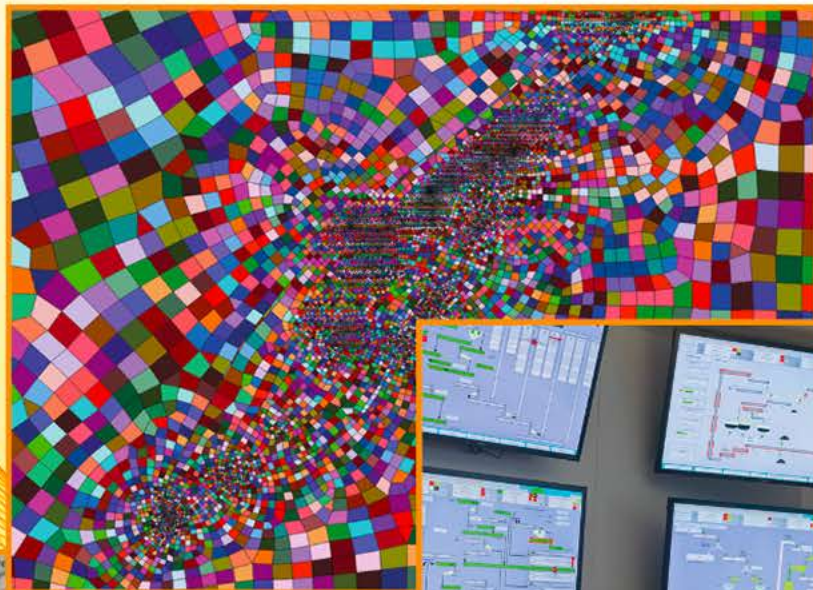


# Bericht 2021-2022

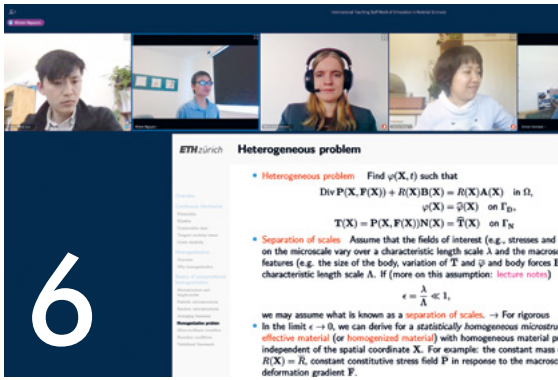


# Bericht 2021–2022

Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen



2



# Inhalt

Vorwort..... 3

International Teaching Staff Week ..... 6

Nationale Forschungsdateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und Werkstofftechnik mit Beteiligung des SWZ gestartet..... 8

DFG-Projekt „Plasmadesinfektion zur Inaktivierung von Viren in Aerosolpartikeln“ ..... 10

SWZ am Schwerpunktprogramm 2315 „Engineered Artificial Minerals“ beteiligt: ..... 12

Digitalisierung in der Lehre: Open Educational Resources..... 14

DFG-Sonderforschungsbereich 1368 „Sauerstofffreie Produktion“ ..... 15

Empathisch Intelligente, Kollaborierende Roboter ..... 17

Ausbau der IT-Infrastruktur für die Forschung am SWZ ..... 20

SWZ-Technologietransferprojekt „Digitaler Zwilling des Walzwerks der AG der Dillinger Hüttenwerke – Abbildung von Energie- und Rohstoffströmen“ ..... 22

DFG-Projekt „Grenzflächenreaktion und Diffusionskinetik an der fest-flüssig Phasengrenze von Verbundgusspartnern im System Al-Cu-Zn“ ..... 23

SWZ-Technologietransferprojekt „Digitaler Zwilling der Lebensmittelqualitätssicherungslabore der BASF“ ..... 24

Beirat des SWZ..... 26

Weitere Nachrichten ..... 27

Mitglieder des SWZ ..... 29

# Liebe Leserinnen und Leser,

auch wenn insbesondere im Jahr 2021 noch einige Einschränkungen in Bezug auf Präsenzveranstaltungen vorlagen, so sind dennoch auch in den Jahren 2021 und 2022 wieder viele spannende Dinge im Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) und in seinem Umfeld geschehen, über die wir Sie mit diesem Bericht informieren möchten. Mit dem Abschluss des Jahres 2022 blickt das SWZ bereits auf eine 10-jährige Geschichte zurück. Der vorliegende Zweijahresbericht ist folglich bereits der Fünfte. Gegründet wurde das SWZ zum 1.1.2013 als gemeinsame wissenschaftliche Einrichtung der beiden Partneruniversitäten Clausthal und Göttingen.

im Jahr 2022 um ein GPU-Beschleunigersystem ergänzt, um ihn so fit für neue Forschungsfragen zu machen (siehe Seite 20).



*Eröffnung des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal Göttingen im Januar 2013, v.l.n.r.: Professorin Ulrike Beisiegel (damals Präsidentin Universität Göttingen), Professorin Johanna Wanka (damals niedersächsische Ministerin für Wissenschaft und Kultur), Professor Thomas Hanschke (damals Präsident der TU Clausthal), Foto: Christian Ernst.*

Mittlerweile hat das SWZ über 40 Mitglieder und ist an beiden Partneruniversitäten fest verankert. Neben einem wissenschaftlichen Austausch z.B. durch die SWZ-Konferenzreihe „Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science“ und gemeinsamen Lehrveranstaltungen wie insbesondere der „International Teaching Staff Week“ (siehe Seite 6) bietet das SWZ seinen Mitgliedern seit 2019 auch gemeinsame Infrastruktur z.B. in Form eines Rechenclusters an. Dieser Cluster wurde



*Aufnahme einer 3D-Punktwolke der Aula Academica der TU Clausthal. Die Analyse und Interpretation der per Laserscanner erfassten Daten erfolgt auf Rechnern des SWZ, Foto: Institute of Geo-Engineering, TU Clausthal.*

Der anfängliche Aufbau des SWZ wurde durch das Ministerium für Wissenschaft und Kultur (MWK) unterstützt und auch erst dadurch möglich. Mittlerweile werden am SWZ sehr erfolgreich eigene Drittmittel sowohl von institutionellen Fördergebern als auch von Industriepartnern eingeworben. Neben den zahlreichen 2021 und 2022 neu eingeworbenen DFG-Projekten z.B. zur Covid-19-Forschung oder zur Rückgewinnung von kritischen Rohstoffen aus metallischen Recycling-Schlacken (siehe z.B. Seiten 10 und 12) stellt nach wie vor die Beteiligung am Sonderforschungsbereich (SFB) 1368 ein Highlight am SWZ dar (siehe Seite 15). Im Bereich des Technologietransfers laufen momentan Projekte sowohl mit der AG der Dillinger Hüttenwerke (siehe Seite 22) und mit BASF (siehe Seite 24).

Sichtbar wird die kontinuierlich wachsende Expertise des SWZ insbesondere im Bereich der Materialsimulation durch die Beteiligung von SWZ-Juniorprofessorin Nina Merkert in der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und Werkstofftechnik (NFDI-



MatWerk). NFDI-MatWerk ist ein Unterbereich der 2020 gegründeten Nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Ingenieurwissenschaften, deren Ziel es ist, einheitliche Standards für die Speicherung von Forschungsdaten zu entwickeln (siehe Seite 8).



Die Fortschritte im Bereich der Informationstechnik und der Robotik führen dazu, dass Menschen und Maschinen immer näher zusammenrücken und mit einander interagieren. Ein wichtiges Beispiel stellen die Fahrerassistenzsysteme in modernen Autos dar. Bereits seit 2019 werden am SWZ die Möglichkeiten der Zusammenarbeit von Menschen und Maschinen untersucht. Auf dieser Basis wurde Ende 2022 die Förderung des Projektes KEIKO „Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter“ vom MWK bewilligt (siehe Seite 17).

**Jun.-Prof. Dr. Nina Merkert**  
Sprecherin des Vorstands des  
Simulationswissenschaftlichen Zentrums  
Clausthal-Göttingen

Begleitet wird die wissenschaftliche Arbeit am SWZ seit 2015 durch einen externen Beirat, der das Zentrum in Bezug auf die strategische Ausrichtung berät und zur Qualitätssicherung beiträgt. Im Sommer 2021 wurden nach dem Auslaufen der Amtszeit des bisherigen Beirats 6 Personen, die ein breites wissenschaftliches Spektrum abbilden und in ihren jeweiligen Bereichen in hohem Maße ausgewiesen sind, berufen (siehe Seite 26). Das SWZ freut sich sehr, die betreffenden Forscherinnen und Forscher für eine Mitarbeit im Beirat gewonnen zu haben.

Aufgrund des begrenzten vorgegebenen Umfangs des Berichts, werden wir im Folgenden einen Überblick über die aktuellen Forschungsthemen geben. Wir hoffen, dass der Bericht Ihr Interesse weckt. Weitere Informationen zu allen vorgestellten Themen und Projekten finden Sie wie üblich auf unserer Homepage [www.simzentrum.de](http://www.simzentrum.de).

Wir hoffen, dass Ihnen die folgenden Artikel einen guten Einblick in die aktuellen Arbeiten und Projekte am SWZ vermitteln und wünschen Ihnen viel Spaß bei der Lektüre!

**Prof. Dr.-Ing. Marus Baum**  
Stellvertretender Sprecher des Vorstands des  
Simulationswissenschaftlichen Zentrums  
Clausthal-Göttingen

.....

5

.....

# International Teaching Staff Week

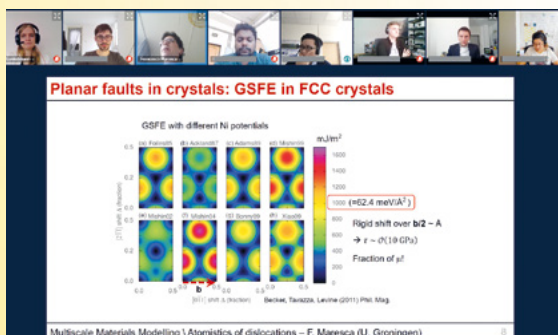
In den Jahren 2021 und 2022 wurde das 2019 neu eingeführte Lehrformat „International Teaching Staff Week“ erfolgreich weiterentwickelt. Die International Teaching Staff Week, bei der internationale Dozentinnen und Dozenten für eine Woche nach Clausthal eingeladen werden, ist mittlerweile fest in den Studienplänen der Master-Studiengänge Energie und Materialphysik, Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, Maschinenbau und Verfahrenstechnik/Chemieingenieurwesen an der TU Clausthal verankert. Die Vorträge der internationalen Dozenten ermöglichen den Master- und Promotions-Studierenden dabei einen Einblick in Themen, die über das an der TU Clausthal angebotene Themenspektrum hinausgehen. „Die Materialforschung ist traditionell ein wichtiges Forschungsgebiet in Clausthal. Methoden der Künstlichen Intelligenz werden hier zunehmend angewandt, finden sich jedoch bisher weniger in den Lehrveranstaltungen wieder. Das Ziel der Veranstaltung ist es, dieses Angebot zu erweitern und gleichzeitig der Internationalisierung in Forschung und Lehre Rechnung zu tragen sowie innovative Lehrmethoden voranzutreiben.“, erklärt die SWZ-Vorsitzende Juniorprofessorin Nina Merkert. Während die Veranstaltung im Wintersemester 2019/2020 noch in Präsenz durchgeführt werden konnte – inklusive Rahmenprogramm wie dem Besuch des Weihnachtsmarktes in Goslar oder der vom Internationalen Zentrum Clausthal organisierten X-Mas-Party – musste in den folgenden beiden Jahren Corona-bedingt auf ein Online-Format ausgewichen werden. Dennoch war die Anzahl an Teilnehmenden mit jeweils gut 50 Personen gleichbleibend hoch.

