

# Bericht 2019–2020



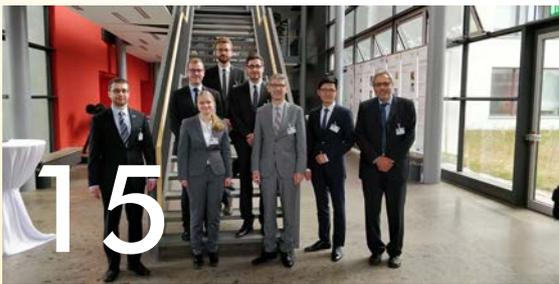
Zweiter Internationaler Clausthal-Göttingen  
Workshop on Simulation Science



# Bericht 2019–2020

Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen

2



# Inhalt

Vorwort.....	3
Zweiter Internationaler Clausthal-Göttingen Workshop on Simulation Science.....	4
International Teaching Staff Week .....	10
SWZ-Juniorprofessor Dr.-Ing. Marcus Baum zum W3-Professor an der Universität Göttingen berufen .....	14
DFG-Sonderforschungsbereich 1368 „Sauerstofffreie Produktion“ .....	15
DFG-Vorhaben „Einfluss von Oxidschichten auf die plastischen Eigenschaften von Metallen: Von der atomistischen zur mesoskopischen Skala“ .....	17
SWZ-Industrieprojekt „Digitaler Logistikwilling“ für das Walzwerk der AG der Dillinger Hüttenwerke .....	18
Rechenressourcen für die SWZ-Wissenschaftler .....	20
Virtual-Reality-Labor am SWZ .....	22
Vorstand des SWZ .....	23
Clausthaler Graduiertenschule zur Mensch-Maschine-Interaktion (HerMes) .....	24
Digitalisierung für nachhaltige Mobilität .....	27
Weitere Nachrichten .....	28
Mitglieder des SWZ .....	33

# Liebe Leserinnen und Leser,

.....  
3  
.....

mit diesem Jahresbericht möchten wir Sie über die Aktivitäten des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen (SWZ) und seiner Mitglieder in den Jahren 2019 und 2020 informieren. Bei der vorliegenden Zusammenstellung von Themen und Projekten handelt es sich um den inzwischen vierten Zweijahresbericht seit der Gründung des SWZ am 1. Januar 2013 durch die beiden Partneruniversitäten Clausthal und Göttingen.

Die 2017 in Göttingen gestartete SWZ-Konferenzreihe „Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science“ wurde 2019 mit einer zweiten Auflage in Clausthal fortgesetzt. Rund 100 Teilnehmerinnen und Teilnehmer vermittelten ein positives Feedback. Die Post-Proceedings sind bei Springer in der Reihe CCIS (Communications in Computer and Information Science) erschienen, siehe auch Seite 6. Der dritte, ursprünglich für 2021 geplante Workshop wurde aufgrund der aktuellen Pandemie verschoben. Da der Workshop sehr vom direkten Austausch der Teilnehmenden lebt, hoffen wir, dass er schon im kommenden Jahr 2022 als Präsenzveranstaltung durchgeführt werden kann.

Ein weiteres Highlight des SWZ stellt die im Wintersemester 2019/2020 gestartete „International Teaching Staff Week“ dar. Bei dieser Veranstaltung handelt es sich um eine Kooperation des SWZ mit dem Internationalen Zentrum Clausthal

(IZC). Dozenten aus dem Ausland werden für eine Woche nach Clausthal eingeladen, um Blockvorlesungen zu verschiedenen spannenden Themen anzubieten. Auf Basis der durchweg positiven Rückmeldungen wurde beschlossen, die Veranstaltung im Wintersemester 2020/2021 zu wiederholen und außerdem in Wahlpflichtkatalogen mehrerer Studiengänge fest zu verankern, siehe auch Seite 10.

