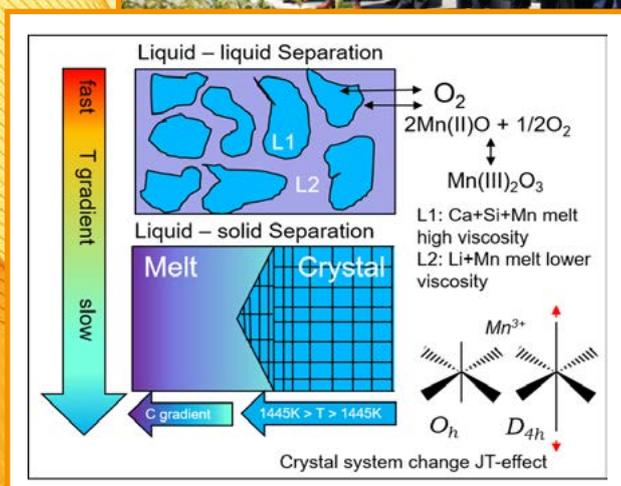
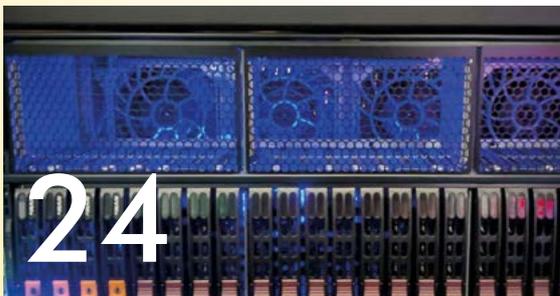
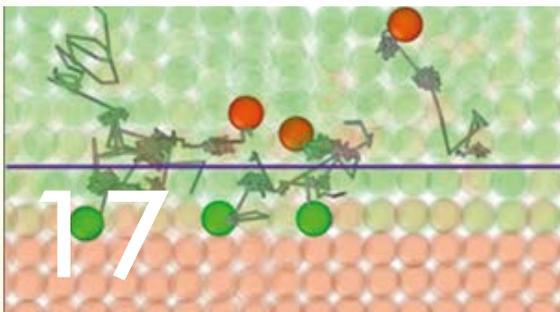


# Bericht 2023–2024



# Bericht 2023–2024

Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen



# Inhalt

- Vorwort..... 3
- Das Zentrum in Zahlen ..... 6
- Forschungsgebiete..... 8
- Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter (KEIKO)..... 11
- Nachhaltige Mensch-KI-Zusammenarbeit (NaMeKI)..... 14
- Sonderforschungsbereich 1368 wird weitere 4 Jahre gefördert ..... 17
- Schwerpunktprogramm 2315: „Entstehung kritischer Verbindungen in Recycling-Schlacken“ ..... 20
- Einsatz von maschinellem Lernen in mehrskaligen Finite Elemente Simulationen..... 22
- Ausbau des SWZ-Rechenclusters ..... 24
- SWZ Workshop 2024: Simulation meets AI ..... 26
- Digitaler Zwilling der Qualitätssicherungs-labore der BASF ..... 28
- Digitaler Zwilling des Walzwerks der Dillinger Hüttenwerke ..... 30
- SWZ-Webapp Bildungsmaterial des Monats auf twillo ..... 32
- SimScience 2025 ..... 34
- Personalia ..... 36
- Weitere Nachrichten ..... 37
- Vorstand/Wissenschaftlicher Beirat ..... 41
- Mitglieder ..... 43
- Veröffentlichungen ..... 47

# Liebe Leserinnen und Leser,

.....  
3  
.....

mit dem vorliegenden Jahresbericht möchten wir Sie über die zahlreichen spannenden Aktivitäten des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen (SWZ) und seiner Mitglieder in den Jahren 2023 und 2024 informieren. Bei der vorliegenden Zusammenstellung von Themen und Projekten handelt es sich bereits um den sechsten Zweijahresbericht seit der Gründung des SWZ am 1. Januar 2013 durch die beiden Partneruniversitäten Clausthal und Göttingen, d.h. Anfang Januar 2025 feiert das SWZ bereits seinen 12. Geburtstag.

Aktuell ist das SWZ sowohl an einem **DFG-Sonderforschungsbereich** als auch an einem **DFG-Schwerpunktprogramm** beteiligt. Beide wurden 2023 bzw. 2024 erfolgreich zwischenevaluiert und gehen nun in die zweite Förderphase. Bei dem Sonderforschungsbereich 1368 geht es darum zu erforschen, wie Produktionstechniken und Fertigungsverfahren zukünftig durch den Ausschluss von Sauerstoff in den Prozess- und Wirkzonen optimiert werden können (siehe dazu Seite 17). Das Schwerpunktprogramm 2315 greift die hochaktuelle Frage auf, wie kritische bzw. wertvolle Elemente beim Recycling von Batterien und ähnlichen Produkten erfolgreich zurückgewonnen werden können (siehe dazu Seite 20).

Ein wichtiger Baustein des SWZ ist die aktive Vernetzung der Arbeitsgruppen der beiden Partneruniversitäten Clausthal und Göttingen durch gemeinsame Projekte. Ziel ist es, die jeweils komplementären Expertisen in gemeinsamen Projekten gewinnbringend einzusetzen. Ein großes Projekt, an dem mehrere Arbeitsgruppen sowohl aus Clausthal als auch aus Göttingen beteiligt sind, ist das Anfang 2023 gestartete KEIKO-Projekt. KEIKO steht für „**Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter**“. Ziel des Projektes ist es, Roboter zu entwickeln, die sowohl im Industrie- als auch im Serviceumfeld nahtlos mit Menschen zusammenarbeiten können und deren Intentionen deuten können. In dem Projekt (siehe auch Seite 11) treffen so verschiedene Kompetenzen wie Messtechnik (Clausthal) auf der einen Seite und Psychologie (Göttingen) aufeinander. Als

Klammer fungieren sowohl in Clausthal als auch in Göttingen angesiedelte Arbeitsgruppen aus Informatik und Physik.



*In dem von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in Clausthal und Göttingen gemeinsam bearbeiteten Projekt „Nachhaltige Mensch-KI-Kooperation“ geht es darum, die Möglichkeiten des Einsatzes von Robotik nah am Menschen zu erproben, Foto: Ernst.*

Die vom SWZ bereits seit Jahren gelebte hochschulübergreifende Zusammenarbeit wurde im Frühjahr 2024 vom Land Niedersachsen in Form der „Wissenschaftsräume“ Förderausschreibung aufgegriffen. Das SWZ hat sich mit dem Projektantrag „**Nachhaltige Mensch-KI-Kooperation**“ auf diese Ausschreibung beworben und einen Zuschlag erhalten. In dem im November 2024 gestarteten Projekt (siehe auch Seite 14) geht es darum, Robotik insbesondere in der Pflege einzusetzen und dabei die neuen Möglichkeiten, die KI-Systeme zur Kommunikation und Interaktion mit Menschen mit sich bringen, zu nutzen. Neben der Universität Göttingen und der TU Clausthal sind mit der Universitätsmedizin Göttingen und der Hochschule für angewandte Wissenschaft und Kunst Göttingen (HAWK) auch zwei Institutionen, die stärker die Anwendungen im Blick haben, Teil des Projektteams.



Mit Hilfe eines experimentierfähigen Digitalen Zwillinges untersuchen die BASF und das SWZ gemeinsam verschiedene Steuerungsstrategie in den Qualitätssicherungslaboren der BASF am Standort Ludwigshafen, Foto: BASF.

Im Bereich des **Wissenstransfers** ist das SWZ aktuell sowohl in ein Projekt mit der Dillinger Hütte (siehe Seite 30) als auch in ein Projekt mit der BASF (siehe Seite 28) eingebunden. In beiden Projekten geht es darum, jeweils ganz verschiedene Aspekte eines realen Systems in Form eines experimentierfähigen Digitalen Zwillinges abzubilden. Ziel ist es in beiden Fällen, verschiedene Investitions- und Steuerungsalternativen im Vorfeld kostenneutral analysieren und bewerten zu können. Bereits einen Schritt weiter ist das von SWZ-Wissenschaftlern gemeinsam mit Industriepartnern entwickelte **ADSYNX-Verfahren**, welches mittlerweile zum Patent angemeldet und auf der Hannover Messe 2024 vorgestellt wurde (siehe Seite 38). Der nächste geplante Schritt ist die Entwicklung eines einsatzfähigen Microchips, in dem das Verfahren implementiert wird.

Um seinen Forscherinnen und Forschern die notwendige Rechenleistung, die für viele Untersuchungen benötigt wird, zur Verfügung zu stellen, betreibt das SWZ bereits seit 2019 einen eigenen **Rechencluster**. Dieser wurde 2024 nicht nur um einen weiteren Knoten ausgebaut, sondern vor allem um für viele KI- und auch HPC-Aufgaben wichtige Rechenbeschleuniger erweitert (siehe Seite 24). Rechenressourcen werden im SWZ jedoch nicht nur zur Beantwortung von rechenintensiven Forschungsfragen eingesetzt, sondern auch in Form von kleinen Webapps zur Verdeutlichung von physikalischen Zusammenhängen in der Lehre. Werden derartige digitale Lehrmaterialien frei zur Verfügung gestellt, so spricht man

von **Open Education Resources (OER)**. Für das Land Niedersachsen sammelt das „twillo“-Portal solche OERs. Im November 2023 wurden zwei von SWZ-Wissenschaftlerinnen und -Wissenschaftlern entwickelte OERs als „Projekt des Monats“ ausgezeichnet (siehe Seite 32). Auch wenn es in diesem Bericht um die Jahre



Frau Prof. Merkert ist eine der Nutzerinnen des neuen Knoten im SWZ-Rechencluster, Foto: Herzog.

2023 und 2024 geht, so sei doch ein kleiner Ausblick auf das Frühjahr 2025 gestattet: Vom 7. bis zum 9. Mai 2025 richtet das SWZ die dritte Auflage des „**International Workshop on Simulation Science (SimScience)**“ aus. Auf dieser Konferenz, die in der Aula Academica in Clausthal stattfinden wird, werden wieder zahlreiche Forschende ihre aktuellen Ergebnisse im Bereich der Simulationswissenschaften vorstellen. Bei den letzten beiden Auflagen konnte die SimScience jeweils rund 100 Vortragende anziehen. Für 2025 wird mit einer ähnlichen Teilnahme gerechnet. Neben der bereits im letzten Durchlauf etablierten Podiumsdiskussion zu einem jeweils aktuellen Thema wird die Konferenz dieses Mal zusätzlich durch den Wettbewerb „Science meets Arts“ ergänzt (siehe Seite 34).

Wie immer reicht der Platz in diesem Bericht nicht aus, um über alle Aktivitäten und Projekte des SWZ ausführlich zu berichten. Daher möchten wir an dieser Stelle auf die Homepage des SWZ ([www.simzentrum.de](http://www.simzentrum.de)) hinweisen, auf der sich zum einen ausführlichere Beschreibungen der hier beschriebenen Projekte, inklusive Literaturangaben usw., und zum anderen auch Informationen

zu Aktivitäten, die in diesem Bericht keinen Platz gefunden haben, finden. Wir hoffen, dass Ihnen die folgenden Artikel einen kleinen Einblick in die vielfältigen Arbeiten und Projekte am SWZ vermitteln und wünschen Ihnen viel Spaß bei der Lektüre.

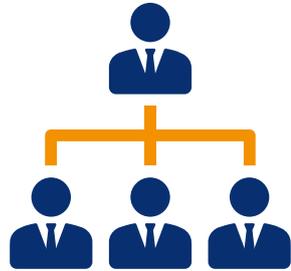
**Prof. Dr. Florentin Wörgötter**

Sprecher des Vorstands des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen

**Prof. Dr. Nina Merkert**

Stellvertretende Sprecherin des Vorstands des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen

# Das Zentrum in Zahlen



## Organisationsform

- Gemeinsame wissenschaftliche Einrichtung der Technischen Universität Clausthal und der Georg-August-Universität Göttingen gemäß § 36 a NHG
- Gegründet im Januar 2013



## Personen

- 44 Mitglieder aus Clausthal und Göttingen
- aus 14 verschiedenen Instituten der beiden Partneruniversitäten
- geleitet von einem paritätisch besetzten Vorstand aus 6 Personen
- beraten von einem externen wissenschaftlichen Beirat aus 6 Personen



## Forschung

- Ausrichtung des International Workshop on Simulation Science
- 355 Publikationen der SWZ-Mitglieder in 2023 und 2024
- 12 laufende geförderte Projekte
- 5 Promotionen in 2023 und 2024 im Umfeld dieser Projekte



## Lehre

- Durchschnittlich 26 Lehrveranstaltungen mit Simulationsbezug pro Semester in Clausthal und Göttingen zusammen
- 38 Vorträge im Rahmen der SWZ-Ringvorlesung „Simulationswissenschaften“



## Vernetzung

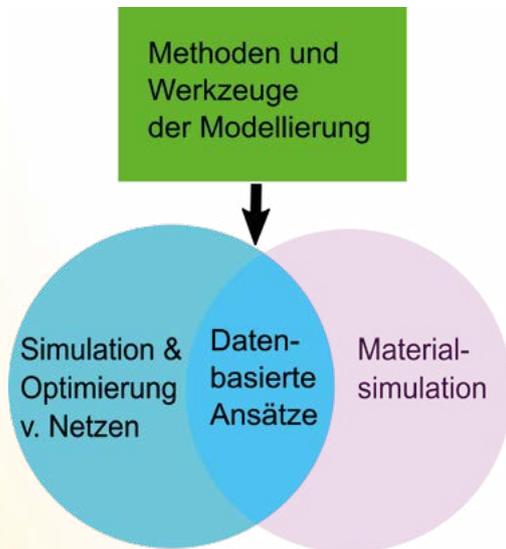
- 5 neue standortübergreifende Projekte in 2023 und 2024 gestartet oder verlängert



## Rechnen

- 224 CPU-Kerne (verteilt auf 5 Maschinen)
- 24.064 CUDA-Kerne (verteilt auf 3 Rechenbeschleuniger)

# Forschungsgebiete



Das Simulationswissenschaftliche Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) befasst sich sowohl mit der Weiterentwicklung von Simulationsmethoden als auch mit deren Anwendung in verschiedenen Bereichen in Mathematik, Informatik, Physik und den Ingenieurwissenschaften. Simulationsmodelle zur Beantwortung von konkreten Fragen werden in allen Bereichen der Industrie, der Wissenschaft sowie für viele gesellschaftliche Fragestellungen eingesetzt. Das SWZ erforscht und entwickelt dafür geeignete Methoden und Werkzeuge und bietet diese aktiv den jeweiligen Nutzern an. Dabei stehen einerseits empirische und modellbasierte Ansätze und andererseits datenbasierte Ansätze wie Methoden der Künstlichen Intelligenz und des High-Performance-Computings im Fokus. Empirische und modellbasierte Ansätze beschreiben die Entwicklung eines Systems auf Basis von Gesetzmäßigkeiten, z.B. der Physik. Materialsimulationen zeichnen sich so durch eine Vielzahl verschiedener Simulationsmethoden aus, welche auf die jeweilige Problemklasse und die entsprechenden Längen- und Zeitskalen zugeschnitten sind. Prognostische Verfahren basieren auf der Analyse großer Datenmengen. Die aktuellen Projekte am SWZ gliedern sich in die im Folgenden dargestellten Bereiche. Die Auflistung der Forschungsgebiete stellt

dabei eine Momentaufnahme dar und kann und wird durch zukünftige Projekte ergänzt:

## Simulation und Optimierung von Netzen

Die Simulation ist heute eine der wichtigsten und in vielen Fällen einzig praktikablen Techniken zur Analyse und Optimierung von großen Netzen. Telekommunikationsnetze, Verkehrs-/Logistiknetze und Energienetze haben vieles gemeinsam. Die Komplexität der Netze mit ihren vielen parallel existierenden Knoten und den Strömen zwischen den Knoten ist schwer überschaubar und oft mit anderen Techniken als Simulation nicht beherrschbar. Das tatsächliche Verhalten eines solchen Netzes unterscheidet sich oft von dem vermuteten Verhalten. Der Aufbau, Betrieb, Modifikation und Optimierung solcher Netze stellt in der Regel eine Infrastrukturaufgabe dar, die mit erheblichen Kosten verbunden ist. Um hier Fehlentwicklungen zu vermeiden, wird vor einer physischen Installation die Simulation als wichtigstes Hilfsmittel eingesetzt, um die Eigenschaften eines Netzes, das Verhalten, die kritischen Leistungskenngrößen und Parameter in einem frühen Stadium zu ermitteln. Die 2005 in Kraft getretene EU-Verordnung z.B. zu Ausgleichszahlungen an Fluggäste bei Annullierungen oder großen Verspätungen (EG 261/2004) unterstreicht die Notwendigkeit geeigneter Verfahren und Systeme für den praktischen Einsatz.

Im Kontext der Industrie 4.0 haben sich mittlerweile sogenannte Digitale Zwillinge, mit denen verschiedene Aspekte der realen Produktion sowohl im Vorfeld von Bau und Inbetriebnahme als auch im laufenden Betrieb analysiert und optimiert werden können, etabliert. Im Rahmen der Forschung am SWZ werde die entsprechenden Methoden zur Modellierung und Simulation weiträumig vernetzter Produktions- und Logistikprozesse weiterentwickelt und zusammen mit Industriepartnern praktisch erprobt.

## Simulation von Materialien und Fluiden

Die Fortschritte der Materialwissenschaften haben seit jeher den Entwicklungsstand einer Gesellschaft definiert. Materialwissenschaften sind gerade in der deutschen Industrielandschaft eines der zentralen Themen, welche die Grundlage für viele Innovationen in anderen Industriezweigen liefern.

In den Materialwissenschaften hat sich bereits eine stark interdisziplinäre Arbeitsweise herausgebildet, welche in den stark überlappenden Bereichen „Computational Materials Science“, „Computational Physics“ and „Computational Chemistry“ ausgeprägt ist. Simulationen haben sich in den Materialwissenschaften und den benachbarten naturwissenschaftlichen Disziplinen zu einem lebendigen und forschungsstarken Wissenschaftszweig herausgebildet, der vermehrt auch von der Industrie wahrgenommen und aktiv gefördert wird.

Probleme der Materialwissenschaften sind sehr vielfältig und spielen sich typischerweise auf unterschiedlichsten Längen- und Zeitskalen ab. Deshalb zeichnet sich das Feld der Materialsimulationen durch eine Vielzahl verschiedener Simulationsmethoden aus, welche auf die jeweilige Problemklasse zugeschnitten sind:

Auf der kleinsten Längenskala werden in so genannten ab-initio Simulationen atomare Prozesse parameterfrei auf der Grundlage von Naturgesetzen simuliert. Diese quantenmechanischen Methoden erfordern meistens Hochleistungsrechner, erlauben aber vielfältige und quantitative Aussagen zu treffen. Ein solches Programmpaket wird in Clausthal entwickelt und vertrieben.

Auf der makroskopischen Längenskala wird das Material als ein Kontinuum betrachtet, dessen Verhalten von Materialparametern bestimmt wird, die entweder aus dem Experiment bekannt oder durch grundlegendere Simulationen bestimmt wurden. Weil die Simulationstechniken hier weitgehend einheitlich sind, kommen besonders kommerzielle Programmpakete zum Einsatz. Das Hauptinteresse richtet sich hier auf die Modellierung des Problems und die Bestimmung der dabei verwendeten Parameter und Zustandsgleichungen,

sowie die Verifikation und die Visualisierung der Resultate.

Zwischen diesen Polen befinden sich eine Vielzahl weiterer Methoden die hier nur einige als Stichworte genannt werden sollen: Monte-Carlo Methoden, Molekularmechanik, Molekulardynamik, Phasenfeldtheorien, Mikrostruktursimulation von Versetzungsnetzwerken und Korngrenzen.

Eine der „Grand Challenges in Computational Materials Science“ ist daher die Multiskalensimulation, die im Idealfall von der ab-initio Simulation bis zur Simulation von Umformprozessen und Herstellungsverfahren reicht. Diese Herausforderung wird einerseits dadurch angegangen, dass Simulationsparameter gezielt von den mikroskopischen Simulationen zu den makroskopischen Simulationen durchgereicht werden. Andererseits werden unterschiedliche Simulationsmethoden in eine einheitliche Simulationsumgebung integriert, um Effekte zu beschreiben, bei denen unterschiedliche Längen- und Zeitskalen nicht mehr entkoppelt werden können. Diese Aktivitäten erfordern die Zusammenarbeit unterschiedlicher Wissenschaftsdisziplinen und profitieren von Zusammenhängen, wie sie im Simulationswissenschaftlichen Zentrum geplant sind.

Im Gegensatz zu etlichen anderen Anwendungen von Simulationsverfahren sind Simulationen im Bereich der Materialwissenschaften sehr häufig dadurch gekennzeichnet, dass sie alle verfügbaren, informationsverarbeitenden Ressourcen bis an die Grenzen ausschöpfen müssen, um verwertbare Ergebnisse zu erzielen. Fragen der algorithmischen Komplexität und der Effizienz von Implementierungen sind daher für Fortschritte der Simulationsmethoden in diesem Teilgebiet von entscheidender Bedeutung.

Da Optimierung und Charakterisierung von Materialien mit großen Datenmengen in verschiedenen Formaten verbunden sind, werden zunehmend Methoden der Künstlichen Intelligenz zur Analyse verwendet. Diese Methoden können zur Erzeugung synthetischer Daten eingesetzt werden, wenn Analytik und konventionelle Modellierung an ihre Grenzen stoßen. In den letzten Jahren haben sich daher Machine-Learning-Methoden zur Vorhersage von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen und

zur Materialentwicklung etabliert. Dabei hängt jedoch die Vorhersagekraft von der Verfügbarkeit großer Datensätze ab, weshalb sich einige Aspekte immer noch besser per Simulation beschreiben lassen. Das SWZ bringt diese Kompetenzen in verschiedene Anwendungsfelder der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik ein.

### **Simulation soziotechnischer Systeme**

Die Echtzeitsteuerung von Mensch-Maschine-Teams in der Fertigung und im Dienstleistungssektor befasst sich hauptsächlich mit der Koordination von Plänen und Aktionen der Teammitglieder während der gemeinsamen Bearbeitung und Verarbeitung einzelner Vorgänge. Im Fokus steht hierbei eine integrierte Betrachtung der Effizienz des soziotechnischen Gesamtsystems und der Zufriedenheit und Sicherheit des Menschen.

Für eine eng-gekoppelte Zusammenarbeit zwischen Menschen und Maschinen ist es erforderlich, dass sowohl menschliche als auch maschinelle Mitglieder eines Teams ein gemeinsames Verständnis von ausgeführten Aktionen haben.

Ein weiterer wichtiger Faktor ist das Vertrauen zum Kollaborationspartner – sowohl vom Menschen in die Maschine als auch umgekehrt. Nur mit Vertrauen kann eine Verlässlichkeit von Verhalten erreicht werden, wodurch das volle Potential einer Kollaboration erst erreicht werden kann. Menschen können einer Maschine nur vertrauen, wenn die Maschine bekanntermaßen gut getestet ist, so wie die Zusammenarbeit zwischen Menschen schwierig ist, wenn einer der Beteiligten einen schlechten Ruf hat. Die Modellierung von Vertrauen aus der Perspektive der Maschine ist das messbare Gesamtergebnis der Auswertung von Variablen, die den menschlichen Zustand und das menschliche Verhalten beschreiben.

Der Entwurf von Interaktionsmodellen für die Mensch-Maschine-Zusammenarbeit erfordert einen interdisziplinären Ansatz: Es müssen sowohl Vertrauens- und Intentionsmodelle integriert werden als auch die Interaktion anpassungsfähig und mit einem hohen Grad an Automatisierung im Engineering-Prozess gestaltet werden.

Ein kollaborativer Roboter in einem Team sollte in

der Lage sein, das Vertrauen seines menschlichen Partners in ihn zu erkennen und sicherzustellen, dass dieser menschliche Partner seinen Fähigkeiten nicht zu sehr vertraut und ihn für Aufgaben einsetzt, für die er nicht konzipiert wurde. Sie sollte den Partner auch davon abhalten, sich selbst oder die Gesamtaufgabe zu gefährden. Dies spiegelt die Notwendigkeit einer dynamischen Vertrauenskalibrierung während der menschlichen Zusammenarbeit mit einer autonomen Maschine wider.

Die Erfassung physiologischer Parameter hat sich als gut geeignet erwiesen, um Informationen über die kognitiven Bedingungen des Menschen abzuleiten, und ist äußerst relevant für die Zuweisung eines Vertrauensniveaus. Die Erfassung solcher Phänomene wird jedoch nicht nur durch den Grad an Akzeptanz und potentieller Beeinträchtigung menschlicher Handlungen begrenzt, sondern auch durch die monetären Kosten für die Instrumentierung der Arbeitsplätze mit der Sensor-Infrastruktur, um die erforderlichen Daten zu erfassen.

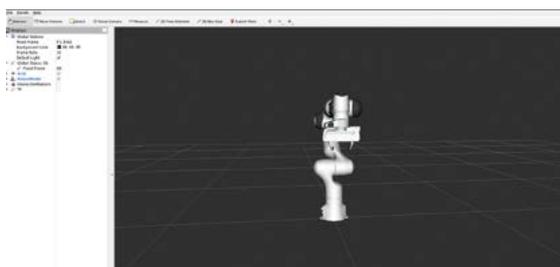
Um fundierte Entscheidungen treffen zu können, muss die Maschine nicht nur den aktuellen Zustand des menschlichen Teamkollegen modellieren, sondern auch kurzfristig zuverlässige Vorhersagen über die Handlungen, Pläne und sogar Absichten des Teamkollegen treffen. In diesem Zusammenhang sind die Modellierung und das Antizipieren von Bewegungen des menschlichen Körpers und Laufwegen von entscheidender Bedeutung. Neben den Bewegungen der Hand und des Kopfes sind auch Armbewegungen im Zusammenhang mit der sicheren Mensch-Maschine-Zusammenarbeit z.B. bei Montage- oder Demontageprozessen von Bedeutung, ebenso wie die Laufwege der Menschen.

# Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter (KEIKO)

2023 gestartetes standortübergreifendes Forschungsprojekt stellt erste Ergebnisse vor.



Nutzung des Cobot-Experimentators im KEIKO-Labor im SWZ, Fotos: Herzog.



Erkennung von Menschen im Umfeld des Cobot-Roboters und virtuelle Repräsentation des Roboters, Fotos: Richter.

Das Förderprojekt KEIKO – Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter – läuft seit Januar 2023 am Simulationswissenschaftlichen Zentrum Göttingen-Clausthal und wird mit 1,7 Mio. Euro vom Niedersächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kultur unterstützt. Ziel des Projekts ist die Entwicklung von Roboterlösungen, die sich an den Menschen anpassen, statt umgekehrt. Menschzentrierte Interaktion steht dabei im Fokus.