## Vortragende und Vorlesungstitel im Wintersemester 2020/2021

- Machine learning for atomistic physics  
Dr. Aldo Glielmo (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste, Italien)
- Multiscale materials modeling  
Prof. Dr. Francesco Maresca (University of Groningen, Niederlande)
- Application of artificial neural networks in computational homogenization  
Dr. Khiem Nguyen (Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zuerich, Switzerland)

## Vortragende und Vorlesungstitel im Wintersemester 2021/2022

- High performance computing for physical modeling and simulation  
Prof. Dr. Yudi Rosandi (Universitas Padjadjaran, Indonesien)
- Multiscale materials modelling: from atomistics to micromechanics  
Prof. Dr. Francesco Maresca (University of Groningen, Niederlande)
- First principles calculations and atomistic simulations in Materials Science  
Prof. Dr. Roberto Veiga (ABC Federal University, Brasilien)



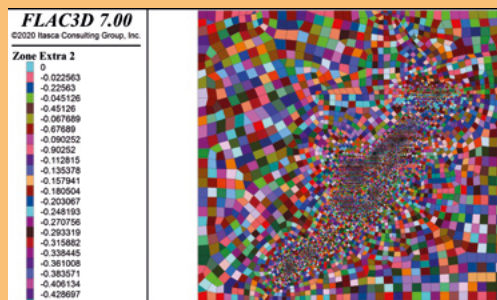
Screenshot der Videoaufzeichnung der International Teaching Staff Week 2020/2021.

## Wettbewerb „Science meets Art“

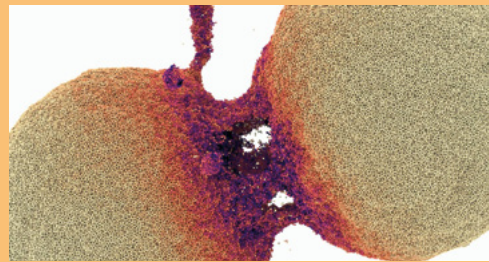
Im Jahr 2022 wurde im Rahmen der International Teaching Staff Week erstmals der Wettbewerb „Science meets Art“ ausgerichtet.

Visualisierungsmethoden sind in der Wissenschaft ein wichtiges Instrument für die Analyse und Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse. Bilder können oft Informationen in einer Weise vermitteln, die Tabellen mit Daten oder Gleichungen nicht erreichen können. Gelegentlich gehen wissenschaftliche Bilder über ihre Rolle als Medium zur Übermittlung von Informationen hinaus und enthalten ästhetische Qualitäten, die sie zu Objekten der Schönheit und Kunst machen.

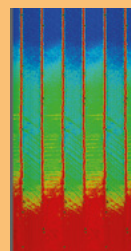
In dem Wettbewerb wurden besonders ästhetische wissenschaftliche Abbildungen prämiert. Insgesamt wurden 17 Visualisierungen eingereicht, von denen die Teilnehmerinnen und Teilnehmer der Veranstaltung die drei besten ausgewählt haben. Christian Heinrich Dörner, der die am höchsten bewertete Abbildung eingereicht hat, erhielt zum Abschluss der Teaching Week einen Buchpreis für seine an moderne Kunst erinnernde Visualisierung geomechanischer Daten.



1. Platz, Titel: „Modern art meets geomechanics. Interpretation questionable!“, Autor: Christian Heinrich Dörner.

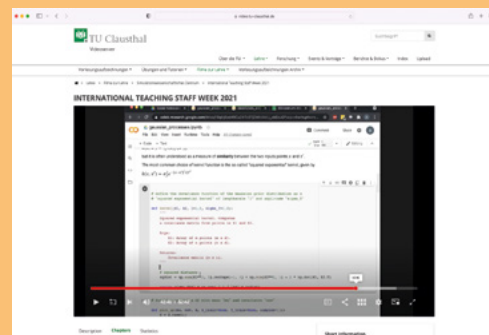


2. Platz, Titel: „Particle bridges forming between saturated silica clusters after the two clusters bounce. The color indicate the temperature of the particle“, Autor: Raihan Alfaridzi.



3. Platz, Titel: „Iron-Carbon get shocks: Stress distributions during shock wave simulation“, Autor: Hoang-Thien Luu.

## Video-Aufzeichnung



Videoaufzeichnung der International Teaching Staff Week 2021.

Die im Rahmen der International Teaching Staff Week 2021 gehaltenen Vorträge wurden als Video aufgezeichnet und stehen über den folgenden Link zum Abruf bereit:

[www.simzentrum.de/lehre/teachingstaffweek2021](http://www.simzentrum.de/lehre/teachingstaffweek2021)



# Nationale Forschungsdateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und Werkstofftechnik mit Beteiligung des SWZ gestartet

In den Simulationswissenschaften spielen Forschungsdaten traditionell eine herausgehobene Rolle. Forschungsergebnisse bestehen in vielen Fällen nicht nur aus publizierten Texten, sondern umfassen meistens umfangreiche Mess- oder Simulationsprotokolle. Erst auf Basis dieser Daten können die Ergebnisse von Dritten verifiziert werden. Auch für anschließende Arbeiten, die auf den Ergebnissen aufbauen sollen, ist eine nachvollziehbare Dokumentation und dauerhafte Zugänglichkeit der Forschungsdaten von besonderer Bedeutung.

Um einheitliche Standards für die Speicherung von Forschungsdaten zu entwickeln, wurde 2020 die Nationale Forschungsdateninfrastruktur für die Ingenieurwissenschaften (NFDI4Ing) gegründet. Speziell für die Materialsimulation wurde im Sommer 2021 mit der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und Werkstofftechnik (NFDI-MatWerk) ein entsprechender Unterbereich eingerichtet. Dieser wird in den folgenden 5 Jahren durch die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) mit rund 15,7 Mio. Euro gefördert. Grundlage der NFDI sind die FAIR-Prinzipien, wonach die entstehende Forschungsdateninfrastruktur Auffindbarkeit (findable), Zugänglichkeit (accessible), Interoperabilität (interoperable) und Wiederverwendbarkeit (reproducible) gewährleisten soll.

In der materialwissenschaftlichen Forschung werden häufig sehr unterschiedliche Methoden (Simulationen, mikroskopische Verfahren und mechanische Versuche) kombiniert, die darüber hinaus auf sehr unterschiedlichen Größenskalen operieren. Dieser Multiskalencharakter wird durch die in nahezu allen Materialien vorhandenen stark heterogenen Mikrostrukturen – von

## NFDI4Ing



Es existieren bereits zahlreiche Forschungsansätze zur Definition von Begriffsontologien in den Ingenieurwissenschaften, um so fachübergreifend Begriffe mit jeweils einer einheitlichen Bedeutung festzulegen. Ziel des NFDI4Ing-Konsortiums ist es, diese bereits erarbeiteten Standards zu konsolidieren. Trotz einer Vielzahl an hochspezialisierten Ansätzen für die Verwaltung von Forschungsdaten, die jeweils die Bedürfnisse einzelner Fachgemeinschaften abbilden, besteht der Bedarf nach einem gemeinsamen Ansatz auf methodischer Ebene. Die Aufgabe des NFDI4Ing besteht darin, Gemeinsamkeiten zwischen den Fachbereichen zu nutzen, um wichtige Ziele zu identifizieren und auf dieser Basis Lösungen für den Umgang mit Forschungsdaten zu entwickeln, die der gesamten Ingenieurgemeinschaft zugutekommen.

### Weitere Informationen:

[nfdi4ing.de](http://nfdi4ing.de)  
[nfdi-matwerk.de](http://nfdi-matwerk.de)

Kristalldefekten auf der atomaren Skala bis zu makroskaligen Poren – verursacht. Da diese Mikrostrukturen in der Regel nicht im Gleichgewicht sind, führt das Zusammenspiel von mikrostrukturellen Merkmalen auf verschiedenen Größen- und Zeitskalen zu stark pfadabhängigen Bearbeitungsschritten. Dies erfordert eine sehr präzise und kontrollierte Verarbeitung und Fertigung einschließlich entsprechender Dokumentation. Die NFDI-MatWerk soll diese Herausforderungen adressieren und in einer gemeinsamen, mit allen beteiligten Nutzerinnen und Nutzern abgestimmten, digitalen Infrastruktur abbilden.

Für das SWZ ist Frau Juniorprofessorin Nina Merkert Mitglied des Konsortiums der NFDI-MatWerk. Die Arbeitsgruppe Modellbildung des DFG-Sonderforschungsbereichs 1368 „Sauerstofffreie Produktion“, die Frau Merkert leitet, wurde als eines der Projekte ausgewählt, dessen Forschungsdaten als Testdatenset verwendet werden sollen, um so die im Rahmen der NFDI-MatWerk erarbeiteten Methoden und Dienste zu evaluieren und um erste vollständig digitale Arbeitsabläufe zur Erfassung und Speicherung von Forschungsdaten zu erproben. Die hier verwendeten Multiskalensimulationen stellen dabei eine Herausforderung für Workflow-Systeme in der Materialwissenschaft dar, da sie die Verbindung unterschiedlicher Datentypen und Programmcodes erfordern. Das Konsortium strebt die Definition einheitlicher, arbeitsgruppenübergreifender Begriffe (Ontologien), gemeinsame Software-Standards sowie den Aufbau einer themenübergreifenden Community an.

## FAIR-Prinzipien

Um effizienter mit der steigenden Anzahl an Forschungsergebnissen umgehen zu können, und insbesondere, um mit eigenen Forschungen auf die bereits existierenden Ergebnisse aufbauen zu können, wurden die 4 FAIR-Prinzipien definiert:

1. Auffindbarkeit (Findable):  
Daten sollen so mit Metainformationen angereichert werden (z.B. Verschlagwor-

tung), dass diese später leicht sowohl von Menschen als auch von automatisierten Systemen wiedergefunden werden können.

