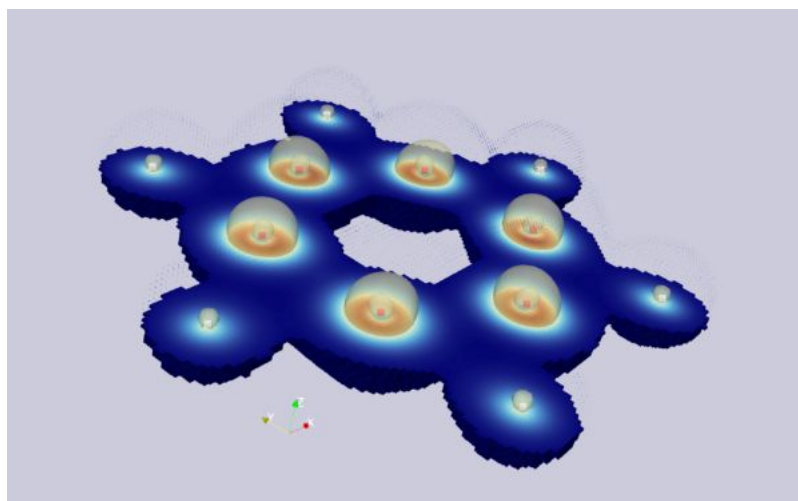


CASUS und Microsoft Research forschen gemeinsam

21.08.2026, 12:00 | Wissenschaft, Forschung, Bildung

Pressemitteilung von: *idw - Informationsdienst Wissenschaft*



Für viele Simulationsanwendungen hat sich die 1998 mit dem Nobelpreis ausgezeichnete Dichtefunktionaltheorie (DFT) als entscheidend herauskristallisiert. „Die Achillesferse der DFT ist das sogenannte Austausch-Korrelations-Funktional“, erläutert CASUS-Direktor Prof. Thomas D. Kühne. Mit Funktionalen sucht man in der Wissenschaft die für ein Problem am besten geeignete Funktion. Zwar wurden die in den vergangenen Jahren entwickelten Austausch-Korrelations-Funktionalen für die DFT immer besser, doch die genauesten Funktionalen benötigen so viel Rechenzeit, dass sie nur für Systeme mit wenigen Teilchen genutzt werden können. Skala ist ein neues, von Microsoft Research AI for Science entwickeltes Austausch-Korrelations-Funktional. Statt eine weitere Ebene mathematischer Formeln einzuführen, setzte Microsoft bei Skala auf einen neuen Ansatz: Hier hat ein neuronales Netzwerk gelernt, wie sich die Elektronendichten in verschiedenen Bereichen gegenseitig beeinflussen. Damit ist Skala eines der ersten verfügbaren KI-basierten Austausch-Korrelations-Funktionalen.

„Die von Microsoft Research im Jahr 2025 vorgestellten Ergebnisse waren beeindruckend, insbesondere die Kombination aus Genauigkeit und Recheneffizienz bei bestimmten DFT-Berechnungen“, berichtet Kühne. „Für uns war klar, dass wir die Gelegenheit nutzen, diesen neuen Ansatz im Rahmen von CP2K zu evaluieren und seine Anwendbarkeit auf für unsere Community relevante Probleme zu erkunden. Natürlich freuen wir uns sehr, die erste Gruppe außerhalb von Microsoft zu sein, die den Nutzen von Skala bestätigt hat.“ Mitte August veröffentlichten die Wissenschaftler die ersten Ergebnisse ihrer Zusammenarbeit in einem Preprint. Die Ergebnisse zeigen, dass der eingeschlagene Weg vielversprechend ist. „Mit Skala erreichen wir für unseren konkreten Testfall einen merklichen Sprung in der Genauigkeit der Simulationen,“ berichtet Erstautor Franz Pöschel aus dem CASUS-Team „Scientific Computing Core“.

