaft (InSpo), Institut für Technische und Numerische Mechanik (ITM), Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung (IWS), Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation (IANS), Institut für Mechanik (im Bauwesen/Mechbau) und viele mehr) ...*

*Außerdem: das Planetarium Stuttgart, Wort für Werk und die Ausstellungsbetreuungs-HiWis, des Weiteren u. a. Jochen Spohrer (ILH), Fabian Hempert (Robert Bosch GmbH), Kirsten Warrach-Sagi und Thomas Schwitalla (Institut für Physik und Meteorologie der Universität Hohenheim), Nikolaus Troje (BioMotion Lab, Queen's University, Kingston, Ontario), das Kulturreferat der Stadt Stuttgart und die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG).*

# KONFERENZEN & WORKSHOPS

## Simulationen auf der Porenskala – InterPore 2017 in Rotterdam

Die InterPore ist eine der weltweit größten Konferenzen zum Thema poröse Materialien, sowohl methodisch als auch in Anwendungen. Poröse Medien sind mit dem Teilprojekt A.6 („Simulation der Herstellung offenporiger Feststoffe“ am Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart) auch ein wichtiger Teilbereich im SFB 716.



InterPore 2017.

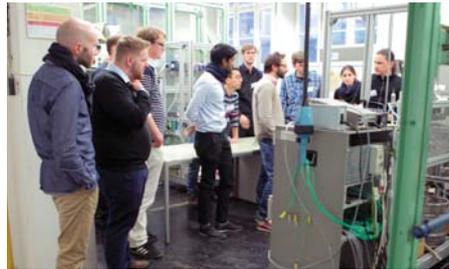
Aus diesem Grund engagiert sich der SFB 716 schon seit längerem bei dieser Veranstaltung. Bei der diesjährigen InterPore im Mai in Rotterdam organisierte das Teilprojekt A.6 unter der Leitung von Manuel Hirschler unter dem Motto „Pore-Scale Modeling and Experiments on Multiphase Flow in Porous Media“ erneut ein Minisymposium mit drei Sessions. Und das mit Erfolg: Die Sitzplätze im gut besuchten Vortragsraum reichten nicht aus, so dass einige Zuhörer stehen mussten.

Prof. Ivan Lunati von der Multiphase and Hydrosystems Group des Institute of Earth Sciences der University of Lausanne (Schweiz) hielt den Eröffnungsvortrag zum Thema „Pore-Scale Modelling“. Dabei angesprochen wurden die Zukunft detaillierter Simulation auf der Porenskala sowie Fragen über Herausforderungen und Limitierungen bei Simulationen und die Notwendigkeit neuer Ansätze.

**i** Teilprojekt A.6 | ICVT, Mai 2017

## Süddeutsche SPH-Community trifft sich in Stuttgart

Der alljährliche Workshop der Süddeutschen Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)-Community fand in diesem Jahr am Institut für Chemische Verfahrenstechnik (ICVT) der Universität Stuttgart statt – unterstützt vom SFB 716.



Technikumsführung im ICVT.

Etwa 20 Teilnehmer aus so unterschiedlichen Fachbereichen wie Physik, Mechanik, Verfahrenstechnik, Strömungsmechanik, Siedlungswasserwirtschaft, Visualisierung, Computergrafik und Computeranimation kamen zusammen, um sich über die neuesten Entwicklungen auf dem Gebiet der SPH-Forschung auszutauschen. Die Teilnahme interdisziplinärer Fachbereiche ermöglichte einen sehr produktiven Austausch über die Meisterung aktueller Herausforderungen.

Vertreten waren Forschungsgruppen zahlreicher Universitäten und Hochschulen aus dem süddeutschen Raum, darunter die Universitäten Freiburg und Konstanz, die TU München, das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) sowie die Hochschule der Medien Stuttgart und mit verschiedenen Instituten die Universität Stuttgart.

Die Keynote zum Thema „Smoothed Particle Hydrodynamics in Urban Water Management“ wurde von Gastredner Dr. Michael Meister vom Institut für Siedlungswasser-

wirtschaft der Universität Innsbruck gehalten. Neben der Anwendung der SPH-Methode in der Trink- und Abwasseraufbereitung wurden auch die weiteren Möglichkeiten ihres Einsatzes, ihre Vor- und Nachteile sowie der derzeitige Stand der diesbezüglichen Forschung vorgestellt. In weiteren Programmpunkten präsentieren sich die teilnehmenden Institutionen mit ak-



SPH-Workshop 2016.

tuellen Themen, gefolgt von einer Technikumsführung im Labor des ICVT mit der Demonstration einer Hochdruckblasensäule sowie eines pulsationsarmen Verdampfers für kleine Gasströme.