Auf den folgenden Seiten berichten wir von weiteren Entwicklungen, wie zum Beispiel der internen Graduiertenschule HerMes (Mensch-Maschine-Interaktion), neuen DFG-Projekten, der Kooperation mit der AG der Dillinger Hüttenwerte zur Entwicklung eines Digitalen Logistikzwillings sowie über die Einrichtung und den Ausbau von gemeinsamen Ressourcen für die SWZ-Wissenschaftlerinnen und -Wissenschaftler.

Dabei fällt der vorliegende Bericht deutlich kürzer aus als die bisherigen Berichtsbände, da wir uns bei der aktuellen Ausgabe auf die lesefreundliche Darstellung von Highlights konzentriert haben. Für die wissenschaftlichen Details verweisen wir auf unsere Homepage [www.simzentrum.de](http://www.simzentrum.de).

Wir hoffen, dass Ihnen die folgenden Artikel einen guten Einblick über die vielfältigen Arbeiten und Projekte am SWZ vermitteln und wünschen Ihnen viel Spaß bei der Lektüre.

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

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

## Zweiter Internationaler Clausthal-Göttingen Workshop on Simulation Science

In der Zeit vom 8. bis zum 10. Mai 2019 haben sich über 70 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zum zweiten „Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science“ in der Aula Academica der TU Clausthal getroffen. Mit der Tagung werde die Sichtbarkeit des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen (SWZ) weiter erhöht, unterstrich der Clausthaler Universitätspräsident Professor Joachim Schachtner bei der Begrüßung. Das SWZ war 2013 als gemeinsames Zentrum der beiden südniedersächsischen Universitäten gegründet

worden. Vom Land Niedersachsen zwischen 2013 und 2019 mit 4,3 Millionen Euro gefördert, sind seither rund 20 Forschungsprojekte aufgesetzt und zwei Juniorprofessuren installiert worden. „Das stimmt für die Zukunft dieser engen Forschungs-kooperation zwischen Clausthal und Göttingen optimistisch“, so Professor Schachtner.

Auch Professor Jens Grabowski, Dekan der Fakultät für Mathematik und Informatik der Universität Göttingen, hob die Bedeutung des SWZ hervor: „Das Zentrum ist eine Erfolgsstory.“ Als Beleg



verwies er zum einen auf Professor Marcus Baum. Der Wissenschaftler war zunächst Juniorprofessor am Simulationswissenschaftlichen Zentrum und ist inzwischen als W3-Professor für die Universität Göttingen gewonnen worden. Zum anderen hielt Professor Grabowski den gerade veröffentlichten Forschungsbericht 2017–2018 des SWZ in die Höhe. Der Umfang von 260 Seiten spreche für die vielfältigen Aktivitäten des Forschungszentrums.

Inhaltlich beschäftigt sich das SWZ mit drei Forschungsfeldern: Simulation und Optimierung von Netzen, Simulation von Materialien und verteilte Simulation. Die Kombination dieser Themen und der interdisziplinäre Ansatz mache das Besondere der aktuellen Tagung aus, sagte der Clausthale Professor Gunther Brenner als Sprecher des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen. Informatiker, Mathematiker und Ingenieure aus Deutschland und aller Welt brachten sich in die Konferenz ein und tauschten sich über 45 Fachbeiträge aus. Leitvorträge hielten: Professor Benoît Appolaire (University of Lorraine, Frank-

## Aufzeichnungen der Vorträge

Viele der auf der Konferenz gehaltenen Vorträge konnten dank freundlicher Erlaubnis der Redner aufgezeichnet werden und stehen auf dem Video-Server der TU Clausthal zum freien Zugriff zur Verfügung:

**[video.tu-clausthal.de/film/simulation-science-workshop-2019.html](https://video.tu-clausthal.de/film/simulation-science-workshop-2019.html)**



## Post-Proceesing erschienen

Die Post-Proceedings des zweiten Clausthal-Göttingen International Workshop Simulation Science (SimScience 2019) sind in der Springer LNCS-Serie CCIS (Communications in Computer and Information Science) erschienen:

[link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-45718-1](https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-45718-1)

Aus 47 Extended-Abstract-Einreichungen wurden 45 für die Präsentation auf dem Workshop in Clausthal ausgewählt. In einer zweiten Review-Runde nach dem Workshop wurden 12 Full-Papers aus einer Teilmenge von Einreichungen für den Tagungsband angenommen. Alle ausgewählten Beiträge wurden von zwei externen Gutachtern begutachtet. Die ausgewählten Beiträge stammen von Wissenschaftlern aus Deutschland, Indonesien und Großbritannien.