Durch interdisziplinäre Forschung in sechs Teilprojekten, darunter die Verknüpfung von Emotion, Kognition und Verhalten sowie die Prädiktion menschlicher Bewegungen, soll ein kollaborativer Roboterarm – ein sogenannter Cobot – befähigt werden, in enger Abstimmung

mit Menschen zu arbeiten. Neben technischen Ansätzen wie der kontaktlosen Messung physiologischer und emotionaler Parameter spielt auch die Entwicklung vertrauensbildender Mensch-Maschine-Interaktionen eine zentrale Rolle.

Auf dem KEIKO-Treffen im September 2024 in Clausthal konnten erste Erfolge präsentiert werden: Das System erkennt Körpersprache durch Kamerasysteme und der Cobot führt entsprechende Handlungen aus. Als erste Anwendungsfelder sind Tätigkeiten im Bereich Recycling und in der Pflege angedacht. Besonders im Recycling, z.B. bei der Demontage von Traktionsbatterien, bietet die Zusammenarbeit mit Cobot großes Potenzial. Ein weiteres, the-

matisch verwandtes Forschungsprojekt startete im November 2024 (siehe Seite NaMeKI). Ein aktueller Meilenstein des KEIKO-Projekts ist die Entwicklung eines direkten Tool-Handovers, bei dem der Roboter ein Werkzeug ohne explizite Anforderung des Nutzers übergibt. Um diesen Fortschritt zu demonstrieren, wird in Clausthal ein neuer Demonstrator aufgebaut, der auf dem Göttinger Modell basiert. Diese Entwicklung stellt einen weiteren Schritt hin zu einer intuitiven und nahtlosen Zusammenarbeit zwischen Mensch und Roboter dar.

Das Projekt wird durch Forschende der Universitäten Göttingen, Clausthal und Duisburg-Essen getragen. Ein interdisziplinäres Team aus Experten wie Prof. Dr. Annetrin Schacht, Prof. Dr. Florentin Wörgötter (Göttingen), Prof. Dr. Jörg Müller, Prof. Dr. Andreas Reinhardt, Prof. Dr. Christian Rembe (Clausthal) sowie Prof. Dr. Michael Prilla (Duisburg-Essen) bringt ihre Expertise ein. Mit einem klaren Fokus auf realitätsnahe Anwendungen soll KEIKO die Grundlagen für empathische und kognitive Robotiklösungen der Zukunft legen.

### Medienberichterstattung über KEIKO

Dass das KEIKO-Projekt eine hoch aktuelle Thematik aufgreift, zeigen die zahlreichen Medienberichte über das Projekt. Unter anderem wurde seit Projektstart in folgenden Magazinen über das Projekt berichtet:

- März 2023, taz: „Wenn der Roboter den Menschen missversteht“
- April 2023, medizintechnik: „Wenn der Pflegeroboter Gefühle erkennt“
- Juli 2024, iQ-Journal: „Von Star Trek zur Wirklichkeit – Wie die TU Clausthal Roboter empathisch machen will“
- September 2024: „Kollaborierende Roboter entwickeln Empathie“

### Promotion von KEIKO-Mitarbeiter Andreas Richter



Andreas Richter, Koordinator des KEIKO-Projektes, nach erfolgreicher Promotion zum Dr.-Ing. Fotos: IEI, TU Clausthal.

Mit einer messtechnischen Lösung zur Regelung von additiven Lichtbogen-schweißprozessen (Wire Arc Additive Manufacturing, WAAM) hat Andreas Richter, Projektkoordinator des KEIKO-Forschungsprojektes, mit der Note sehr gut am 8. November 2024 seine Dissertation erfolgreich verteidigt. Seine in der Arbeitsgruppe Messtechnik von Prof. Rembe durchgeführte Promotion behandelt neben Prozessmesstechnik auch Fertigungsmesstechnik. Bei der Prozessmesstechnik erfolgte eine enge Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen von Prof. Bohn und Prof. Wesling. Die Methoden von Herrn Richter haben es inzwischen ermöglicht,

dass mit WAAM gedruckte Stahlstrukturen mit einer deutlich geringeren Formabweichung als bisher hergestellt werden können. Das reduziert nicht nur den Aufwand für die Nachbearbeitung, sondern verringert auch Spannungen im Material. Verspannungen können aus Gestaltmessungen während und nach dem Abkühlen der Struktur bestimmt werden. Hierfür hat Herr Richter mit der Arbeitsgruppe von Prof. St. Hartmann zusammengearbeitet. Für die Gestaltmessung mit Kohärenz-Raster-Interferometrie hat sich Herr Richter an die Normenreihe Geometric Product Specifications and Verification gehalten.



Additive Fertigung mittels Lichtbogen-schweißen, Foto: IEI, TU Clausthal.

#### Beteiligte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler:

- **Prof. Dr. Christian Rembe**  
(Elektrische Informationstechnik, TU Clausthal)  
rembe@iei.tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Michael Prilla**  
(Informatik, Universität Duisburg-Essen)  
michael.prilla@uni-due.de
- **Dr. Andreas Richter**  
(Elektrische Informationstechnik, TU Clausthal)  
richter@iei.tu-clausthal.de
- **Enrico Guerra, M.Sc.**  
(Informatik, Universität Duisburg-Essen)  
enrico.guerra@uni-due.de
- **Sakif Hossain, M.Sc.**  
(Informatik, TU Clausthal)  
sakif.hossain@tu-clausthal.de
- **Niels Rohweder, M.Sc.**  
(Elektrische Informationstechnik, TU Clausthal)  
rohwerder@iei.tu-clausthal.de
- **Hooman Sarvghadi, M.Sc.**  
(Institut für Informatik, TU Clausthal)  
hooman.sarvghadi@tu-clausthal.de
- **Esther Semmelhack, M.Sc.**  
(Psychologie, Universität Göttingen)  
e.semmelhack@psych.uni-goettingen.de
- **Henrik Trommer, M.Sc.**  
(Physik, Universität Göttingen)  
henrik.trommer@phys.uni-goettingen.de
- **Prof. Dr. Annetrin Schacht**  
(Psychologie, Universität Göttingen)  
schacht@psych.uni-goettingen.de
- **Prof. Dr. Florentin Wörgötter**  
(Physik, Universität Göttingen)  
worgott@gwdg.de
- **Prof. Dr. Jörg Müller**  
(Informatik, TU Clausthal)  
joerg.mueller@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Andreas Reinhardt**  
(Informatik, TU Clausthal)  
andreas.reinhardt@tu-clausthal.de

# Nachhaltige Mensch-KI-Zusammenarbeit (NaMeKI)

Verbundprojekt wird im Rahmen des Programms „Wissenschaftsräume“ mit 3 Mio. Euro gefördert.



Erkennung von Menschen im Umfeld des Cobot-Roboters und virtuelle Repräsentation des Roboters, Fotos: Richter.

Das gemeinsam von der TU Clausthal, der Universität Göttingen, der Universitätsmedizin Göttingen sowie der HAWK Göttingen beantragte Projekt „Nachhaltige Mensch-KI-Zusammenarbeit“ hat sich zum Ziel gesetzt, Roboter für einen Einsatz als Helfer in der Pflege fit zu machen.

Worum geht es in dem gesellschaftsrelevanten Projekt „Nachhaltige Mensch-KI-Zusammenarbeit“ konkret? „Deutschland altert. Bedingt durch die steigende Lebenserwartung wächst der Bedarf an ambulanter Pflege und Rehabilitation stetig. Gleichzeitig herrscht ein Mangel an Fachkräften, die entsprechende Pflege-, Therapie- und Gesundheitsdienstleistungen erbringen können. Im Projekt wollen wir die Grundlagen schaffen, damit diese Lücke geschlossen werden kann“, erläutert Prof. Andreas Reinhardt, der das Forschungsvorhaben koordiniert. Diese Versorgungslücke wird nach Prognosen des Instituts der deutschen Wirtschaft sogar weiter anwachsen; für 2035 wird ein Defizit von beinahe 500.000 Pflegekräften vorausgesagt.

An dieser Stelle bietet die Digitalisierung eine Chance, den Fachkräftemangel abzumildern:

durch den Einsatz von Assistenztechnologien bzw. Mensch-KI-Zusammenarbeit. Um diese Potenziale vollständig auszuschöpfen, gilt es laut Reinhardt aber noch eine Vielzahl elementarer Forschungsfragen zu beantworten. Zum Beispiel: Wie muss ein KI-System aufgebaut sein, um nachhaltig, ressourcenschonend, effizient und sicher mit Menschen zusammenarbeiten zu können? Welche Sensoren und KI-Verfahren sind erforderlich, um menschliche Befindlichkeiten, Absichten und Aktionen zu erkennen und vorherzusagen? Wie können wir ethische Grundsätze einhalten und die Privatheit der Beteiligten besser schützen? Und welche Auswirkungen hat dieser Schutz auf Vertrauen und Akzeptanz der Beteiligten im Interaktionsdreieck Patient – Pflegekraft – Roboter?

Diesen und weiteren Fragestellungen werden die insgesamt 14 an dem Projekt beteiligten Professorinnen und Professoren mit ihren Teams in den nächsten fünf Jahren nachgehen. Gefördert wird das Projekt in dieser Zeit mit 3 Mio. Euro über das niedersächsische „Wissenschaftsräume“-Programm. Das Projekt schließt dabei nahtlos an die Forschungsexpertise, die u.a. mit dem KEIKO-Projekt sowie dem Vorläuferprojekt HerMes auf

dem Gebiet der Zusammenarbeit von Mensch und Maschine im SWZ gewonnen wurde, an.

# zukunft. niedersachsen

NaMeKI wird gefördert mit Mitteln aus zukunft.niedersachsen, einem Förderprogramm des Niedersächsischen Ministeriums für Wissenschaft und Kultur und der VolkswagenStiftung.

## Wissenschaftsräume



**Niedersachsen**



**VolkswagenStiftung**

Mit dem Förderprogramm „Wissenschaftsräume“ unterstützen das Land Niedersachsen und die VolkswagenStiftung die fächerübergreifende Zusammenarbeit zwischen niedersächsischen Hochschulen. Ziel des Programmes ist eine stärkere Vernetzung von Universitäten mit umliegenden außeruniversitären Einrichtungen und damit verbunden der Transfer von aktuellen Forschungsergebnissen in die Praxis sowie die engere Verzahnung mit Partnern aus der Industrie.

Insgesamt wurden 47 Anträge von den niedersächsischen Hochschulen eingereicht, von denen letztendlich 16 zur Förderung vorgesehen wurden. Einer dieser erfolgreichen Anträge ist das Projekt „Nachhaltige Mensch-KI-Zusammenarbeit“ der Universitäten Clausthal und Göttingen, der Universitätsmedizin Göttingen sowie der HAWK Göttingen, welches über 5 Jahre hinweg eine Förderung von insgesamt 3 Mio. Euro erhält.

## NaMeKI-Projekt mit Kickoff-Meeting offiziell gestartet



Besichtigung des SWZ-Roboter-Labors im Rahmen des NaMeKI-Kickoff-Meetings, Foto: Herzog

Am 20. November 2024 fand das offizielle Kickoff-Meeting des NaMeKI-Projektes im Roboter-Labor des SWZ statt. NaMeKI besteht aus insgesamt 8 Teilprojekten, die von jeweils entweder einem oder zwei Promotionsstudierenden bearbeitet werden. Da die einzelnen Arbeitspakete teilweise aufeinander aufbauen, ist ein gestaffelter Start der Teilprojekte geplant. Über einen Transferbeirat, der mit Vertretern aus Unternehmen sowie sozialen Einrichtungen, für die die Ergebnisse des NaMeKI-Projektes relevant sind, besetzt werden soll, soll eine enge Abstimmung mit den möglichen Nutzerinnen und Nutzern der erarbeiteten Techniken gewährleistet werden.

## Beteiligte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler:

- **Prof. Dr. Claire Chalopin**  
(Ingenieurwissenschaften und Gesundheit, HAWK Göttingen)  
claire.chalopin@hawk.de
- **Prof. Dr. Rüdiger Ehlers**  
(Software and Systems Engineering, TU Clausthal)  
ruediger.ehlers@tu-clausthal.de

- **Prof. Dr. Thomas Linkugel**  
(Ingenieurwissenschaften und Gesundheit,  
HAWK Göttingen)  
thomas.linkugel@hawk.de
- **Prof. Dr. Jörg P. Müller**  
(Informatik, TU Clausthal)  
joerg.mueller@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Andreas Rausch**  
(Software and Systems Engineering, TU Clausthal)  
andreas.rausch@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr.-Ing. Andreas Reinhardt**  
(Informatik, TU Clausthal)  
andreas.reinhardt@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr.-Ing. Delphine Reinhardt**  
(Informatik, Universität Göttingen)  
reinhardt@cs.uni-goettingen.de
- **Prof. Dr. Anne Schacht**  
(Psychologie, Universität Göttingen)  
schacht@psych.uni-goettingen.de
- **Prof. Dr. Silke Schicktanz**  
(Ethik und Geschichte der Medizin,  
Universität Göttingen)  
sschick@gwdg.de
- **Prof. Dr. Wolfgang Viöl**  
(Ingenieurwissenschaften und Gesundheit,  
HAWK Göttingen)  
wolfgang.vioel@hawk.de
- **Prof. Dipl.-Des. (FH) Stefan Wölwer**  
(Gestaltung von interaktiven Medien,  
HAWK Göttingen)  
stefan.woelwer@hawk.de
- **Prof. Dr. Uwe Wolfram**  
(Werkstoffkunde und Werkstofftechnik, TU  
Clausthal)  
uwe.wolfram@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Ramin Yahyapour**  
(Informatik, Universität Göttingen)  
ramin.yahyapour@gwdg.de

# Sonderforschungsbereich 1368 „Sauerstofffreie Produktion – Prozesse und Wirkzonen in sauerstofffreier Atmosphäre zur Entwicklung zukunftsfähiger Produktionstechniken und Fertigungsverfahren“ wird weitere 4 Jahre gefördert

DFG-Senat würdigt Potential für weltweit einzigartige und neue Forschungsidee.



Team des SFB 1368, Foto: Maximilian Weiss, SFB 1368.

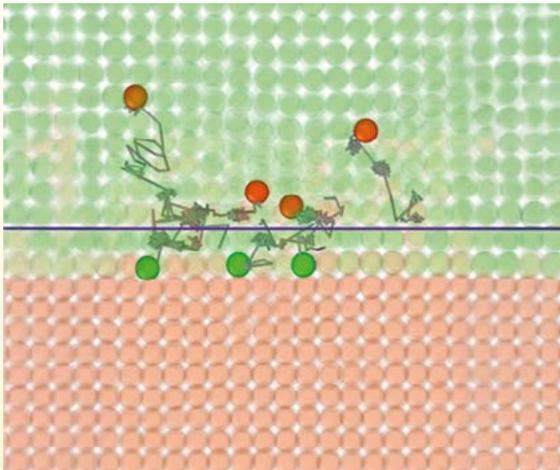
Der Senat der Deutschen Forschungsgemeinschaft hat die Bewilligung einer zweiten Förderperiode für den Sonderforschungsbereich (SFB) 1368 „Sauerstofffreie Produktion – Prozesse und Wirkzonen in sauerstofffreier Atmosphäre zur Entwicklung zukunftsfähiger Produktionstechniken und Fertigungsverfahren“ bekannt gegeben. Damit stehen den Forschenden unter der Leitung des Sprechers Professor Dr.-Ing. Hans Jürgen Maier bis Ende 2028 gut 10,5 Millionen Euro zur Fortführung ihrer exzellenten Forschung zur Verfügung.

„Das ist eine tolle Nachricht“, freut sich Professor Maier. „Wir haben mit der sauerstofffreien Produktion in den letzten vier Jahren ein gänzlich neues Forschungsgebiet erschlossen und gezeigt, dass wir damit bisherigen Produktionsprozesse um neue Möglichkeiten

erweitern, die Leistungsfähigkeit der erzeugten Produkte signifikant steigern und zudem völlig neuartige Prozesse ermöglichen können.“

Produktionsprozesse in der metallverarbeitenden Industrie werden heute fast ausschließlich unter Anwesenheit von Sauerstoff durchgeführt. Die dabei zwangsläufig stattfindende Oxidation der Metalloberflächen wirkt in der Fertigung überwiegend als Störfaktor. Eine Produktion in sauerstofffreier Atmosphäre hat dagegen das Potenzial, in technischer, wirtschaftlicher sowie ressourcenschonender Hinsicht enorme Fortschritte zu erzielen. In der ersten Förderperiode haben die Forschenden des Sonderforschungsbereichs gezielt die grundlegenden Auswirkungen vollkommener Abwesenheit von Sauerstoff bei verschiedenen Produktionsprozessen untersucht. Es zeigte sich, dass im ganz überwiegenden Teil der betrach-

teten Prozesse die Effekte durch die Sauerstofffreiheit nicht nur kleine Verbesserungen bewirken, sondern tatsächlich die erhofften großen Technologiesprünge. Als Beispiele seien hier die Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit von Verbunden um zwei Größenordnungen, die Reduktion des nötigen Umformgrades beim Kaltpressschweißen um über 30% oder der vollständige Verzicht auf Flussmittel beim Löten genannt. Das Energieeinsparpotential durch sauerstofffreies Presshärten von Stählen entspricht dabei einem Jahresstrombedarf von 600.000 Haushalten.



Grenzflächendiffusion in Cu-Al-Bilayern.  
Grün: Al-Atome, Orange: Cu-Atome.

So wurde dem SFB bei der Bewertung durch die 13-köpfige Begutachtungsgruppe dann auch ein hohes disruptives Potential für diese weltweit einzigartige und neue Forschungs idee attestiert.

Auf Basis dieser hervorragenden Ausgangsposition soll nun in der zweiten Förderperiode das Forschungsprogramm konsequent weiterentwickelt werden. Ziel ist es unter anderem das durch die vielen großen Effekte aufgezeigte Potential weiter auszuschöpfen. Damit werden weitere Grundlagen gelegt, um am Ende der Gesamtlauzeit ein ganzheitliches Verständnis über die Vorgänge bei der sauerstofffreien Produktion zu erlangen und damit einer Übertragung in die industrielle Praxis den Weg zu ebnen.

Im Sonderforschungsbereich 1368 arbeiten acht Institute der Leibniz Universität Hannover, vier Institute der Technischen Universität Clausthal,

der Lehrstuhl Datenmanagement im Maschinenbau der Universität Paderborn sowie das Laser Zentrum Hannover zusammen. Sprecherhochschule ist die Leibniz Universität Hannover. Insgesamt forschen fast 50 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in 19 Teilprojekten. Die jetzt bewilligte Förderperiode von 2024 bis 2028 ist die zweite von maximal drei möglichen Förderperioden.

Die Themenstellungen der Teilprojekte betreffen die plasmagestützte Desoxidation von Halbzeugen und Pulvern in Form von technischen Materialien wie praxisnahen Stählen bis hin zu legierten Werkstoffen für die additive Fertigung. Zielstellung der Oxidfreiheit sind hierbei Vorteile im Verarbeitungsverhalten der Ausgangswerkstoffe mit anderen Fertigungsverfahren sowie ebenfalls verbesserte Recyclingpotentiale. Auch bei der Herstellung von elektrisch leitfähigen Klebstoffverbindungen soll mit Blick auf die Reduktion von Oberflächenoxiden die Bandbreite nutzbarer, kostengünstiger Additive (Kupfer anstatt Gold oder Silber) vergrößert werden. Darüber hinaus ist im SFB auch ein erstes Transferprojekt enthalten, welches die gewonnenen Erkenntnisse in praktische industrielle Anwendungen überführen soll.

Von Seiten des SWZ ist Frau Prof. Dr. Nina Merkert, die das Teilprojekt C05 Fügesimalation leitet, an dem SFB beteiligt. Ziel des Projekts ist die systematische Untersuchung der Bindung zwischen desoxidierten Fügepartnern für verschiedene Fügeverfahren mittels klassischer Molekulardynamiksimulationen. Es soll aufgeklärt werden, wie sich das Entfernen der Oxidschichten auf die zugrundeliegenden Mechanismen und damit auf die Verbindungsqualität auswirkt. Dies erfordert ein Verständnis der atomaren Bindungsmechanismen an den Grenzflächen in silandotierter Atmosphäre und der grundlegenden Abhängigkeit von Desoxidationszustand und Temperatur.

#### **Beteiligte SWZ-Wissenschaftlerinnen und SWZ-Wissenschaftler:**

- **Prof. Dr. Nina Merkert**  
(SWZ, TU Clausthal)  
nina.merkert@tu-clausthal.de

- **Dr. Shan Lyu**  
(SWZ, TU Clausthal)  
shan.lyu@tu-clausthal.de

- **Dr. Hoàng-Thiên Luu**  
(SWZ, TU Clausthal)  
hoang-thien.luu@tu-clausthal.de

**Weitere Teilprojektleiterinnen und -leiter  
der TU Clausthal:**

- **Dr. René Gustus**  
(Materialtechnik, TU Clausthal)  
rene.gustus@tu-clausthal.de

- **Prof. Dr. Maus-Friedrichs**  
(Materialtechnik, TU Clausthal)  
wolfgang.maus-friedrichs@tu-clausthal.de

- **Prof. Dr. Alfred Weber**  
(Mechanische Verfahrenstechnik, TU Clausthal)  
weber@mvt.tu-clausthal.de

- **Dr. Lienhard Wegewitz**  
(Energieforschung und Physikalische Technolo-  
gien, TU Clausthal)  
lienhard.wegewitz@tu-clausthal.de

- **Dr.-Ing Henning Wiche**  
(Materialtechnik, TU Clausthal)  
henning.wiche@tu-clausthal.de

# Schwerpunktprogramm 2315: „Entstehung kritischer Verbindungen in Recycling-Schlacken“

Das DFG Schwerpunktprogramm 2315 zum Recycling kritischer Elemente geht in die zweite Förderperiode.

Die zunehmende Komplexität von Produkten und darin verwendeter Komponenten und Verbunde aus dem Hightech-Bereich führt dazu, dass mittlerweile eine Vielzahl von Elementen mit unterschiedlichen chemischen und physikalischen Eigenschaften verbaut wird. Dabei reichen herkömmliche Methoden der Demontage und der mechanischen Aufbereitung der zum Teil mikroskopisch kleinen Bauteile nicht mehr aus, um die Rückgewinnung aller Wertträger sicher zu stellen. Dies ist besonders kritisch für wirtschaftsstrategisch wichtige Rohstoffe, die in geringen Mengen vorhanden sind. Es können Hochtemperaturprozesse eingesetzt werden, bei denen allerdings ein Teil der Wertträger in die Schlacken gelangen und bisher verloren gehen. Ein typisches Beispiel dafür ist das Recycling von Lithium-Ionen-Batterien. Das Schwerpunktprogramm (SPP) 2315 mit dem Titel „Engineered Artificial Minerals (EnAM) – a Geometallurgical Tool to Recycle Critical Elements from Waste Streams“, das 2021 gestartet ist, geht auf eine Initiative von Prof. Daniel Goldmann (TU Clausthal) und Prof. Dr. Urs Peuker von der TU Freiberg zurück. In der ersten Förderphase wurden 19 Einzelprojekten zu den Themengebieten Schlackenmodifikation und Anreicherung, sowie der Zerkleinerung und Trennung gefördert. Alle Clausthaler Projekte haben überzeugt und werden mit einer Fördersumme von insgesamt ca. 2 Mio. Euro weiter finanziert.

In der ersten Förderperiode haben sich die beteiligten Arbeitsgruppen sowohl TU Clausthal intern als auch mit anderen AGs des SPPs vernetzt. Insgesamt 14 Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler wurden an der TU Clausthal gefördert.

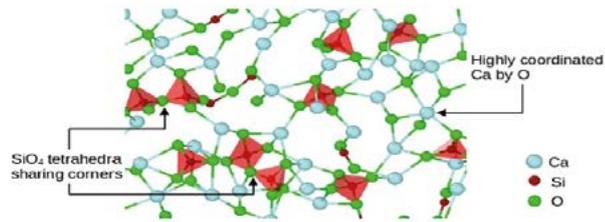
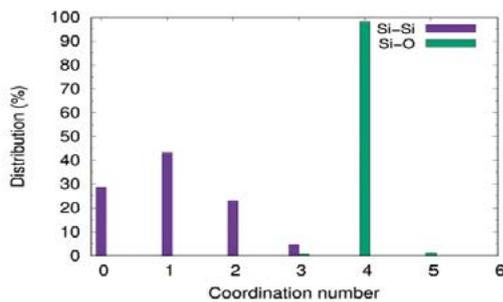
Zur experimentellen Erstellung von Schlackenana-  
loga und Einzelkomponenten wurden Verfahren



*Prof. Ursula Fittschen, Prof. Nina Merkert und Dr. lyad Alabd Alhafez bei der Präsentation des Projektes „Engineered Artificial Minerals“.*

von der micro-Präparation bis zur macro-Synthese, in den Projekten von Dr. Thomas Schirmer (IELF), Prof. Dr. Alfred Weber und Dr.-Ing. Annett Wollmann (IMVT) und Prof. Dr. Ursula Fittschen (IAAC) etabliert. Diese werden z.T. in den Trennprojekten von Prof. Andreas Schmidt (IOC) und Prof. Alfred Weber & Dr.-Ing. Annett Wollmann eingesetzt.

Erstarrungsphänomene und Schmelzstruktur konnten in der Zusammenarbeit der modellierenden und experimentell arbeitenden AGs besser verstanden werden. Das Nicht-Gleichgewichtsthermodynamik Modell, entwickelt von Prof. Dr. Michael Fischlschweiger (IEVB) zeigt, wie sich Kristalle in mineralogischen Systemen während der Erstarrung dynamisch bilden und erklärt kinetische Phänomene bei der Phasenbildung. Die Molekulardynamik-Simulationen (MD-Simulationen)



Koordinationszahlen und graphische Darstellung der  $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$  Schlackenstruktur.

von Prof. Dr. Nina Merkert (SWZ/IMET) haben gezeigt, wie sich durch Änderung der Schmelzenzusammensetzung die Viskosität und die Diffusion einzelner Ionen verändern, was wiederum die Erstarrung in der Schmelze beeinflusst. Die aus diesen Simulationen gewonnenen Erkenntnisse über die Koordination der Ionen kann in Zukunft in andere Modelle einfließen.

Aus dem mineralogisch orientierten Projekt von Dr. Schirmer zusammen mit der Universität Bochum wurde eine neue Gruppe vielversprechender Anreicherungsverbindungen (EnAM), die Lithiummanganate identifiziert. Der Einfluss der Oxidationsstufe des Mangans auf die Komponentenbildung wird in der zweiten Phase unter anderem im Fokus stehen, da sie einen großen Einfluss auf die Anreicherung des Lithiums hat. Wie die Struktur der Schmelze, mit Berücksichtigung potenzieller Phasentrennung, sich auf die Redoxeeigenschaften auswirkt, wird von Prof. Dr. Nina Merkert und Prof. Dr. Ursula Fittschen mit Kooperation mit dem Projekt von Prof. Dr. Michael Fischeschweiger untersucht werden.