2. Zugänglichkeit (Accessible):  
Forschungsergebnisse sollen langzeitarchiviert werden und in einer möglichst einfach herunterladbaren Form dauerhaft zur Verfügung gestellt werden. Die Daten können in geschützter Form vorliegen, die Authentifizierung und Rechteverwaltung für die Daten müssen aber klar definiert sein. Die genauen Bedingungen für die Zugänglichkeit der Daten müssen transparent sein.
3. Interoperabilität (Interoperable):  
Die Daten sollten so vorliegen, dass sie ausgetauscht, interpretiert und in einer automatisierten Weise mit anderen Datensätzen von Menschen sowie Computersystemen kombiniert werden können. Dies kann realisiert werden, in dem nach Möglichkeit standardisierte Formate für die Forschungsdaten verwendet werden und Begriffe gemäß einer allgemein anerkannten Ontologie verwendet werden, so dass andere Forscher später auf die veröffentlichten Daten ohne unnötigen Konvertierungsaufwand und dem Risiko von Missinterpretationen zugreifen können.
4. Wiederverwendbarkeit (Reusable):  
Die Daten sollen für die zukünftige Forschung wiederverwendet werden können und mit kompatiblen Datenquellen vergleichbar sein. Um Ergebnisse nachvollziehen zu können, müssen Informationen dazu, wie diese entstanden sind (z.B. verwendete Geräte und Methoden), angegeben werden. Außerdem ist eine klare Definition, unter welcher Lizenz die Daten zur Verfügung gestellt wurden, für eine Weiterverwendung von essenzieller Bedeutung.

**Weitere Informationen:**  
[www.nature.com/articles/sdata201618](http://www.nature.com/articles/sdata201618)

# DFG-Projekt „Plasmadesinfektion zur Inaktivierung von Viren in Aerosolpartikeln“

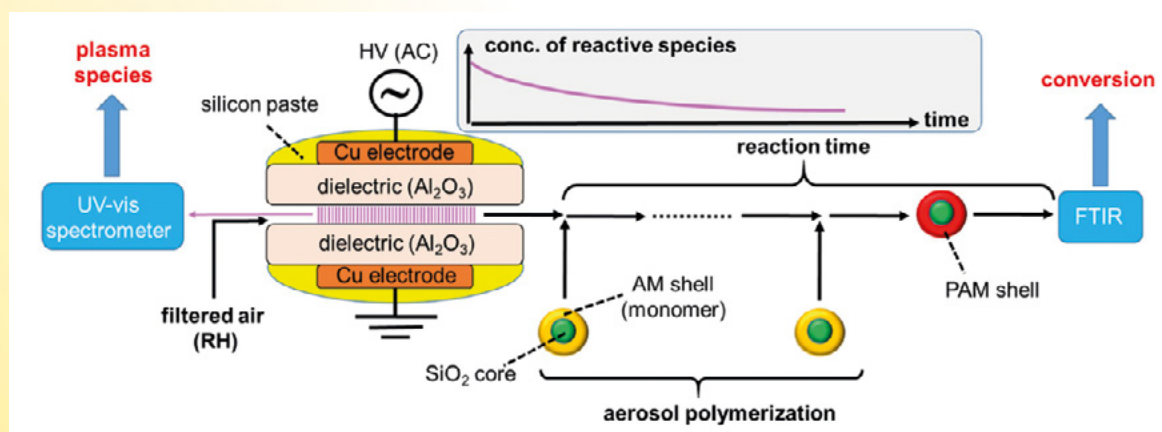
Ein probates Mittel zum Eindämmen von Epidemien und Pandemien sind Hygienemaßnahmen, durch die der Kontakt mit dem Virus vermieden wird. Noch besser wäre es, die Viren unschädlich zu machen. An diesem Punkt setzt das Forschungsprojekt „Grundlagen der Plasmadesinfektion zur Inaktivierung von Viren in Aerosolpartikeln: Einfluss von Flüssigkeitsfilmen“ an.

Das Projekt startete im Sommer 2021 mit einer initialen Unterstützung von 100.000 Euro durch die „Fokus-Förderung COVID-19“ der DFG. Auf Basis der guten bislang erzielten Ergebnisse erfolgte dann im Sommer 2022 eine umfangreichere Anschlussförderung in Höhe von 300.000 Euro für eine Laufzeit von 3 Jahren. Beteiligt an dem Projekt sind Juniorprofessorin Nina Merkert, Vorstandsvorsitzende des SWZ, und Professor Alfred Weber, Leiter des Instituts für Mechanische Verfahrenstechnik der TU Clausthal und Vorsitzender der VDI/Dechema Fachgruppe „Aerosoltechnik“.

Der Hintergrund: Plasma wird neben den drei allgemein bekannten Aggregatzuständen fest, flüssig und gasförmig häufig als vierter Aggregat-

zustand bezeichnet. Plasma wird durch das Erhitzen der Materie auf üblicherweise 100.000 °C oder mehr erzeugt. Ein typisches Beispiel dafür ist die Sonne. Man kann jedoch auch kaltes Plasma schaffen, bei dem das Gas nur teilweise ionisiert ist. Dabei wird dem Gas gerade so viel Energie zugeführt, dass zwar die Elektronen in Bewegung gebracht und somit heiß werden, jedoch nur wenige Teilchen ionisiert werden. Die Elektronen können dabei viele Tausend Grad heiß sein, ohne dass sich die Temperatur des gesamten Plasmas auf mehr als Raumtemperatur erhöht.

Kalte Plasmen wie die sogenannte dielektrische Barriere-Entladung werden verwendet, um Mikroorganismen gezielt zu inaktivieren und zu eliminieren. Konkret werden sie seit einigen Jahren eingesetzt, um toxische oder unerwünschte Schadstoffe in der Raumluft oder in Abgasströmen zu beseitigen. Sogar zur gezielten Zerstörung von Krebszellen werden sie genutzt. Dies gelingt, ohne die Umgebung zu schädigen oder Schadstoffe zu produzieren. Folglich sind Plasmen besonders geeignet für die Sterilisation von medizinischen Instrumenten, Textilien, Lebensmitteln und sogar der Haut oder Wunden.

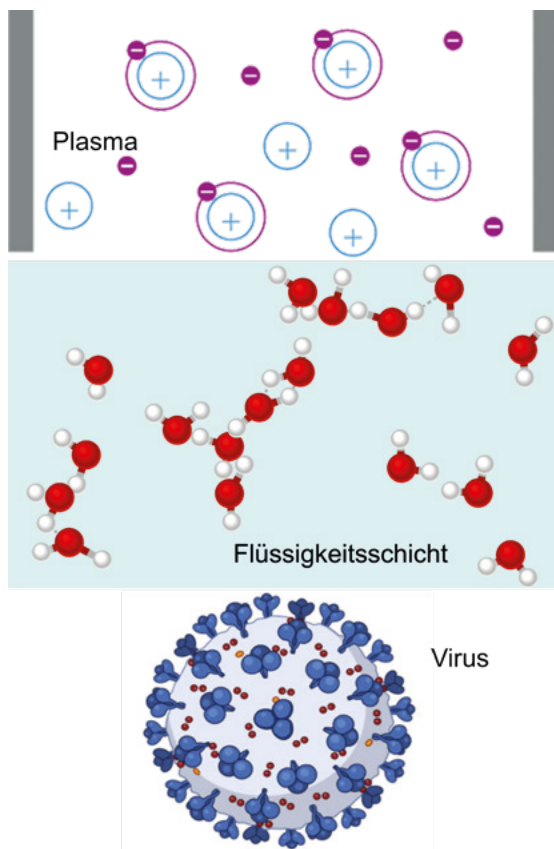


Schematischer Aufbau zur Herstellung von DBD-Plasmaspezies.



Das Ausschalten von Viren in Aerosolpartikeln hat durch die Covid-19-Pandemie enorm an Bedeutung gewonnen. Ein neuer Ansatz besteht darin, die Partikel zu filtern und die Viren anschließend mit kaltem Plasma abzutöten. „Noch effizienter wäre es, die Viren direkt im Aerosolzustand zu inaktivieren“, sagt Professorin Nina Merkert: „Jedoch sind die Viren im Aerosolzustand von Feuchtigkeitsschichten umgeben und die Wechselwirkung zwischen den Plasmaspezies und der Flüssigkeitsschicht ist bisher nur unzureichend verstanden.“ Simulationen auf Atomebene könnten fundamentale Einblicke in die Vorgänge der Plasmadesinfektion liefern, die durch Experimente nur schwer oder gar nicht zugänglich sind.

„In unserem Projekt werden Molekulardynamiksimulationen durchgeführt, um die Wechselwirkungsmechanismen von reaktiven Plasmaspezies mit Flüssigkeitsfilmen, welche die Viren umgeben, zu untersuchen“, so Forscherin Merkert. Diese Simulationsrechnungen werden verglichen mit Messungen an ummantelten Aerosol-Surrogatpartikeln.



*Schematische Darstellung der Idee: Bei der Inaktivierung von Viren in Aerosolpartikeln mit Hilfe von Plasma müssen Flüssigkeitsschichten berücksichtigt werden.*

## SWZ am Schwerpunktprogramm 2315 „Engineered Artificial Minerals“ beteiligt: Rückgewinnung von kritischen Rohstoffen aus metallischen Recycling-Schlacken

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, was speziell für wirtschaftsstrategische Rohstoffe in geringen Konzentrationen kritisch ist. Daher werden pyrometallurgische Prozesse eingesetzt, bei denen allerdings ein Teil der Wertträger in die Schlacken ausgetrieben werden und bisher verloren gehen. Ein typisches Beispiel dafür ist das Recycling von Lithium-Ionen-Batterien. Die Rückgewinnung der häufig in geringen Konzentrationen enthaltenen Wertträger aus diesen Schlacken ist das Ziel des intern geförderten Leitprojektes „EnAM“ (Engineered Artificial Minerals) des Forschungsfeldes „Rohstoffsicherung und Ressourceneffizienz“ der TU Clausthal.

Aufbauend auf den Aktivitäten im EnAM-Leitprojekt hat die TU Clausthal, von deren Seite Professorin Ursula Fittschen und Professor Daniel Goldmann federführend beteiligt sind, in Zusammenarbeit mit der TU Bergakademie Freiberg bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) erfolgreich ein Schwerpunktprogramm (SPP 2315) mit dem Titel „Engineered Artificial Minerals – a Geometallurgical Tool to Recycle Critical Elements from Waste Streams“ beantragt. Im Rahmen dieses Programms sollen während einer sechsjährigen Förderphase in 19 Einzelprojekten unterschiedliche Aspekte des Recyclings von Schlacken erforscht werden.



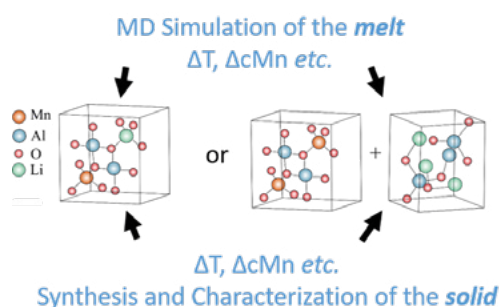
*Clausthaler Projektpartner in dem DFG-Schwerpunktprogramm SPP 2315 EnAM – „Engineered Artificial Minerals“, v.l.n.r.: Dr. Thomas Schirmer, Juniorprofessorin Nina Merkert, Professor Michael Fischlschweiger, Professorin Ursula Fittschen, Dr.-Ing. Annett Wollmann, Professor Alfred Weber, Professor Andreas Schmidt. Foto: Apl. Professorin Joanna Kolny-Olesiak.*

Die TU Clausthal konnte sich dabei erfolgreich mit fünf Projekten und einer Gesamtfördersumme von 1,93 Millionen Euro einbringen. Die Projekte, die im August 2021 bewilligt worden sind, befassen sich mit thermodynamischen Aspekten der Erstarrung von Schlacken, der Analyse von Material- und Phasenzusammensetzung, der Aufkonzentrierung der Zielkomponente in trockenen und nassen Sortierverfahren und der Herstellung von Kalibrierschlacken.