Im Gegensatz zur Europäischen Community (SPHERIC) lag der Fokus dieses Workshops sehr stark auf der methodischen Anwendung und weniger auf der methodisch-mathematischen Entwicklung neuer Algorithmen.

Der bisher biennial veranstaltete Workshop soll zukünftig jährlich stattfinden. Das ermöglicht die Optimierung der SPH-Methode für vielversprechende Anwendungen wie z. B. Mehrphasenströmung in porösen Medien, Strukturbildungsprozesse bei Polymermembranen, Tropfenzerfall in Brennkammern, Verdampfungsvorgänge sowie Animationen in Kinofilmen.

**i** Teilprojekt A.6 | ICVT, November 2016

## VORTRÄGE VON SFB-716-MITGLIEDERN BEI KONFERENZEN & WORKSHOPS

(AUSWAHL)

- 12th International SPHERIC Workshop, Ourense/Spanien (Juni 2017)  
**Manuel Hirschler** (A.6): „Study of implicit time-integration in truly incompressible SPH“ (weiterer Autor aus dem SFB 716: Ulrich Nieken)
- Symposium Gas-Phase Synthesis 2017, Duisburg (März 2017)  
**Andreas Kronenburg** (A.8): „Langevin Dynamics Simulation of Nanoparticle Agglomeration in Turbulent Flows“
- Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Hochdruckverfahrenstechnik, Mikroverfahrenstechnik, Molekulare Modellierung und Simulation (MolMod 2017), Frankfurt (März 2017)  
**Niels Hansen** (A.9): „Thermodynamics of Self-Assembly of Perylene Derivatives“ (weiterer Autor aus dem SFB 716: Jörg Baz)
- International Symposium on Multiscale Computational Analysis of Complex Materials, Kopenhagen/Dänemark (Aug. 2017)  
**Siegfried Schmauder** (B.2): „Multiscale modelling of fatigue – From atoms to components“
- International Conference on Laser Ablation (COLA 2017), Marseille/Frankreich (Sept. 2017)  
**Johannes Roth** (B.5): „Molecular dynamics simulations of laser ablation in Silicon and Germanium: the influence of electron-temperature dependent interactions“
- 44th International Conference on Plasma Science (ICOPS 2017), Atlantic City/USA (Mai 2017)  
**Stephen Coplestone** (B.8): „Coupling Md Simulations Of Laser Ablation With Pic-Dsmc Simulations Of Plasma Plume Expansions And Subsequent Laser-Plasma Interactions Presentation“
- Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Hochdruckverfahrenstechnik, Mikroverfahrenstechnik, Molekulare Modellierung und Simulation, International Workshop Molecular Modeling and Simulation: Science, Engineering and Industrial Applications (MolMod 2017), Frankfurt (März 2017)  
**Valerio Ferrario** (C.1): „Simulations of protein diffusion and aggregation for bioprocess design and optimization“ (weiterer Autor aus dem SFB 716: Jürgen Pleiss)
- 26th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD 2017), Erlangen (Juli 2017)  
**Georg Rempfer** (C.5): „Reducing Spurious Flow In Simulations Of Electrokinetic Phenomena“
- FRESH Lecture, Universiteit Leiden/Niederlande (Jan. 2017)  
**Johannes Kästner** (C.6): „Synergistic ‚Substrate Activation‘ and ‚Oxygen Activation‘ in Salicylate Dioxygenase from QM/MM Simulations“
- CECAM Workshop Challenges across Large-Scale Biomolecular and Polymer Simulations, Wien/Österreich (Feb. 2017)  
**Ewa Anna Oprzeska-Zingrebe** (C.8): „Interactions Between a Short DNA Oligonucleotide and Urea in the Light of Kirkwood-Buff Theory: a Molecular Dynamics Simulation Study“ (weiterer Autor aus dem SFB 716: Jens Smiatek)
- Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) Frühjahrstagung, Dresden (März 2017)  
**Jens Smiatek** (C.8): „Aqueous Ionic Liquids and Their Influence on Peptide Conformations: Denaturation and Dehydration Mechanisms“
- Euro-TMCS II: Theory, Modelling and Computational Methods for Semiconductors Workshop, Cork/Irland (Dez. 2016)  
**Frank Maier** (C.9): „DNA sequencing using diamondoid-functionalized nanopores“ (weitere Autoren aus dem SFB 716: Ganesh Sivaraman, Maria Fyta)
- SIGRAD 2017 (Swedish Chapter of Eurographics), Norrköping/Schweden (Aug. 2017)  
**Patrick Gralka** (D.3): „From Visualization Research to Public Presentation – Design and Realization of a Scientific Exhibition“ (weitere Autoren aus dem SFB 716: Michael Krone, Karsten Schatz, Nora Hieronymus, Tina Barthelmes, April Cooper, Tobias Rau, Guido Reina, Thomas Ertl)
- 10th IEEE Pacific Visualization (PacificVis 2017), Seoul/Südkorea (April 2017)  
**Michael Krone** (D.4): „Implicit Sphere Shadow Maps“ (weitere Autoren aus dem SFB 716: Guido Reina, Thomas Ertl)
- 2017 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Atlanta/USA (Feb. 2017)  
**Michael Lahnert** (D.8): „Minimally-Invasive Integration of P4est in Espresso for Adaptive Lattice-Boltzmann“ (weiterer Autor aus dem SFB 716: Miriam Mehl)
- 23rd IEEE International Conference on High Performance Computing, Data, and Analytics (HiPC 2016), Hyderabad/Indien (Dez. 2016)  
**Steffen Hirschmann** (D.9): „Towards Understanding Optimal Load-Balancing of Heterogeneous Short-Range Molecular Dynamics“ (weitere Autoren aus dem SFB 716: Dirk Pflüger, Colin W. Glass)

