

## Computersimulation molekularer und zellulärer Biosysteme sowie komplexer weicher Materie

### I. Motivation

Die Ende 2003 eingerichtete Förderinitiative **Neue konzeptionelle Ansätze zur Modellierung und Simulation komplexer Systeme** möchte einen Beitrag dazu leisten, komplexe Systeme mittels mathematischer Modellierung und Computersimulation besser zu verstehen. Zugleich zielt sie darauf, die Zusammenarbeit zwischen Theorie, Modellierung und Simulation zu stärken. Die Initiative richtet sich an entsprechend ausgewiesene Theoretiker und Theoretikerinnen aus allen Wissenschaftsdisziplinen.

Als komplex werden hier Systeme aufgefasst, die aus einer großen Anzahl von Elementen bestehen und sich durch das alleinige Studium ihrer Konstituenten nicht angemessen beschreiben lassen. Charakteristisch für solche Systeme sind die Konkurrenz zwischen Autonomie und Integration der Einzelelemente, emergente Phänomene über die hierarchischen Ebenen hinweg und eine adaptive Anpassung an die Umgebung. Die Förderinitiative zielt hier auf systematisch verbesserbare und auf breite Klassen von Problemen anwendbare Konzepte. Dabei setzt die Stiftung große Erwartung in gemeinsame Ansätze mehrerer Experten und Expertinnen aus Theorie, Modellierung und Simulation, die komplementäres Methodenwissen einbringen.

Zum einen werden fach- oder methodenübergreifend angelegte Forschungsprojekte nach vorheriger thematischer Ausschreibung gefördert, nunmehr erneut zu komplexen (Bio-) Makromolekülen sowie dynamischen Vorgängen in Zellen und weicher Materie wie weiter unten beschrieben. Die frühere Ausschreibung „Komplexe Netzwerke als fächerübergreifendes Phänomen“ ist abgeschlossen. Weitere thematische Ausschreibungen sind für Mitte 2008/Anfang 2009 vorgesehen.

Zum anderen können sich Postdoktoranden und Postdoktorandinnen bei einem Arbeitsgruppenwechsel um Fellowships „Computational Sciences“ bewerben (s. Merkblatt 82c); ein jährlicher Stichtag ist hier vorgesehen. Ferner werden Forschungsfreisemester mit Lehrstuhlvertretung, Workshops und Sommerschulen gemäß den Modalitäten des Symposienprogramms (s. Merkblatt 1) sowie Vorhaben zu den formalen Grundlagen von Komplexität unterstützt.

### II. Thematik

Die Ausschreibung **Computersimulation molekularer und zellulärer Biosysteme sowie komplexer weicher Materie** zielt auf Forschungsprojekte, die sich mit komplexen Systemen an der Schnittstelle von theoretischer Physik, Biophysik, Chemie, Biologie einschließlich weicher Materie befassen. Im De-

zember 2004 gab es hierzu bereits zwölf Be- willigungen unter Beteiligung von 20 Arbeits- gruppen. Eine Liste dieser Projekte steht auf der Homepage der Stiftung.

Für die Analyse und Vorhersage experimen- teller Befunde in den molekularen Biowissen- schaften sind Fortschritte in der Theorie und Modellbildung unerlässlich. Die dafür benötig- ten Methoden stehen noch am Anfang. Ähn- lich stellt sich die Situation bei weicher Mate- rie dar, die festkörper- wie auch flüssigkeits- ähnliche Charakteristika aufweist. Die Compu- tersimulation solch komplexer Systeme steht vor einer Reihe von Herausforderungen:

- an experimentelle Daten anzuschließen und Modellkonfigurationen entsprechend weiterzuentwickeln;
- räumliche Skalen zu überbrücken;
- die zeitliche Skala zu erweitern mit Blick auf biologisch relevante molekulare Pro- zesse;
- größere Systeme zu behandeln und die Komplexität zu reduzieren;
- problemangepasste Methoden systema- tisch zu identifizieren;
- eine bessere Anwendbarkeit der Methoden zu erschließen.

Ein besonderes Augenmerk der Förderung liegt auf neuen methodischen Ansätzen, ins- besondere solchen, die systematisch verbes- serbar und übertragbar sind. Beispielsweise wäre an eine geeignete Vergrößerung einer atomaren Sichtweise oder einen Multiskalen- ansatz zu denken. In Betracht kommt weiter- hin eine innovative Kombination bekannter Methoden aus der Quantenchemie, Elektro- statik, Hydrodynamik, Molekulardynamik und Vielteilchentheorie. (Semi-)empirische und stochastische Ansätze bieten sich ebenfalls an, um bestehende Beschränkungen zu überwinden.

In jedem Fall sollte die beabsichtigte Metho- denentwicklung auf eine konkrete wissen-

schaftliche Frage zielen und das Simulations- ergebnis in Bezug zu experimentellen Daten gesetzt werden. Eine Förderung experimentel- ler Teilprojekte steht nicht im Fokus der För- derinitiative. In einem geringem Umfang wird die Ermittlung fehlender Daten zwecks Ver- gleich mit den Simulationsergebnissen jedoch akzeptiert.