Die Arbeiten sind in folgende Themen gegliedert: Optimierung und verteilte Systeme sowie Simulation von Materialien (selbstorganisierte und poröse Strukturen; Finite-Elemente- und Multiskalenmethoden).





reich) über Phasenfeldsimulationen von plastischer Verformung in Metallen, Thomas Drescher (Leiter Fahrzeugtechnik der Volkswagen AG) über die Bedeutung der Digitalisierung für die Entwicklung der Mobilität und Professor Peter Vortisch (Karlsruher Institut für Technologie) über die Simulation von Verkehr und Mobilität.

Ein Höhepunkt war zudem die Podiumsdiskussion zu digitalen Lehr- und Lernmethoden. Die Moderation übernahm Juniorprofessorin Nina Gunkelmann, die die Tagung mit Unterstützung von SWZ-Geschäftsführer Dr. Alexander Herzog reibungslos organisiert hatte. Weitgehend einig waren sich die fünf Diskutierenden darüber, dass Simulations- und Modellierungstechniken künftig zu einem zentralen Element in der Lehre an Universitäten werden. „Da steht ein Wandel bevor“, sagte beispielsweise Professor Brenner, auch für die Rolle der Lehrenden.

Weitere Informationen:  
[www.simsience2019.tu-clausthal.de/](http://www.simsience2019.tu-clausthal.de/)

## Dritter Internationaler Clausthal-Göttingen Workshop on Simulation Science

Nach den großen Erfolgen der ersten beiden Workshops 2017 in Göttingen und 2019 in Clausthal, stand bereits frühzeitig fest, dass die Konferenzreihe weiter fortgesetzt werden soll. Der ursprünglich geplante Termin wäre das Frühjahr 2021 gewesen.

Da eine Konferenz wie der Simulation Science Workshop jedoch von der direkten Interaktion der Teilnehmenden und dem wissenschaftlichen Austausch auch außerhalb der Vorträge lebt und im Laufe des Jahres 2020 noch nicht absehbar war, wie sich die Corona-Situation Anfang 2021 darstellt, wurde beschlossen, den Workshop um ein Jahr auf 2022 zu verschieben.

Geplant ist wieder ein Termin im Frühjahr. Ausgerichtet werden soll der dritte internationale Clausthal-Göttingen Workshop on Simulation Science wieder an der Universität Göttingen.





Das Konferenz-Dinner, das traditionell die Gelegenheit zum zwanglosen wissenschaftlichen Austausch der Konferenzteilnehmer bietet, fand am Abend des 9. Mai auf der MS AquaMarin statt. Die MS AquaMarin verkehrt auf der Okertalsperre in - je nach Füllstand des Stausees - etwa 400 m ü. NN und ist somit die höchstgelegene Schifffahrtlinie in Norddeutschland.



# International Teaching Staff Week

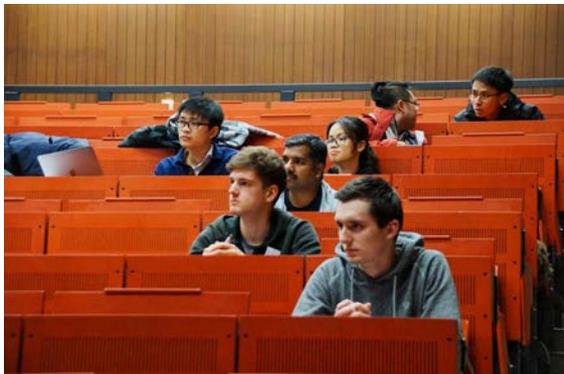
Mit der „International Teaching Staff Week“ unterstreicht das SWZ seine weltoffene Ausrichtung und praktiziert zugleich innovative Lehrmethoden. Im Dezember 2019 haben gleich zwei internationale Austauschveranstaltungen an der TU Clausthal stattgefunden: Zum einen hatte das Internationale Zentrum Clausthal (IZC) Lehrende aus einem halben Dutzend Ländern zu Gast, die sich in erster Linie in Deutsch als Fremdsprache fortbildeten. Zum anderen holte das Simulationswissenschaftliche Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ) internationale Dozenten in den Harz, um Masterstudierende und Promovierende auf dem Gebiet Simulationsmethoden in den Materialwissenschaf-