# KONFERENZEN & WORKSHOPS

## SFB 716 Mitorganisator von MolMod 2017

Im Rahmen des „ProcessNet-Jahrestreffen Frankfurt I“ fand im März 2017 im DECHEMA-Haus Frankfurt der internationale Workshop „Molecular Modeling and Simulation: Science, Engineering and Industrial Applications (MolMod)“ statt.

Der Workshop vereinte Experten aus Forschung und Industrie, um sowohl wissenschaftliche als auch praktische Herausforderungen auf dem Gebiet der angewandten molekularen Modellierung und Simulation zu diskutieren. Die Themen für 2017 waren u. a. MD/MC Simulation Methods and Tools, Multiscale

Modeling and Simulation Physico-Chemical Properties und Nanoscale Processes.

Organisiert wurde er von ProcessNet (einer gemeinsamen Initiative von DECHEMA und VDI-GVC) und dem SFB 716.

📅 März 2016

## BETEILUNG VON SFB-716-MITGLIEDERN AN AUSRICHTUNG UND (MIT-)ORGANISATION VON VERANSTALTUNGEN (AUSWAHL)

- SAFT 2017, Heidelberg (Mai 2017)  
**Joachim Groß** (A.7): Wissenschaftliches Komitee
- International Conference on Structural Integrity and Durability (ICSID 2017), Dubrovnik/Kroatien (Aug. 2017)  
**Siegfried Schmauder** (B.2): Organisationskomitee
- EUROMAT 2017, Thessaloniki/Griechenland (Sept. 2017)  
**Siegfried Schmauder** (B.2): Session Chairman
- European Summer School on Industrial Biotechnology (ESSIB), Wageningen/Niederlande (Sept. 2017)  
**Jürgen Pleiss** (C.1, D.4): Organisator
- Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen  
Hochdruckverfahrenstechnik, Mikroverfahrenstechnik, Molekulare Modellierung und Simulation, International Workshop Molecular Modeling and Simulation: Science, Engineering and Industrial Applications (MolMod 2017), Frankfurt (März 2017)  
**Christian Holm** (C.5): Programmkomitee
- Pacific Graphics 2016, Okinawa/Japan (Okt. 2016)  
**Thomas Ertl** (D.3, D.4): Conference Co-Chair  
**Guido Reina** (D.3): Organisator Session Visualization/NPR
- ISC High Performance 2016, Frankfurt (Juni 2016)  
**Guido Reina** (D.3) Organisationskomitee ISC WOIV Workshop „In Situ Visualization: Introduction & Applications“
- IEEE VIS 2017, Phoenix (Okt. 2017)  
u. a. **Guido Reina** (D.3), **Michael Krone** (D.4): Organisatoren Tutorial „Interactive Visualization of Large Dynamic Particle Data“
- IEEE VIS 2016, Baltimore/USA (Okt. 2016)  
**Thomas Ertl** (D.3, D.4): IEEE VAST Programmkomitee  
**Daniel Weiskopf** (D.5): Leitung ETVIS Workshop, Paper Co-Chair BioVis Workshop, Panelist BELIV Workshop, Programmkomitee IEEE VAST & IEEE SciVis
- IEEE Pacific Visualization 2017, Seoul/Südkorea (April 2017)  
**Daniel Weiskopf** (D.5): Paper Co-Chair
- ACM SIGGRAPH ASIA 2016, Macao, (Dez. 2016):  
**Daniel Weiskopf** (D.5): Co-Chair Symposium on Visualization.
- International Symposium on Big Data Visual Analytics (BDVA), Sydney/Australien (Nov. 2016), Adelaide/Australien (Nov. 2017)  