In dem Bereich der Trenntechnik konnten bereits beachtliche Erfolge bei der trockenen Pulvertrennung von Modellgemischen durch tribo-elektrische Aufladung und Elektrosortierung in dem Projekt von Prof. Alfred Weber und Dr.-Ing. Annett Wollmann erreicht werden. Ebenso erfolgreich war die flotative Trennung von Gemischen mit Hilfe von neuartigen schaltbaren Sammlermolekülen aus den Derivaten des Naturprodukts Punicin, das in Granatapfelbaumblättern vorkommt. Diese Moleküle wurden in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Andreas Schmidt hergestellt und unter verschiedenen Bedingungen getestet. Besonders faszinierend ist die beleuchtungsabhängige Selektivität dieser Verbindungen.

#### Beteiligte SWZ-Wissenschaftlerinnen und SWZ-Wissenschaftler:

- **Prof. Dr. Nina Merkert**  
(SWZ, TU Clausthal)  
nina.merkert@tu-clausthal.de
- **Dr. Iyad Alabd Alhafez**  
(SWZ, TU Clausthal)  
iyad.alabd.alhafez@tu-clausthal.de

#### Weitere Teilprojektleiterinnen und -leiter der TU Clausthal:

- **Prof. Dr. Ursula E.A. Fittschen**  
(Anorganische und Analytische Chemie, TU Clausthal)  
ursula.fittschen@tu-clausthal.de
- **Dr. Thomas Schirmer**  
(Endlagerforschung, TU Clausthal)  
thomas.schirmer@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Andreas Schmidt**  
(Organische Chemie, TU Clausthal)  
schmidt@ioc.tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Alfred Weber**  
(Mechanische Verfahrenstechnik, TU Clausthal)  
weber@mvt.tu-clausthal.de
- **Dr.-Ing. Annett Wollmann**  
(Mechanische Verfahrenstechnik, TU Clausthal)  
annett.wollmann@tu-clausthal.de

# Einsatz von maschinellem Lernen in mehrskaligen Finite Elemente Simulationen

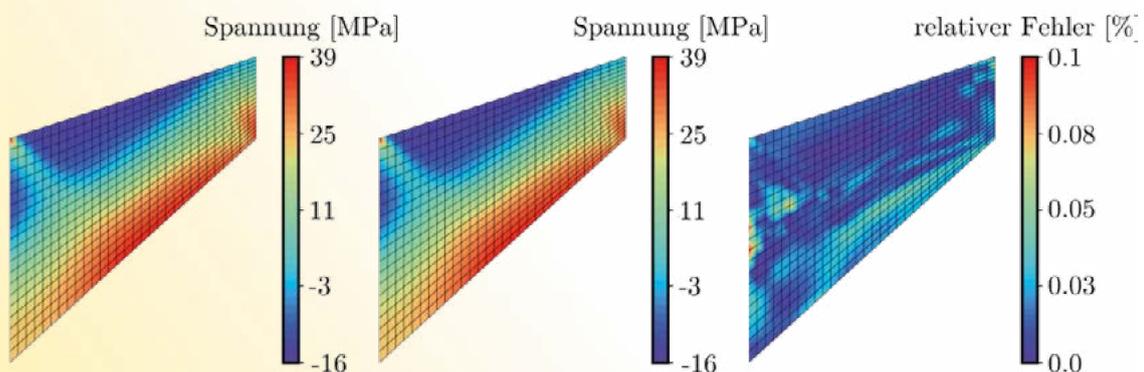
## Drastische Reduktion der notwendigen Rechenzeit bei der Materialsimulation mit Hilfe von maschinellem Lernen.

Hochleistungsfähige Bauteile, wie die Bugnase des ICE, Flügel von Windkraftanlagen oder Rumpfe von Katamaranen, bestehen aus Verbundwerkstoffen mit heterogener Mikrostruktur. Das mechanische Materialverhalten durch Simulationen gezielt vorherzusagen, ist aufgrund dieser Mikrostrukturen und der dadurch benötigten Rechenleistung oft nur begrenzt möglich. Daher entwickelt ein Forschungsteam der Technischen Universität Clausthal Modelle des maschinellen Lernens, um solche Simulationen zu beschleunigen. Das Ergebnis liegt statt nach Tagen bereits nach wenigen Sekunden vor.

### Simulationen mit maschinellem Lernen kombinieren

Simulationen ist sehr aufwendig und führt zu sehr langen Rechenzeiten“, erläutert Jendrik-Alexander Tröger von der Technischen Universität Clausthal. Dadurch sind Simulationen zur Unterstützung nur eingeschränkt möglich, weshalb Materialentwicklerinnen und -entwickler auf experimentelle Studien unter entsprechendem Zeit- und Ressourcenaufwand zurückgreifen.

Bei der Simulation des mechanischen Verhaltens von Bauteilen nimmt insbesondere die Berechnung der Mikrostruktur sehr viel Zeit in Anspruch. Im Gegensatz dazu sind neuronale Netze als Methode des maschinellen Lernens nach erfolgreichem Training sehr schnell auswertbar. Deshalb hat das interdisziplinäre Forschungsteam vom Institut für



Ressourceneffizienz, geringes Gewicht, Nachhaltigkeit – um die stetig wachsenden Anforderungen bei Werkstoffen zu erfüllen, werden diese kontinuierlich weiterentwickelt. Dabei nimmt häufig die Komplexität der Mikrostruktur zu, indem beispielsweise verstärkende oder besonders leichte Partikel oder Elemente hinzukommen. „Die Berücksichtigung der heterogenen Mikrostrukturen in

Technische Mechanik und Institute for Software and Systems Engineering in einem ersten Schritt eine große Datenmenge für die Mikrostruktur eines faserverstärkten Polymers erstellt und damit ein neuronales Netz als Ersatzmodell trainiert. „Das neuronale Netz konnte anschließend erfolgreich die Simulation der Mikrostruktur in Bauteilsimulationen ersetzen“, berichtet der Ingenieur.

„Die Rechenzeit von üblicherweise mehreren Tagen auf Hochleistungsrechnern haben wir mithilfe neuronaler Netze auf wenige Sekunden auf einem üblichen Laptop reduziert“, betont Jendrik-Alexander Tröger, „da neben der Rechenzeit auch der Speicherbedarf bei der Nutzung neuronaler Netze wesentlich geringer ist.“ Die Ergebnisse zwischen einer Referenzsimulation und eines trainierten neuronalen Netzes sind optisch nicht voneinander zu unterscheiden. Der bisherige datenbasierte Ansatz benötigt allerdings für jede Mikrostruktur die Generierung eines neuen Datensatzes. Daher will das Team zukünftig den Umfang an Daten durch geeignete physikalisch-basierte neuronale Netze wesentlich reduzieren. Damit können sie die entwickelte Methodik auf unterschiedlichste Mikrostrukturen übertragen, sodass sich zukünftig Mikrostrukturen durch Simulationen gezielt optimieren und der Umfang experimenteller Studien reduzieren lassen.



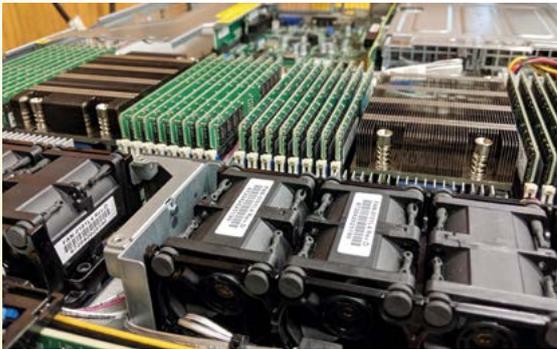
Jendrik-Alexander Tröger (links) und Hamidreza Eivazi nutzen maschinelles Lernen in komplexen Simulationen, um Materialien schneller zu optimieren. Foto: ITM.

#### **Beteiligte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler:**

- **Dr. Stefan Wittek**  
(Software and Systems Engineering, TU Clausthal)  
stefan.wittek@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann**  
(Technische Mechanik, TU Clausthal)  
stefan.hartmann@tu-clausthal.de
- **Prof. Dr. Andreas Rausch**  
(Software and Systems Engineering, TU Clausthal)  
andreas.rausch@tu-clausthal.de
- **Hamidreza Eivazi, M.Sc.**  
(Technische Mechanik, TU Clausthal)  
hamidreza.eivazi.kourabbaslou@tu-clausthal.de
- **Jendrik-Alexander Tröger, M.Sc.**  
(Technische Mechanik, TU Clausthal)  
jendrik-alexander.troeger@tu-clausthal.de

# Ausbau des SWZ-Rechenclusters

Rechencluster um einen weiteren Knoten inklusive einer Beschleunigerkarte ausgebaut.



Oben und unten: Foto: Marg, rechts: Foto: Herzog.

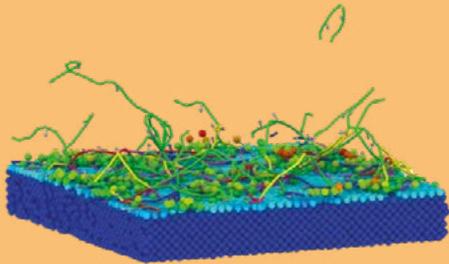
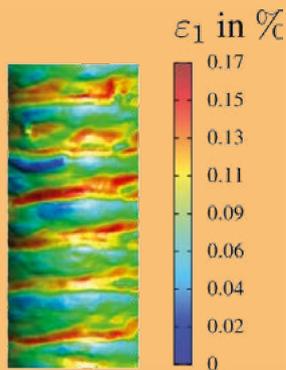
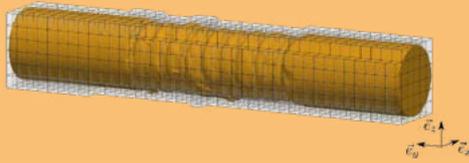
Der vom SWZ koordinierte zentrale Rechencluster an der TU Clausthal wurde mit Mitteln aus dem Teilprojekt von Prof. Dr. Nina Merkert des Sonderforschungsbereiches (SFB) 1368 „Sauerstofffreie Produktion“ weiter ausgebaut. Ziel des Projekts ist die systematische Untersuchung der Bindung zwischen desoxidierten Fügepartnern für verschiedene Fügeverfahren mittels klassischer Molekulardynamiksimulationen. Es soll aufgeklärt werden, wie sich das Entfernen der Oxidschichten auf die zugrundeliegenden Mechanismen und damit auf die Verbindungsqualität auswirkt.

Das System wurde initial 2019 in Betrieb genommen und seit dem aufgrund kontinuierlich steigender Nachfrage bereits mehrfach ausgebaut. In der aktuellen Erweiterungsrunde wurde ein weiterer Rechenknoten mit insgesamt 64 physischen CPU-

Kernen und über einem Terabyte RAM angeschafft. Als Besonderheit besitzt der neue Server insgesamt 8 PCIe-Steckplätze, die mit Rechenbeschleunigerkarten bestückt werden können. Aktuell ist bereits einer der Steckplätze mit einer Nvidia H100 Karte bestückt. Für 2025 ist die Anschaffung weiterer Beschleunigerkarten geplant. Die Rechenbeschleunigerkarten unterstützen insbesondere numerisch intensive Rechnungen und sowohl KI-Training als auch die spätere Anwendung von entsprechenden Modellen. Für das Projekt von Nina Merkert haben sich GPUs zur Beschleunigung von Molekulardynamiksimulationen etabliert und ermöglichen durch den entsprechenden CPU-GPU-Verbund enorme Steigerungen der Rechenleistung und Effizienz.

Aktuell wird der Rechencluster vorrangig von der Arbeitsgruppe von Frau Merkert (SWZ) sowie von der Technischen und der Physikalischen Chemie, der Technischen Mechanik sowie dem Institut für Geo-Engineering und perspektivisch vom Institut für Werkstoffkunde und Werkstofftechnik genutzt.

## Aktuelle Forschung unter Nutzung des Rechenclusters



Oben: Diskretisierung einer additiv gefertigte Stahlprobe mit ungefütteten finiten Elementen, unten: Verteilung der Hauptdehnung an der Oberfläche des Modells. Gerenderte Darstellung der mittels MD-Simulation modellierten Al/Cu-Grenzfläche.

## Leistungsdaten des Systems

- 5 Rechenknoten
- 224 physische CPU-Kerne
- 24.064 CUDA-Kerne
- 4736 GB Arbeitsspeicher
- Angebunden an das Storage-System des Rechenzentrums der TU Clausthal
- Aktuell genutzt von 6 Instituten bzw. Einrichtungen

### Kontakt:

- **Prof. Dr. Nina Merkert**  
(SWZ, TU Clausthal)  
nina.merkert@tu-clausthal.de
- **Dr. Alexander Herzog**  
(SWZ, TU Clausthal)  
alexander.herzog@tu-clausthal.de

# SWZ Workshop 2024: Simulation meets AI

Workshop des Simulationswissenschaftlichen Zentrums am 15. und 16. August 2024 an der Universität Göttingen durchgeführt.



Oben: Teilnehmerinnen und Teilnehmer des SWZ-Workshops 2024 in Göttingen; links: Begrüßung der Teilnehmenden durch Prof. Dr. F. Wörgötter, Vorstandsvorsitzender des SWZ; rechts: Keynote-Vortrag von Prof. Dr. A. Schöbel, Leiterin des Fraunhofer Institut für Wirtschafts- und Technomathematik. Fotos: Herzog.

Am 15. und 16. August fand der SWZ-Workshop 2024 am Dritten Physikalischen Institut der Universität Göttingen statt. Der zweitägige Workshop, an dem etwa 30 Forscherinnen und Forscher der beiden SWZ-Partneruniversitäten Clausthal und Göttingen teilnahmen und ihre aktuellen Forschungsergebnisse präsentierten, stand unter dem Motto „Simulation meets AI“. Hiermit wurde der aktuellen Verbreitung von Künstlichen-Intelligenz-Methoden auch in den Simulationswissenschaften

Rechnung getragen. Dementsprechend bezog sich auch ein guter Teil der Vorträge auf Ansätze und Einsätze der AI in einem breiten Themenfeld. Die Präsentationen wurden von drei Keynotes eingerahmt: Frau Prof. Dr. Schöbel, Leiterin des Fraunhofer Instituts für Wirtschafts- und Technomathematik und SWZ-Beiratsmitglied, berichtete über aktuelle Methoden zur Planung und Optimierung des nachhaltigen Personentransports, Prof. Dr. Ecker aus dem Institut für Informatik der

Universität Göttingen berichtete über die Möglichkeiten des Einsatzes von Digitalen Zwillingen zur Modellierung komplexer Systeme und Prof. Dr.-Ing. Brenner aus dem Institut für Technische Mechanik der TU Clausthal stellte neue Methoden des Maschinen Lernens zur Optimierung von Bohrprozessen vor. Als vorläufiges Fazit der Veranstalter kann festgehalten werden, dass die AI-Methoden sicher weiter im Kommen seien, dass sie aber die „klassische“ Simulation eher ergänzen als verdrängen werden.

Des Weiteren wurde der Workshop genutzt, um den Strategieprozess des Zentrums fortzuführen. Prof. Dr. F. Wörgötter, Vorstandsvorsitzender des SWZ lobte die Vorträge während des Workshops als „sehr hochwertig und gut dazu geeignet, den Austausch von Ideen und Forschungsansätzen voranzubringen.“ Aufgrund der sehr positiven Resonanz auf den SWZ-Workshop ist geplant, diesen in Zukunft zweijährlich jeweils im Wechsel mit der SimScience-Konferenz durchzuführen.

### Vorträge und Keynotes auf dem Workshop

- Keynote: Sustainable Passenger Transport (Prof. Dr. A. Schöbel, Fraunhofer Institut für Wirtschafts- und Technomathematik)
- Shortest path planning on grids and graphs (T. Kulvicius, Universität Göttingen)
- Track-to-Track Association in a Collective Perception Scenario (L. M. Wolf, Universität Göttingen)
- Online Task Planning using Simulated Mental Imagery (S. Li, Universität Göttingen)
- Modeling behavior guided by concepts grounded in sensory information (M. Tamosiunaite, Universität Göttingen)
- Enhancing NILM Through Innovative

Tooling (M. Bouchur, TU Clausthal)

- Keynote: Digital twins to understand complex systems (Prof. Dr. A. Ecker, Universität Göttingen)
- Multiscale Computations using Finite Elements (J.-A. Tröger, TU Clausthal)
- Physics-informed deep operator networks for multiscale simulations (H. Eivazi, TU Clausthal)
- Simulation meets AI: Generative Models and Adjoint Method hybrids (S. Herzog, Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen)
- On modeling and simulation of acoustic cavitation (R. Mettin, Universität Göttingen)
- InRecNet – Insect Recognition Model (C. Seyidbayli, TU Clausthal)
- Renewing Active Matter (P. Zimmer/Y. Pollack, Max Planck Institute for Dynamics and Self-Organization (MPI-DS), Göttingen)
- Modeling actin and synapse geometry (M. Thomas/M. Fauth, Universität Göttingen)
- Keynote: ML supported simulation in deep drilling technology (Prof. Dr.-Ing. G. Brenner, TU Clausthal)
- Digitalization in Materials Science (N. Merkert, TU Clausthal)
- Atomistic simulations of the shock and spall behavior of the refractory high-entropy alloy HfNbTaTiZr (D. Thürmer, TU Clausthal)
- Engineered compounds for the recovery of critical elements (I. A. Alhafez, TU Clausthal)

# Digitaler Zwilling der Qualitätssicherungslabore der BASF

Simulation und Optimierung der Abläufe in der Qualitätssicherung bei der BASF in Ludwigshafenschleunigerkarte ausgebaut.



*In den Qualitätskontrolllaboren des BASF-Unternehmensbereiches Nutrition & Health werden pro Jahr rund 180.000 Einzelanalysen durchgeführt. Ziel des gemeinsamen Projektes ist es, die hier auftretenden Abhängigkeiten zu analysieren und auf dieser Basis Ablaufplanungs- und Investitionsentscheidungen zutreffen, Foto: BASF Nutrition & Health.*

Seit dem Frühjahr 2022 analysieren die BASF und das SWZ gemeinsam die Abläufe in den Qualitätssicherungslaboren der BASF am Standort Ludwigshafen in Bezug auf die Effizienz des Personaleinsatzes und damit verbunden in Bezug auf Warte- und Durchlaufzeiten. Ziel ist die Ermittlung von optimalen Betriebskenngrößen, um einen möglichst wartezeitenfreien Fluss der Proben durch das System zu ermöglichen. Das 2022 begonnene Projekt wurde zunächst in 2023 auf weitere Fragestellungen in dem ursprünglich betrachteten Labor ausgeweitet und 2024 auf weitere Laborkomplexe. Für 2025 ist ein weiteres Anschlussprojekt geplant.

In der Qualitätskontrolle des BASF-Unternehmensbereiches Nutrition & Health werden eine Vielzahl von Produkten wie Aromen, Enzymen, Hilfs- und Wirkstoffen für die Pharmaindustrie sowie Zusatzstoffe für die Human- und Tierer-

nährung untersucht. Die Produkte finden ihre Anwendung unter anderem in der Lebensmittelproduktion. Um funktionierende Lieferketten im Lebensmittelbereich zu gewährleisten, müssen sowohl regelmäßige als auch ad-hoc Nachfragen pünktlich bedient werden. Voraussetzung dafür ist ein reibungsloser Produktionsablauf und eine zuverlässige Qualitätskontrolle und Qualitätssicherung. Nicht weniger wichtig ist allerdings auch eine vorausschauende Personaleinsatzplanung, die mögliche Aufträge antizipiert.

In den Qualitätskontrolllaboren am Standort Ludwigshafen können mehrere tausend verschiedene Untersuchungen von zertifiziertem Personal vorgenommen werden. In der Qualitätskontrolle laufen Proben von über 500 Produkttypen aus mehr als 10 verschiedenen Produktionsanlagen zusammen. Je nach Art und Anzahl der Proben sind mehr oder weniger Analysen verschiedener

Arten notwendig, die sowohl die Laborausstattung als auch die Mitarbeiter auf verschiedene Weise belasten. Pro Probe werden im Schnitt zwischen 10 und 40 Untersuchungen durchgeführt. Damit ergeben sich pro Jahr rund 180.000 durchgeführte Einzelanalysen. Durch die Qualitätskontrolllabore entsteht eine Abhängigkeit zwischen den verschiedenen Fertigungssträngen bei der BASF: Treffen mehr Proben aus einem Fertigungsstrang ein, so hat dies aufgrund der begrenzten Kapazität der Labore auch Auswirkungen auf die Durchlaufzeiten aller anderen Proben.

## Digitaler Zwilling

Ein Digitaler Zwilling ist eine virtuelle Repräsentation eines realen Systems. Das Ziel bei der Erstellung eines solchen digitalen Abbilds eines realen Objektes besteht darin, an dem Digitalen Zwilling kosten- und risikolos verschiedene Steuerungsstrategien untersuchen zu können. Erst wenn sich eine bestimmte Vorgehensweise im Modell als vorteilhaft erwiesen hat, wird sie in die Realität übernommen. Digitale Zwillinge können je nach Anwendungsgebiet verschiedene Aspekte des realen Objektes abbilden. Während in der Produktentwicklung üblicherweise die physikalischen Eigenschaften des späteren Produktes im Vordergrund stehen, soll ein Digitaler Zwilling in der Logistik die Abläufe und deren Zeitdauern möglichst gut widerspiegeln.

Zur Abbildung des realen Labors bei der BASF wurde ein Simulationsmodell aus knapp 500 Komponenten aufgestellt und parametrisiert. Mit Hilfe dieses Modells kann sowohl untersucht werden, welche Durchlaufzeiten sich für bestimmte Proben unter verschiedenen zukünftigen Auftrags-eingangsszenarien ergeben, als auch, welche organisatorischen Veränderungen oder auch Investitionen einen wie starken positiven Einfluss auf Durchlaufzeiten und damit die Liefertreue haben.

## Digitaler Zwilling und Warteschlangentheorie



Vortrag zum Thema „Digitaler Zwilling und Warteschlangentheorie“ bei der BASF in Ludwigshafen, Foto: BASF.

Auf Einladung des EN Quality Control Teams (ENT/QC) der BASF AG hat SWZ-Geschäftsführer Dr. Alexander Herzog am 14. September 2023 in Ludwigshafen gemeinsam mit Herrn Dr. Niklas Loges, Leiter der Qualitätskontrolle Nutrition & Health der BASF, einen Vortrag zum Thema „Digitaler Zwilling und Warteschlangentheorie“ gehalten. Auf der sowohl vor Ort in Ludwigshafen als auch online besuchbaren Veranstaltung wurden neben Themen der Warteschlangentheorie und -simulation sowie deren praktischer-Anwendung im Kontext der Produktions- und Logistikplanung die Fortschritte sowie geplanten nächsten Schritte des gemeinsamen Projektes „Digitaler Zwilling der Qualitätskontrolllabore der BASF“ vorgestellt. Auf der gut besuchten Veranstaltung entstand auf dieser Basis eine intensive Diskussion zu den über die aktuellen Fragestellungen hinausgehenden Möglichkeiten und Herausforderungen bei der simulationsbasierten Optimierung industrieller Prozesse.

### Kontakt:

**Dr. Alexander Herzog**

(SWZ, TU Clausthal)

[alexander.herzog@tu-clausthal.de](mailto:alexander.herzog@tu-clausthal.de)

# SWZ-Technologietransferprojekt „Digitaler Zwilling des Walzwerks der AG der Dillinger Hüttenwerke – Unter- stützung für die grüne Transformation“

Modellierung und Simulation der veränderten Prozesse und Stoffströme in Stahl- und Walzwerk im Kontext der grünen Transformation.



Die Stahlindustrie befindet sich im Transformationsprozess zu einer grünen Produktion.  
Foto: Dillinger.

Obwohl Stahl als Ausgangsrohstoff für Offshore-Windräder, Brücken, Schienen und Pipelines einen wichtigen Beitrag zur Dekarbonisierung u.a. der Energieerzeugung und des Transports liefert, ist die Stahlindustrie gleichzeitig einer der größten  $\text{CO}_2$ -Emittenten. Bei der herkömmlichen Hochofenroute zur Stahlerzeugung wird das Eisenoxid im Eisenerz mit Hilfe von Koks zu Roheisen reduziert, wobei sich der Sauerstoff im Eisenoxid mit dem Kohlenstoff im Koks zu  $\text{CO}_2$  verbindet. Um diese  $\text{CO}_2$ -Emissionen signifikant zu reduzieren, befindet sich die Stahlindustrie aktuell in einer grünen Transformation. Eisenerz soll zukünftig mit Hilfe von grünem Wasserstoff in sogenannten DRI-Anlagen reduziert werden. Der dabei entstehende Eisenschwamm (direct reduced iron = DRI) wird dann in Elektrolichtbogenöfen für den nachfolgenden Gießprozess aufgeschmolzen.



Kohlebetriebener Hochofen bei Dillinger, der im Rahmen der grünen Transformation ersetzt wird.  
Foto: Dillinger.

Auch die AG der Dillinger Hüttenwerke befindet sich mit ihrer Jahresproduktion von ca. 2 Mio. Tonnen Grobblech u.a. für die Fundamente von Offshore-Windanlagen in dieser grünen Transformation. Ziel ist die Einsparung von 55%  $\text{CO}_2$ , d.h. 4,8 Millionen Tonnen jährlich, bis Anfang der 2030er Jahre und eine klimaneutrale Produktion bis 2045. Die Umstellung der Produktionsanlagen erfordert nicht nur Investitionen in Milliardenhöhe. Die neue Produktionsroute ist aufgrund des hohen Wasserstoff- und Strombedarfs auch signifikant teurer als die heutige Hochofenroute. Zur Sicherstellung einer späteren Wirtschaftlichkeit sind eine gesamtheitliche Optimierung der Produktionslogistik sowie eine engere Verzahnung zwischen Vertrieb und Produktion unabdingbar.

Angeschlossen an frühere Kooperationen erweitern die AG der Dillinger Hüttenwerke und das SWZ seit Herbst 2022 im Rahmen eines Projektes mit 4¼ Jahren Laufzeit und 270.000 Euro Fördervolumen die gemeinsam entwickelten produktionslogistischen Simulationsmodelle. Vision ist die Abbildung aller relevanten Produkt-, Energie- und Rohstoffströmen. Mit diesen Simulationsmodellen kann das Unternehmen nicht nur frühzeitig die durch die Transformation veränderten Produktionsabläufe auf seine Machbarkeit prüfen und die richtigen Investitionsentscheidungen treffen. Die Simulationen helfen Produktion und Vertrieb im Verbund ebenfalls dabei, den zukünftigen Produktmix auf seine Wirtschaftlichkeit hin zu optimieren.