### III. Abgrenzung

Anträge zur routinemäßigen Anwendung oder Anpassung von Simulationssoftware sind von einer Förderung ausgeschlossen. Dies gilt auch für Analysen in der Genomik, Proteomik und Bioinformatik.

Die VolkswagenStiftung schließt weiterhin die Förderung von Themen aus, die Gegenstand der Programme anderer Institutionen sind; hierzu zählen Schwerpunktprogramme der Deutschen Forschungsgemeinschaft und För- derausschreibungen der Bundesministerien.

### IV. Fördermöglichkeiten

Gefördert werden Forschungsvorhaben mit fach- und/oder methodenübergreifendem Zu- schnitt, wobei Kooperationsprojekte von Ar-beitsgruppen mit unterschiedlicher Expertise bevorzugt berücksichtigt werden. Eine zu- nächst bis zu dreijährige Laufzeit – mit der Möglichkeit eines späteren, wiederum maximal auf drei Jahre begrenzten Fortsetzungsantrags – kann vorgesehen werden.

Zur Durchführung der Forschungsvorhaben können Mittel für wissenschaftliches Personal, Sachmittel und Reisekostenzuschüsse bereit- gestellt werden. Dies schließt Fahrt- und Auf- enthaltskosten für einen projektbezogenen, maximal einjährigen Austausch von Mitarbei- tern zwischen den beteiligten Arbeitsgruppen sowie Gästemittel zur Einbindung ausländi- scher Wissenschaftler und Wissenschaftlerin-

nen ein. Nicht-wissenschaftliches Personal (Techniker-, Sekretariatsstellen) und Rechnerbeschaffungen werden in der Regel nicht unterstützt.

Qualifizierte promovierte Nachwuchswissenschaftler und -wissenschaftlerinnen können in einem Antrag ihre eigene Stelle einwerben. In internationalen Kooperationen ist auch eine Bewilligung zu Gunsten ausländischer Gruppen möglich. Dabei setzt die Stiftung voraus, dass die Notwendigkeit der Kooperation seitens des obligatorischen deutschen Partnerinstituts schlüssig begründet wird und dieses die Projektkoordination übernimmt.

## V. Antragstellung

Konkrete Hinweise zur Ausarbeitung einer Projektskizze bzw. eines Antrags enthält die nachfolgende Checkliste. Wegen der internationalen Begutachtung werden nur Bewerbungen in englischer Sprache entgegen genommen. Die Projektskizzen und Anträge werden von einer interdisziplinär zusammengesetzten Gutachterkommission vergleichend geprüft. Die Stiftung nimmt keine Anträge in Bearbeitung, die in dieser oder ähnlicher Form gleichzeitig anderen Fördereinrichtungen vorliegen.

Bei neuen Vorhaben ist eine zweistufige Antragsprüfung vorgesehen. Dafür werden zunächst Projektskizzen mit einer dreiseitigen Kurzbeschreibung des Forschungsvorhabens und Angaben zu den Projektbeteiligten und Kosten erbeten. Stichtag für die Einreichung von Projektskizzen ist der **2. November 2007** (Poststempel). Nach der Begutachtung benachrichtigen wir Sie, ob Ihr Thema weiterverfolgt werden kann und welche zusätzlichen Informationen in einem ausführlichen Antrag aufgeführt werden sollen.

Bereits in der Initiative geförderte Arbeitsgruppen können einen Antrag auf bis zu dreijährige Fortsetzung ihres laufenden Vorha-

bens stellen. Ein ca. zehnteitiger Antrag zu den Zielen und dem Arbeitsprogramm für die zweite Förderphase sowie ein Bericht zum aktuellen Bearbeitungsstand werden erwartet. Solche Fortsetzungsanträge können alternativ zum **2. November 2007** oder zum **1. August 2008** an die Stiftung gesandt werden.

Die VolkswagenStiftung kann Fördermittel nur an wissenschaftliche Einrichtungen vergeben. Bei Antragstellern und Antragstellerinnen außerhalb der Hochschulen und der allgemein bekannten außeruniversitären Forschungsinstitutionen sind daher Angaben notwendig zu Rechtsform, Satzung, Besetzung der Organe und Gremien, Gemeinnützigkeit, Etatgestaltung und Haushaltsprüfung der zu fördernden Einrichtung. Soweit ein Tätigkeitsbericht der antragstellenden Einrichtung vorliegt, wird um Übersendung gebeten.

## VI. Auskünfte

Für weitere Auskünfte steht die Geschäftsstelle der VolkswagenStiftung, Hannover, gerne zur Verfügung.