Professor Alfons Esderts, zur Zeit der Antragstellung Vizepräsident für Forschung, Transfer und Internationales an der TU Clausthal, begrüßt diesen Erfolg: „Die Universität sieht sich in ihrer Entscheidung bestätigt, die Entwicklung ihrer vier Forschungsfelder aktiv zu fördern und sieht gespannt den Ergebnissen der anderen Leitprojekte entgegen.“

Die fünf Projekte der ersten Förderphase sind:

- MEPP basierte Modellierung und Simulation von Phasentransformationen und Phasenentwicklungen im LAS System unter Berücksichtigung verschiedener kinetischer Phänomene bei der Erstarrung (Professor Michael Fischlschweiger, Institut für Energieverfahrenstechnik und Brennstofftechnik, TU Clausthal)
- Entstehung kritischer Verbindungen in Recycling Schlacken – eine Studie der Chemie der Schmelze mit MD Simulation und der festen Produkte in einem mikropräparativen Ansatz (Professorin Ursula, Institut für Anorganische und Analytische Chemie, TU Clausthal; Juniorprofessorin Nina Merkert, SWZ; Dr. Thomas Schirmer, Institut für Endlagerforschung, TU Clausthal)
- Untersuchung der Phasenbildung und Phasenkonstitution in den Systemen Li-Mg-Al-O und Li-Al-Mn-O unter besonderer Berücksichtigung von Spinell-Mischkristallen (Dr. Thomas Schirmer, Institut für Endlagerforschung, TU Clausthal; Professor Alfred Ludwig, Universität Bochum)
- Schaltbare selektive Sammler für die Flotation von künstlich erzeugten Mineralien (Professor Andreas Schmidt, Institut für Organische Chemie, TU Clausthal)
- Ladungsinduzierte trockene Aufkonzentrierung von lithiumhaltigen Komponenten in Schlacken-Feinpulvern (Professor Alfred Weber, Dr.-Ing. Annett Wollmann, Institut für Mechanische Verfahrenstechnik, TU Clausthal)



Schema der Projektidee: Schmelzstruktur und Polytypen werden mittels MD Simulationen bestimmt und die Chemie der festen Produkte mittels Experimenten ermittelt.

### Teilprojekt „Entstehung kritischer Verbindungen in Recycling Schlacken – eine Studie der Chemie der Schmelze mit MD Simulation und der festen Produkte in einem mikropräparativen Ansatz“

In diesem Teilprojekt wird gemeinsam mit Herr Dr. Thomas Schirmer (Institut für Endlagerforschung) und Frau Professor Ursula Fittschen (Institut für Anorganische und Analytische Chemie) zum einen mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen (MD) und zum anderen auf Basis von mikropräparativen Ansätzen das Verhalten der beim Recycling von z.B. Elektronikprodukten und Batterien entstehenden Schlacken untersucht.

Im Rahmen des Projektes soll u.a. der Einfluss von Mangan (Mn) auf die Bildung von  $\text{LiAlO}_2$  aus  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{MnO}$ ,  $\text{SiO}_2$ -Schmelzen analysiert werden. Mangan tritt insbesondere beim Recycling von Lithiumionen-Batterien, die vom Smartphone bis zum Elektroauto als Energiespeicher verwendet werden, auf und verändert die Bildung von Lithium-Verbindungen erheblich und behindert die Kristallisation von  $\text{LiAlO}_2$ .

Die Prozesse, die unmittelbar vor der Erstarrung in der Schmelze auftreten, werden mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen untersucht. Mit Hilfe von Mikroprobenpräparation, der Anwendung von Inkjet-Drucktechnologie und materialanalytischen Werkzeugen wird die Mikrostruktur der erstarrten Verbindungen charakterisiert. Ziel des Vorhabens ist es, die bei der Erstarrung der Schlacken relevanten Prozesse verstehen und vorhersagen zu können, um so das effiziente Recycling von Li-Ionen-Batterien und damit eine zirkuläre Batterieproduktion zu ermöglichen.

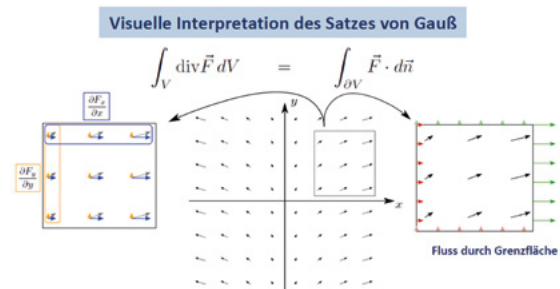


# Digitalisierung in der Lehre: Open Educational Resources

Im Rahmen der Ausschreibung „OER für den Hochschulbereich – Förderung der Erstellung, Pflege und Verbreitung von Open Educational Resources an den niedersächsischen Hochschulen“ wird am SWZ unter Leitung von Juniorprofessorin Nina Merkert und der Georg-August-Universität Göttingen unter Leitung von Professor Pascal Klein aus dem Bereich Didaktik der Physik seit Anfang 2022 ein Verbundvorhaben in Höhe von knapp 180.000 Euro gefördert.

Der Einsatz sogenannter Open Educational Resources (OER) wird seit langem als einer der wesentlichen Eckpfeiler in der Digitalisierung der Lehre sowie zur didaktischen Aufwertung der Lehre angesehen. Der Bedarf an solchen digitalen Lehr- und Lernformaten, die eine Selbstkontrolle der Studierenden ermöglichen, ist durch die Corona-Pandemie noch zusätzlich stark angestiegen. Das geförderte Projekt dient dem besseren Verständnis der Vektoranalysis, die für viele Studienanfängerinnen und Studienanfänger der Physik und der Ingenieurwissenschaften eine große Herausforderung darstellt. Das Ziel ist die Erstellung von OER-Materialien, die unter Einbezug verschiedener digitaldidaktischer Ansätze das Verständnis dieses komplexen Bereiches erleichtern werden. Diese Materialien reichen von erklärenden Videos über Übungen zur Selbstkontrolle bis hin zu Simulationen, welche die Eingabe beliebiger Felder, deren graphische Darstellung und die Berechnung von Kurven- und Flächenintegralen durch selbst gezeichnete Gebiete erlauben.

Eine Besonderheit stellt dabei der Einsatz der Eye Tracking-Technologie, wofür ein Eye-Tracking-Labor mit stationären (remote) Eye-Trackern und mobilen Eye-Tracking-Brillen an der Uni Göttingen zur Verfügung steht, dar. Damit werden Augen- und Blickbewegungen von Forschenden, die Richtung und Stärke von Kräften oder Geschwindigkeiten von Teilchen im Raum beobachten, rekonstruiert. Die Studierenden



lernen von diesem „Expertenblick“ und schulen ihre visuelle Aufmerksamkeit, indem sie sehen, wie Expertinnen und Experten relevante Informationen fokussieren und irrelevante ignorieren.

An der TU Clausthal wird das Modul beispielsweise in der Veranstaltung „Numerische Strömungsmechanik“ eingesetzt. Hier werden die mathematischen Grundlagen wie Vektorfelder, Divergenz und Rotation benötigt. Das Verständnis der Implementierung in den Strömungsmechaniksimulationen wird so vorangetrieben. Erste Simulationstools zu Vektorfeldern und -operationen sowie zur Beschreibung der Federkraft wurden bereits entwickelt. Die Federkraft in zwei Dimensionen erzeugt dabei ein Kraftfeld, welches in jedem Punkt durch einen Kraftpfeil mit Richtung und Länge charakterisiert wird. In weiterführenden Aufgaben wird diese Simulation als ein Beispiel für ein Vektorfeld, welches aus einzelnen Vektoren mit charakteristischer Länge und Richtung besteht, verwendet. Anhand dessen erlernen die Studierenden die Eigenschaften von Vektorfeldern. Mit Hilfe der Simulation von Vektorfeldern und Divergenz können Anwendungsbeispiele wie z. B. laminare Strömungen visualisiert und verstanden werden.

Durch die Expertise des SWZ werden aktuelle wissenschaftsnahe Anwendungsbeispiele eingebracht und damit die Relevanz der Themen betont und eine forschungsorientierte Lehre gefördert. Damit werden die Potentiale des SWZ als Schnittstelle zwischen beiden Universitäten genutzt.

Im Rahmen des Projektes bislang entwickelte Simulationstools:

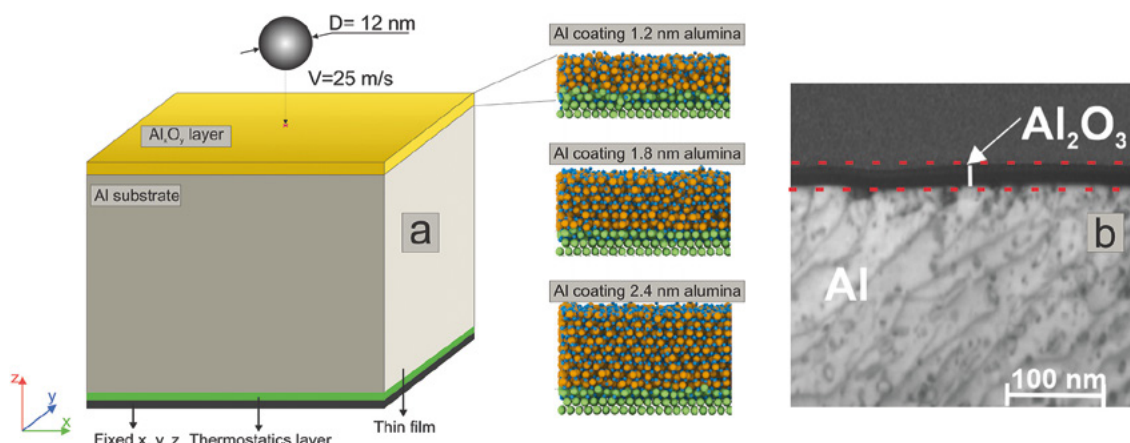
- <https://oer.simzentrum.de/rabbit-evolution.html>
- [https://oer.simzentrum.de/lin\\_accel.html](https://oer.simzentrum.de/lin_accel.html)

# DFG-Sonderforschungsbereich 1368 „Sauerstofffreie Produktion“

Der Sonderforschungsbereich 1368 wird seit 2020 von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert. Am SFB 1368 sind neben acht Instituten der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover auch vier Institute der Technischen Universität Clausthal sowie das Laser Zentrum Hannover e. V. beteiligt. In der Produktionstechnik ist Sauerstoff bei vielen Prozessen häufig ein wesentlicher Störfaktor. Im Sonderforschungsbereich soll der Sauerstoffgehalt auf bisher nicht erreichbar niedrige Werte reduziert werden. In einer sauerstofffreien Umgebung können neue, energieeffiziente und ressourcenschonende Prozesse und eine insgesamt effizientere Produktion realisiert werden.