DRI-EAF-Route (Grüner H<sub>2</sub>) ist umsetzbare Route zur CO<sub>2</sub>-Minderung EAF-Route (100%Schrott) aufgrund Schrott-Lieferengpässen und nicht realisierbarer Qualitätsansprüchen praktisch nicht umsetzbar.

Quelle: Längen (2021), DWV-Fachkommission Hysteel (2022)

Transformationsprozess zur CO<sub>2</sub>-armen Produktion.

**Kontakt:**

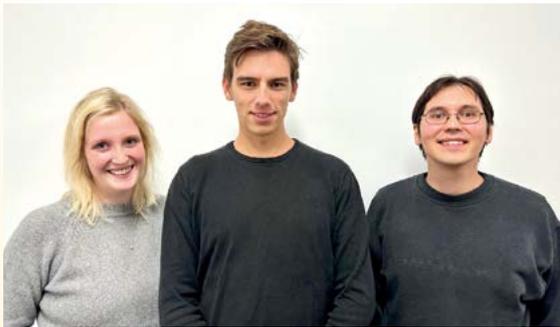
**Dr. Alexander Herzog**

(SWZ, TU Clausthal)

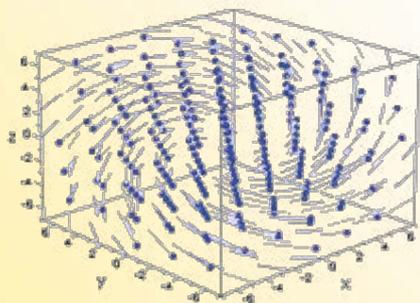
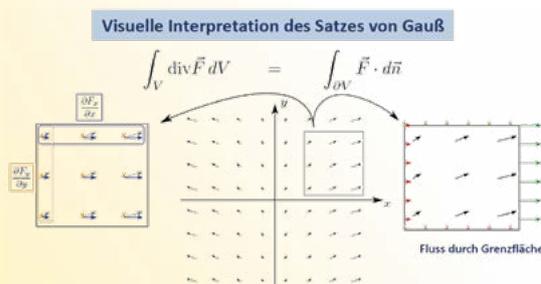
alexander.herzog@tu-clausthal.de

# SWZ-Webapp Bildungsmaterial des Monats auf twillo

Das am SWZ entwickelte Lernszenario „Vektoranalyse in Physik und Technik“ wurde auf dem Open Education Portal twillo ausgezeichnet.



Projektteam der SWZ-Webapps: Larissa Hahn und Simon Blau von der Universität Göttingen und Patrick Höhn von der TU Clausthal.



Screenshots der im Rahmen des OER-Projektes erstellten Webapps zum Einsatz in der Lehre.

Das im Rahmen des vom MWK geförderten SWZ-Projektes „OER für den Hochschulbereich – Förderung der Erstellung, Pflege und Verbreitung von Open Educational Resources an den niedersächsischen Hochschulen“ entstandene OER-Material zur Verdeutlichung von Zusammenhängen aus der Vektoranalyse für StudienanfängerInnen der Physik und der Ingenieurwissenschaften wurde im November 2023 von dem Open Education Portal twillo zum „Bildungsmaterial des Monats“ gewählt.

Ziel des SWZ-Projektes ist die Entwicklung von digitalen Lehrunterstützungsangeboten, sogenannten Open Educational Resources. Das standortübergreifende Projekt wird auf Clausthaler Seite von Frau Prof. Nina Merkert und auf Göttinger Seite von Herrn Prof. Pascal Klein geleitet. Die entwickelten Materialien umfassen Übungen zur Selbstkontrolle sowie Simulationen, welche die Eingabe beliebiger Felder, deren graphische Darstellung und die Berechnung von Kurven- und Flächenintegralen durch selbst gezeichnete Gebiete erlauben. Am SWZ wurden komplexe Simulationen implementiert, die Anwendungsfälle der OER-Materialien zur Vektoranalyse darstellen. An der TU Clausthal wird das Modul beispielsweise in der Veranstaltung „Numerische Strömungsmechanik“ eingesetzt, wobei die Bewegung eines Fluids über die Zeit über die Navier-Stokes-Gleichungen bzw. Euler-Gleichungen beschrieben wird.

Der Einsatz von Open Educational Resources wird seit langem als einer der wesentlichen Eckpfeiler in der Digitalisierung der Lehre sowie zur didaktischen Aufwertung der Lehre angesehen. Die Nachfrage nach solchen digitalen Lehr- und Lernformaten, die eine Selbstkontrolle der Studierenden ermöglichen, ist in den letzten Jahren deutlich angestiegen. Das 2019 entstandene, vom MWK geförderte OER-Port-

tal twillo, auf welchem die am SWZ entstandenen Materialien jetzt ausgezeichnet wurden, sammelt und ordnet die OER-Ressourcen der niedersächsischen Hochschulen.

## Open Education Resources

Als Open Educational Resources (OER) werden Lern- und Lehrmaterialien bezeichnet, die unter einer offenen Lizenz, wie der Creative Commons (CC-Lizenz) oder der General Public License (GPL) veröffentlicht wurden und somit kostenlos und hochschulübergreifend zur Verfügung stehen. Neben digitalen Lehrbüchern werden insbesondere interaktive Webseiten, Videos und internetbasierte Lernprogramme häufig als OER veröffentlicht. OERs ermöglichen es Hochschulen, ihren Studierenden die jeweils besten Materialien anderer Einrichtungen kostenlos zur Verfügung zu stellen. So können Synergieeffekte genutzt werden und gleichzeitig kontinuierlich weiter ausgebauten Materialien angeboten werden. Durch die Zusammenarbeit verschiedener Fachdisziplinen kann bei der Erstellung von OER-Materialien vielfach ein besonderer Blick auf die didaktische Qualität der Materialien gelegt werden.

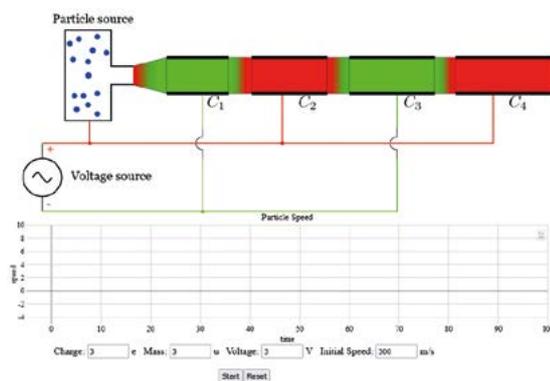
twillo

Für die niedersächsischen Hochschulen sammelt das Portal [twillo.de](https://twillo.de) zentral die OER Materialien. Aktuell hält das Portal über 4000 OER-Materialien von über 120 Institutionen vor. Jeden Monat werden bis zu drei besonders gute Materialien als „OER des Monats“ ausgezeichnet.

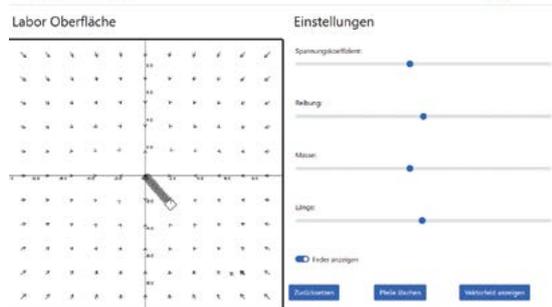
## Link

Die im Rahmen des Projektes erarbeiteten Materialien können über diesen Link aufgerufen werden:

<https://tu-c.de/twillo-oer>



## Feder Simulation



Weitere Screenshots der im Rahmen des OER-Projektes erstellten Webapps zum Einsatz in der Lehre.

## Kontakt:

- **Prof. Dr. Nina Merkert**  
(SWZ, TU Clausthal)  
[nina.merkert@tu-clausthal.de](mailto:nina.merkert@tu-clausthal.de)
- **Prof. Dr. Pascal Klein**  
(Dynamik komplexer Systeme,  
Universität Göttingen)  
[pascal.klein@uni-goettingen.de](mailto:pascal.klein@uni-goettingen.de)

# SimScience 2025

Dritte Auflage des vom SWZ ausgerichteten Internationalen Workshops on Simulation Science für 2025 geplant.



Eröffnung der vorherigen Auflage der SimScience; die nächste Konferenz ist für Mai 2025 geplant.  
Foto: Herzog.

Für die Zeitdauer vom 7. bis zum 9. Mai 2025 ist die dritte Auflage des „Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science“ geplant. Die Konferenz, zu der etwa 100 Teilnehmerinnen und Teilnehmer erwartet werden, wird in der Aula Academica der TU Clausthal stattfinden. Das Vortragsprogramm des dreitägigen Workshops wird insbesondere die folgenden drei Themen in den Blick nehmen:

## Materialwissenschaft und -technik

Entwicklung und Anwendung von Computertechniken in der Werkstoffsimulation (Simulation auf mikroatomarer, meso- und makroskopischer (Kontinuum) Skala, einschließlich Skalenüberbrückung; diffusiver, konvektiver Transport und chemische Prozesse in Werkstoffen; Simulation körniger Materie), maschinelles Lernen (ML) in den Materialwissenschaften (Vorhersage von Eigenschaften/Mikrostrukturen; ML in atomistischen Simulationen; ML bei Kontinuumssimulationen; Materialentwicklung), Simulation von Fluiden.

## Sozio-technische Systeme

Simulation von Mensch-zu-Maschine-Interaktionen (Vertrauensdimensionen für die Mensch-Maschine-Hand-in-Hand-Zusammenarbeit; Validierung und Verifizierung für selbstanpassende Systeme; Echtzeitmodelle und Antizipation menschlichen Verhaltens in der Teamzusammenarbeit; dezentralisierte Zeitplanung unter komplexen realen Bedingungen; Fairness und Vertrauen zwischen heterogenen Benutzerpräferenzen), Meinungsdynamik, Multiagentensysteme, agentenbasierte Modelle, interaktive Simulation.

## Optimierung von Netzwerken

Verkehrnetzwerke, Computer- und Sensornetzwerke, Warteschlangennetze, Internet of Things (IoT)-Umgebungen, elektrische Stromnetze, Simulation unsicherer Optimierungsprobleme, Simulation komplexer stochastischer Systeme, Simulation und Optimierung von Produktions- und Logistiksystemen/Digitale Zwillinge, Process Mining.

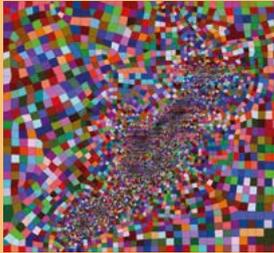
Begleitet wird der Workshop wieder durch ein vielfältiges Rahmenprogramm, welches u.a. eine Podiumsdiskussion zu aktuellen Trends in der Simulation, einem Besuch im Höhlenerlebniszentrum Iberg und einem Konferenz-Dinner besteht. Neu hinzu kommt dieses Mal der Wettbewerb „Science meets Arts“, siehe Infokasten mit weiteren Informationen dazu.

Die Post-Proceedings der Konferenz erscheinen auch dieses Mal wieder in der Springer Communications in Computer and Information Science (CCIS)-Reihe.

Weitere Informationen zur SimScience-Konferenz finden sich unter:

[www.simsience2025.tu-clausthal.de](http://www.simsience2025.tu-clausthal.de)

## Wettbewerb „Science meets Arts“



*Siegerbeitrag des letzten „Science meets Arts“-Wettbewerbs, der als Teil der International Teaching Staff Week 2022 stattfand.*

*Autor: Christian Heinrich Dörnert.*

Als neues Highlight findet während der SimScience-Konferenz die Auswahl und Ehrung der Gewinner des „Science meets Arts“-Wettbewerbs statt. Im Rahmen dieses Wettbewerbs können vorab über die Konferenz-Homepage besonders ausdrucksstarke und ästhetische Abbildungen wissenschaftlicher Zusammenhänge eingereicht werden. Die besten Abbildungen werden während der Konferenz gekürt und mit einem Preis ausgezeichnet.

## Aufzeichnung der Vorträge



*Regieansicht während der Aufzeichnung der Vorträge der letzten SimScience-Konferenz, Foto: Herzog.*

Die Vorträge der letzten Auflage der SimScience konnten zu großen Teilen aufgezeichnet und zum späteren Abruf online zur Verfügung gestellt werden. Eine Übersicht über die aufgezeichneten Vorträge findet sich hier:

**[video.tu-clausthal.de/film/728.html](https://video.tu-clausthal.de/film/728.html)**

Für die SimScience 2025 ist wieder eine Aufzeichnung und online Bereitstellung der Vorträge, sofern die jeweiligen Vortragenden dem zustimmen, geplant.

## Plenarvorträge

Die Vorträge in den einzelnen thematischen Sessions der SimScience-Konferenz werden durch insgesamt drei Plenarvorträge geladener Gäste eingerahmt. Für die SimScience 2025 konnten folgende Sprecherinnen und Sprecher für diese Keynote-Vorträge gewonnen werden:

- **Prof. Dr. Franziska Klügl**,  
Örebro University (Schweden):  
If Agent-Based Simulation is the hammer, what is the nail?
- **Prof. Dr. Alexander Hartmaier**,  
Ruhr-Universität Bochum:  
Towards a digital material twin: Data-oriented microstructure-property relationships
- **Prof. Dr. Piotr Faliszewski**,  
AGH University of Science and Technology (Polen):  
Map of Elections

Die Abstracts zu den Vorträgen können über die SimScience-Homepage abgerufen werden.

## Organisationskomitee:

- **Prof. Dr. Nina Merkert**  
(SWZ, TU Clausthal)  
[nina.merkert@tu-clausthal.de](mailto:nina.merkert@tu-clausthal.de)
- **Jun.-Prof. Dr. Robert Bredereck**  
(Informatik, TU Clausthal)  
[robert.bredereck@tu-clausthal.de](mailto:robert.bredereck@tu-clausthal.de)
- **Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner**  
(Technische Mechanik, TU Clausthal)  
[gunther.brenner@tu-clausthal.de](mailto:gunther.brenner@tu-clausthal.de)
- **Dr. Robert Mettin**  
(Physik, Universität Göttingen)  
[robert.mettin@phys.uni-goettingen.de](mailto:robert.mettin@phys.uni-goettingen.de)

# Personalia

## SWZ-Juniorprofessorin Dr. Nina Merkert zur Außerplanmäßigen Professorin ernannt



*Berufung von Dr. Nina Merkert zur Außerplanmäßigen Professorin an der TU Clausthal, Foto: Mathieu.*

Frau Dr. Nina Merkert kam im September 2017 als Junior-Professorin für „Computational Material Sciences and Engineering“ an die TU Clausthal und das SWZ. Neben ihrer Tätigkeit am SWZ war sie in die Strukturen des Clausthaler Instituts für Technische Mechanik eingebunden. Frau Merkert hat in Kaiserslautern sowie im französischen Grenoble Physik mit Nebenfach Informatik studiert. Vor ihrem Dienstantritt an der TU Clausthal war sie an den Universitäten in Kaiserslautern, Erlangen-Nürnberg sowie an der TU Bergakademie Freiberg tätig.

In der Forschung beschäftigt sich Frau Merkert insbesondere mit der atomistischen Simulation und der Diskrete-Elemente-Simulation von heterogenen Materialien zur Bestimmung der Materialeigenschaften unter Belastung, wie zum Beispiel Riss- und Bruchverhalten, plastische Verformung, Kompaktifizierung und vieles mehr. Im Jahr 2020 hat sie von der Bundesanstalt für Materialforschung- und

prüfung (BAM) den Adolf-Martens-Preis erhalten. An der TU Clausthal hat Frau Merkert zahlreiche DFG-geförderte Projekte mitinitiiert (wie z.B. den Sonderforschungsbereich 1368 und das Schwerpunktprogramm 2315, siehe die Projektbeschreibungen auf den Seiten SFB1368 und SPP2315). Des Weiteren hat sie in der Lehre das Konzept der „International Teaching Staff Week“ etabliert und die SWZ-Konferenz „International Workshop on Simulation Science“ (siehe Seite SimScience) maßgeblich organisiert und inhaltlich geprägt.

Mit Wirkung zum Oktober 2024 wurde Frau Merkert nun auf unbestimmte Zeit zur außerplanmäßigen Professorin an der TU Clausthal ernannt. Neben dem SWZ ist ihre zweite Heimat nun das Clausthaler Institut für Metallurgie.

# Weitere Nachrichten

## Best Poster Award für SWZ-Wissenschaftler



**Dr.-Ing. Hoang-Thien Luu, Daniel Thürmer und Prof. Dr. Nina Merkert auf dem Material Science and Engineering Kongress ausgezeichnet.**

Auf dem 2024er MSE (Material Science and Engineering)-Kongress vom 24. bis zum 26. September 2024 in Darmstadt wurde der Beitrag „Simulation of shock waves in Fe and Fe-C using molecular dynamics“ von Dr.-Ing. Hoang-Thien Luu, Daniel Thürmer und Prof. Dr. Nina Merkert in der Kategorie „Modellierung und Simulation“ mit dem Best Poster Award ausgezeichnet. Das von Hoang-Thien Luu vorgestellte Projekt untersucht den Einfluss von Kohlenstoff auf Stoßwellen in einkristallinem Eisen.

## Robert-Koch-Schule besucht SWZ

**Schülerinnen und Schüler des Clausthal-Zellerfelder Gymnasiums besuchen das SWZ im Rahmen einer Projektwoche.**

An der Robert-Koch-Schule in Clausthal-Zellerfeld fand in der Zeit vom 9. bis zum 11. September 2024 eine Projektwoche statt. 12 Schülerinnen und Schüler des Gymnasiums haben sich für das von Studiendirektor Richard Janssen angebotene Thema „Simulation“ angemeldet. Im Rahmen dieser Projektwoche besuchten die Schülerinnen und Schüler am 9. September zusammen mit ihrem betreuenden Lehrer das Simulationswissenschaftliche Zentrum Clausthal-Göttingen.

Am SWZ wurden die aktuellen Forschungsprojekte vorgestellt und live demonstriert. Dabei kam

sowohl der im KEIKO-Projekt eingesetzte Roboterarm als auch die VR-Brillen zur Partikelsimulation (SFB 1368 Sauerstofffreie Produktion) zum Einsatz. Zum Abschluss der Veranstaltung haben die Teilnehmerinnen und Teilnehmer im PC-Pool des SWZ selbst kleine Simulationsmodelle aufgebaut und so einige Zusammenhänge im Logistik- und Materialflussbereich nachgestellt.



Vorführung des KEIKO-Roboterarms während des Schülerbesuchs am SWZ, Foto: Herzog.

## ADSYNX auf der Hannover Messe

**Von SWZ-Wissenschaftler mitentwickeltes, patentiertes Signalsynchronisationsverfahren wurde auf Hannover Messe 2024 vorgestellt.**

Auf der Hannover Messe 2024, die vom 22. bis zum 26. April 2024 stattfand, wurde das gemeinsam von SWZ-Vorstandsvorsitzendem Prof. Dr. Florentin Wörgötter und Prof. Dr.-Ing. Niels Neumann entwickelte ADSYNX-Verfahren (Adaptive Control Method for Signal Synchronization) zur schnellen Synchronisation von Hochfrequenzsignalen vorgestellt.

Viele Anwendungen im Bereich der Telekommunikation oder auch des autonomen Fahrens setzen hohe Übertragungsbandbreiten bei gleichzeitig begrenzten Frequenzressourcen voraus. Um hierbei die Datenübertragung zwischen verschiedenen Komponenten zu synchronisieren, werden Verfahren benötigt, die sowohl eine schnelle Synchronisation

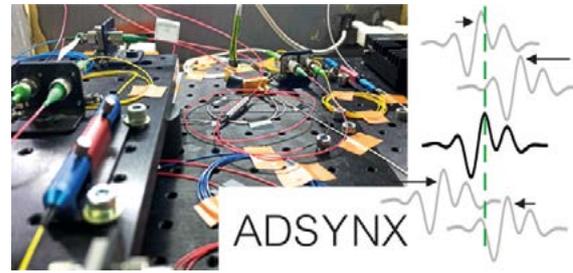


Foto: ADOPD, A. Agyris, U. Baleares, Spanien.

erlauben als auch dabei gleichzeitig mit möglichst wenig Ressourcen auskommen. Das neue ADSYNX-Verfahren, auf das mittlerweile ein Patent gewährt wurde (DE102022132996.8), ermöglicht genau dies. In einem nächsten Schritt soll mit den drei Industriepartnern TTI-Norte (Spanien), Sinowave (Schweden) und Acronik (Griechenland) ein Microchip entwickelt werden, der auf diese Weise Komponenten bei Frequenzen um 100 GHz koppeln kann.

## Prof. Reinhardt vom IEEE ausgezeichnet



Dem Clausthaler Informatiker und SWZ-Vorstandsmitglied Prof. Andreas Reinhardt ist von der IEEE Computer Society die „Golden Core Recognition“ verliehen worden. Foto: Exner.

Prof. Andreas Reinhardt (Institut für Informatik/SWZ) hat Anfang Februar 2023 im kalifornischen Long Beach (USA) an einem Treffen des Direktoriums der IEEE Computer Society teilgenommen. In diesem Rahmen war dem Wissenschaftler der TU Clausthal die Auszeichnung von der amtierenden Präsidentin der Fachgesellschaft persönlich überreicht worden.

Die „Golden Core Recognition“ ist eine Würdigung für ehrenamtliches Engagement. Sie wird jährlich

weltweit nur an einen kleinen Personenkreis vergeben, der sich durch einen wesentlichen Einsatz für die IEEE Computer Society hervorgetan hat. Im Fall des Clausthaler Informatikers wurde der Preis unter anderem für dessen ehrenamtliche Tätigkeit als Vorsitzender des Technical Activities Committee verliehen, welches die Ausrichtung wissenschaftlicher Tagungen weltweit koordiniert. Seit 2013 bringt sich Reinhardt in verschiedenen Funktionen ehrenamtlich in Aktivitäten des IEEE ein, seit 2018 ist er Vorsitzender von Gremien.

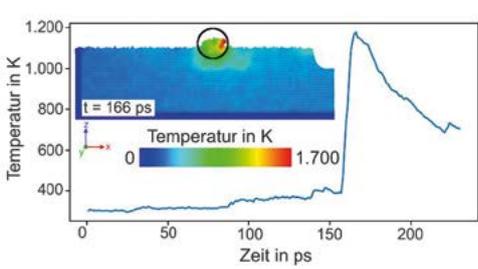
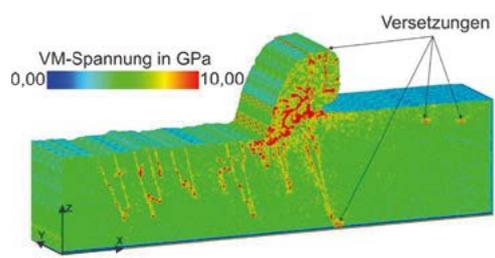
IEEE steht für „Institute of Electrical and Electronics Engineers“. Dahinter verbirgt sich ein weltweiter Berufsverband von Ingenieur:innen, Techniker:innen, Wissenschaftler:innen und angrenzender Berufe, hauptsächlich aus den Bereichen Elektrotechnik und Informationstechnik. Der gesamte Berufsverband hat über 400.000 Mitglieder und ist in 39 Fachgesellschaften gegliedert. Die IEEE Computer Society ist mit über 50.000 Mitgliedern die zahlenmäßig größte und somit eine der wichtigsten und einflussreichsten Fachgesellschaften im IEEE.

# Einfluss von Oxidschichten auf die plastischen Eigenschaften von Metallen

Seit 2020 von der DFG gefördertes Projekt erfolgreich abgeschlossen.

In einer sauerstoffreichen Umgebung bildet sich in der Regel eine Oxidschicht auf Metalloberflächen aus. Für die korrekte Beschreibung der Versetzungsnukleation muss deshalb der Einfluss der Oxidation berücksichtigt werden. Dies ist vor allem für Materialien mit einem großen Oberfläche-zu-Volumen Verhältnis wie poröse Strukturen und sauerstoffaffinen Metalle wie Aluminium relevant. Bei letzterem bildet sich selbst unter Hochvakuumbedingungen binnen Sekunden eine Oxidschicht. Diese kann die mechanischen Eigenschaften von Materialien stark beeinflussen. Im Jahr 2024 erfolgreich abgeschlossenen DFG-Projekt wurden die Einflüsse der Oxidation auf die plastischen Eigenschaften von Metallen unter Berücksichtigung der grundlegenden Abhängigkeiten von Sauerstoffkonzentration und Tempera-

tur mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen studiert. Es wurde gezeigt, dass nanoskalige Oxidschichten einen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften von Aluminium und Titan haben. Die Oxidschicht auf beiden untersuchten Werkstoffen weist eine erhöhte Sprödigkeit auf. Die mechanischen Eigenschaften von Titan und Aluminium werden durch die Oxidschichten signifikant beeinflusst, indem diese den Nukleationsprozess verändern und die Versetzungsbe-  
wegung verhindern. Andererseits zeigen Aluminium-Nanoschäume und Nanodrähte, die einer Oxidation unterzogen wurden, eine vergrößerte Zahl von Al-O-Bindungen, was zu einer erhöhten Duktilität führt. Beim Übertrag der Modelle auf die Mesoskala konnte am Beispiel von Indentations- und Nanoscratchingsimulationen erwiesen werden, dass die chemische Verbindung einen wesentlichen Einfluss auf die Bildung von Versetzungen hat.



Von-Mises-Spannungsverteilung bei einer MD-Simulation der Titanzerspanung nach 1500 ps (links) und Temperaturentwicklung an der Bruchstelle der Oxidschicht im Zeitverlauf sowie räumlich aufgelöste Temperatur bei 160 ps (rechts)

## GAMM-Steckbrief zu SWZ-Forscherin

GAMM-Rundbrief für das erste Halbjahr 2024 stellt SWZ-Professorin Nina Merkert in Form eines zweiseitigen Steckbriefs vor.

Die GAMM-Rundbriefe können über folgende Adresse abgerufen werden: [www.gamm.org/publikationen/gamm-rundbriefe](http://www.gamm.org/publikationen/gamm-rundbriefe)

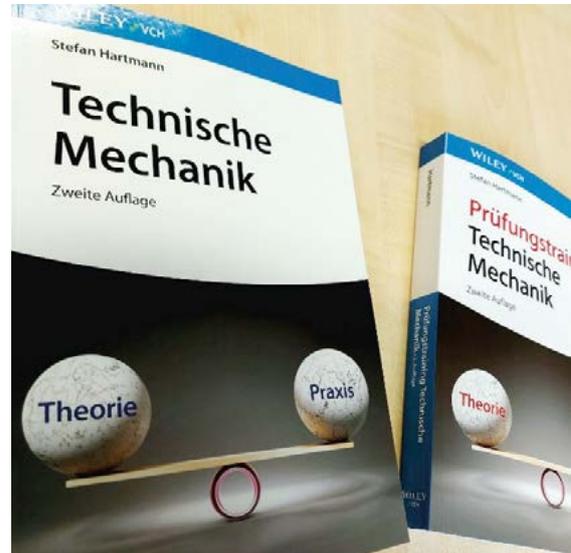
Die Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik e.V. veröffentlicht zweimal jährlich einen Rundbrief, in dem über aktuelle Entwicklungen informiert und ausgewählte Nachwuchswissenschaftler:innen in Steckbriefform vorgestellt werden. In der Ausgabe 1/2024 wird die stellvertretende SWZ-Vorstandsvorsitzende Prof. Dr. Nina Merkert inklusive einer Darstellung ihrer aktuellen Forschungsprojekte vorgestellt.