ten und im Bereich „Power Systems Engineering“ zu inspirieren.

Die beiden Austauschwochen zählten zusammen annähernd 50 Teilnehmende. Neben dem Fachlich-Didaktischen gehörten auch mehrere interkulturelle Veranstaltungen, ja sogar ein Science Slam und die multikulturelle Clausthale X-mas-Party zum Programm. Eine solche Art der international geprägten Fortbildung sei an Universitäten hierzulande bisher kaum zu finden, so Astrid Abel, Geschäftsführerin des IZC.

Für die „International Teaching Staff Week“ des Simulationswissenschaftlichen Zentrums konn-







ten Dozenten von der Oxford University sowie aus Japan, Brasilien und Indonesien gewonnen werden. „Sie haben jeweils bis zu acht Stunden Lehrveranstaltungen abgehalten, sich hier didaktisch fortgebildet und mit Clausthaler Forschenden und Lehrenden vernetzt“, berichtet Juniorprofessorin Nina Gunkelmann, die stellvertretende SWZ-Vorsitzende.

Die Austauschwochen standen unter der Schirmherrschaft des Vizepräsidenten für Forschung, Transfer und Internationales bzw. des Vizepräsidenten für Studium und Lehre der TU Clausthal. Beide veranstaltende Einrichtungen – das IZC und das SWZ – bekamen positive Rückmeldungen. Im Wintersemester 2020/2021 wird das Format daher wieder im Kalender der TU Clausthal stehen.

#### Vortragende und Themen der International Teaching Staff Week 2019

- High Performance Computing for Physical Modeling and Simulation  
Yudi Rosandi (Universitas Padjadjaran, Indonesia)
- Atomistic simulations in Materials Science: Molecular Dynamics and Monte Carlo simulations of metals and alloys  
Roberto Veiga (ABC Federal University, Brazil)
- Continuum Mechanics Modeling of Materials  
Dr. Christos Skamniotis (Oxford University, UK)
- Power System Simulation and Analysis  
Thongchart Kerdphol (Kyushu Institute of Technology, Japan)



## International Teaching Staff Week 2021

Auf Basis des großen Erfolgs der ersten International Teaching Staff Week im Wintersemester 2019/2020, gibt es auch im Wintersemester 2020/2021 wieder eine International Teaching Staff Week geben. Corona-bedingt findet die Veranstaltung dieses Mal in rein digitaler Form statt. Die Vorlesungen werden dabei als Live-Videoübertragungen zur Verfügung gestellt. Als Rahmenprogramm gibt es neben einem virtuellen Spielabend eine ebenfalls virtuelle Führung durch das Kloster Michaelstein bzw. die Musikakademie, die Gärten sowie die Musikausstellung „KlangZeitRaum“ geben.

Weitere Informationen und auch die Möglichkeit, nach der Veranstaltung die Vorlesungsaufzeichnungen anzusehen, gibt es hier:

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

Die Vortragsthemen der zweiten International Teaching Staff Week lauten:

- Machine learning for atomistic physics
- Multiscale Materials Modeling
- Application of artificial neural networks in computational homogenization



## SWZ-Juniorprofessor Dr.-Ing. Marcus Baum zum W3-Professor an der Universität Göttingen berufen

Zum 1.4.2019 wurde Herr Dr.-Ing. Marcus Baum an der Universität Göttingen zum W3-Professor für Data Fusion an das Institut für Informatik berufen. Herr Baum war im Oktober 2015 als SWZ-Juniorprofessor an die Universität Göttingen gekommen und leitet seitdem die Arbeitsgruppe Data Fusion, zu der momentan 8 Doktorandinnen und Doktoranden gehören. Die Berufung von Herrn Baum trägt weiter zur dauerhaften Etablierung der SWZ-Forschungsthemen in Göttingen bei.