Im von SWZ-Juniorprofessorin Nina Merkert geleiteten Teilprojekt CO<sub>5</sub> wird der Einfluss der Oxidschichten auf die physikalischen Eigenschaften der Bindung der Fügepartner mittels Molekulardynamik (MD) grundlegend untersucht. Voraussetzung hierfür ist die Wahl geeigneter Wechselwirkungspotenziale, welche die Materialeigenschaften der Verbundpartner wiedergeben und auch die Wechselwirkung mit Oxidschichtresten realistisch

beschreiben. In der ersten Förderperiode wurden geeignete Wechselwirkungspotenziale zur Modellierung des Einflusses der Oxidation auf tribologische Phänomene wie der Nanoindentation und der Zerspannung untersucht und verifiziert. Hierbei wurde ein Wechselwirkungspotential identifiziert, das die Modellierung der Nanoindentation von Aluminium unter Variation der Oxidschichtdicken in Übereinstimmung mit Experimenten aus Teilprojekt CO<sub>3</sub> „Werkzeugverschleißschutz“ ermöglicht. Die Oxidschicht zeigte sowohl experimentell als auch simulativ einen erheblichen Einfluss auf die Defektemission im Aluminium-Substrat. In einer gemeinsamen Studie mit den Teilprojekten CO<sub>3</sub> und AO<sub>5</sub> „Walzplattieren“, bei der gezeigt wurde, dass die Tribooxidation und der resultierende abrasive Verschleiß in einer silandotierten Atmosphäre unterdrückt werden, wurden tribologisch relevante Diffusionsprozesse in silandotierter Atmosphäre identifiziert. Der Einfluss von Sauerstoff an der Grenzfläche auf die Diffusionskonstanten wurde für verschiedene metallische Verbindungen und Temperaturen untersucht und es konnte gezeigt werden, dass die Diffusions-



Schematische Darstellung einer Nanoindentations-Simulation und Rasterkraftmikroskopie-Messung von Aluminium mit einer nativen Oxidschicht.



koeffizienten in sauerstofffreien Systemen erhöht sind, was zur Bildung von besonders hochwertigen, stoff-schlüssigen Verbindungen führt.



Simon Homann wurde auf SFB-Klausurtagung 2021 mit Studienpreis für sein Forschungspraktikum zum Thema „Molecular dynamics simulations of oxidation processes during machining of titanium work pieces“ ausgezeichnet, Foto: SFB 1368.

Bei Titanlegierungen können Oxidschichten auch ein großer Nachteil bei der Materialbearbeitung sein, wobei gezeigt wurde, dass Wolframkarbid-Werkzeuge in Anwesenheit von Sauerstoff schneller verschleifen. Ursache dieses Problems könnte sein, dass Oberflächenmaterial

der gebildeten Titanspäne - einschließlich der Oxide, in die Werkzeugoberfläche diffundieren kann. In einer im Rahmen des SFB-Teilprojekts C05 geleisteten Projektarbeit von SWZ-Masterstudent Simon Homann wurde deshalb mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen die offene Frage geklärt, ob Sauerstoff aus der Umgebungsluft während des Zerspanprozesses zwischen Span und Schneide gelangen kann. Die Ergebnisse zeigen, dass in der betrachteten Zeitspanne keine bis sehr geringe Oxidation an der Kontaktfläche stattfindet. Damit kann dies als Ursache dafür ausgeschlossen werden, dass Wolframkarbid-Werkzeuge in Anwesenheit von Sauerstoff schneller verschleifen.

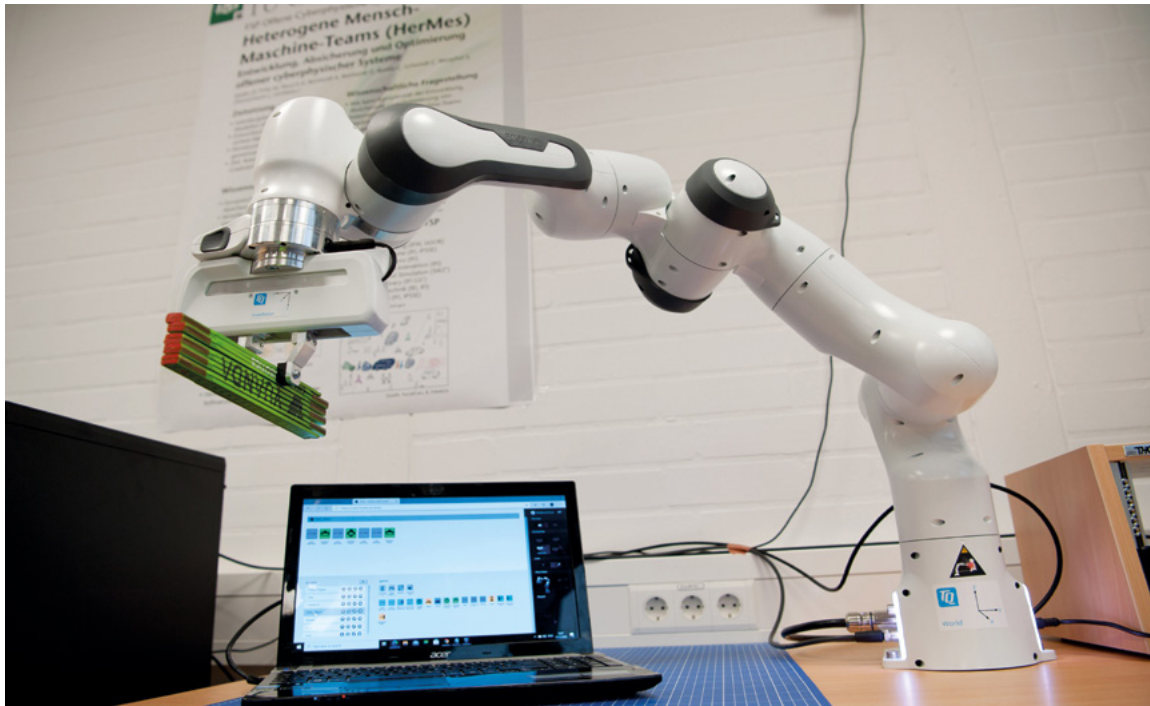
Für seine Arbeit mit dem Titel „Molecular dynamics simulations of oxidation processes during machining of titanium work pieces“ wurde Herr Homann 2021 mit dem SFB-Studienpreis ausgezeichnet. Diese Arbeiten wurden weitergeführt, indem der Schneidprozess von einkristallinem hcp-Titan mit und ohne Oxidschicht simuliert wurde. Im Rahmen des SFBs konnte Dr.-Ing. Hoàng Thiên Luu zudem am 24. Oktober 2022 seine Promotion mit dem Titel „Molecular dynamics simulations of plastic deformation in iron and aluminum: Influence of surfaces and interfaces“ mit der mündlichen Prüfung erfolgreich abschließen.



Promotion von Hoàng Thiên Luu, v.l.n.r.: Jun.-Prof. Dr. N. Merkert (SWZ), Dr. H.T. Luu (SWZ), Prof. Dr. H. M. Urbassek (TU Kaiserslautern), Foto: SWZ.

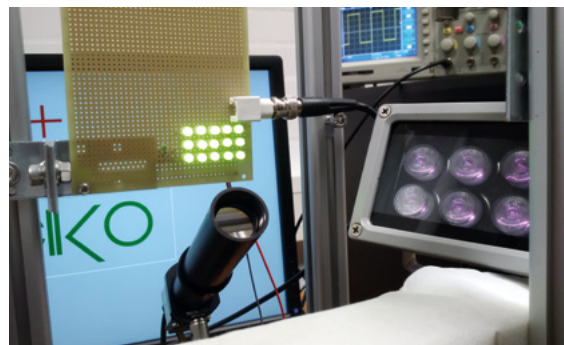


# Empathisch Intelligente, Kollaborierende Roboter



Kollaborierende Roboter (Kobots) können heute sicher und mit hoher Geschwindigkeit und Genauigkeit repetitive und wohldefinierte Aufgaben ausführen. Der Mensch zeichnet sich dagegen durch ein höheres Maß an Flexibilität und Improvisationsfähigkeit, durch soziale Intelligenz und umfassende kognitive Fähigkeiten aus – Eigenschaften, die man bei Kobots derzeit noch nicht vorfindet.

Einerseits verspricht eine Kombination dieser unterschiedlichen und komplementären Stärken erhebliche Nutzungspotentiale in zentralen Anwendungsfeldern wie beispielsweise industrieller Fertigung, Gesundheitswesen und Pflege, sowie Assistenzsystemen bei Anlagen und Fahrzeugen. Andererseits erfordert eben diese Kombination ein überaus hohes Maß an soziokognitiver und emotionaler Intelligenz der Roboter; ohne dieses ist eine flexible Zusammenarbeit in komplexen



Umgebungen und mit wechselnden menschlichen Partnern unmöglich. Unter empathischer Intelligenz versteht man dabei die fundamentale Fähigkeit, mentale Zustände und Handlungsabsichten des Partners zu verstehen und darauf kontextbezogen adaptiv zu reagieren. Das Fehlen von empathischer Intelligenz bei aktuellen Kobots ist der Hauptgrund für den immer noch geringen

Einsatz flexibler kollaborativer Mensch-Maschine-Teams (MMT) in der Praxis. Schon der einfachste Anwendungsfall – die situativ-einfühlsame Übergabe eines Gegenstandes, z.B. eines Werkstückes, erfordert eine aktuell nicht realisierbare Leistung des Roboters. Was Menschen intuitiv beherrschen, stellt die Maschine vor Probleme: Sie muss zum Beispiel abschätzen, ob der menschliche Partner überhaupt bereit ist, den Gegenstand zu übernehmen („Take-Over-Readiness“, TOR) und darauf entsprechend reagieren und ihre eigene Aufgabenplanung an die Situation anpassen. Die Gründe für diese Schwierigkeiten sind vielfältig. Es fehlen geeignete Daten sowie Sensorik, um relevante Zustandsmessungen (abgelenkt, interessiert, aufmerksam, ...) am Menschen vorzunehmen, es fehlt die Praxistauglichkeit abstrakter Modelle, welche auf den Daten aufbauen und Mensch und Maschine gemeinsam berücksichtigen, und, bei ungenügender Umsetzung, die Akzeptanz, falls Datensicherheit und -sparsamkeit bei diesen sehr persönlichen Daten nicht berücksichtigt wird.