## Buchveröffentlichungen: „Technische Mechanik“ und „Prüfungstraining Technische Mechanik“

### Neuaufgabe wichtiger Technische Mechanik Lehrbücher erschienen.

Im September 2024 sind die beiden Lehrbücher „Technische Mechanik“ und „Prüfungstraining Technische Mechanik“ von Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann, Leiter der Arbeitsgruppe Festkörpermechanik am Institut für Technische Mechanik der TU Clausthal und Mitglied des SWZ, in der zweiten Auflage erschienen. Die beiden deutschlandweit nachgefragten Bücher unterstützen bereits seit 9 Jahren Studierende sowohl studienbegleitend als auch in der unmittelbaren Prüfungsvorbereitung und stellen somit einen wichtigen Grundpfeiler der ingenieurtechnischen Hochausbildung dar. Die zusammen rund 1200 Seiten umfassenden Bücher sind, wie auch schon die erste Auflage, im Wiley-VCH-Verlag erschienen. Die Bücher behandeln die Grundgleichungen der Mechanik fester Materialien, wie sie später in der Methode der finiten Elemente – einem der weitest verbreiteten numerischen Berechnungsverfahren in der industriellen Praxis – sowie Mehrkörperdynamik ihre Anwendung finden.

- Technische Mechanik:  
ISBN 978-3-527-35323-1
- Prüfungstraining Technische Mechanik:  
ISBN 978-3-527-35324-8



# Vorstand des SWZ

Das Simulationswissenschaftliche Zentrum wird von einem 6-köpfigen Vorstand geleitet. Jeweils drei Vorstandsmitglieder kommen von der Technischen Universität Clausthal und drei von der Georg-August-Universität Göttingen. Der Vorsitz im Vorstand wechselt alle zwei Jahre zwischen den beiden Standorten. Gewählt wird der Vorstand von den Mitgliedern des SWZ. Für die Amtszeit bis Mai 2025 besteht der SWZ-Vorstand aus folgenden Personen:



**Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum**  
Arbeitsgruppe Datenfusion  
Institut für Informatik  
Universität Göttingen



**Daniel Thürmer, M.Sc.**  
Arbeitsgruppe Computational  
Material Sciences  
SWZ Clausthal-Göttingen  
TU Clausthal



**Prof. Dr. Nina Merkert  
(Stellvertretende Sprecherin des Vorstands)**  
Arbeitsgruppe Computational  
Material Sciences  
SWZ Clausthal-Göttingen  
Institut für Metallurgie  
TU Clausthal



**Prof. Dr. Florentin  
Wörgötter  
(Sprecher des Vorstands)**  
Abteilung für Computational  
Neuroscience  
Drittes Physikalisches Institut  
Biophysik  
Universität Göttingen



**Dr. Robert Mettin**  
Arbeitsgruppe Ultraschall und  
Kavitation  
Drittes Physikalisches Institut –  
Biophysik  
Universität Göttingen



**Prof. Dr.-Ing. Andreas  
Reinhardt**  
Abteilung Energieinformatik  
Institut für Informatik  
TU Clausthal

# Wissenschaftlicher Beirat des SWZ

Begleitet wird die Arbeit des Simulationswissenschaftlichen Zentrums von einem externen wissenschaftlichen Beirat, der den Vorstand bei strategischen Entscheidungen berät. Die Beiratsmitglieder werden von den Präsidi der beiden Partneruniversitäten für eine Amtszeit von jeweils 6 Jahren berufen. Für die Zeit bis April 2027 besteht der wissenschaftliche Beirat des SWZ aus folgenden Personen:



**Prof. Dr. Franziska Klügl**  
Universität Örebro, Schweden  
Forschungsbereich:  
Agentenbasierte Simulation



**Prof. Dr. Ing. Sigrid Wenzel**  
Universität Kassel  
Forschungsbereich:  
Produktionsorganisation und  
Fabrikplanung



**Prof. Dr. Ulrich Rieder**  
Universität Ulm  
Forschungsbereich:  
Optimierung und Operations  
Research



**Prof. Dr. Horst Zisgen**  
Hochschule für angewandte  
Wissenschaften Darmstadt  
Forschungsbereich: Statistik



**Prof. Dr. Siegfried  
Schmauder**  
Universität Stuttgart  
Forschungsbereich:  
Materialwissenschaft



**Prof. Dr. Anita Schöbel**  
Leiterin des Fraunhofer Instituts  
für Techno- und Wirtschafts-  
mathematik  
Forschungsbereich: Ganzzah-  
lige Optimierung

# Mitglieder des SWZ

## Professorinnen und Professoren

- Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum (Informatik, Universität Göttingen)
- Jun.-Prof. Dr. Robert Brederick (Informatik, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner (Technische Mechnik, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Johannes Buhl (Metallurgie, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Umut Durak (Informatik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Xiaoming Fu (Informatik, Universität Göttingen)
- Prof. Dr. Leonhard Ganzer (Erdöl- und Erdgastechnik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Jens Grabowski (Informatik, Universität Göttingen)
- Prof. Dr. Thorsten Grosch (Informatik, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann (Technische Mechnik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Dieter Hogrefe (Informatik, Universität Göttingen)
- Prof. Dr. Olaf Ippisch (Mathematik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Diethelm Johannsmann (Physikalische Chemie, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Pascal Klein (Dynamik komplexer Systeme, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Nina Merkert (SWZ /Metallurgie, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Jörg Müller (Informatik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Gerlind Plonka-Hoch (Numerische und Angewandte Mathematik, Universität Göttingen)
- Prof. Dr. Andreas Rausch (Software and Systems Engineering, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Andreas Reinhardt (Informatik, TU Clausthal)
- Prof. Dr.-Ing. Christian Rembe (Elektrische Informationstechnik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Anne Schacht (Psychologie, TU Clausthal)

- Prof. Dr.-Ing. Babette Tonn (Metallurgie, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Uwe Wolfram (Werkstoffkunde und Werkstofftechnik, TU Clausthal)
- Prof. Dr. Florentin Wörgötter (Physik, Universität Göttingen)
- Prof. Dr. Ramin Yahyapour (Informatik, Universität Göttingen)

## Wissenschaftliche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter

- Dr. Tobias Ahlbrecht (Informatik, TU Clausthal)
- Dr. Iyad Alabd Alhafez (SWZ, TU Clausthal)
- Durga Prasanth Dude, M.Sc. (SWZ, TU Clausthal)
- Dr. Alexander Herzog (SWZ, TU Clausthal)
- Sakif Hossain, M.Sc. (Informatik, TU Clausthal)
- Dr. Hoàng-Thiên Luu (SWZ, TU Clausthal)
- Dr. Shan Lyu (SWZ, TU Clausthal)
- PD Dr.-Ing. habil. Marco Mancini (Energieverfahrenstechnik und Brennstofftechnik, TU Clausthal)
- Dr. Robert Mettin (Physik, Universität Göttingen)
- Felix Merz, M.Sc. (SWZ, TU Clausthal)
- Alexander Plack, M.Sc. (SWZ, TU Clausthal)
- Niels Rohweder, M.Sc. (SWZ, TU Clausthal)
- Hooman Sarvghadi, M.Sc. (Informatik, TU Clausthal)
- Vasilij Seibert, M.Sc. (Software and Systems Engineering, TU Clausthal)
- Esther Semmelhack, M.Sc. (Psychologie, Universität Göttingen)
- Dr. Masoom Shaban (SWZ, TU Clausthal)
- Daniel Thürmer, M.Sc. (SWZ, TU Clausthal)
- Jendrik-Alexander Tröger, M.Sc. (Technische Mechanik, TU Clausthal)
- Henrik Trommer, M.Sc. (Physik, Universität Göttingen)

# Lehrveranstaltungen mit Simulationsbezug in Clausthal und Göttingen

Sowohl in Clausthal als auch in Göttingen finden regelmäßig zahlreiche Lehrveranstaltungen mit einem Bezug zum SWZ bzw. zu Methodik und Anwendungen von Simulationen statt. Die im Berichtszeitraum stattgefundenen Veranstaltungen werden im Folgenden überblicksartig aufgelistet:

## TU Clausthal – Sommersemester 2023

- Simulation umformtechnischer Prozesse (Palkowski, Foadian)
- Simulation eines mechatronischen Systems (Turschner)
- Praktikum Simulation einer solaren Meerwasserentsalzung (Weber, Mancini)
- Fundamentals of Reservoir Simulation (Ganzer, Jenei)
- Reservoir Simulation Workshop (Ganzer, Jenei)
- Simulation und Analyse von Produktionssystemen (Schwindt, Alturk)
- Agentenbasierte Simulation und künstliche Intelligenz (Kesten-Kühne, Hirschmann)
- Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen (Numerische Mathematik II) (Angermann)
- Multiagentensysteme (Müller, Hossain)
- Materialfluss und Logistik (Esderts, Cevirgen, Wecken)
- Höhere FEM-Simulation mit ANSYS (Lohrengel)
- FEM-Praktikum mit ANSYS (Lohrengel)
- Numerische Strömungsmechanik (Brenner)
- Dynamische Simulation mit Aspen Custom Modeler (Strube)
- Computational Fluid Dynamics (CFD) für Verfahrenstechnik (Mancini, Fischlschweiger)
- Computational Thermodynamics for Materials and Process Design (Fischlschweiger, Wang)
- Advanced Reservoir Simulation with Complex Fluids (Ganzer, Hagemann)
- Seminar: Agentenbasierte Simulation in der Ökonomik (Paetzel, Eckenfels, Hirschmann)
- Rechnergestützte Modellierung und Optimierung (Zimmermann, Wohlerl)
- Stochastische Modellbildung und Simulation (Zimmermann, Sapountzoglou)
- Numerische Mathematik III (Öffner)
- Wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen (Paralleles Rechnen)/Scientific High-Performance Computing (Ippisch, Böhm)
- Modellbildung und Simulation (Reuter)
- Simulation Engineering (Durak, Hartmann)
- Simulation und Test in der Produktentwicklung (Lohrengel)

## TU Clausthal – Wintersemester 2023/2024

- Numerische Simulation in der Umformtechnik (Foadian, Buhl)
- Computer-aided Molecular Modeling (Johannsmann, Drache, Merkert)
- Praktikum Simulation einer solaren Meerwasserentsalzung (Weber, Mancini)
- International Teaching Staff Week of Simulation in Material Sciences (Merkert)
- Numerical Fluid Mechanics (Brenner)
- Computational Simulation (Brenner)
- Simulationsmethoden in den Ingenieurwissenschaften (Brenner)
- Methode der finiten Elemente (Hartmann, Tröger)
- Projekt zu Simulationsmethoden (Brenner)
- Modellierung und Simulation verfahrenstechnischer Systeme (Strube)
- Stationäre Simulation mit Aspen Plus (Strube)

### TU Clausthal – Sommersemester 2024

- Simulation umformtechnischer Prozesse (Palkowski, Foadian, Buhl)
- Simulation eines mechatronischen Systems (Turschner)
- Praktikum Simulation einer solaren Meerwasserentsalzung (Weber, Mancini)
- Fundamentals of Reservoir Simulation (Ganzer, Jenei)
- Reservoir Simulation Workshop (Ganzer, Jenei)
- Agentenbasierte Simulation und künstliche Intelligenz (Kesten-Kühne, Hirschmann)
- Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen (Numerische Mathematik II) (Öffner)
- Mensch-Maschine-Interaktion (Unbehaun)
- Hauptseminar: Agent-based modelling and simulation (Müller, Ahlbrecht)
- Digital Twins: Hauptseminar (Hartmann, Kruschinski, Burmester)
- Materialfluss und Logistik (Esderts, Wecken)
- Höhere FEM-Simulation mit ANSYS (Lohrengel)
- FEM-Praktikum mit ANSYS (Lohrengel)
- Numerische Strömungsmechanik (Brenner)
- Basic principles of molecular dynamics (Merkert)
- Dynamische Simulation mit Aspen Custom Modeler (Strube)

### TU Clausthal – Wintersemester 2024/2025

- Numerische Simulation in der Umformtechnik (Foadian, Buhl)
- Computer-aided Molecular Modeling (Johannsmann, Drache, Merkert)
- Modellierung und Simulation in der Kunststofftechnik (Steuernagel)
- Praktikum Simulation einer solaren Meerwasserentsalzung (Weber, Mancini)
- Computational Fluid Dynamics (CFD) für Verfahrenstechnik (Mancini, Fischschweiger)
- Computational Thermodynamics for Materials and Process Design (Fischschweiger, Wang)
- Advanced Reservoir Simulation with Complex Fluids (Ganzer, Hagemann)
- Modellierung und Planung von Logistiksystemen (Schwindt, Andris)
- Seminar: Agentenbasierte Simulation in der Ökonomik (Paetzel, Eckenfels, Hirschmann)
- Rechnergestützte Modellierung und Optimie-

- rung (Zimmermann, Wohler)
- Numerische Mathematik III (Öffner)
- Wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen (Paralleles Rechnen)/Scientific High-Performance Computing (Ippisch)
- Modellbildung und Simulation (Reuter)
- Simulation Engineering (Durak, Hartmann)
- Konstruktion und Simulation mit 3D-CAD (ehemals Konstruktion und Simulation mit ProE (Creo)) (Inkermann, Meyer)
- Höhere FEM-Simulation mit ANSYS (Lohrengel)
- FEM-Praktikum mit ANSYS (Lohrengel)
- Multi-scale Simulation (Merkert)
- Numerical Fluid Mechanics (Brenner)
- Computational Simulation (Brenner)
- Simulationsmethoden in den Ingenieurwissenschaften (Brenner)
- Projekt zu Simulationsmethoden (Brenner)
- Modellierung und Simulation verfahrenstechnischer Systeme (Strube)
- Stationäre Simulation mit Aspen Plus (Strube)

### Universität Göttingen – Sommersemester 2023

- Biomolecular Physics and Simulations (Grubmüller/de Groot)
- Introduction to Molecular Dynamic Simulations (Grubmüller/de Groot)
- Computer simulations (Müller)
- Seminar on perfect simulation (Schuhmacher)
- Simulation modelling (M.FES.122). Specialization „Ecosystem Analysis and Modelling“ (Wiegand/Meyer)
- Methoden zur Numerischen Mathematik (Lehrenfeld)
- Numerische Mathematik II (Lehrenfeld)
- Proseminar über Numerische Mathematik (Luke)
- Vertiefung Waldwachstum und Waldwachstumsmodellierung (Paul/Albert)

### Universität Göttingen – Wintersemester 2023/2024

- Introduction to Molecular Dynamic Simulations (Grubmüller/de Groot)
- EPR-Simulation (NN)
- Data Science: Numerische Methoden (Schmitzer/Luckhardt)

- Numerische Mathematik I (Luke)
- Proseminar über Numerische Mathematik (Lehrenfeld)
- Ökosystemmodellierung (Wiegand/Meyer)

#### **Universität Göttingen – Sommersemester 2024**

- Biomolecular Physics and Simulations (Grubmüller/de Groot)
- Introduction to Molecular Dynamic Simulations (Grubmüller/de Groot)
- Simulation modelling (M.FES.122). Specialization „Ecosystem Analysis and Modelling“ (Wiegand/Meyer)
- Workshop on simulation-based inference (NN)
- Vertiefung Waldwachstum und Waldwachstumsmodellierung (Paul /Albert)
- Einführung in die Computermodellierung (Semmann)

#### **Universität Göttingen – Wintersemester 2024/2025**

- Computer simulations (Müller)
- Data simulation for linear models in R (Mundry)
- Introduction to Molecular Dynamic Simulations (Grubmüller/de Groot)
- RTG 2756 Molecular dynamics simulations (NN)
- Einführung in die Computermodellierung (NN)
- Seminar über mathematische Modellierung (Meyer)

# Veröffentlichungen der SWZ-Mitglieder

## Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum

- L.M. Wolf, M. Baum: Track-to-track Association based on Deterministic Sampling using Herding; 2024 27th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-6, 2024
- S. Steuernagel, K. Thormann, M. Baum: Random Matrix-based Tracking of Rectangular Extended Objects with Contour Measurements; 2024 27th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-8, 2024
- S. Steuernagel, A. Kurda, M. Baum: Point Cloud Registration based on Gaussian Mixtures and Pairwise Wasserstein Distances 2023 IEEE Symposium Sensor Data Fusion and International Conference on Multisensor Fusion and Integration (SDF-MFI), 2023
- K. Thormann, M. Baum: Single-Frame Radar Odometry Incorporating Bearing Uncertainty; 2023 IEEE Symposium Sensor Data Fusion and International Conference on Multisensor Fusion and Integration (SDF-MFI), 2023
- S. Steuernagel, K. Thormann, M. Baum: Evaluation Scores for Elliptic Extended Object Tracking Considering Diverse Object Sizes; 2023 26th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-7, 2023
- S. Steuernagel, K. Thormann, M. Baum: Improved extended object tracking with efficient particle-based orientation estimation; 2023 26th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-8, 2023
- L.M. Wolf, S. Steuernagel, K. Thormann, M. Baum: Track-to-track Association based on Stochastic Optimization; 2023 26th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-7, 2023
- E. Ernst, F. Pfaff, M. Baum, U.D. Hanebeck: Multitarget–Multidetector Tracking Using the Kernel SME Filter; 2023 26th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-7, 2023
- R. Volkmar, K. Thormann, K. Soal, Y. Govers, M. Böswald, M. Baum: Adaptive Kalman Filter Tracking for Instantaneous Aircraft Flutter Moni-

- toring; 2023 26th International Conference on Information Fusion (FUSION), 1-8, 2023
- E. Ernst, F. Pfaff, U.D. Hanebeck, M. Baum: The Kernel-SME Filter with Adaptive Kernel Widths for Association-free Multi-target Tracking; 2023 American Control Conference (ACC), 355-361, 2023
- J.S. Fowdur, M. Baum, F. Heymann, P. Banys: An Overview of the PAKF-JPDA Approach for Elliptical Multiple Extended Target Tracking Using High-Resolution Marine Radar Data; Remote Sensing 15 (10), 2503, 2023

## Jun.-Prof. Dr. Robert Brederick

- N. Boehmer, R. Brederick, K. Heeger, D. Knop, J. Luo: Multivariate algorithmics for eliminating envy by donating goods; Autonomous Agents and Multi-Agent Systems 38 (2), 43, 2024
- D. Szafranski, S. Ulrich, R. Brederick, A. Reinhardt: LoRaWAN Coverage Assessment Using Optimal Bicycle Route Planning; 2024 IEEE 49th Conference on Local Computer Networks (LCN), 1-4, 2024
- R. Brederick, J. Luo: Complexity of manipulation and bribery in premise-based judgment aggregation with simple formulas; Information and Computation 296, 105128, 2024
- R. Brederick, A. Kaczmarczyk, J. Luo, R. Niedermeier, F. Sachse: Improving Resource Allocations by Sharing in Pairs; Journal of Artificial Intelligence Research 78, 1069-1109, 2023
- M. Bentert, R. Brederick, P. Györgyi, A. Kaczmarczyk, R. Niedermeier: A multivariate complexity analysis of the material consumption scheduling problem; Journal of Scheduling 26 (4), 369-382, 2023
- N. Boehmer, R. Brederick, D. Peters: Rank aggregation using scoring rules Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence 37 (5), 5515-5523, 2023
- N. Boehmer, R. Brederick, D. Knop, J. Luo: Fine-grained view on bribery for group identification; Autonomous Agents and Multi-Agent Systems 37 (1), 21, 2023

- R. Bredereck, T. Fluschnik, N. Talmon: Efficiently Computing Smallest Agreeable Sets; *ECAI 2023*, 311-318, 2023
- R. Bredereck, A. Kaczmarczyk, D. Knop, R. Niedermeier: High-multiplicity fair allocation using parametric integer linear programming; *ECAI 2023*, 303-310, 2023

#### **Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner**

- H. Gao, D. Zhou, A. Tatomir, K. Li, L. Ganzer, P. Jaeger, G. Brenner, M. Sauter: Estimation of recovery efficiency in hightemperature aquifer thermal energy storage considering buoyancy flow; *Water Resources Research*, 60, e2024WR037491, 2024
- M.M. Abdelhafiz, J.F. Oppelt, G. Brenner, L.A. Hegele: Numerical investigation of the convective heat transfer coefficient for a concentric annulus with rotating inner cylinder with application in the deep geothermal drilling process; *Geoenergy Science and Engineering*, Volume 231, Part B, December 2023, 2023
- M.M. Abdelhafiz, J.F. Oppelt, G. Brenner, L.A. Hegele: Application of a thermal transient subsurface model to a coaxial borehole heat exchanger system; *Geoenergy Science and Engineering*, Volume 227, August 2023, 2023

#### **Prof. Dr.-Ing. Johannes Buhl**

- L. Isidore Besong, J Buhl: A review of constitutive models used in macroscale finite element analysis of additive manufacturing and post-processing of additively manufactured components; *Virtual and Physical Prototyping* 19 (1), e2356079, 2024
- B. Nawaz, Q. Hu, T Zhang, L. Wang, Y. Li, J. Buhl, W. Xu: The influence of ferrite content, ferrite-austenite morphology, and orientation relationship on bainite transformation in intercritically annealed bainitic steels; *Materials Characterization* 217, 114310, 2024
- R. Kremer, J. Etzkorn, S Khani, T. Appel, J. Buhl, H. Palkowski: Influence of Post-Heat Treatment on Corrosion Behaviour of Additively Manufactured CuSn10 by Laser Powder Bed Fusion; *Materials* 17 (14), 3525, 2024
- SW. Ahmed, K. Altaf, A Tariq, M. Alkahtani, J. Buhl, G. Hussain: Geometric Optimization of SLM-Printed AlSi10Mg Radial Heat Sinks: A Numerical and Experimental Approach for Natural Convection Conditions; *Arabian Jour-*

- *nal for Science and Engineering*, 1-19, 2024
- L. Grüger, TS. Fischer, R. Woll, J. Buhl: Safeguarding Against Risks in the Wire Arc Additive Manufacturing Process; *Industry 4.0 Science* 40 (1), 63-69, 2024
- L. Grüger, TS. Fischer, R. Woll, J. Buhl: Absicherung von Risiken beim Prozess des Wire Arc Additive Manufacturing; *Industry 4.0 Science* 40, 63-69, 2024
- L. Grüger, B. Sydow, R Woll, J. Buhl: Design of a cost-effective and statistically validated test specification with selected machine elements to evaluate the influence of the manufacturing process with a focus on ...Metals 13 (11), 1900, 2023
- G. Hussain, M. Hassan, H Wei, J. Buhl, M. Xiao, A. Iqbal, H. Qayyum, A.A. Riaz, R. Muhammad, K.K. Ostrikov: Advances on Incremental forming of composite materials; *Alexandria Engineering Journal* 79, 308-336, 2023
- J. Buhl, Ll. Besong, S. Härtel: Temperature Control of the Two-Point Incremental Forming Process to Achieve Homogeneous Martensite Content Based on Finite Element Simulations; *International Conference on the Technology of Plasticity*, 739-747, 2023
- F. Jensch, J. Buhl, R. Laue, S. Härtel: Application of the plane-strain-compression-test to determine the local mechanical properties of LPBF-manufactured 316l components; *Materials Research Proceedings* 28, 149-158, 2023
- T. Hart-Rawun.g, J Buhl, A. Horn, M. Bambach, M. Merklein: A unified model for isothermal and non-isothermal phase transformation in hot stamping of 22MnB5 steel; *Journal of Materials Processing Technology* 313, 117856, 2023
- Qadeer, G. Hussain, M. Alkahtani, J. Buhl: Springback behavior of a metal/polymer laminate in incremental sheet forming: stress/strain relaxation perspective; *Journal of Materials Research and Technology* 23, 1725-1737, 2023
- R. Israr, J. Buhl: An Additive Introduction Manufacturing to (AM) of metals and its trends in Wire-Arc Additive Manufacturing (WAAM) simulations; *Machine Tools: An Industry 4.0 Perspective*, 103, 2023

#### **Prof. Dr.-Ing. Umut Durak**

- D. Kruschinski, D.T. Ngassam, U. Durak, S. Hartmann: An MLOps Framework to Data-Driven Modelling of Digital Twins with an