**Daniel Weiskopf** (D.5), **Michael Krone** (D.4): Programmkomitee
- IEEE Symposium on Biological Data Visualization (BIOVIS), Baltimore/USA (Okt. 2016), Prag/Tschechien (Juli 2017)  
**Daniel Weiskopf** (D.5), **Michael Krone** (D.4): Programmkomitee
- 2017 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Atlanta/USA (Feb. 2017)  
**Miriam Mehl** (D.8): Organisator Session „Parallel Frameworks and Libraries for Tree-Structured Grids – Part II of II“

## HONOM 2017 an der Universität Stuttgart

Vom 27. bis 31. März 2017 tagte in Stuttgart die ECCOMAS-Fachkonferenz „HONOM 2017 – European Workshop on High Order Nonlinear Numerical Methods for Evolutionary PDEs: Theory and Applications“.



Sie wurde organisiert vom Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG, Teilprojekt B.8) in Zusammenarbeit mit den Universitäten Zürich und Trient, mit Unterstützung von u. a. SFB 716, SimTech und DFG.

Die ECCOMAS (European Community on Computational Methods in Applied Sciences) bringt an Entwicklung und Anwendung von Berechnungsmethoden Interessierte aus Wissenschaft und Technologie zusammen. Zu ihren Aktivitäten gehören die Organisation europaweiter Kongresse, die Unterstützung regionaler Fachveranstaltungen und thematischer Konferenzen und Workshops sowie außerdem die Förderung von Veranstaltungen für Nachwuchsforscher und des Austauschs mit der Industrie.

📅 Teilprojekt B.8 | IAG, März 2017

## Wechsel im Doktorandensprecherteam

**April Cooper (C.6, Institut für Theoretische Chemie) ist seit September 2016 neu im Doktorandensprecherteam des SFB 716. Sie folgt damit auf Florian Weik (C.5, Institut für Computerphysik). Weiterhin im Amt bleibt Michael Lahnert (D.8, Institut für Parallele und Verteilte Systeme).**



April Cooper, Michael Lahnert

Das Doktoranden-Netzwerk des SFB 716 ist ein Zusammenschluss aller Promovierenden aus den unterschiedlichen Teilprojekten. Es verfolgt im Wesentlichen die Ziele, alle

Doktoranden, die im Rahmen des SFB 716 ihr Promotionsverfahren durchführen, zusammenzubringen, die Nachwuchswissenschaftler in ihren Forschungsaktivitäten zu unterstützen und den gegenseitigen Austausch zu fördern.

Alle Doktoranden des SFB 716 sind herzlich zu den regelmäßigen informellen Treffen eingeladen. Diese finden im Anschluss an die Kolloquien des SFB 716 statt.

Darüber hinaus werden mehrtägige Ausflüge und Workshops für die Nachwuchswissenschaftler organisiert.

**i** Teilprojekte C.6, D.8 | ITheoC, IPVS, September 2016

## Kurz berichtet

**Dr. Valerio Ferrario (C.1)** ist seit November 2016 neu am Institut für Technische Biochemie (ITB) und im SFB 716. Er forscht zur Simulation von Enzymen unter Prozessbedingungen.

**Tobias Rau** ist seit November 2016 am VISUS als Wissenschaftlicher Mitarbeiter unter anderem für die Betreuung und Pflege von MegaMol mitverantwortlich.