Ersteres stellt die grundlegendste Forschungslücke dar: Eine wie auch immer ausgestaltete Messung am Menschen muss in der Praxis immer passiv und kontaktlos oder wenigstens – bezogen auf die Tätigkeit des Menschen – minimalinvasiv sein, um nicht mit z.B. einem Produktionsprozess oder Recyclingprozess zu interferieren. Sensorik, welche aus physiologischen Messungen (Gehirnaktivität, Atmung, Puls o.ä.) Daten zum emotionalen Zustand des Menschen sammelt, hat bisher zu inakzeptablen Einschränkungen der Arbeitstätigkeit durch Kabel, komplexe Aufbauten und Störanfälligkeit geführt. Diese Einschrän-

kung dürfen künftige Messungen im Einsatz nicht haben. Künstliche Empathische Intelligenz (KEI) für Roboter ist ebenfalls Gegenstand aktuellster Forschung. Ergebnisse werden hier dringend benötigt, denn es existieren erschreckende Beispiele für das Fehlen von KEI in der Praxis: Zum Beispiel wurde erst nach der Einführung von Fahrerassistenzsystemen die Fragestellung aufgeworfen, inwiefern der Autopilot bei der Übergabe der Fahrzeugkontrolle durch den Autopiloten an den Menschen überhaupt weiß, ob der Mensch in dem Moment dazu bereit ist.

Die daraus entstehende Gefahr liegt klar auf der Hand; ihr lässt sich nur durch die Berücksichtigung situativ-empathischer Information begegnen. Auch in der Fertigung treten diese Probleme auf und führen zu Konflikten oder Gefahren. Zu erforschen sind demnach Methoden, durch die Kobots befähigt werden, konfliktfrei und gefahrloser Hand in Hand mit dem Menschen zu arbeiten.

Kobots stellen mithin eine wichtige Zukunftsvision für die Digitalisierung der Industrie dar. Ein Zusammenarbeiten von Menschen mit Robotern kann allerdings erst dann auf dem Niveau echter Mensch-Mensch-Kollaboration funktionieren, wenn Kobots, ähnlich zu uns, empathische Intelligenz aufweisen. Eine weit gespannte und innovative Problemstellung, die wie im Clausthaler und Göttinger Verbundprojekt „Kognitiv und Empathisch Intelligente Kollaborierende Roboter“ – KEIKO eine interdisziplinäre Anstrengung unterschiedlicher Forschungsbereiche in der Verbindung von Software- und Hardware Forschung mit Psychologie und Modellierung erfordert.



## KEIKO: Verbundprojekt zwischen Clausthal und Göttingen am SWZ

Das Förderprojekt KEIKO entstand aus Forschungsergebnissen des von der TU Clausthal finanzierten Vorprojektes Heterogene Mensch-Maschine-Teams (HerMes). Untersucht wurde und wird die Verknüpfung von Mensch und Maschine zu einem gemeinsamen, kooperativ arbeitenden Team, in dem sich der Roboter auf den Menschen einstellt, statt der Anpassung des Menschen an den Roboter – Menschzentriertheit im eigentlichen Sinne.

In sechs unterschiedlichen Teilprojekten werden Vertrauensschätzung und -bildung zwischen Menschen und Kobots, Prädiktion von menschlichen Bewegungstrajektorien, Anpassung und Optimierung der Kobotbewegungen, menschliche Verhaltensmuster, die Erfassung physiologischer und psychologischer Parameter sowie Datenfusion erforscht.

Mit datengetriebener Modellierung von menschlichem Verhalten sowie der maschinellen Prädiktion von menschlichen Handlungsabsichten und Bewegungstrajektorien sollen Prädiktionen für die Steuerung eines Kobots erfolgen. Andererseits werden aus neuropsychologischen Untersuchungen emotionsbasierte Parameter abgeleitet, deren kontaktlose Messung im Zusammenspiel mit Wearables, am Körper getragener drahtloser Sensorik, die Datenbasis schaffen soll, die emotional empfindsame Kobots möglich macht.

Die Erforschung von Emotion, Kognition und Verhalten, und wie diese durch Bedingungen der Umgebung und individuelle Unterschiede moduliert werden können, auch unter Berücksichtigung sozialer Aspekte; Handlungsfehler zu erkennen aufgrund falscher gegenseitiger Intentions- und Bewegungsvorhersagen, und die konfliktfreie Vermeidung bzw. Abmilderung von Fehlern sind somit die Ziele der Verbundforschung. Demonstriert werden sollen die Erkenntnisse an einem Kobot, der am Ende des Projektes somit befähigt sein soll, eine einfache (De-)Montagetätigkeit Hand in Hand mit einem Menschen auszuführen.

Gefördert wird das Projekt im Rahmen des Programms SPRUNG mit über 1,7 Mio. Euro durch das Ministerium für Wissenschaft und Kultur in Niedersachsen. Ab dem 1. Januar 2023 wird KEIKO am Simulationswissenschaftlichen Zentrum Göttingen-Clausthal zentral koordiniert und am Demonstrator umgesetzt.

Verbundpartner sind Prof. Dr. Annetrin Schacht und Prof. Dr. Florentin Wörgötter von der Universität Göttingen sowie Prof. Dr. Jörg Müller, Prof. Dr. Andreas Reinhardt und Prof. Dr. Christian Rembe von der TU Clausthal. Außerdem arbeitet Prof. Dr. Michael Prilla an dem Projekt mit, der letztes Jahr von der TU Clausthal an die Universität Duisburg-Essen gewechselt ist.





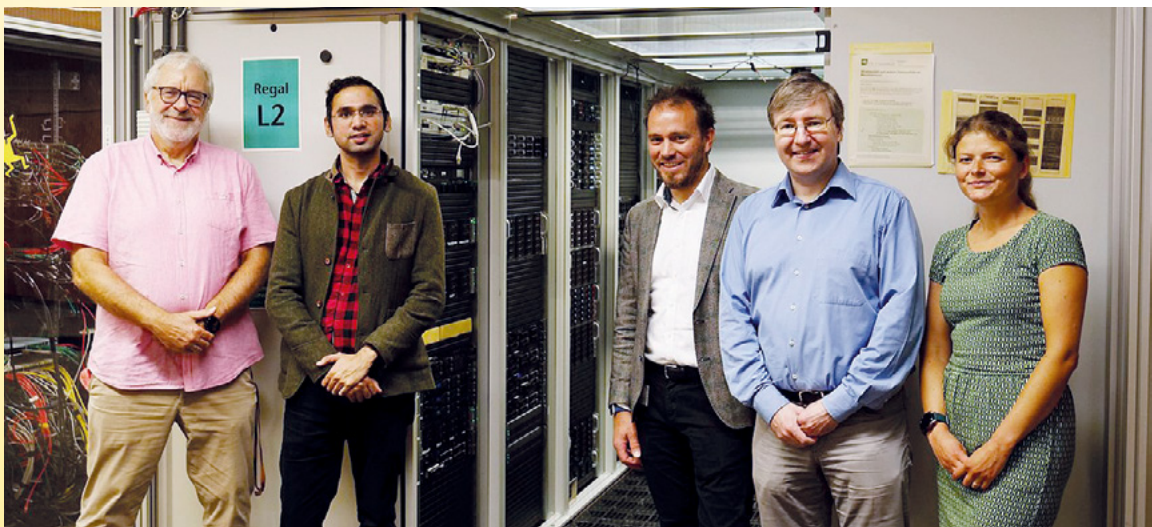
# Ausbau der IT-Infrastruktur für die Forschung am SWZ

Deep Learning ist eine spezielle Methode zur Informationsverarbeitung und wird mittlerweile in zahlreichen Fachgebieten zur Analyse großer Datensätze verwendet. Umfangreiche Datenmengen werden zunächst von Algorithmen extrahiert, anschließend analysiert, um dann eine Schlussfolgerung oder Prognose über eine bestimmte Fragestellung abzuleiten. Das Erkennen von Mustern oder Dingen auf 2D-Bildern oder 3D-Umgebungen, das Verständnis von Texten oder die Optimierung von Entscheidungsprozessen stellen nur eine Auswahl von potentiellen Möglichkeiten der Methode dar. Ein typisches Beispiel ist die Fragestellung, ob sich ein bestimmtes Objekt wie eine Katze auf einem Foto befindet. Diese für einen Menschen triviale Aufgabe stellte ein Computerprogramm bis vor wenigen Jahren vor eine nahezu unlösbare Herausforderung. Erst als Rechner in die Lage versetzt wurden, automatisiert aus großen Datenmengen zu lernen, konnten sie diese Aufgaben mit hoher Zuverlässigkeit lösen. Für das Erkennen eines Objektes müssen viele

fachspezifische Informationen wie das Aussehen aus unterschiedlichen Perspektiven oder das Farb- oder Größenspektrum vorliegen.

An der TU Clausthal forscht die Arbeitsgruppe um Professor Jens-André Paffenholz vom Institute of Geo-Engineering im Bereich der raum-zeitlichen Überwachung künstlicher und natürlicher Objekte mit Hilfe von 3D-Punktwolken, die mit Hilfe von Multisensorsystemen effizient erfasst werden können. Mögliche Objekte oder Szenarien können von der Phänotypisierung von Pflanzen bis zu Infrastrukturgebäuden und untertägigen Bergbauszenarien reichen. Neben der Identifikation von natürlichen und anthropogenen Geometrien wird eine systematische Change Detection möglich, d.h. die Erfassung von Veränderungen teils komplexer Strukturen. Auch die Leistungscharakterisierung von Laserscannern und Kameras in verschiedenen Maßstäben wird ermöglicht. Für ein aktuelles Projekt wird eine leistungsstarke GPU genutzt, um dichte Tiefeninformationen aus Stereobildern mit Hilfe inhärenter geometrischer

*Frank Ebeling (Rechenzentrum TU Clausthal), Waseem Iqbal (Institute of Geo-Engineering), Professor Jens-André Paffenholz (Institute of Geo-Engineering), Dr. Alexander Herzog (SWZ) sowie Natalia Rentzsch (Rechenzentrum), v.l.n.r. Foto: Rechenzentrum.*



Beschränkungen unter Verwendung eines auf Deep Learning basierenden Ansatzes zu rekonstruieren. Tiefeninformationen sind eine Schlüsselkomponente in vielen Anwendungen wie Robotik, 3D-Modellrekonstruktion, semantische Segmentierung und allgemeinem Objekttracking (von z.B. Fahrzeugen), die Disparitäts-/Tiefenschätzungen in allen Bildregionen erfordern, auch in solchen, die verdeckt, spärlich und ohne eindeutige Merkmale sind.

Das generelle Anwendungsspektrum für die Methodik wächst kontinuierlich. Deep Learning ist jedoch extrem rechenintensiv. Ein Deep Learning-Training kann Wochen oder Monate andauern, um gute Vorhersagen und Entscheidungen treffen zu können, da je nach Komplexität der Aufgabenstellung Millionen von Modell-Parametern verarbeitet werden müssen. Leistungsstarke Grafikprozessoren, sogenannte GPUs, werden hierbei für immer mehr Aufgaben des Deep Learnings genutzt, da sie neben Funktionen wie naturgetreuen Darstellungen in Videospielen auch als Mehrzweck-Parallelprozessoren geeignet sind. An der TU Clausthal hat sich ein durch mehrere Forschungsgruppen gemeinsam genutzter, vom Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) koordinierter Compute-Cluster etabliert. Der 2019 initial eingerichtete und seitdem aufgrund steigender Nutzerzahlen kontinuierlich ausgebaut Cluster bietet als gemeinsame



Aufnahme einer 3D-Punktwolke der Aula Academica der TU Clausthal mittels des terrestrischen Laserscanners Leica RTC360. Auch um solche Aufnahmen umsetzen zu können, ist der Rechencluster des SWZ um einen leistungsstarken Grafikprozessor erweitert worden. Foto: Institute of Geo-Engineering/TUC.