- Application to Virtual Test Rigs; International Conference on Conceptual Modeling, 71-86, 2024
- J. Rüter, U. Durak, J.C. Dauer: Investigating the Sim-to-Real Generalizability of Deep Learning Object Detection Models; *Journal of Imaging* 10 (10), 259, 2024
  - T. Schubert, S. Friedrich, W. Zaeske, U. Durak: Towards fault-tolerance of IMA with safe dynamic reconfiguration; *CEAS Aeronautical Journal*, 1-12, 2024
  - Ahlbrecht, J. Sprockhoff, U. Durak: A system-theoretic assurance framework for safety-driven systems engineering; *Software and Systems Modeling*, 1-18, 2024
  - T. Dörr, F. Schade, J. Becker, G. Keramidis, N. Petrellis, V. Kelefouras, M. Mavropoulos, K. Antonopoulos, C.P. Antonopoulos, N. Voros, A. Ahlbrecht, W. Zaeske, V. Janson, P. Nöldeke, U. Durak, C. Panagiotou, D. Karadimas, N. Adler, C. Reichmann, A. Sailer, R. Weber, T. Wilhelm, W. Gabler, K. Weiden, X.A. Recasens, S. Sezer, F. Siddiqui, R. Khan, K. McLaughlin, S.Y. Tasdemir, B. Sonigara, H. Hui, E.S. Viguer, A.A. Suarez, V.N. Gallego, M.M. Alcobendas, M.M. Tello: XANDAR: An X-by-Construction Framework for Safety, Security, and Real-Time Behavior of Embedded Software Systems; *2024 Design, Automation & Test in Europe Conference & Exhibition (DATE)*, 1-6, 2024
  - Lukic, U. Durak: Technology Requirements for the Development of Aircraft for Urban Air Mobility-Status Quo; *Deutsche Gesellschaft für Luft-und Raumfahrt-Lilienthal-Oberth eV, Bonn*, 2024
  - J. Sprockhoff, U. Durak: Neural Network Ensembles for Safety-Critical Object Detection Functions in Aerospace; *Deutsche Gesellschaft für Luft-und Raumfahrt-Lilienthal-Oberth eV, Bonn*, 2024
  - J.M. Christensen, A.A. Girija, T. Stefani, U. Durak, E. Hoemann, F. Köster, T. Krüger, S. Hallerbach: Advancing the AI-Based Realization of ACAS X Towards Real-World Application; *36th IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence, ICTAI 2024*, 2024
  - J.M. Christensen, W.M.M. Zaeske, J.W. Beck, S. Friedrich, T. Stefani, A.A. Girija, E. Hoemann, U. Durak, F. Köster, T. Krüger, S. Hallerbach: Towards Certifiable AI in Aviation: A Framework for Neural Network Assurance Using Advanced Visualization and Safety Nets; *43rd IEEE/AIAA Digital Avionics Systems Conference, DASC 2023*, 2024
  - Cinoğlu, U. Durak: Thrust-level dependent vibration diagnostics of UAV propeller using fast Fourier transform and K-nearest neighbour; *International Journal of Sustainable Aviation* 10 (4), 297-314, 2024
  - T. Stefani, J.M. Christensen, A.A. Girija, S. Gupta, U. Durak, F. Köster, T. Krüger, S. Hallerbach: Automated Scenario Generation from Operational Design Domain Model for Testing AI-Based Systems in Aviation; *CEAS Aeronautical Journal*, 2024
  - A.A. Girija, J.M. Christensen, T. Stefani, E. Hoemann, U. Durak, F. Köster, S. Hallerbach, T. Krüger: Towards the Monitoring of Operational Design Domains using Temporal Scene Analysis in the realm of Artificial Intelligence in Aviation; *43rd IEEE/AIAA Digital Avionics Systems Conference, DASC 2024*, 2024
  - Naja, S. Gupta, U. Durak, S. Hartmann: Towards a Scenario Toolkit for Autonomous Systems. *Simul. Notes Eur.* 34 (1), 13-21, 2024
  - T. Schubert, S. Friedrich, W.M.M. Zaeske, U. Durak: Improving Fault-Tolerance of IMA using Safe Dynamic Reconfiguration; *CEAS Aeronautical Journal*, 2024
  - Lukic, S. Friedrich, T. Schubert, U. Durak: Automated Configuration of ARINC 653-Compliant Avionics Architectures *AIAA SCITECH 2024 Forum*, 1856, 2024
  - J. Sprockhoff, S. Gupta, U. Durak, T. Krueger: Scenario-Based Synthetic Data Generation for an AI-based System Using a Flight Simulator *AIAA SCITECH 2024 Forum*, 1462, 2024
  - Lukic, J. Sprockhoff, A. Ahlbrecht, S. Gupta, U. Durak: Iterative Scenario-Based Testing in an Operational Design Domain for Artificial Intelligence Based Systems in Aviation. *Simul. Notes Eur.* 33 (4), 183-190, 2023
  - U. Durak, H. von Viebahn: Setting the Avionics Research Agenda for Zero-Emission Flight; *Deutsche Gesellschaft für Luft-und Raumfahrt-Lilienthal-Oberth eV*, 2023
  - V. Janson, A. Ahlbrecht, U. Durak: Architectural Challenges in Developing an AI-based Collision Avoidance System; *2023 IEEE/AIAA 42nd Digital Avionics Systems Conference (DASC)*, 1-8, 2023

- M. Ibrahim, U. Durak: The Current Regulatory Framework and the Overarching Properties; 2023 IEEE/AIAA 42nd Digital Avionics Systems Conference (DASC), 1-8, 2023
  - W. Zaeske, S. Friedrich, T. Schubert, U. Durak: WebAssembly in Avionics: Decoupling Software from Hardware; 2023 IEEE/AIAA 42nd Digital Avionics Systems Conference (DASC), 1-10, 2023
  - B. Lukić, A. Ahlbrecht, S. Friedrich, U. Durak: State-of-the-Art Technologies for Integrated Modular Avionics and the Way Ahead; 2023 IEEE/AIAA 42nd Digital Avionics Systems Conference (DASC), 1-10, 2023
  - F. Siddiqui, A. Ahlbrecht, R. Khan, S.Y. Tasdemir, H. Hui, B. Sonigara, S. Sezer, K. McLaughlin, W. Zaeske, U. Durak: Cybersecurity Engineering: Bridging the Security Gaps in Avionics Architectures and DO-326A/ED-202A; 2023 IEEE/AIAA 42nd Digital Avionics Systems Conference (DASC), 1-8, 2023
  - F. Schade, T. Dörr, A. Ahlbrecht, V. Janson, U. Durak, J. Becker: Automatic Deployment of Embedded Real-time Software Systems to Hypervisor-managed Platforms; 2023 26th Euromicro Conference on Digital System Design (DSD), 436-443, 2023
  - S. Friedrich, E. Engler, T. Schubert, W.M.M. Zaeske, U. Durak: Assuring apex with a versatile rust apiembedded world conference 2023, 298-305, 2023
  - T. Ören, U. Durak, E.H. Page, A. Tolk, S.Y. Diallo: Simulation as experience to enhance three types of skillsBody of knowledge for modeling and simulation: a handbook by the society for modeling and simulation international, 2023
  - P. Fishwick, S.Y. Diallo, U. Durak, B. Hou, B.H. Li, C. Su, Y. Wang, L. Zhang, X. Xie, L. Zhou, B.P. Zeigler, T. Pawletta, H. Folkerts, S. Mittal: Core Research Areas; Body of knowledge for modeling and simulation: a handbook by the society for modeling and simulation international, 2023
  - K. Dmitriev, F. Kaakai, M. Ibrahim, U. Durak, B. Potter, F. Holzapfel: Tool Qualification Aspects in ML-Based Airborne Systems Development; Gesellschaft für Informatik eV, 2023
  - W.M.M. Zaeske, C.A. Brust, A. Lund, U. Durak: Towards Enabling Level 3A AI in Avionic Platforms; Software Engineering 2023 Workshops, 189-207, 2023
  - Rebischke, W. Zaeske, U. Durak: From the Cloud to the Clouds: Rethinking Integrated Modular Avionics with Cloud-Native Technologies; AIAA SCITECH 2023 Forum, 1122, 2023
  - M. Ibrahim, U. Durak, O. Oey, T. Stripf: Chasing the rainbow: Streamlined tool qualification; AIAA SCITECH 2023 Forum, 1128, 2023
  - S. Friedrich, W. Zaeske, P. Nöldeke, U. Durak: Symmetric Multiprocessing for L4Re on ARM Architecture using RUST; AIAA SCITECH 2023 Forum, 1121, 2023
  - Ö. Küçükkör, T.H. Karakoç, U. Durak: Comparison of MPPT Algorithms Under Different Environmental Conditions for Solar Powered High Altitude Platforms; AIAA SCITECH 2023 Forum, 2132, 2023
  - S. Gupta, U. Durak: Operational Domain Metamodel for Testing AI Systems in Aviation; AIAA SCITECH 2023 Forum, 2589, 2023
  - B. Cinoglu, Ö. Küçükkör, T.H. Karakoç, U. Durak: Analyzing the Effects of Different MPPT Algorithms on Lithium-Ion Battery Degradation; AIAA SCITECH 2023 Forum, 1592, 2023
  - N. Scariachan, M. Goetz, J. Kurz, U. Durak: ARINC 661 Based User Interface Design for a Sustainable Aviation Application on an Electronic Flight Bag; AIAA SciTech 2023 Forum, 2711, 2023
  - J. Sprockhoff, B. Lukic, V. Janson, A. Ahlbrecht, U. Durak, S. Gupta, T. Krueger: Model-Based Systems Engineering for AI-Based Systems; AIAA SCITECH 2023 Forum, 2587, 2023
  - H. Folkerts, T. Pawletta, U. Durak: An Extension for the Specification and Automated Selection of System Variants Based on the System Entity Structure Using a Problem from Process Industry.Simul. Notes Eur. 33 (1), 17-25, 2023
- Prof. Dr. Xiaoming Fu**
- X. Yue, S. Yang, L. Zhu, S. Trajanovski, F. Li, X. Fu: Exploiting Wide-Area Resource Elasticity With Fine-Grained Orchestration for Serverless Analytics; IEEE/ACM Transactions on Networking, 2024
  - J. Ma, S. Xu, Y. Liu, X. Fu: CH-Mits: A Cross-Modal Dataset for User Sentiment Analysis on Chinese Social Media; Proceedings of the 33rd ACM International Conference on Information and Knowledge Management, 2024
  - B. Hou, S. Yang, F. Li, L. Zhu, L. Jiao, X. Chen,

- X. Fu: Gamora: Learning-Based Buffer-Aware Preloading for Adaptive Short Video StreamingIEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems, 2024
- B. Hou, S. Yang, F. Li, L. Zhu, X. Chen, Y. Wang, X. Fu: NOVA: Neural-Optimized Viewport Adaptive 360-Degree Video Streaming at the EdgeIEEE Transactions on Services Computing, 2024
  - X. Wei, T. Yuan, J. Yuan, X. Fu: Learning to Communicate Strategically for Efficient Collective IntelligenceProceedings of the 2024 SIGCOMM Workshop on Networks for AI Computing, 4-6, 2024
  - W. Yang, W. Du, B. Zhao, T. Yuan, Y. Ren, X. Zhou, Q. Wu, X. Fu: Deadline-oriented Flow Control for Real-time UHD Videos in 5G Edge Networks2024 33rd International Conference on Computer Communications and Networks (ICCCN), 2024
  - K. Li, A. Noor, W. Ni, E. Tovar, X. Fu, O.B. Akan: Poisoning Federated Learning with Graph Neural Networks in Internet of Drone-IEEE International Conference on Computer Communications and Networks (ICCCN 2024), 2024
  - N. He, S. Yang, F. Li, L. Zhu, L. Sun, X. Chen, X. Fu: Incentive Mechanism for Resource Trading in Video Analytic Services Using Reinforcement LearningIEEE Transactions on Services Computing, 2024
  - X. Gao, J. Luo, H. Chen, Y. Zhen, J. Zhang, X. Fu: Alleviating educational inequality in math with the aid of online shadow education—the impact of equal access and equal quality mechanismsEducation and Information Technologies 29 (9), 10571-10593, 2024
  - X. Yue, S. Yang, L. Zhu, S. Trajanovski, X. Fu: Demeter: Fine-grained Function Orchestration for Geo-distributed Serverless AnalyticsIEEE INFOCOM 2024-IEEE Conference on Computer Communications, 2498-2507, 2024
  - L. Sun, W. Wang, T. Yuan, L. Mi, H. Dai, Y. Liu, X. Fu: BiSwift: Bandwidth orchestrator for multi-stream video analytics on edgeIEEE INFOCOM 2024-IEEE Conference on Computer Communications, 1181-1190, 2024
  - X. Yang, W. Wu, S. Feng, M. Wang, D. Wang, Y. Li, Q. Sun, Y. Zhang, X. Fu, S. Poria: MM-InstructEval: Zero-Shot Evaluation of (Multimodal) Large Language Models on Multimodal Reasoning TasksarXiv preprint arXiv:2405.07229, 2024
  - L. Mi, T. Yuan, W. Wang, H. Dai, L. Sun, J. Zheng, G. Chen, X. Fu: Accelerated Neural Enhancement for Video Analytics With Video Quality AdaptationIEEE/ACM Transactions on Networking, 2024
  - L. Wang, W. Wang, H. Dai, Y. Qu, J. Zheng, R. Gu, G. Chen, X. Fu: Joint Deployment of Truck-drone Systems for Camera-based Object MonitoringIEEE Transactions on Mobile Computing, 2024
  - K. Xiao, S. Yang, F. Li, L. Zhu, X. Chen, X. Fu: Making serverless not so cold in edge clouds: A cost-effective online approachIEEE Transactions on Mobile Computing, 2024
  - E. Dong, P. Gao, Y. Yang, M. Xu, X. Fu, J. Yang: SmartSBD: Smart shared bottleneck detection for efficient multipath congestion control over heterogeneous networksComputer Networks 237, 110047, 2023
  - T. Yuan, H.M. Chung, X. Fu: PP-MARL: Efficient Privacy-Preserving Multi-agent Reinforcement Learning for Cooperative Intelligence in CommunicationsIEEE Network, 2023
  - W. Yang, W. Du, B. Zhao, Y. Ren, X. Zhou, X. Fu: Poster: Traffic Scheduler for Cloud VR Applications in Edge Networks2023 IEEE 31st International Conference on Network Protocols (ICNP), 1-2, 2023
  - Z. Li, Y. Huang, X. Fu: EVA: A Distributed Optimization Architecture for Efficient Video Analytics for Smart CitiesProceedings of the 18th Workshop on Mobility in the Evolving Internet Architecture, 2023
  - T. Yuan, H.M. Chung, J. Yuan, X. Fu: DACOM: Learning delay-aware communication for multi-agent reinforcement learningProceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2023
  - Y. Yuan, W. Wang, Y. Wang, S.S. Adhatarao, B. Ren, K. Zheng, X. Fu: Joint optimization of qoe and fairness for adaptive video streaming in heterogeneous mobile environmentsIEEE/ACM Transactions on Networking 32 (1), 50-64, 2023
  - T. Yuan, L. Mi, W. Wang, H. Dai, X. Fu: AccDecoder: Accelerated decoding for neural-enhanced video analyticsIEEE INFOCOM 2023-IEEE Conference on Computer Communications, 1-10, 2023

- B. Hou, S. Yang, F.A. Kuipers, L. Jiao, X. Fu: Eavs: Edge-assisted adaptive video streaming with fine-grained serverless pipelines; IEEE INFOCOM 2023-IEEE Conference on Computer Communications, 1-10, 2023
  - Z. Zhou, D. Niyato, Z. Xiong, X. Gong, W. Saad, X. Fu: Guest Editorial The Nexus Between Edge Computing and AI for 6G Networks; IEEE Transactions on Network Science and Engineering 10 (3), 1186-1189, 2023
  - S. Xu, J. Xu, B. Li, X. Fu: Predicting Where You Visit in a Surrounding City: A Mobility Knowledge Transfer Framework Based on Cross-City Travelers; International Conference on Database Systems for Advanced Applications, 334-350, 2023
  - S. Ding, X. Luo, J. Wang, X. Fu: Gnn-geo: A graph neural network-based fine-grained ip geolocation framework; IEEE Transactions on Network Science and Engineering 10 (6), 3543-3560, 2023
  - F. Wölk, T. Yuan, K. Kis-Katos, X. Fu: A temporal-spatial analysis on the socioeconomic development of rural villages in Thailand and Vietnam based on satellite image data; Computer Communications 203, 146-162, 2023
  - Y. Zhang, Q. Gong, Y. Chen, Y. Xiao, X. Wang, P. Hui, X. Fu: A human mobility dataset collected via LBS; LabData in Brief 46, 108898, 2023
  - N. He, S. Yang, F. Li, S. Trajanovski, L. Zhu, Y. Wang, X. Fu: Leveraging deep reinforcement learning with attention mechanism for virtual network function placement and routing; IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems 34 (4), 1186-1201, 2023
  - J. Zhang, Y. Zhang, E. Dong, Y. Zhang, S. Ren, Z. Meng, M. Xu, X. Li, Z. Hou, Z. Yang, X. Fu: Bridging the Gap between {QoE} and {QoS} in Congestion Control: A Large-scale Mobile Web Service Perspective; 2023 USENIX Annual Technical Conference (USENIX ATC 23), 553-569, 2023
  - B. Jenei, R. Manasipov, L. Ganzer: Inverse Modelling of Multiphase Fluid-Flow Experiments for Improved Interpretation of Saturation Functions—Application in CO<sub>2</sub>-Storage; ECMOR 2024 2024 (1), 1-13, 2024
  - Z. Blbas, B. Hagemann, J. Michelsen, L. Ganzer: Measuring Diffusion Coefficient of Hydrogen in Underground Gas Storage; SPE Europe featured at EAGE Conference and Exhibition?, D031S017R002, 2024
  - S. Hogeweg, B. Hagemann, V. Bobrov, L. Ganzer: Development and calibration of a bio-geo-reactive transport model for UHS; Frontiers in Energy Research 12, 1385273, 2024
  - D. Zhou, K. Li, H. Gao, A. Tatomir, M. Sauter, L. Ganzer: Techno-economic assessment of high-temperature aquifer thermal energy storage system, insights from a study case in Burgwedel, Germany; Insights from a Study Case in Burgwedel, Germany, 2024
  - D. Zhou, K. Li, H. Gao, L. Ganzer, M. Sauter, P. Jaeger, A. Tatomir: CO<sub>2</sub> high-temperature aquifer thermal energy storage (CO<sub>2</sub> HT-ATES) feasible study: Combining the heating storage and CCUS; Gas Science and Engineering 122, 205224, 2024
  - B. Jenei, M. Al-Eryani, R. Manasipov, L. Ganzer: Experimental determination of different saturation functions for simulation of underground geological CO<sub>2</sub> storage-SCA2024-1057. The 37 th International Symposium of the Society of Core Analysts. Fredericton, New Brunswick, Canada. August 26–30., 2024
  - S. Hogeweg, J. Michelsen, B. Hagemann, L. Ganzer: Empirical and numerical modelling of gas-gas diffusion for binary hydrogen-methane systems at underground gas storage conditions; Transport in Porous Media 151 (1), 213-232, 2024
  - L. Cao, H. Wang, L. Jiang, B. Zhang, L. Ganzer, Y. Li, X. Wang, K. Li, S. Pang, H. Xiao: Modelling Transient Production Forecasting of Horizontal Wells in Abnormal High-Pressure Tight Gas Reservoirs; SPE Asia Pacific Unconventional Resources Conference and Exhibition, 2023
  - L. Cao, H. Wang, L. Jiang, B. Zhang, L. Ganzer, Y. Xie, J. Luo, X. Wang: A composite framework model for transient pressure dynamics in tight gas reservoirs incorporating stress
- Prof. Dr. Leonhard Ganzer**
- S. Pang, B. Hagemann, L. Ganzer, K. Li: Experimental Evaluations of Capillary Entry Pressure for Caprock Sealing Capacity in Carbon Capture and Storage; Fifth EAGE Global Energy Transition Conference & Exhibition (GET 2024), 2024

- sensitivity *Energies* 16 (20), 7175, 2023
- N. Langanke, T. Leblanc, A. Fadili, R.E. Hincapie, L. Ganzer: Flow of Viscoelastic Polymer Solutions in Porous Media: Influence of Molecular Weight and Dispersity *SPE Europe/EC-Europe Energy Conference* featured at the 84th EAGE Annual Conference & Exhibition, 2023
  - S.S. Abdelkareem, A.A. Grimstad, P.E. Bergmo, C.L. Gaol, A.J. Ghahfarokhi, A.E. Lothe, C. Ringstad, L. Ganzer: Dynamic CO<sub>2</sub> Storage Capacity for a Fault-bounded Structure in the Trøndelag Platform, Offshore Mid-Norway *SPE Europe/EC-Europe Energy Conference* featured at the 84th EAGE Annual Conference & Exhibition, 2023
  - S. Al Ismaili, C. Gaol, N. Langanke, L. Ganzer: Utilization of Microfluidics Technology for an Efficient Polymer Screening Process in Enhanced Oil Recovery (EOR) Applications *SPE Europe/EC-Europe Energy Conference* featured at the 84th EAGE Annual Conference & Exhibition, 2023
  - K. Li, L. Ganzer, P. Jaeger, S. Pang, X. Wang: Numerical Investigation of High Temperature Aquifer Energy Storage (HT-ATES) in Northern Germany *84th EAGE Annual Conference & Exhibition 2023* (1), 1-5, 2023
  - G. Strobel, B. Hagemann, C.T. Lüddecke, L. Ganzer: Coupled model for microbial growth and phase mass transfer in pressurized batch reactors in the context of underground hydrogen storage *Frontiers in Microbiology* 14, 1150102, 2023
  - B. Jenei, R. Manasipov, H. Almuallim, L. Ganzer: Advantages of Automated Rock Type Adjusting History Matching Workflow Driven by Adjoint Approach with Sensitivity Analysis of Different Model Parameters and Saturation Functions *SPE Reservoir Characterisation and Simulation Conference and Exhibition*, 2023
  - G. Strobel, J. Zawallich, B. Hagemann, L. Ganzer, O. Ippisch: Experimental and numerical investigation of microbial growth in two-phase saturated porous media at the pore-scale *Sustainable Energy & Fuels* 7 (16), 3939-3948, 2023
- Prof. Dr. Jens Grabowski**
- Z. Ahmed, E. Schwass, S. Herbold, F. Trautsch, J. Grabowski: A new perspective on the competent programmer hypothesis through the reproduction of real faults with repeated mutations *Software Testing, Verification and Reliability* 34 (3), e1874, 2024
  - J. Erbel, J. Grabowski: Scientific workflow execution in the cloud using a dynamic runtime model *Software and Systems Modeling* 23 (1), 163-193, 2024
  - F. Zalila, F. Korte, J. Erbel, S. Challita, J. Grabowski, P. Merle: MoDMA/CAO: a model-driven framework for the design, validation and configuration management of cloud applications based on OCCISoftware and Systems Modeling 22 (3), 871-889, 2023
  - Trautsch, S. Herbold, J. Grabowski: Are automated static analysis tools worth it? An investigation into relative warning density and external software quality on the example of Apache open source projects *Empirical Software Engineering* 28 (3), 66, 2023
  - Trautsch, J. Erbel, S. Herbold, J. Grabowski: What really changes when developers intend to improve their source code: a commit-level study of static metric value and static analysis warning changes *Empirical Software Engineering* 28 (2), 30, 2023
- Prof. Dr. Thorsten Grosch**
- R. Kern, F. Brüll, T. Grosch: ReSTIR FG: Real-Time Reservoir Resampled Photon Final Gathering *The Eurographics Association*, 2024
  - R. Kern, F. Brüll, T. Grosch: Real-Time Pixel-Perfect Hard Shadows with Leak Tracing *The Eurographics Association*, 2024
  - F. Brüll, R. Kern, T. Grosch: Ray Traced Stochastic Depth Map for Ambient Occlusion *The Eurographics Association*, 2024
  - M. Guthe, T. Grosch: VMV 2023: Frontmatter *The Eurographics Association*, 2023
  - R. Kern, F. Brüll, T. Grosch: Accelerating Photon Mapping for Hardware-Based Ray Tracing *Journal of Computer Graphics Techniques Vol 12* (1), 2023
- Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann**
- J.A. Tröger, C. Steinweller, S. Hartmann: Identification, uncertainty quantification and validation of orthotropic material properties for additively manufactured polymers *Mechanics of Materials* 197, 105100, 2024
  - J.A. Tröger, L. Müller-Lohse, S. Hartmann: Coupled digital image correlation and infrared

- thermography applied to curved specimens; 40th Danubia-Adria Symposium on Advances in Experimental Mechanics, Gdansk, Poland, 24.-27. September 2024, 2024
- U. Römer, S. Hartmann, J.A. Tröger, D. Anton, H. Wessels, M. Flaschel, L. De. Lorenzis: Reduced and all-at-once approaches for model calibration and discovery in computational solid mechanics; *Applied Mechanics Reviews*, 1-51, 2024
  - L. Müller-Lohse, S. Hartmann, A. Richter, C. Rembe: Strain determination using a global interpolation concept based on coherence scanning interferometry measurements; *Experimental Mechanics*, 2024
  - J.A. Tröger, R. Sartorti, W. Garhuom, A. Düster, S. Hartmann: Full-field validation of finite cell method computations on wire arc additive manufactured components; *Archive of Applied Mechanics*, 1-19, 2024
  - D. Anton, J.A. Tröger, H. Wessels, U. Römer, A. Henkes, S. Hartmann: Deterministic and statistical calibration of constitutive models from full-field data with parametric physics-informed neural networks; *arXiv preprint arXiv:2405.18311*, 2024
  - J.A. Tröger, S. Hartmann, K. Treutler, A. Potschka, V. Wesling: Simulation-based process parameter optimization for wire arc additive manufacturing; *Progress in Additive Manufacturing*, 1-14, 2024
  - M.A. Martinez. Page, S. Hartmann: Modeling and simulation of the aging behavior of a zinc die casting alloy; *Applied Mechanics* 5, 646-695, 2024
  - J.A. Tröger, U. Römer, S. Hartmann: Comparing frequentist and Bayesian uncertainty quantification in two-step constitutive model calibration; *PAMM*, e202400031, 2024
  - S. Hartmann, J.A. Tröger, U. Römer, H. Wessels: Parameter identification using finite elements and full-field data in the all-at-once context; *PAMM*, e202400035, 2024
  - H. Eivazi, M. Alikhani, J.A. Tröger, S. Wittek, S. Hartmann, A. Rausch: Enhancing multiscale simulations with constitutive relations-aware deep operator networks; *PAMM*, e202400123, 2024
  - J.A. Tröger, H. Eivazi, S. Hartmann, S. Wittek, A. Rausch: Efficient integration of deep neural networks in sequential multiscale simulations- *PAMM* 23 (4), e202300052, 2023
  - S. Hartmann, P.K. Dileep, M. Grafenhorst: A time-adaptive FE<sup>2</sup>-approach within the method of vertical lines; *Computers & Mathematics with Applications* 151, 222-243, 2023
  - J.A. Tröger, S. Hartmann, K. Treutler, A. Potschka, V. Wesling: Resource-efficient welding processes through numerical simulation and optimization; *Clausthal Conference on Circular Economy, Clausthal-Zellerfeld*, 23.-24. November 2023, 2023
  - L. Müller-Lohse, J.A. Tröger, S. Hartmann: Coupled strain and temperature gradient analysis in curved surfaces; *PAMM* 23 (3), e202300041, 2023
  - J.A. Tröger, S. Hartmann: Thermal finite element simulations for extrusion-based additive manufacturing processes; *Tagungsband 5. Niedersächsisches Symposium Materialtechnik: 23. bis 24. Februar 2023*, 2023
  - H. Eivazi, J.A. Tröger, S. Wittek, S. Hartmann, A. Rausch: FE<sup>2</sup> Computations With Deep Neural Networks: Algorithmic Structure, Data Generation, and Implementation; *Mathematical and Computational Applications* 28, 1-37, 2023
  - L. Müller-Lohse, J.A. Tröger, S. Hartmann: Application of radial basis functions in strain analysis of digital image correlation; *PAMM* 22 (1), e202200140, 2023
  - P.K. Dileep, S. Hartmann, M. Javadi, H. Palkowski, T. Fischer, G. Ziegmann: Uncertainty estimation using Gaussian error propagation in metal forming process simulation; *PAMM* 22 (1), e202200073, 2023
  - J.A. Tröger, S. Hartmann: Parameter identification and uncertainty quantification of the thermal conductivity tensor for transversely isotropic composite materials; *PAMM* 22 (1), e202200026, 2023
  - S. Hartmann, L. Müller-Lohse, J.A. Tröger: Temperature gradient determination with thermography and image correlation in curved surfaces with application to additively manufactured components; *Experimental Mechanics* 63 (1), 43-61, 2023
- Prof. Dr. Olaf Ippisch**
- J. Zawallich, O. Ippisch: Well-posedness for a system of diffusion–reaction equations with noncoercive diffusion; *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 47 (7), 6539-6550,