**Liang Zhou (D.5, VISUS)** verbringt ab August 2017 zwei Gastsemester am Scientific Computing and Imaging Institute in Utah. Dort wird er über Visualisierung von Unsicherheiten bei Ensemblesimulationen forschen. Sein Betreuer ist der Institutsleiter Prof. Chris Johnson.

**Florian Weik (C.5)** vom Institut für Computerphysik (ICP) forschte von Juli bis September 2016 im Rahmen eines Auslandsaufenthaltes am Los Alamos National Laboratory in den USA.

**Matthias Braun** ist seit Juli 2017 ein weiteres neues Mitglied im MegaMol-Team. Als Systemadministrator am VISUS wird er zudem unter anderem die Powerwall mitbetreuen.

**Prof. Daniel Weiskopf** (Projektleiter D.5) vom VISUS hat im April 2017 einen Ruf an das Heidelberg Institut für Theoretische Studien (HITS) und an die Universität Heidelberg abgelehnt.

## NEU IM SFB 716

(seit Oktober 2016)

## Wissenschaftler/-innen

- Valerio Ferrario  
Teilprojekt C.1 (ITB)
- Tobias Rau  
MegaMol (VISUS)
- Marc Scherle  
Teilprojekt A.6 (ICVT)
- Christian-Alexander Walter  
Teilprojekt A.6 (ICVT)

## Verwaltung

- Matthias Braun  
Systemadministrator (VISUS)

## ALUMNI

(seit Oktober 2016)

## Wissenschaftler/-innen

- Ganesh Sivamaran  
Teilprojekt C.9 (ICP)
- Cam-Quy Vo  
Teilprojekt C.1 (ITB)

## Verwaltung

- Tina Barthelmes  
Presse- und Öffentlichkeitsarbeit (VISUS)
- Claudia Lemke  
Koordination (ICP)

# AUSBLICK

## SFB-716-KOLLOQUIEN

Die Termine für die Kolloquien des SFB 716 im Wintersemester sind:

- 26. Oktober 2017, 16:00 Uhr
- 23. November 2017, 16:00 Uhr
- 14. Dezember 2017, 16:00 Uhr (Weihnachtsfeier)
- 25. Januar 2018, 16:00 Uhr

Veranstaltungsort ist wie gewohnt:

Institut für Computerphysik (ICP), Allmandring 3, 70569 Stuttgart, Seminarraum 1.079.

Zudem werden in regelmäßigen Abständen im Rahmen des SFB 716 am ICP Vorträge von externen Sprechern angeboten.

---

## ESPResSo Summer School 2017

### Simulating Soft Matter with ESPResSo, ESPResSo++ and VOTCA

Der SFB 716 veranstaltet vom 9. bis 13. Oktober 2017 (Ort: ICP, Allmandring 3, Stuttgart) eine einwöchige Sommerschule.

The school consists of lectures and hands-on sessions in two tracks, both for beginners as well as for experienced users of ESPResSo and ESPResSo++. Furthermore, there will be a poster session, where participants have the opportunity to discuss their projects with the other participants and the speakers, and a number of scientific talks where scientists will present recent research projects that were done with any of the software packages.

Interessierte sind zur Teilnahme herzlich eingeladen.

---

## 2. Süddeutscher SPH Workshop

### Pre-/Postprocessing großer Simulationen Neue Entwicklungen und Anwendungen

28. November 2017, Ort: ICVT, Böblinger Str. 72/Gebäude 78, Stuttgart

Bei Interesse an der Teilnahme bitte anmelden bei Manuel Hopp-Hirschler.

---

Mehr Informationen zu diesen und weiteren Veranstaltungen unter [www.sfb716.uni-stuttgart.de](http://www.sfb716.uni-stuttgart.de)

## IMPRESSUM

### Herausgeber:

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

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

September 2017

**Konzept, Gestaltung, Redaktion:**  
Nora Hieronymus

**Layout-Design:** Tina Barthelmes

**Fotos:** SFB 716 (sofern nicht anders angegeben), Ausstellung/Coverfoto: Max Kovalenko

**Online-Version:** [www.sfb716.uni-stuttgart.de/presse-und-medien/sfb716journal.html](http://www.sfb716.uni-stuttgart.de/presse-und-medien/sfb716journal.html)



Die Forschung des SFB 716 der Universität Stuttgart wird gefördert durch die

**DFG**