Infrastruktur gegenüber kleineren Insellösungen erhebliche Synergieeffekte und fördert durch das Zusammenführen von Knowhow die interdisziplinäre Zusammenarbeit. Die im August 2022 aus Mitteln des SWZ angeschaffte und in das System integrierte Nvidia A100 GPU erweitert die Möglichkeiten des Clusters nun insbesondere im Bereich des Deep Learnings sowie in Bezug auf Simulationsmodelle, die wiederkehrende Rechenoperationen auf große Datenmengen anwenden, erheblich. Die Rechenressource wird durch das Rechenzentrum der TU Clausthal betrieben.

### Technische Daten des Rechenclusters

- **Knoten 1:**
  - CPUs: 2x AMD Epyc 7281 (insgesamt 32 physische Kerne)
  - RAM: 1024 GB
  - Über das RZ der TU Clausthal für alle Mitarbeitenden direkt zugänglich
- **Knoten 2:**
  - CPUs: 2x AMD Epyc 7282 (insgesamt 32 physische Kerne)
  - RAM: 1024 GB
  - Hauptsächlich von den chemischen Instituten genutzt
- **Knoten 3:**
  - CPUs: 2x AMD Epyc 7281 (insgesamt 32 physische Kerne)
  - RAM: 512 GB
  - Hauptsächlich vom SWZ genutzt
- **Knoten 4:**
  - CPUs: 2x AMD Epyc 7502 (insgesamt 64 physische Kerne)
  - Rechenbeschleuniger: Nvidia Tesla T4, Nvidia A100
  - RAM: 1024 GB
  - Hauptsächlich von SWZ, Software Systems Engineering und Geo-Engineering genutzt

Alle Rechenknoten sind in das Forschungsnetzwerk der TU Clausthal integriert. Insbesondere stehen damit die Festspeichersysteme im Rechenzentrum der TU Clausthal für die Datenablage zur Verfügung.



## SWZ-Technologietransferprojekt „Digitaler Zwilling des Walzwerks der AG der Dillinger Hüttenwerte – Abbildung von Energie- und Roh- stoffströmen“

Die Gruppe Dillinger produziert ca. 2 Mio. Tonnen an Grobblechen pro Jahr, die u.a. zu Offshore-Windrattürmen, Brückenträgern und Pipelines weiterverarbeitet werden und damit wichtige Basiselemente zur Dekarbonisierung von Energieerzeugung und -transport bilden. Eine große aktuelle Herausforderung besteht darin, die Produktion der Grobbleche selbst ebenfalls CO<sub>2</sub>-neutral zu gestalten. Klassisch erfolgt die Reduktion von Eisenerz (Eisenoxid) zu Roheisen mit Hilfe von Koks Kohle. Als Nebenprodukte entstehen dabei abgesehen von CO<sub>2</sub> auch weitere technisch nutzbare Gase. Eine Umstellung auf eine Reduktion des Eisenerzes mit Hilfe von Wasserstoff und ein Einschmelzen für den Strangguss mit Hilfe eines Elektroofens erfordert zukünftig nicht nur große Mengen an Wasserstoff und Strom, sondern verändert auch alle weiteren Stoffströme im Werk.

Um diese Abhängigkeiten zu analysieren und im Vorfeld der geplanten Errichtung eines Elektroofens am Standort Dillingen die logistischen Rahmenbedingungen vorzubereiten bzw. Produktionsschritte, die bislang Nebenprodukte des Hochofenprozesses weiterverarbeitet haben, rechtzeitig umzustellen, haben das SWZ und die Gruppe Dillinger im Herbst 2022 ein gemeinsames Projekt mit einer Laufzeit von 4¼ Jahren vereinbart. Dillinger wird die Forschung am SWZ während der Laufzeit des Projektes mit insgesamt 270.000 Euro unterstützen.

Das Projekt schließt an frühere gemeinsame Vorarbeiten zur Optimierung der logistischen Prozesse im Walzwerk an und erweitert die gemeinsam entwickelten Simulationsmodelle auf alle Prozesse vom Hochofen über das Stahlwerk

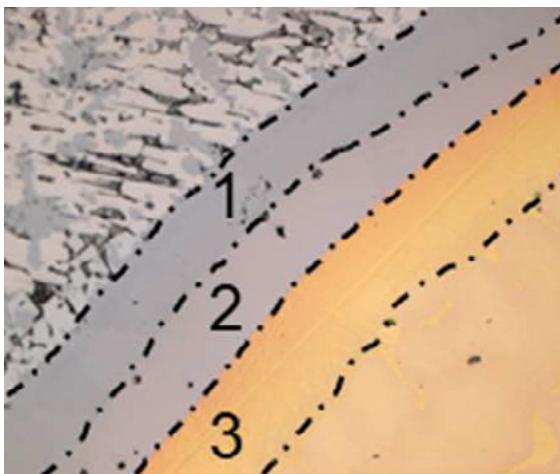


Leitwarte Sinteranlage Dillingen, Foto: Uwe Braun, SHS – Stahl-Holding-Saar.

bis hin zum Walzwerk. Gleichzeitig erfolgt eine Ausdehnung des Betrachtungsgegenstands von bislang primär den Blechen zukünftig auch auf Energie- und Rohstoffströme. Um dynamische, nicht vorab absehbare Effekte berücksichtigen zu können, wird ein stochastisches Modell aufgebaut. Perspektivisch sollen dabei auch Konzepte der dynamischen Budgetplanung und des Revenue Managements in das Projekt einfließen.



# DFG-Projekt „Grenzflächenreaktion und Diffusionskinetik an der fest-flüssig Phasengrenze von Verbundgusspartnern im System Al-Cu-Zn“



Mikrostruktur an der Grenzfläche zwischen AA6060 – CuZn37.

Im Oktober 2022 wurde von der DFG eine Förderung für das Projekt „Grenzflächenreaktion und Diffusionskinetik an der fest-flüssig Phasengrenze von Verbundgusspartnern im System Al-Cu-Zn: Experimente und Mehrskalensimulationen“ im Gesamtumfang von fast einer Million Euro für die Dauer von 3 Jahren bewilligt.

Die Möglichkeit, Materialien mit unterschiedlichen mechanischen, chemischen und physikalischen Eigenschaften in einem Bauteil zu kombinieren, führt zur Entwicklung von Hybridbauteilen mit verbesserten Eigenschaften. Dabei ist das Verbundgussverfahren eine effiziente Methode, um diese herzustellen. Die Entwicklung der intermetallischen Phasen ist hier der wesentliche Einflussfaktor für die Leistung des endgültigen Bauteils. Deshalb ist das Verständnis und die Kontrolle der Bildung und des Wachstums dieser intermetallischen Phasen der Schlüsselfaktor für die Optimierung der Verbundfestigkeit neu entwickelter Hybridbauteile.

Ziel des Projekts ist die Erstellung eines sequentiellen Mehrskalensmodells zur Vorhersage des Wachstums intermetallischer Phasen zwischen Aluminium und Messing beim Verbundguss. Dies bietet die Möglichkeit, geeignete Prozessparameter für eine feste Verbindung in Verbundguss- oder Schweißprozessen zu bestimmen und so die Erzeugung von Hybridbauteilen zu optimieren. Beteiligt an dem Projekt sind Professorin Babette Tonn, Leiterin der Abteilung Gießereitechnik, Professor Harald Schmidt, Leiter der AG Festkörperkinetik sowie Juniorprofessorin Nina Merkert, Vorstandsvorsitzende des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen (SWZ).

## SWZ-Technologietransferprojekt „Digitaler Zwilling der Lebensmittel- qualitätssicherungslabore der BASF“

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 Tierernährung 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:



*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 zu treffen, Foto: BASF Nutrition & Health.*

Treffen mehr Proben aus einem Fertigungszweig ein, so hat dies aufgrund der begrenzten Kapazität der Labore auch Auswirkungen auf die Durchlaufzeiten aller anderen Proben.

Um diese Abhängigkeiten zu analysieren, die Durchlaufzeiten in Bezug auf zukünftige Auftragseingänge möglichst präzise zu schätzen und auch um mögliche Investitionsentscheidungen in Bezug auf ihre Auswirkungen auf die Gesamtleistung der Labore bewerten zu können, haben das Simulationswissenschaftliche Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) und die BASF im Frühjahr 2022 ein gemeinsames Projekt gestartet: der Digitale QC-Zwilling. In dem Projekt werden die Verzweigungen verschiedener Probentypen untersucht, die sich auf mehrere Analysestationen im Labor verteilen. Es werden dabei notwendige Bedienzeiten an den jeweiligen Laborständen unter die Lupe genommen, aber auch die einzelnen Verkettungen verschiedener Stationen, an denen Mitarbeitende eingesetzt werden.

Die konkreten Analysen und Modellierungen erfolgen in enger Abstimmung zwischen den Fachabteilungen bei der BASF und der Arbeitsgruppe an der TU Clausthal. Auf diese Weise können an der Universität erarbeitete wissenschaftliche Konzepte und Analyseverfahren schnell in die praktische Anwendung gebracht und Berechnungsverfahren direkt in Produktionsplanungswerkzeuge integriert werden.

Auf Basis der ermittelten Daten wird ein Simulationsmodell aufgestellt, bestehend aus knapp 500 Komponenten. Mit Hilfe dieses Modells kann sowohl untersucht werden, welche Durchlaufzeiten sich für bestimmte Proben unter verschiedenen zukünftigen Auftragseingangsszenarien ergeben, als auch, welche organisatorischen Veränderungen oder auch Investitionen einen wie starken positiven Einfluss auf Durchlaufzeiten und damit die Liefertreue haben.