Hohes Interesse nach Ankündigung

Microsoft Research AI for Science hatte die Integration von Skala in CP2K im Frühjahr 2026 auf einer Konferenz angekündigt. Seitdem gab es seitens der Community immer wieder Nachfragen zum Arbeitsstand. „Auf der einen Seite hat uns das Interesse gefreut, auf der anderen Seite standen wir unter einem gewissen Zugzwang, zu liefern“, fährt Pöschel fort. „Ich bin daher froh, mitteilen zu können, dass Skala jetzt innerhalb von CP2K für Simulationen von molekularen Systemen verfügbar ist.“

Dr. Sebastian Ehlert, Senior Researcher bei Microsoft Research AI for Science, erläutert, warum CP2K eine so große Bedeutung für das Skala-Team hat: „Um die Skala-Verbreitung zu fördern, sollte Skala dort verfügbar sein, wo die

Community aktiv ist. CP2K ist seit vielen Jahren ein Dreh- und Angelpunkt der Forschung im Bereich der computergestützten Chemie und steht daher natürlich ganz oben auf der Prioritätenliste für die Integration.“

Das CP2K-Ökosystem ist ein leistungsstarkes Werkzeug für die Durchführung von DFT-Berechnungen, insbesondere im Zusammenhang mit Dynamiksimulationen großer Systeme über lange Zeiträume. Auf der Open-Source-Softwareplattform können Moleküle, Flüssigkeiten, Festkörper und biologische Systeme auf Basis quantenmechanischer Methoden wie der Dichtefunktionaltheorie sowie klassischer Molekulardynamik simuliert werden. Dank seiner effizienten Algorithmen und der Möglichkeit, einzelne Rechenschritte auf spezialisierten Computerarchitekturen parallel ausführen zu können, kann CP2K auch sehr große Systeme mit Tausenden bis Zehntausenden Atomen berechnen. Dadurch eignet sich die Software insbesondere für die Erforschung von Batteriematerialien, Katalysatoren, Halbleitern, Proteinen und anderen komplexen Materialien. Jüngst wurde CP2K um Funktionen erweitert, die den Einsatz KI-gestützter Modelle ermöglichen. Diese können mit durch CP2K erzeugten Trainingsdaten molekulare Energien und Kräfte mit hoher Genauigkeit vorhersagen. Das erweitert die Zeit- und Längenskalen der Simulationen.

Weitere Neuerungen in Vorbereitung

Vor der Veröffentlichung testeten die verantwortlichen Teams von Microsoft Research AI for Science und CASUS die Skala-Integration in CP2K ausgiebig. „Wir möchten sicherstellen, dass Skala über verschiedene Programme und Einstellungen hinweg eine gleichbleibende Genauigkeit und Geschwindigkeit bietet“, sagt Ehlert. „Gemeinsam mit dem CP2K-Team haben wir eine Reihe von Integrationstests entwickelt, um zu gewährleisten, dass Skala numerisch korrekte Ergebnisse liefert. Wir sind besonders dankbar für die Unterstützung des CASUS-Teams, das über fundierte Erfahrung in der numerischen Verifizierung von Berechnungsmethoden verfügt.“

Skala ist keine feststehende Lösung: Das KI-Modell wird ständig verbessert und um neue Fähigkeiten erweitert. Bald sollen auch Simulationen von periodischen Festkörpern wie Metallen und Halbleitern sowie von Flüssigkeiten möglich sein. CP2K kann als Plattform für eine schnelle und breite Einführung dienen: Durch die erfolgte Integration hat man immer die neueste Skala-Version zur Hand. „Microsoft Research AI for Science stellt hohe Anforderungen an seine Forschungspartner“, erklärt Kühne. „Wir sind bei der weiterhin laufenden Zusammenarbeit zuversichtlich, dass auf diesen ersten Erfolg weitere folgen werden.“

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Thomas D. Kühne | Direktor

Center for Advanced Systems Understanding (CASUS) am HZDR

E-Mail: t.kuehne@hzdr.de

Originalpublikation:

F. Pöschel, J. Pototschnig, F. Stein, A. Knüpfer, T. Vogels, S. Battaglia, S. Ehlert, J. Hutter, T. D. Kühne: Molecular Implementation of the Machine-Learned Skala Exchange-Correlation Functional in CP2K through GauXC, 2026, arXiv (DOI: 10.48550/arXiv.2608.19033)

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf

SimonSchmitt (Mitarbeiter in der Presse- und Öffentlichkeitsarbeit)

0351 260 3400

s.schmitt@hzdr.de

News-ID: 1321269 • Views: 144 (Stand: 24.08.2026)

Link zur Pressemitteilung:

<https://www.openpr.de/news/1321269/CASUS-und-Microsoft-Research-forschen-gemeinsam-idw.html>