- 2024
- S. Schlüter, M. Lucas, B. Grosz, O. Ippisch, J. Zawallich, H. He, R. Dechow, D. Kraus, S. Blagodatsky, M. Senbayram, A. Kravchenko, H.-J. Vogel, R. Well: The anaerobic soil volume as a controlling factor of denitrification: a review *Biology and Fertility of Soils*, 1-23, 2024
  - S. Schlüter, M. Lucas, B. Grosz, O. Ippisch, J. Zawallich, H. He, R. Dechow, D. Kraus, S. Blagodatsky, M. Senbayram, A. Kravchenko, H.-J. Vogel, R. Well: The anaerobic soil volume as a controlling factor of denitrification *EGU24*, 2024
  - G. Strobel, J. Zawallich, B. Hagemann, L. Ganzer, O. Ippisch: Experimental and numerical investigation of microbial growth in two-phase saturated porous media at the pore-scale *Sustainable Energy & Fuels* 7 (16), 3939-3948, 2023
- Prof. Dr. Diethelm Johannsmann**
- D. Johannsmann, I. Reviakine: Quartz crystal microbalance with dissipation monitoring for studying soft matter at interfaces *Nature Reviews Methods Primers* 4 (1), 63, 2024
  - C. Leppin, A. Langhoff, D. Johannsmann: Square Wave Electrogravimetry Monitors Transient Submonolayer Adsorption of Redox-Active Molecules with a Precision of Less Than 1% of a Monolayer *Electrochemical Society Meeting Abstracts* 245, 2405-2405, 2024
  - Langhoff, C. Leppin, D. Johannsmann: Kinetics of Charge Reversal in the Double Layer Studied with an Electrochemical Quartz Crystal Microbalance (EQCM-D) *Electrochemical Society Meeting Abstracts* 245, 2466-2466, 2024
  - Leppin, A. Langhoff, D. Johannsmann: Cyclic Electrogravimetry Reveals Details of Copper Electrodeposition in the Presence of Additives *Electrochemical Society Meeting Abstracts* 245, 2481-2481, 2024
  - A.M. Leshansky, B.Y Rubinstein, I. Fouxon, D. Johannsmann, M. Sadowska, Z. Adamczyk: Quartz Crystal Microbalance Frequency Response to Discrete Adsorbates in Liquids *Analytical Chemistry*, 2024
  - V. Vanoppen, D. Johannsmann, X. Hou, J. Sjölund, P. Broqvist, E.J. Berg: Exploring Metal Electroplating for Energy Storage by Quartz Crystal Microbalance: A Review *Advanced Sensor Research*, 2400025, 2024
  - M. Biermann, C. Leppin, A. Langhoff, T. Ziemer, C. Rembe, D. Johannsmann: An electrochemical quartz crystal microbalance (EQCM) based on microelectrode arrays allows to distinguish between adsorption and electrodeposition *Analyst* 149 (7), 2138-2146, 2024
  - Johannsmann, A. Langhoff, C. Leppin: The QCM combined with voltage modulation at the front electrode: Applications in electrochemistry and beyond *Elsevier*, 2024
  - Johannsmann, C. Leppin, A. Langhoff: Stiffness of Contacts between Adsorbed Particles and the Surface of a QCM-D Inferred from the Adsorption Kinetics and a Frequency-Domain Lattice Boltzmann Simulation *Advanced Theory and Simulations* 6 (11), 2300190, 2023
  - Johannsmann, J. Petri, C. Leppin, A. Langhoff, H. Ibrahim: Particle fouling at hot reactor walls monitored In situ with a QCM-D and modeled with the frequency-domain lattice Boltzmann method *Results in Physics* 45, 106219, 2023
  - D. Johannsmann, A. Langhoff, C. Leppin, I. Reviakine, A.M.C. Maan: Effect of Noise on Determining Ultrathin-Film Parameters from QCM-D Data with the Viscoelastic Model *Sensors* 23 (3), 1348, 2023
  - Rott, C. Leppin, T. Diederichs, P. Garidel, D. Johannsmann: Protein-protein interactions in solutions of monoclonal antibodies probed by the dependence of the high-frequency viscosity on temperature and concentration *Analyst* 148 (8), 1887-1897, 2023
- Prof. Dr. Pascal Klein**
- S.Z. Lahme, J.O. Cirkel, L. Hahn, J. Hofmann, J. Neuhaus, S. Schneider, P. Klein: Enrollment to exams: Perceived stress dynamics among first-year physics students *Physical Review Physics Education Research* 20 (2), 020127, 2024
  - Gößling, P. Klein: Mit Videoanalyse Repräsentationskompetenz fördern: Untersuchungen der Bewegungen von Luftkissenfußbällen *Unterricht Physik* 2024 (203), 34-37, 2024
  - M. Remmele, E. Wieland, L. Hahn, P. Klein, P. Lindemann-Matthies: Flower or leaf characteristics, coloured or black and white illustrations—what helps student teachers to identify plants? *Journal of Biological Education*, 1-16, 2024
  - S.Z. Lahme, P. Pirinen, L. Rončević, A. Lehtinen, A. Sušac, A. Müller, P. Klein: A framework for

- designing experimental tasks in contemporary physics lab courses; *Journal of Physics: Conference Series* 2750 (1), 012016, 2024
- M. Rusek, P. Klein, M. Schindler: Eye tracking for STEM education research: new perspectives *Frontiers in Education* 9, 1389962, 2024
  - Weidmann, L. Hahn, P. Klein, T. Waitz: Concept of a Public Outreach Project on PCET Reactions; *NEW PERSPECTIVES IN SCIENCE EDUCATION* 13th Edition, 317, 2024
  - L. Hahn, S.A. Blaue, P. Klein: A research-informed graphical tool to visually approach Gauss' and Stokes' theorems in vector calculus; *European Journal of Physics* 45 (2), 025706, 2024
  - S.Z. Lahme, P. Klein, A. Müller: Smartphone-based undergraduate research projects in an introductory mechanics course; *Journal of Physics: Conference Series* 2693 (1), 012008, 2024
  - S.Z. Lahme, P. Klein, A. Lehtinen, A. Müller, P. Pirinen, L. Rončević, A. Sušac: Physics lab courses under digital transformation: A trina-tional survey among university lab instructors about the role of new digital technologies and learning objectives; *Physical Review Physics Education Research* 19 (2), 020159, 2023
  - J. Lewing, P. Klein, S. Schneider: Wirkung technischer und biologischer Kontexte auf das situationale Interesse beim Bearbeiten physikalischer Lernaufgaben zum Energiekonzept; *Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften* 29 (1), 8, 2023
  - J. Hofmann, L. Hahn, K. Jelacic, A. Sušac, P. Klein: Triangulation von Verbal-und Blickdaten: Eine Eye-Tracking-Studie; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - L. Hahn, SA Blaue, P Höhn, N. Merkert, P. Klein: Open Educational Resources für den Hochschulbereich: Anschauliche Vektoranalyse für die Studieneingangsphase; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - L. Hahn, P. Klein: Multiple Repräsentationen und Zeichenaktivitäten als Zugänge zu Vektorfeldkonzepten; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - S.Z. Lahme, M. Fipp, P. Klein, A. Müller: Offene Projektaufgaben mit Smartphone-Experimenten für die Studieneingangsphase Physik; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - S.Z. Lahme, J.O. Cirkel, L. Hahn, P. Klein, S. Schneider: Belastungsquellen in der Studieneingangsphase Physik; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - P. Pirinen, P. Klein, S.Z. Lahme, A. Lehtinen, L. Rončević, A. Susac: Exploring digital signal processing using an interactive Jupyter notebook and smartphone accelerometer data; *European journal of physics* 45 (1), 015802, 2023
  - L. Hahn, P. Klein: Clustering eye-movement data uncovers students' strategies for coordinating equations and diagrams of vector fields; *Educational Studies in Mathematics*, 1-27, 2023
  - M.N. Dahlkemper, S.Z. Lahme, P. Klein: How do physics students evaluate artificial intelligence responses on comprehension questions? A study on the perceived scientific accuracy and linguistic quality of ChatGPT; *Physical Review Physics Education Research* 19 (1), 010142, 2023
  - L. Hahn, P. Klein: Analysis of eye movements to study drawing in the context of vector fields; *Frontiers in Education* 8, 1162281, 2023
  - L. Hahn, P. Klein: The impact of multiple representations on students' understanding of vector field concepts: Implementation of simulations and sketching activities into lecture-based ... *Frontiers in Psychology* 13, 1012787, 2023
  - S.Z. Lahme, P. Klein, A. Lehtinen, A. Müller, P. Pirinen, L. Rončević, A. Sušac: Evaluating digital experimental tasks for physics laboratory courses; *PhyDid B: Didaktik der Physik: Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
- Prof. Dr. Nina Merkert**
- S. Chakrabarty, D.A. De Abreu, I.A. Alhafez, O. Fabricznaya, N. Merkert, A. Schnickmann, T. Schirmer, U.E.A. Fittschen, M. Fischlschweiger: Kinetics of  $\gamma$ -LiAlO<sub>2</sub> Formation out of Li<sub>2</sub>O-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Melt – A Molecular Dynamics-Informed Non-Equilibrium; *Thermodynamic Study Solids* 5:561, 2024
  - S. Hampel, I. A. Alhafez, A. Schnickmann, S. Wunderlich, H. Li, M. Fischlschweiger, T. Schirmer, N. Merkert, U. E. A. Fittschen. Experimental and Simulation Studies on the Mn Oxidation State Evolution of a Li<sub>2</sub>O-MnO<sub>x</sub>-CaO-SiO<sub>2</sub> Slag Analogue; *Minerals* 14(9):868, 2024.
  - M. Shaban, N. Merkert, A.C.T. van Duin, D. van Duin, A.P. Weber: Advancing DBD Plasma Chemistry: Insights into Reactive Nitrogen Species such as NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and N<sub>2</sub>O

- Optimization and Species Reactivity through; *Environmental Science & Technology* 58 (36), 16087-16099, 2024
- D. Thürmer, O.R. Deluigi, H.M. Urbassek, E.M. Bringa, N. Merkert: Atomistic Simulations of the Shock and Spall Behavior of the Refractory High-Entropy Alloy HfNbTaTiZr; *High Entropy Alloys & Materials*, 1-11, 2024
  - S. Hampel, I.A. Alhafez, T. Schirmer, N. Merkert, S. Wunderlich, A. Schnickmann, H. Li, M. Fischlschweiger, U.E.A. Fittschen: Engineering compounds for the recovery of critical elements from slags: melt characteristics of Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub>, LiAlO<sub>2</sub> and LiAl<sub>5</sub>O<sub>8</sub>ACS; *Omega*, 2024
  - U.E.A. Fittschen, S. Hampel, T. Schirmer, N. Merkert: Multimodal spectroscopy and molecular dynamic simulations to understand redox-chemistry and compound formation in pyrometallurgical slags: example of manganese oxidation state; *Applied Spectroscopy Reviews*, 1-18, 2024
  - D. Thürmer, H.T. Luu, N. Merkert: Molecular dynamics simulation of shock waves in Fe and Fe-C: Influence of system characteristics; *Journal of Applied Physics* 135 (15), 2024
  - I.A. Alhafez, O.R. Deluigi, D. Tramontina, N. Merkert, H.M. Urbassek, E.M. Bringa: Nanoindentation into a bcc high-entropy HfNbTaTiZr alloy – an atomistic study of the effect of short-range order; *Scientific Reports* 14 (1), 9112, 2024
  - S. Hampel, I.A. Alhafez, T. Schirmer, N. Merkert, S. Wunderlich, A. Schnickmann, H. Li, M. Fischlschweiger, U.E.A. Fittschen: Engineering Compounds for the Recovery of Critical Elements from Slags: Melt Characteristics of Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub>, LiAlO<sub>2</sub>, and LiAl<sub>5</sub>O<sub>8</sub>ACS; *Omega*, 2024
  - L. Hahn, S.A. Blaue, P. Höhn, N. Merkert, P. Klein: Open Educational Resources für den Hochschulbereich: Anschauliche Vektoranalysis für die Studieneingangsphase; *PhyDid B-Didaktik der Physik-Beiträge zur DPG-Frühjahrstagung*, 2023
  - Demirci, D. Steinberger, M. Stricker, N. Merkert, D. Weygand, S. Sandfeld: Statistical analysis of discrete dislocation dynamics simulations: initial structures, cross-slip and microstructure evolution; *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 31 (7), 075003, 2023
  - S. Raugel, K. Barianti, H.T. Luu, N. Merkert, F. Dencker, F. Nürnberger, H.J. Maier, M.C. Wurz: Characterization of the tribologically relevant cover layers formed on copper in oxygen and oxygen-free conditions; *Friction* 11 (8), 1505-1521, 2023
  - G.S. Dutta, D. Meiners, N. Merkert: A Study of Free-Form Shape Rationalization Using Biomimicry as Inspiration; *Polymers* 15 (11), 2466, 2023
- Prof. Dr. Jörg Müller**
- S. Schleibaum, L. Feng, S. Kraus, J.P. Müller: ADESSE: Advice Explanations in Complex Repeated Decision-Making Environments; *Proceedings of IJCAI-24: The Thirty-Third International Joint Conference on Artificial Intelligence*, 2024
  - J. Teusch, B. Neumann-Saavedra, J.P. Müller: A Reinforcement Learning Strategy for Planning Geo-Fenced Micro-Mobility Facilities; Available at SSRN 4745247, 2024
  - S. Schleibaum, J. Teusch, R. Ehlers, J.P. Müller: A systematic analysis of design choices in short-term taxi demand prediction models; *Transportation Research Procedia* 78, 554-561, 2024
  - S. Schleibaum, J.P. Müller, M. Sester: An Explainable Stacked Ensemble Model for Static Route-Free Estimation of Time of Arrival; *Journal of Advanced Transportation* 2024 (1), 9301691, 2024
  - J. Teusch, J.N. Gremmel, C. Koetsier, F.T. Johora, M. Sester, D.M. Woisetschläger, J.P. Müller: A systematic literature review on machine learning in shared mobility; *IEEE Open Journal of Intelligent Transportation Systems* 4, 870-899, 2023
  - E. Loff, S. Schleibaum, J.P. Müller, B. Säfken: Explaining taxi demand prediction models based on feature importance; *European Conference on Artificial Intelligence*, 269-284, 2023
  - Mukbil, Y. Yousif, S. Hossain, J.P. Müller: CTV-Dataset: A Shared Space Drone Dataset for Cyclist-Road User Interaction Derived from Campus Experiments; *2023 IEEE 26th International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC)*, 2023
  - Hesselmann, D. Reinhardt, J. Gertheiss, J.P. Müller: Data Privacy in Ride-Sharing Services: From an Analysis of Common Practices to Improvement of User Awareness; *Secure IT Systems: 27th Nordic Conference, NordSec 2022, Reykjavic, Iceland, November 30–December 2, 2022, Proceedings*, 2023

**Prof. Dr. Gerlind Plonka-Hoch**

- R. Razavi, G. Plonka, H. Rabbani: X-let's atom combinations for modeling and denoising of OCT images by modified morphological component analysis; *IEEE Transactions on Medical Imaging* 43(2), 760-770, 2024
- G. Plonka, D. Potts, Gabriele Steidl, M. Tasche: *Numerical Fourier Analysis*; ANHA, Birkhäuser, second edition, 2023
- R. Arian, A. Vard, R. Kafieh, G. Plonka, H. Rabbani: A new convolutional neural network based on combination of circlets and wavelets for macular OCT classification; *Scientific Reports* 13, 22582, 2023
- Z. Baharlouei, H. Rabbani, G. Plonka: Wavelet scattering transform application in classification of retinal abnormalities using OCT images; *Scientific Reports* 13, 19013, 2023
- N. Derevianko, G. Plonka, M. Petz: From ESPRIT to ESPIRA: Estimation of Signal Parameters by Iterative Rational Approximation; *IMA Journal of Numerical Analysis* 43(2), 789–827, 2023
- G. Plonka, Y. Riebe, Y. Kolomoitsev: Spline Representation and Redundancies of One-Dimensional ReLU Neural Network Models; *Analysis and Applications* 21(01), 127-163, 2023
- N. Derevianko, G. Plonka, R. Razavi: ESPRIT versus ESPIRA for reconstruction of short cosine sums and its application; *Numerical Algorithms* 92, 437-470, 2023

**Prof. Dr. Andreas Rausch**

- M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: Enhancing Clustering Performance of Failed Test Cases during HIL Simulation: A Study on Deep Auto-Encoder Structures and Hyperparameter Tuning *Applied Sciences* 14 (19), 9064, 2024
- Aslam, A. Aniculaesei, A. Buragohain, D. Bamal, A. Rausch: Runtime safety assurance of autonomous vehicles used for last-mile delivery in urban environments; *Next Chapter in Mobility: Technische und betriebswirtschaftliche Aspekte*, 2024
- O. Greulich, C. Knieke, B. Rafie, A. Rausch, M. Kuhrmann: Software Process as a Service: Towards A Software Process Ecosystem; *Proceedings of the 2024 International Conference on Software and Systems Processes*, 2024
- M.F. Ali, D. Briechle, M. Briechle-Mathiszig, T. Geger, A. Rausch: Party Without a Cake? Onto an Inter-modal HitchHike Logistics Platform for Passengers and Products Transportation; *European Conference on Software Architecture*, 100-114, 2024
- Aslam, A. Aniculaesei, A. Buragohain, M. Zhang, D. Bamal, A. Rausch: Runtime Safety Assurance of Autonomous Last-Mile Delivery Vehicles in Urban-like Environment; *SAE Technical Paper*, 2024
- Amyan, M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: Automating Fault Test Cases Generation and Execution for Automotive Safety Validation via NLP and HIL Simulation; *Sensors* 24 (10), 3145, 2024
- V Seibert, A. Rausch, S. Wittek: Betty's (Re) Search Engine: A client-based search engine for research software stored in repositories. *grid* 1 (2), 2024
- Schindler, A. Rausch: Formal Software Architecture Rule Learning: A Comparative Investigation between Large Language Models and Inductive Techniques; *Electronics* 13 (5), 816, 2024
- F. El Morer, S. Wittek, A. Rausch: Assessment of the suitability of degradation models for the planning of CCTV inspections of sewer pipes; *Urban Water Journal* 21 (2), 190-203, 2024
- M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: Representative Real-Time Dataset Generation Based on Automated Fault Injection and HIL Simulation for ML-Assisted Validation of Automotive Software Systems; *Electronics* 13 (2), 437, 2024
- M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: A Virtual Testing Framework for Real-Time Validation of Automotive Software Systems Based on Hardware in the Loop and Fault Injection; *Sensors* 24 (12), 3733, 2024
- H. Eivazi, M. Alikhani, J.A. Tröger, S. Wittek, S. Hartmann, A. Rausch: Enhancing multiscale simulations with constitutive relations-aware deep operator networks; *PAMM*, e202400123, 2024
- S. Schwendemann, A. Rausch, A. Sikora: A Hybrid Predictive Maintenance Solution for Fault Classification and Remaining Useful Life Estimation of Bearings Using Low-Cost Sensor Hardware; *Procedia Computer Science* 232, 128-138, 2024
- Aniculaesei, C. Schindler, C. Knieke, A. Rausch, D. Rohne, A. Richter: A Method for ODD Specification and Verification with

- Application for Industrial Automated Driving Systems; 2023 International Conference on Computational Science and Computational Intelligence (CSCI), 2023
- M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: Intelligent Identification of Simultaneous Faults of Automotive Software Systems under Noisy and Imbalanced Data based on Ensemble LSTM and Random Forest; IEEE Access, 2023
  - J.A. Tröger, H. Eivazi, S. Hartmann, S. Wittek, A. Rausch: Efficient integration of deep neural networks in sequential multiscale simulations; PAMM 23 (4), e202300052, 2023
  - H. Klus, C. Knieke, A. Rausch, S. Wittek: Software Engineering Meets Artificial Intelligence; Electronic Communications of the EASST 82, 2023
  - S. Schwendemann, A. Rausch, A. Sikora: Detailed Study of Different Degradation Stages of Bearings in a Practical Reference Dataset; 2023 IEEE 28th International Conference on Emerging Technologies and Factory Automation (ETFA), 2023
  - M. Urban, A. Aniculaesei, A. Rausch: AI-Driven Runtime Monitoring of Energy Consumption in Autonomous Delivery Drones; Intelligent Systems Conference, 267-283, 2023
  - M. Gharbi, A. Koschel, A. Rausch, G. Starke: Basiswissen für Softwarearchitekten: Aus- und Weiterbildung nach iSAQB-Standard zum Certified Professional for Software Architecture–Foundation Levelpunkt. verlag, 2023
  - Alhaji, M. Prilla, A. Rausch: Robot Collaboration and Model Reliance Based on Its Trust in Human-Robot Interaction; IFIP Conference on Human-Computer Interaction, 17-39, 2023
  - J. Krohn, V. Ustohalova, F. Krob, S. Chaudry, A. Rausch, S. Wittek, D. Bratzel: Anwendung der künstlichen Intelligenz (KI) für die Standortauswahl von tiefen geologischen Endlagern (AKI): Vorhaben: 4721E03210; Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE), 2023
  - H. Eivazi, J.A. Tröger, S. Wittek, S. Hartmann, A. Rausch: FE2 Computations with Deep Neural Networks: Algorithmic Structure, Data Generation, and Implementation Mathematical and Computational Applications 28 (4), 91, 2023
  - M. Abboush, C. Knieke, A. Rausch: GRU-based denoising autoencoder for detection and clustering of unknown single and concurrent faults during system integration testing of automotive software systems; Sensors 23 (14), 6606, 2023
  - N Habib, Y. Cho, A. Buragohain, A. Rausch: Towards exploring adversarial learning for anomaly detection in complex driving scenes; International Conference on Deep Learning Theory and Applications, 35-55, 2023
  - Aniculaesei, I. Aslam, D. Bamal, F. Hensch, A. Vorwald, M. Zhang, A. Rausch: Connected dependability cage approach for safe automated driving; International Stuttgart Symposium, 3-21, 2023
  - L. Everding, I. Aslam, C. Raulf, O. Aviv Yarom, J. Fritz, S. Jacobitz, T. Hegerhorst, C. Pethe, T. Şahin, J. Iatropoulos, T. Vietor, A. Rausch, X. Liu-Henke, R. Henze: Dynamically Configurable Autonomous Vehicles for Urban Cargo Transportation; Towards the New Normal in Mobility: Technische und betriebswirtschaftliche Aspekte, 2023
  - Knieke, E. Nyakam, A. Rausch, C. Schindler, C. Bartelt, N. Wilken, N. Ziebur: Emergent Software Service Platform and its Application in a Smart Mobility Setting; 15th International Conference on Adaptive and Self-Adaptive Systems and Applications, 2023
  - C Lemardelé, A. Baldó, A. Aniculaesei, A. Rausch, M. Conill, L. Everding, T. Vietor, T. Hegerhorst, R. Henze, L. Mátyus, L. Pagès, V. Rocag, A. Sanfeliu, A. Santamaria-Navarro, I. Tóhádi: The LogiSmile Project-Piloting Autonomous Vehicles for Last-Mile Logistics in European cities; Transportation Research Procedia 71, 180-187, 2023
  - Bratzel, S.H.A. Wittek, A. Rausch: A Flood Prediction Benchmark Focused on Unknown Extreme Events. SIMULTECH, 267-278, 2023
  - M. Schindler, C. Schindler, A. Rausch: A Formalism for Explaining Concepts through Examples based on a Source Code Abstraction; International Journal on Advances in Software Volume 16, Number 1 & 2, 2023, 2023
- Prof. Dr.-Ing. Andreas Reinhardt**
- M. Bouchur, A. Reinhardt: NILMInspector: An Interactive Tool for Data Visualization and Manipulation in Load Disaggregation Proceedings of the 11th ACM International Conference on Systems for Energy-Efficient Buildings, Cities, and Transportation, 2024

- D. Szafranski, S. Ulrich, R. Brederbeck, A. Reinhardt: LoRaWAN Coverage Assessment Using Optimal Bicycle Route Planning; 2024 IEEE 49th Conference on Local Computer Networks (LCN), 1-4, 2024
  - A. Reinhardt, F. Jöst: Multimedia Communications Laboratories: Experimental Research Facilities at KOM; From Multimedia Communications to the Future Internet: Essays Dedicated to Ralf Steinmetz on the Occasion of His Retirement, 2024
  - L.H. Acosta, A. Reinhardt, T. Müller, D. Reinhardt: Beyond Wake Words: Advancing Smart Speaker Protection with Continuous Authentication and Local Profiles; 2024 33rd International Conference on Computer Communications and Networks (ICCCN), 2024
  - Nikulins, K. Sudars, E. Edelmers, I. Namatevs, K. Ozols, V. Komasilovs, A. Zacepins, A. Kvišis, A. Reinhardt: Deep Learning for Wind and Solar Energy Forecasting in Hydrogen Production; Energies 17 (5), 1053, 2024
  - R. Jurdak, A. Reinhardt: Message from the Technical Program Committee; Proceedings of the 2024 IEEE 25th International Symposium on a World of Wireless, Mobile and Multimedia Networks (WoWMoM 2024), 2024
  - D. Szafranski, A. Reinhardt: ELORA: Even Longer Range Sensor Networking Through Modulated Concurrent LoRa Transmissions; 2023 IEEE 24th International Symposium on a World of Wireless, Mobile and Multimedia Networks (WoWMoM), 2023
  - D. Szafranski, A. Reinhardt: Investigating the Effects of Precipitation on the Reliability of Lossy LoRaWAN Links; 20. GI/ITG KuVS Fachgespräch Sensornetze (FGSN 2023), 19, 2023
- Prof. Dr.-Ing. Christian Rembe**
- L. Müller-Lohse, S. Hartmann, A. Richter, C. Rembe: Strain Determination Using a Global Interpolation Concept Based on Coherence Scanning Interferometry Measurements; Experimental Mechanics 64 (8), 1277-1294, 2024
  - F. Wang, J. Wölck, M. Hess, C. Rembe: Laser-Doppler-Dehnungssensor mit Polarisationsdiversität für Dehnungsmessung im Hochgeschwindigkeitszugversuch; tm-Technisches Messen 91 (s1), 44-49, 2024
  - N.O. Rohweder, L.A. Raimund, C. Rembe: Influence of lossy JPEG compression on measurement uncertainty for luminance-based area measurements; tm-Technisches Messen 91 (s1), 38-43, 2024
  - C. Rembe, C. Gao: Improvement of Noise Performance in the Phase Locking Laser Doppler Vibrometer with a Low Carrier Frequency via Harmonic Locking; Optica Open, 2024
  - D. Kohlmann, M. Schewe, H. Wulfmeier, C. Rembe, H. Fritze: Extraction of nanometer-scale displacements from noisy signals at frequencies down to 1 mHz obtained by differential laser Doppler vibrometry; Journal of Sensors and Sensor Systems 13 (2), 167-177, 2024
  - K. Tolchkova, C. Rembe: Measuring turbulence parameters with high precision through the smooth perturbation method; Optical Instrument Science, Technology, and Applications III 13024, 15-23, 2024
  - M. Schewe, MA.A. Ismail, R. Zimmermann, U. Durak, C. Rembe: Flyable Mirror: Airborne laser Doppler vibrometer for large engineering structures; Journal of Physics: Conference Series 2698 (1), 012007, 2024
  - M. Schewe, L. Zhang, C. Rembe: Signal processing scheme for broadband heterodyne gigahertz interferometry with a broadband and a second low-noise photodetector with limited bandwidth; Journal of Physics: Conference Series 2698 (1), 012012, 2024
  - F. Wang, C. Rembe: Statistical behaviour of laser Doppler vibrometer detector signals and application of statistics for signal diversity; Journal of Physics: Conference Series 2698 (1), 012020, 2024
  - C. Gao, C. Rembe: A Variable Carrier Generation for Heterodyne LDV with an Optical Phase-locked Loop; Journal of Physics: Conference Series 2698 (1), 012018, 2024
  - K. Treutler, T. Gehling, M. Scheck, A. Richter, C. Bohn, R. Ehlers, C. Rembe, V. Wesling: Properties oriented WAAM – microstructural and geometrical control in WAAM of low-alloy steel; Welding in the World 68 (2), 247-257, 2024
  - M. Scheck, A. Richter, S. Beitler, T. Gehling, K. Treutler, V. Wesling, C. Rembe, C. Bohn: High geometric fidelity through closed-loop control of the weld pool size in gas metal arc welding based direct energy deposition; Additive Manufacturing 80, 103944, 2024