# Beirat des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen

Das Simulationswissenschaftliche Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) verfügt über einen externen Beirat, der die wissenschaftliche Arbeit am Zentrum begleitet, es in Bezug auf die strategische Ausrichtung berät und zur Qualitätssicherung beiträgt. Die Beiratsmitglieder sind auf den Gebieten der Mathematik, Informatik, Materialwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Simulationswissenschaften ausgewiesene Forscherinnen und Forscher, die so zusätzliche Expertise in das SWZ hineinbringen und die aktuellen Entwicklungen und Pläne beurteilen können. Der Beirat wird auf Vorschlag des Vorstands des SWZ von den Präsidien der beiden Partneruniversitäten bestellt. Die Amtszeit beträgt jeweils 6 Jahre. Für die Amtszeit von Mai 2021 bis April 2017 wurden folgende Personen in den Beirat berufen:

- **Prof. Dr. Franziska Klügl**  
(Universität Örebro, Schweden, Agentenbasierte Simulation)
- **Prof. Dr. Ulrich Rieder**  
(Universität Ulm, Optimierung und Operations Research)
- **Prof. Dr. Siegfried Schmauder**  
(Universität Stuttgart, Materialwissenschaft)
- **Prof. Dr. Anita Schöbel**  
(Leiterin des Fraunhofer ITWM, Ganzzahlige Optimierung)
- **Prof. Dr. Ing. Sigrid Wenzel**  
(Universität Kassel, Produktionsorganisation und Fabrikplanung)
- **Prof. Dr. Horst Zisgen**  
(Hochschule für angewandte Wissenschaften Darmstadt, Statistik)

Der Beirat spiegelt damit die wissenschaftliche Breite des SWZ wider. Auf der konstituierenden Sitzung des SWZ Beirats am 22.7.2021 wurde Frau Wenzel zur Vorsitzenden und Herr Zisgen zum stellvertretenden Vorsitzenden des Beirats gewählt.

Das SWZ bedankt sich für die Unterstützung durch die Beiratsmitglieder und freut sich auf eine gute Zusammenarbeit!

# Weitere Nachrichten

.....  
27  
.....

## Experte für Luftfahrtinformatik

### **Privatdozent Dr. habil. Umut Durak ist an der TU Clausthal der Titel außerplanmäßiger Professor verliehen worden.**

Übergeben wurde die Urkunde von Universitätspräsident Professor Joachim Schachtner, der damit das umfangreiche Engagement Umut Duraks in Forschung und Lehre würdigte. Der Wissenschaftler ist am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) beschäftigt und daneben seit 2014 als Lehrbeauftragter und seit 2018 als Privatdozent an der Technischen Universität Clausthal tätig.

Umut Durak hat an der Technischen Universität des Nahen Ostens in Ankara Maschinenbau studiert und wurde dort auch promoviert. 2013 wechselte er als wissenschaftlicher Mitarbeiter an das DLR-Institut für Flugsystemtechnik in Braunschweig. Parallel zu seiner Lehrtätigkeit an der TU Clausthal habilitierte sich Dr.-Ing. Umut Durak an der Harzer Universität für das Fach „Model-Based Simulation Systems Engineering“.

Umut Durak arbeitet seit mehr als 15 Jahren in verschiedenen Bereichen der Luftfahrtinformationstechnologie. Derzeit ist er Gruppenleiter der Arbeitsgruppe „Abgesicherte Embedded Systems“

am DLR, die sich mit der Forschung zur Einsatzfähigkeit neuer Informations- und Kommunikationstechnologien (ICT) für sicherheitskritische Avionik-Anwendungen beschäftigt.

An der TU Clausthal bringt sich Professor Durak am Institut für Informatik ein. Er koordiniert die Forschungsgruppe „Aeronautical Informatics“ und hält zum Beispiel auf diesem Gebiet sowie für „Simulation Engineering“ Vorlesungen. Daneben ist Umut Durak Mitglied im Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal-Göttingen.



*Professor Umut Durak (links) hat die Urkunde von Universitätspräsident Professor Joachim Schachtner entgegen genommen, Foto: Melanie Bruchmann.*

---

## MRS Spring Meeting 2021: Best Poster Award Nominierung für Daniel Thürmer

### **SWZ-Wissenschaftler Daniel Thürmer auf dem MRS Spring Meeting 2021 für den Best Poster Award nominiert**

Daniel Thürmer wurde mit seinem Poster mit dem Titel „Exceptionally High Spallation Strength for a High-Entropy Alloy Demonstrated by Experiments and Simulations“ für den Best Poster Award auf

dem digitalen MRS Spring Meeting 2021 nominiert. In seiner unter Leitung von SWZ-Juniorprofessorin Merkert erstellten Arbeit untersucht der SWZ-Doktorand mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen Hochentropie-Legierungen, die vielfältige technologische Anwendungen haben. Gemeinsam mit Kollaborationspartnern aus den USA, Argentinien und Deutschland wurde die

stoßinduzierte Spallation oder Ablösung einer Hochentropie-Legierung mittels atomistischen Simulationen und Experimenten untersucht. Sowohl Experimente als auch Simulationen zeigen eine sehr hohe Splitterfestigkeit, was auf eine hohe Leistung der Legierung bei ultrahohen Verformungsraten schließen lässt.



## SWZ-Vorstandsmitglied Dr.-Ing. Andreas Reinhardt zum Professor für Energieinformatik an der TU Clausthal berufen

Im Rahmen des Programmes „Digitalisierungsprofessuren für Niedersachsen“ wurde Dr.-Ing. Andreas Reinhardt zum Professor für Energieinformatik an der TU Clausthal berufen. Der Forschungsschwerpunkt von Professor Reinhardt liegt im Entwurf sensorbasierter Systeme zur dezentralen Datenerfassung und -verarbeitung sowie in der KI-basierten Extraktion höherwertiger Information aus diesen Daten, zum Beispiel zur Überwachung von Energienetzen oder der Digitalisierung von Haushalten und Industrieanlagen. Andreas Reinhardt hat an der Technischen Universität Darmstadt studiert (Elektrotechnik und Informationstechnik, Schwerpunkt Datentechnik) und 2011 promoviert. Als Postdoktorand sammelte er an der University of New South Wales in Sydney internationale Erfahrung, bevor 2014 als Vertretungsprofessor an die TU Clausthal kam. Im Oberharz habilitierte er sich 2019, nachdem er 2018 die Leitung der Abteilung für „Energieinformationsnetze und -systeme“ übernommen hatte. Professor Reinhardt ist Mitglied des Vorstands des SWZ.



Professor für Energieinformatik Andreas Reinhardt (rechts) erhält seine Ernennungsurkunde von Clausthals Universitätspräsident Professor Joachim Schachtner, Foto: Christian Ernst.



# Mitglieder des SWZ

## Professoren und Lehrstuhlvertreter

- Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum  
(Stellvertretender Vorstandsvorsitzender)  
Arbeitsgruppe Datenfusion, Institut für Informatik, Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner  
Arbeitsgruppe Strömungsmechanik,  
Institut für Technische Mechanik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Jürgen Dix  
Arbeitsgruppe Computational Intelligence,  
Institut für Informatik, Technische Universität Clausthal
- apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Umut Durak  
Arbeitsgruppe Aeronautical Informatics,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Xiaoming Fu  
Arbeitsgruppe Computer Networks Group,  
Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr. Leonhard Ganzer  
Arbeitsgruppe Lagerstättentechnik,  
Institut für Erdöl- und Erdgastechnik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Jens Grabowski  
Arbeitsgruppe Softwaretechnik für Verteilte Systeme,  
Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr. Thorsten Grosch  
Arbeitsgruppe Graphische Datenverarbeitung und Multimedia,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Thomas Hanschke  
Arbeitsgruppe Stochastische Modelle in den Ingenieurwissenschaften,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann  
Arbeitsgruppe Festkörpermechanik,  
Institut für Technische Mechanik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Dieter Hogrefe  
Arbeitsgruppe Telematik, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr. Olaf Ippisch  
Arbeitsgruppe Wissenschaftliches Rechnen,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Diethelm Johannsmann  
Institut für Physikalische Chemie,  
Technische Universität Clausthal
- Jun.-Prof. Dr. Nina Merkert  
(Vorstandsvorsitzende)  
Arbeitsgruppe Computational Material Sciences,  
Institut für Technische Mechanik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Jörg Müller  
Arbeitsgruppe Wirtschaftsinformatik,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Gerlind Plonka-Hoch  
Arbeitsgruppe Mathematische Signal- und Bildverarbeitung,  
Institut für Numerische und Angewandte Mathematik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr. Andreas Rausch  
Institut für Software Systems Engineering,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr.-Ing. Andreas Reinhardt  
Arbeitsgruppe Energieinformatik,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr.-Ing. Christian Rembe  
Arbeitsgruppe Messtechnik,  
Institut für Elektrische Informationstechnik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr.-Ing. Babette Tonn  
Arbeitsgruppe Gießereitechnik, Institut für Metallurgie,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Stephan Waack  
Arbeitsgruppe Theoretische Informatik und Algorithmische Methoden,  
Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Prof. Dr. Stephan Westphal  
Arbeitsgruppe Diskrete Optimierung, Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal
- Prof. Dr. Ramin Yahyapour  
Arbeitsgruppe Praktische Informatik, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen

## Wissenschaftliche Mitarbeiter

- Tobias Ahlbrecht, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Computational Intelligence,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Martin Dahmen, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Diskrete Optimierung,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal
- Johannes Erbel, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Softwaretechnik für Verteilte  
Systeme, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Niklas Fiekas, B.Sc.  
Arbeitsgruppe Computational Intelligence,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal
- Vanessa Glück Nardi, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Gießereitechnik,  
Institut für Metallurgie,  
Technische Universität Clausthal
- Dr. Alexander Herzog  
Geschäftsführer des Simulationswissenschaftlichen  
Zentrums, Arbeitsgruppe Stochastische  
Modelle in den Ingenieurwissenschaften,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal
- Dipl.-Math. Verena Herbold  
Arbeitsgruppe Softwaretechnik für Verteilte  
Systeme, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Dipl.-Inf. Daniel Honsel  
Arbeitsgruppe Theoretische Informatik und  
Algorithmische Methoden, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Sakif Hossain, M.Sc.  
Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- Dr. Hoang-Thien Luu  
Arbeitsgruppe Computational Material Sci-  
ences, Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- PD Dr.-Ing. habil. Marco Mancini  
Arbeitsgruppe CFD, Institut für Energie-  
verfahrenstechnik und Brennstofftechnik,  
Technische Universität Clausthal
- Dr. Robert Mettin  
Arbeitsgruppe für Molekulare und Zelluläre  
Biophysik, Drittes Physikalisches Institut,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Felix Merz, M.Sc.  
Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- Alexander Plack, B.Sc.  
Arbeitsgruppe Computational Material  
Sciences, Simulationswissenschaftliches  
Zentrum Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- Niels Rohweder, M.Sc.  
Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- Dr. Jochen Schulz  
Arbeitsgruppe Optimierung, Institut für  
Numerische und Angewandte Mathematik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Dr. Masoom Shaban  
Arbeitsgruppe Computational Material  
Sciences, Simulationswissenschaftliches  
Zentrum Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal
- Fabian Siggés, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Datenfusion, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen
- Daniel Thürmer, M.Sc.  
Arbeitsgruppe Computational Material  
Sciences, Simulationswissenschaftliches  
Zentrum Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal

Die Kontaktdaten der SWZ-Mitglieder finden Sie  
auf der SWZ-Homepage:

**[www.simzentrum.de/personen/mitglieder](http://www.simzentrum.de/personen/mitglieder)**

.....

31

.....



**Postanschrift**

Simulationswissenschaftliches Zentrum Clausthal-Göttingen  
Geschäftsstelle  
Dr. Alexander Herzog  
Arnold-Sommerfeld-Straße 6  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
E-Mail: [simzentrum@tu-clausthal.de](mailto:simzentrum@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)