Ansprechpartnerin: Dr. Ulrike Bischler  
Telefon: +49 (0) 511-83 81 350  
Telefax: +49 (0) 511-83 81 4350  
E-Mail: [bischler@volkswagenstiftung.de](mailto:bischler@volkswagenstiftung.de)

.....  
**VolkswagenStiftung**  
Kastanienallee 35  
30519 Hannover

Telefon 05 11/83 81-0  
Telefax 05 11/83 81-0  
[www.volkswagenstiftung.de](http://www.volkswagenstiftung.de)

## Checkliste zur Antragstellung 82a

### Computersimulation molekularer und zellulärer Biosysteme sowie komplexer weicher Materie

Projektskizzen und (Fortsetzungs-)Anträge in **englischer** Sprache können zum angegebenen Stichtag eingereicht werden. Das Vorhaben sollte so beschrieben sein, dass sowohl die Stiftung als auch die von ihr zu Rate gezogenen Gutachter und Gutachterinnen ein klares Bild des Projekts erhalten. Bitte senden Sie Ihren Antrag auf Papier mit Originalunterschrift(en) und zusätzlich in elektronischer Form (vorzugsweise als pdf-Datei per E-Mail) an die VolkswagenStiftung.

Die folgenden Informationen werden bei Projektskizzen (Stichtag 2. Nov. 2007) benötigt:

- Deckblatt mit kurzem **Projekttitle** und Namen mit Institutsadressen aller **Antragsteller / Antragstellerinnen**
- **drei- bis vierseitige Projektdarstellung**  
(1) Thema und Zielsetzung, (2) Kurzbeschreibung des Forschungsstandes, der vorgesehenen Methoden und des Arbeitsprogramms, (3) Angaben zum Mehrwert der Kooperation
- **Kostenabschätzung** und Angabe zur **Laufzeit**  
gegliedert in Personal-, Reise- und sonstige laufende Sachkosten für jede beteiligte Arbeitsgruppe
- **Unterschriften** aller Antragsteller / Antragstellerinnen

Separat im Anhang (bzw. als getrennte Datei):

- Je einseitige Kurzfassung des **wissenschaftlichen Werdegangs** mit Angabe von fünf neueren, projektrelevanten Publikationen von allen Antragstellern/innen sowie den schon bekannten Projektbearbeitern/innen

Anträge werden nur bei laufender Förderung in der Initiative oder positiv bewerteter Projektskizze entgegen genommen. Die folgenden Informationen werden bei aufgeforderten und Fortsetzungsanträgen (Stichtage 2. Nov. 2007, 1. August 2008) benötigt:

- kurzer, möglichst aussagefähiger **Projekttitle**
- Namen mit (ggf. aktualisierten) Institutsadressen aller **Antragsteller / Antragstellerinnen**
- **Zusammenfassung** in Englisch und Deutsch – je ca. 150 Worte –
- **zehn- bis zwölfseitige ausführliche Darstellung**  
Zielsetzung und Begründung, eigene Vorarbeiten und erwartete Ergebnisse in Bezug zum internationalen Forschungsstand, Komplexität des Systems, Durchführung und Methoden, Arbeits- und Zeitplan, Expertise der involvierten Arbeitsgruppen und Gestaltung der Kooperation
- **Kostenplan** mit Begründung der einzelnen Positionen, wie folgt
  - Personalmittel (tarifliche Einstufung und tatsächlich erforderlicher Betrag, inkl. Sozialversicherungsanteil des Arbeitgebers)
  - Laufende Sachmittel (z. B. Reisekosten, Verbrauchsmaterial, Publikationsgebühren)
  - Einmalige Sachmittel (z. B. kleinere Geräte, Literatur)

- Bezeichnung des vorgesehenen **Bewilligungsempfängers** (z. B. Hochschulinstitut)
- **Erklärung** zur Vorlage des Antrags oder thematisch verwandter Anträge bei anderen Förderinstitutionen
- **Unterschriften** aller Antragsteller / Antragstellerinnen

Separate Anlagen (bzw. als getrennte Dateien):

- **wissenschaftlicher Werdegang** und **Liste relevanter Publikationen** der vergangenen **fünf Jahre** aller Projektbeteiligten – pro Person maximal drei Seiten –
- Auflistung **anderer Förderungen** (Titel, Laufzeit, Umfang, Förderinstitution, Abgrenzung)
- nur bei Antragstellern und Antragstellerinnen ohne eine feste Anstellung während der vorgesehenen Projektlaufzeit und bei Beantragung der eigenen Stelle:  
**Stellungnahme** seitens der Institutsleitung bzw. des Fachbereichs zur Durchführbarkeit des Vorhabens (einschließlich Rechnernutzung) und zur Mittelverwaltung

Bitte senden Sie Ihre Projektskizze / Ihren Antrag und die zugehörigen Dateien an:

VolkswagenStiftung  
Dr. Ulrike Bischler  
Kastanienallee 35  
30519 Hannover

E-Mail: [bischler@volkswagenstiftung.de](mailto:bischler@volkswagenstiftung.de)