- C. Rembe: VIBRATION MEASUREMENTS BY LASER AND NONCONTACT TECHNIQUES ANCONA, 21-23 JUNE 2023; *Journal of Physics: Conference Series* 2698, 011001, 2024
- M. Biermann, C. Leppin, A. Langhoff, T. Ziemer, C. Rembe, D. Johannsmann: An electrochemical quartz crystal microbalance (EQCM) based on microelectrode arrays allows to distinguish between adsorption and electrodeposition; *Analyst* 149 (7), 2138-2146, 2024
- S. Nagorny, M. Schewe, T. Weingartz, A. Eitzeroth, J. Adams, C. Rembe, A. Schmidt: Stabilities of bis (thienyl) ethenes in polymethyl methacrylate (PMMA) coatings as absorbance modulation layers for nanoscale imaging; *Materials Advances* 5 (1), 159-170, 2024
- T. Ziemer, G. Ziegmann, C. Rembe: Investigations on terthiophene as an electrically conductive polymer for UV laser lithography; *tm-Technisches Messen* 90 (11), 703-714, 2023
- E. Schneegans, J. Hug, C. Rembe: Investigation of cross-sensitivities of the potential drop method for structural health monitoring of civil structures; *tm-Technisches Messen* 90 (11), 736-748, 2023
- M. Yu, P. Gewecke, J. Südbeck, A. Schönbeck, R. Schnabel, C. Rembe: Heterodyne laser Doppler vibrometer with squeezed light enhancement; *Optics Letters* 48 (21), 5607-5610, 2023
- M. Yu, P. Gewecke, R. Schnabel, C. Rembe: High-precision interferometric vibration measurement with squeezed light: Hochpräzise interferometrische Schwingungsmessung mit gequetschtem Licht; *tm-Technisches Messen* 90 (s1), 79-84, 2023
- K. Tolchkova, C. Rembe: Evaluation of turbulence parameters with a multipoint Laser Doppler Vibrometer: Bestimmung von Turbulenzparametern mit einem Mehrpunkt-Laser-Doppler-Vibrometer; *tm-Technisches Messen* 90 (s1), 120-125, 2023
- N.O. Rohweder, C. Rembe: High precision pupillometry: Hochpräzise Pupillometrie; *tm-Technisches Messen* 90 (s1), 114-119, 2023
- P. Jain, C. Geisler, D. Leitz, V. Udachin, S. Nagorny, T. Weingartz, J. Adams, A. Schmidt, C. Rembe, A. Egner: Super-resolution Reflection Microscopy via Absorbance Modulation; *ACS Nanoscience Au* 3 (5), 375-380, 2023
- M. Yu, M. Schewe, G. Bauer, C. Rembe: Improved demodulated phase signal resolution for carrier signals with small modulation index by clipping and synchronous sampling for heterodyne interferometers; *Scientific Reports* 13 (1), 8570, 2023
- D. Kohlmann, H. Wulfmeier, H. Fritze, M. Schewe, C. Rembe: P37-Detection of nm-Scale Displacements at Frequencies down to 1 mHz by Differential Laser Doppler Vibrometry; *Poster*, 352-353, 2023
- D. Kohlmann, H. Wulfmeier, M. Schewe, T. Defferriere, C. Rembe, H.L. Tuller, H. Fritze: High-temperature chemical expansion of PrO.1Ce0.9O2- $\delta$  thin films determined by Differential Laser Doppler Vibrometry; *Solid State Ionics* 392, 116151, 2023
- M. Schewe, D. Kohlmann, H. Wulfmeier, H. Fritze, C. Rembe: Differential laser Doppler vibrometry for displacement measurements down to 1 mHz with 1 nm amplitude resolution in harsh environments; *Measurement* 210, 112576, 2023
- T. Weingartz, S. Nagorny, J. Adams, A. Eitzeroth, M. Schewe, C. Rembe, A. Schmidt: Bis (thienyl) ethenes with  $\alpha$ -methoxymethyl groups. Syntheses, spectroscopic Hammett plots, and stabilities in PMMA films; *RSC advances* 13 (37), 25704-25716, 2023
- D. Kohlmann, H. Wulfmeier, M. Schewe, I. Kogut, C. Steiner, R. Moos, C. Rembe, H. Fritze: Chemical expansion of CeO<sub>2</sub>- $\delta$  and Ce<sub>0.8</sub>Zr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>- $\delta$  thin films determined by laser Doppler vibrometry at high temperatures and different oxygen partial pressures; *Journal of Materials Science* 58, 1481-1504, 2023
- D. Kohlmann, H. Wulfmeier, M. Schewe, I. Kogut, C. Steiner, R. Moos, C. Rembe, H. Fritze: Chemical expansion of CeO<sub>2</sub>- $\delta$  and Ce<sub>0.8</sub>Zr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>- $\delta$  thin films determined by laser Doppler vibrometry at high temperatures and different oxygen partial pressures; *Journal of Materials Science* 58 (4), 1481-1504, 2023

#### Prof. Dr. Anne Schacht

- F. Grassi, L. Kulke, A. Lepavre, A. Schacht: Relevance acquisition through motivational incentives: Modeling the time-course of associative learning and the role of visual features; *Imaging Neuroscience*, 2, 1-20, 2024
- Ziereis, A. Schacht: Additive effects of emotional expression and stimulus size on the perception

- of genuine and artificial facial expressions: An ERP study; *Scientific Reports*, 14:5574, 2024
- R. Demel, A. Pooresmaeili, F. Gagsch, M. Spengler, A. Schacht: Beyond bi-dimensional measures: Introducing a culturally tailored measure of political orientation; *Political Psychology*. 1-19, 2023
  - F. Grassi, E.A. Semmelhack, J. Ruge, A. Schacht: On the dynamics of gain and loss: Electrophysiological evidence from associative learning; *Biological Psychology*, 180, 108588, 2023
  - Y. Rafiee, A. Schacht: Sex differences in emotion recognition: Investigating the moderating effects of stimulus features; *Cognition and Emotion*, 37(5), 863-873, 2023
  - Y. Rafiee, C. Heine, A. Schacht: Does the interplay of emotion-related personality traits and reproductive hormones predict individual variation in emotion recognition? *Plos ONE*, 18(2), e0295176, 2023
  - Y. Rafiee, J. Stern, J. Ostner, L. Penke, A. Schacht: Does emotion recognition change across phases of the ovulatory cycle? *Psychoneuroendocrinology*, 148, 105977, 2023
  - Vakhrushev, R., Cheng, F., A. Schacht, A. Pooresmaeili: Differential effects of intra-modal and cross-modal reward value on perception: ERP evidence; *Plos One*, 18(6), e0287900, 2023
  - Ziareis, A. Schacht: Motivated attention and task relevance in the processing of cross-modally associated faces: Behavioral and electrophysiological evidence; *Cognitive, Affective and Behavioral Neuroscience*, 23, 2023
  - Ziareis, A. Schacht: Validation of Scrambling Methods for Vocal Affect Bursts; *Behavior Research Methods*, 2023
  - Ziareis, A. Schacht: Gender Congruence and Emotion Effects in Cross-Modal Associative Learning: Insights from ERPs and Pupillary Responses; *Psychophysiology*. 00:e14380, 2023
- Prof. Dr.-Ing. Babette Tonn**
- F. Stieler, B. Tonn: XRD-Analysis of the Relation of Stacking Fault Formation and the TRIP-Effect in ADI; *International Journal of Metalcasting* 18 (3), 1926-1934, 2024
  - P. Lachart, B. Tonn, E. Stolz, A. Esderts, R. Masendorf: Prediction of Cross-Section-Dependent ADI Microstructures by Experimental Heat Treatment Simulation; *International Journal of Metalcasting*, 1-12, 2024
  - V.G. Nardi, T. Greß, B. Tonn, H. Schmidt, W. Volk: Fast reactive interdiffusion between solid brass and liquid aluminium; *Results in Materials* 20, 100471, 2023
  - F. Stieler, D. Funk, B. Tonn: Alteration of the graphite morphology in solid solution-strengthened ductile iron due to high contents of cerium and bismuth; *International Journal of Metalcasting* 17 (2), 1315-1325, 2023
  - P. Lachart, E. Stolz, B. Tonn, R. Masendorf, A. Esderts: Investigation of the microstructure of ADI in thick-walled components and its influence on local mechanical properties; *Combining of Design, Casting, Computer Simulation, Checking and Cyclic Behaviour for Efficient Cast Components*, March 6th-8th, 2023, Darmstadt, 2023
  - J. Gogolin, B. Tonn, T. Steingraber, P. Hoffmann, J. Niewiadomski: Influence of alloying and trace elements on microstructure and mechanical properties of ductile cast iron; *Combining of Design, Casting, Computer Simulation, Checking and Cyclic Behaviour for Efficient Cast Components*, March 6th-8th, 2023, Darmstadt, 2023
- Prof. Dr. Uwe Wolfram**
- K. Beck, S. Hennige, U. Wolfram, M.P. Fernandez, M. Roberts: Skeletal Dissolution of the Cold-Water Coral *Desmophyllum pertusum* from Ocean Acidification and Impacts to Ecosystem Integrity; 2024 Ocean Sciences Meeting, 2024
  - J. Williams, H. Ahlqvist, A. Cunningham, A. Kirby, I. Katz, J. Fleming, ...: Validated respiratory drug deposition predictions from 2D and 3D medical images with statistical shape models and convolutional neural networks; *Plos one* 19 (1), e0297437, 2024
  - S. McPhee, L.E. Kershaw, C.R. Daniel, M.P. Fernández, E. Cillán-García, ...: QCT-based computational bone strength assessment updated with MRI-derived 'hidden' microporosity; *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials* 147, 106094, 2023
  - M.P. Fernández, J. Schwiedrzik, A. Bürki, F. Peyrin, J. Michler, P.K. Zysset, U. Wolfram: In situ synchrotron radiation  $\mu$ CT indentation of cortical bone: Anisotropic crack propagation, local deformation, and fracture; *Acta biomaterialia* 167, 83-99, 2023

- C.R. Daniel, S.E. Taylor, S. McPhee, U. Wolfram, T. Schwarz, S. Sommer, L.E. Kershaw: Relationship between CT-Derived Bone Mineral Density and UTE-MR-Derived Porosity Index in Equine Third Metacarpal and Metatarsal Bones; *Animals* 13 (17), 2780, 2023
- Groetsch, A. Gourrier, D. Casari, J. Schwie-drzik, J.D. Shephard, J. Michler, P.K. Zysset, U. Wolfram: The elasto-plastic nano-and micro-scale compressive behaviour of rehydrated mineralised collagen fibres; *Acta biomaterialia* 164, 332-345, 2023
- K.A. Barnhill, J.M. Roberts, I. Myers-Smith, M. Williams, K.G. Dexter, C. Ryan, U. Wolfram, S.J. Hennige: Incorporating dead material in ecosystem assessments and projections; *Nature Climate Change* 13 (2), 113-115, 2023

#### Prof. Dr. Florentin Wörgötter

- J. Pomp, A. Garlichs, T. Kulvicius, M. Tamosiunaite, M.F. Wurm, A. Zahedi, F. Wörgötter, R.I. Schubotz: Action Segmentation in the Brain: The Role of Object-Action Associations; *Journal of cognitive neuroscience*, 36(9), 1784-1806, 2024
- L. Lettermann, A. Jurado, T. Betz, F. Wörgötter, S. Herzog: Tutorial: a beginner's guide to building a representative model of dynamical systems using the adjoint method; *Nat. Com. Physics*, 7(1), 128, 2024
- M. Tamosiunaite, C. Tetzlaff, F. Wörgötter: Unsupervised learning of perceptual feature combinations; *PLOS Comp. Biol.*, 20(3), e1011926, 2024
- J.M. Braun, M. Fauth, M. Berger, N.-S. Huang, E. Simeoni, E. Gaeta, R. Rodrigues do Carmo, R.I. Garcia-Betances, M.T. Arredondo Waldmeyer, A. Gail, J.C. Larsen, P. Manoonpong, C. Tetzlaff, F. Wörgötter: A Brain Machine Interface Framework for Exploring Proactive Control of Smart Environments; *Scientific Reports* 14, 11054, 2024
- T. Kulvicius, D. Zhang, K. Nielsen-Saines, S. Bölte, M. Kraff, C. Einspieler, L. Poustka, F. Wörgötter, P.B. Marschik: Infant movement classification through pressure distribution analysis *Nat. Com Medicine*, 3(1), p.112, 2023

#### Prof. Dr. Ramin Yahyapour

- Q. Liu, R. Yahyapour: Nonlinear parsimonious modeling based on Copula-LoGoExpert Sys-

- tems with Applications 255, 124774, 2024
- R. Rabiéyan, R. Yahyapour, P. Jahnke: Optimization of containerized application deployment in virtualized environments: a novel mathematical framework for resource-efficient and energy-aware server infrastructure; *The Journal of Supercomputing* 80 (15), 22598-22630, 2024
- R. Rabiéyan, R. Yahyapour, P. Jahnke: Optimizing Resource Consumption and Reducing Power Usage in Data Centers, A Novel Mathematical VM Replacement Model and Efficient Algorithm; *Journal of Grid Computing* 22 (3), 1-21, 2024
- Badirova, F.F. Moghaddam, R. Yahyapour: Integration of Self-sovereign Identity in Centralized Identity Management: SSI-based Authentications, Attribute-based Authorization 2024 11th International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud), 2024
- Q. Liu, R. Yahyapour, H. Liu, Y. Hu: A novel combining method of dynamic and static web crawler with parallel computing; *Multimedia Tools and Applications* 83 (21), 60343-60364, 2024
- Badirova, B. Alangot, T. Dimitrakos, R. Yahyapour: Towards Robust Trust Frameworks for Data Exchange: A Multidisciplinary Inquiry; *Open Identity Summit 2024*, 15-26, 2024
- S.D. Varnosfaderani, P. Kasprzak, A. Badirova, R. Krimmel, C. Pohl, R. Yahyapour: An attention based approach for automated account linkage in federated identity management; *Information Sciences* 656, 119920, 2024
- Q. Liu, R. Yahyapour: Forecast stock price based on GRA-LoGo model of information filtering networks; *Journal of Intelligent & Fuzzy Systems*, 1-11, 2023
- F. A.I. Laban, J. Bernoth, M. Goedicke, U. Lucke, M. Striewe, P. Wieder, R. Yahyapour: Establishing the Research Data Management Container in NFDIxCS; *Proceedings of the Conference on Research Data Infrastructure* 1, 2023
- A.F. Hamedani, M. Aziz, P. Wieder, R. Yahyapour: Big Data Framework to Detect and Mitigate Distributed Denial of Service (DDoS) Attacks in Software-Defined Networks (SDN); *2023 3rd International Conference on Electrical, Computer, Communications and Mechatronics Engineering (ICECCME)*, 2023
- R.G.K. Babu, A. Badirova, F.F. Moghaddam, P.

Wieder, R. Yahyapour: Authorization and Interoperability in Access Control Systems; 2023 Fourteenth International Conference on Ubiquitous and Future Networks (ICUFN), 2023

- RG.K. Babu, A. Badirova, F.F. Moghaddam, P. Wieder, R. Yahyapour: Authentication and access control in cloud-based systems; 2023 Fourteenth International Conference on Ubiquitous and Future Networks (ICUFN), 2023
- TH.A. Doan, S. Bingert, R. Yahyapour: MINE-A Text Analysis Service for Digital Humanities Scientists; 2023 ACM/IEEE Joint Conference on Digital Libraries (JCDL), 195-199, 2023

#### Dr. Tobias Ahlbrecht

- T. Ahlbrecht: An algorithmic debugging approach for belief-desire-intention agents; *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence* 92 (4), 797-814, 2024
- T. Ahlbrecht: Goal-based debugging for belief-desire-intention agents; Dissertation Clausthal University of Technology, 2024
- T. Ahlbrecht, J. Dix, N. Fiekas, T. Krausburg: The Multi-agent Programming Contest 2022: Coordinating Agents in a Dynamic World: Agents Follow the Rules, Or Not; Springer Nature, 2023

#### Dr. Iyad Alabd Alhafez

- S. Chakrabarty, D. A. De Abreu, I. A. Alhafez, O. Fabrichnaya, N. Merkert, A. Schnickmann, T. Schirmer, U.E.A. Fittschen, M. Fischlschweiger: Kinetics of  $\gamma$ -LiAlO<sub>2</sub> Formation out of Li<sub>2</sub>O-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Melt – A Molecular Dynamics-Informed Non-Equilibrium Thermodynamic Study; *Solids* 5:561, 2024
- S. Hampel, I. A. Alhafez, A. Schnickmann, S. Wunderlich, H. Li, M. Fischlschweiger, T. Schirmer, N. Merkert, U. E. A. Fittschen: Experimental and Simulation Studies on the Mn Oxidation State Evolution of a Li<sub>2</sub>O-MnO<sub>x</sub>-CaO-SiO<sub>2</sub> Slag Analogue; *Minerals* 14(9):868, 2024
- S. Hampel, I. A. Alhafez, T. Schirmer, N. Merkert, S. Wunderlich, A. Schnickmann, H. Li, M. Fischlschweiger, U. E. A. Fittschen: Engineering Compounds for the Recovery of Critical Elements from Slags: Melt Characteristics of Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub>, LiAlO<sub>2</sub>, and LiAl<sub>5</sub>O<sub>8</sub>ACS; *Omega*, 2024
- I.A. Alhafez, O.R. Deluigi, D. Tramontina, N. Merkert, H. M. Urbassek, E. M. Bringa: Nanoindentation into a bcc high-entropy HfNbTaTiZr

alloy – an atomistic study of the effect of short-range order; *Sci. Rep.* 14:9112, 2024

- I.A. Alhafez, O.R. Deluigi, D. Tramontina, C. J. Ruestes, E. M. Bringa, H. M. Urbassek: Simulated nanoindentation into single-phase fcc Fe<sub>x</sub>Ni<sub>1-x</sub> alloys predicts maximum hardness for equiatomic stoichiometry; *Sci Rep.* 13(1):9806, 2023
- I.A. Alhafez, M. Kopnarski, H.M. Urbassek: Multiple Scratching: An Atomistic Study; *Tribol Lett* 71: 46, 2023., 2023
- I.A. Alhafez, M. Kopnarski, H.M. Urbassek: Scratching a soft layer above a hard substrate; *Philosophical Magazine*, 2023

#### Dr. Alexander Herzog

- Herzog: A Discrete Process Modelling Study of ARGESIM Benchmark 'C2 – Flexible Assembly System' with WarteschlangensimulatorSimulation Notes Europe 34(1), 2024
- Herzog: A Discrete Process Modelling Study of ARGESIM Comparison 'C22 – Non-standard Queuing Policies' with Warteschlangensimulator; *Simulation Notes Europe* 34(1), 2024

#### Dr. Hoàng-Thiên Luu

- D. Thürmer, H.-T. Luu, N. Merkert: Molecular dynamics simulation of shock waves in Fe and Fe–C: Influence of system characteristics; *J. Appl. Phys.* 135:155901, 2024
- S. Raumel, K. Barienti, H.-T. Luu, N. Merkert, F. Dencker, F. Nürnberger, H.J. Maier, M.C. Wurz: Characterization of the tribologically relevant cover layers formed on copper in oxygen and oxygen-free conditions; *Friction*, 2023

#### Dr. Shan Lyu

- V. Hirschberg, S. Lyu, M.G. Schußmann, M. Wilhelm, M.H. Wagner: Modeling elongational viscosity of polystyrene Pom-Pom/linear and Pom-Pom/star blends; *Rheologica Acta* 62 (9), 433-445, 2023
- V. Hirschberg, S. Lyu, M.G. Schußmann: Complex polymer topologies in blends: shear and elongational rheology of linear/pom-pom polystyrene blends; *Journal of Rheology* 67 (2), 403-415, 2023

#### PD Dr.-Ing. habil. Marco Mancini

- R. Weber, V.N. Tanga, M. Mancini, A. Lindmüller, M. Alberti: Entrainment rate predictions of

axis-symmetric non-swirling jets using free-jet-theory, Reynolds-averaged Navier-Stokes modelling and large-eddy-simulations resolved up to; *Journal of the Energy Institute* 117, 101806, 2024

- M. Dammann, R. Weber, A. Fateev, S. Clausen, M. Alberti, T. Kolb, M. Mancini: Thermal radiation at high-temperature and high-pressure conditions: Validation of HITEMP-2010 for carbon dioxide; *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 329, 109121, 2024
- M. Dammann, S.C. Walker, M. Mancini, T. Kolb: Devolatilisation of beech wood char: Kinetics from thermogravimetric analyses and drop-tube reactor experiments; *Fuel* 375, 131967, 2024
- M. Alberti, R. Weber, M. Mancini: Gray gas emissivities and absorptivities for H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> mixtures; *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 322, 109016, 2024
- C. Nobis, M. Mancini, M. Fischlschweiger: Modelling Binder Degradation in the Thermal Treatment of Spent Lithium-Ion Batteries by Coupling Discrete Element Method and Isoconversional Kinetics; *Batteries* 10 (2), 63, 2024
- M. Dammann, M. Mancini, T. Kolb, R. Weber: Thermal radiation at high-temperature and high-pressure conditions: Comparison of models for design and scale-up of entrained flow gasification processes; *Thermal Science and Engineering Progress* 42, 101772, 2023
- M. Mancini, A. Schwabauer: On the Thermal Stability of a Counter-Current Fixed-Bed Gasifier; *Energies* 16 (9), 3762, 2023

#### Dr. Robert Mettin

- Aghelmaleki, H. Afarideh, C. Cairós, R. Pflieger, R. Mettin: Effect of mechanical stirring on sonoluminescence and sonochemiluminescence; *Ultrasonics Sonochemistry*, 107145, 2024
- Lindinger, H. Söhnholz, R. Mettin: Multibubble sonoluminescence in supercooled water; *The Journal of Chemical Physics* 160 (20), 2024
- H.P. Hoeppe, M. Osterhoff, A.A. Maleki, J.M. Rosselló, M. Vassholz, J. Hagemann, T. Engler, D. Schwarz, A. Rodriguez-Fernandez, U. Boesenberg, J. Möller, R. Shayduk, J. Hallmann, A. Madsen, R. Mettin, T. Salditt: The collapse of a sonoluminescent cavitation bubble imaged with X-ray free-electron laser pulses; *New Journal of*

*Physics* 26 (3), 033002, 2024

- J.M. Rosselló, H.P. Hoeppe, M. Koch, C. Lechner, M. Osterhoff, M. Vassholz, J. Hagemann, J. Möller, M. Scholz, U. Boesenberg, J. Hallmann, C. Kim, A. Zozulya, W. Lu, R. Shayduk, A. Madsen, T. Salditt, R. Mettin: Jetting bubbles observed by x-ray holography at a free-electron laser: internal structure and the effect of non-axisymmetric boundary conditions; *Experiments in fluids* 65 (2), 20, 2024
- M. Koch, W. Lauterborn, C. Lechner, R. Mettin: Ring vortex dynamics following jet formation of a bubble expanding and collapsing close to a flat solid boundary visualized via dye advection in the framework of openfoam; *Fluids* 8 (7), 200, 2023
- Lechner, M. Koch, W. Lauterborn, R. Mettin: Fast jets from bubbles close to solid objects: examples from pillars in water to infinite planes in different liquids; *Tech. Mech* 43, 21-37, 2023
- M. Vassholz, H.P. Hoeppe, J. Hagemann, J.M. Rosselló, M. Osterhoff, R. Mettin, J. Möller, M. Scholz, U. Boesenberg, J. Hallmann, C. Kim, A. Zozulya, W. Lu, R. Shayduk, A. Madsen, T. Salditt: Structural dynamics of water in a supersonic shockwave; *Physics of Fluids* 35 (1), 2023
- W. Lauterborn, R. Mettin: Acoustic cavitation: bubble dynamics in high-power ultrasonic fields; *Power Ultrasonics*, 23-52, 2023

#### Dr. Masoom Shaban

- M. Shaban, N. Merkert, A.C.T. van Duin, D. van Duin, A.P. Weber: Advancing DBD Plasma Chemistry: Insights into reactive nitrogen species (RNS) such as NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and N<sub>2</sub>O Optimization and Species Reactivity through Experiments and Molecular Dynamics Simulations; *Environ. Sci. Technol.* 58(36): 16087, 2024



**Postanschrift**

Simulationswissenschaftliches Zentrum Clausthal-Göttingen  
Geschäftsstelle  
Dr. Alexander Herzog  
Arnold-Sommerfeld-Straße 6  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
E-Mail: [alexander.herzog@tu-clausthal.de](mailto:alexander.herzog@tu-clausthal.de)  
Telefon: +49 5323 72-2966

**Impressum**

Herausgeber: Simulationswissenschaftliches Zentrum Clausthal-Göttingen  
Redaktion: Dr. Alexander Herzog, TU Clausthal  
Layout und Satz: Franziska Ottow, TU Clausthal

**Bildnachweis**

Nicht erwähnte Fotos und Grafiken entstammen dem Privatarchiv der jeweils abgebildeten und neben dem Bild namentlich genannten Personen oder dem Archiv des SWZ.



[www.simzentrum.de](http://www.simzentrum.de)