Die Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr.-Ing. Baum beschäftigt sich mit der Erforschung neuer Methoden für die Sensordatenverarbeitung und -fusion. Ein Schwerpunkt ist dabei die Umfelderkennung durch autonome Systeme, wobei insbesondere die Objekterkennung und -verfolgung betrachtet werden.

Die Sensordatenfusion stellt ein wichtiges Gebiet bei der Verbindung von IT-Systemen mit der realen Welt dar und ist daher für alle Systeme, die sich in realen Umgebungen orientieren müssen und bestimmte Situationen zuverlässig erkennen sollen, unverzichtbar. Dies gilt z.B. für (teil-)autonome Fahrzeuge, die Kameradaten, Radar-, Lidar- und Ultraschalldaten kombinieren müssen, aber auch für viele kleinere Systeme angefangen bei Drohnen bis hin zu selbstfahrenden Staubsaugern und Rasenmähern. Jeder einzelne Sensor liefert nur begrenzt zuverlässige Daten: Kameras lassen sich durch Gegenlicht blenden oder können bei Nebel oder Dunkelheit nur noch wenige Informationen liefern. Radarsensoren können auch nachts zuverlässig Größen, Entfernungen und Geschwindigkeiten von Objekten erkennen, können aber weder ein leuchtendes Bremslicht eines vorausfahrenden



*Verkehrsüberwachung & autonome Fahrzeuge – Kooperation zwischen der Arbeitsgruppe Data Fusion (Universität Göttingen) und dem DLR-Institut für Verkehrssystemtechnik.*

Autos wahrnehmen noch die Aufschrift eines Verkehrsschildes ermitteln. Erst durch die sinnvolle Kombination, der von den verschiedenen Sensoren gelieferten Teilinformationen, entsteht ein vollständiges und gesichertes Lagebild, welches einen zuverlässigen Betrieb ermöglicht.

Zur praktischen Umsetzung der in der Arbeitsgruppe Data Fusion erforschten Methoden besteht beispielsweise eine Kooperation mit dem Institut für Verkehrssystemtechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR). Im Rahmen dieser Kooperation wird die Sensordatenfusion in der Verkehrsüberwachung erforscht. Neben der gemeinsamen Betreuung von Abschlussarbeiten sollen die entwickelten Datenfusionsmethoden in den Forschungsfahrzeugen des DLR implementiert werden. Die dann mit diesen Fahrzeugen in realen Straßenverkehrssituationen gemessenen Daten sollen wiederum für die Weiterentwicklung der Fusionsmethoden eingesetzt werden.

# DFG-Sonderforschungsbereich 1368 „Sauerstofffreie Produktion“

.....  
15  
.....

Der Sonderforschungsbereich „Sauerstofffreie Produktion: Prozesse und Wirkzonen in sauerstofffreier Atmosphäre zur Entwicklung zukunftsfähiger Produktionstechniken und Fertigungsverfahren“, an dem das SWZ über Frau Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann beteiligt ist, ist ein gemeinsamer Forschungsbereich der Leibniz-Universität Hannover und der Technischen Universität Clausthal unter Federführung des Instituts für Werkstoffkunde (Hannover).

## Teilprojekt C05 Fügésimulation

Seit Januar 2020 arbeitet der Sonderforschungsbereich (SFB) zum Thema „Sauerstofffreie Produktion“, der in den kommenden vier Jahren mit rund 9,5 Millionen Euro von der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefördert wird. Ziel der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des SFBs ist es, eine Produktionstechnik unter Sauerstofffreiheit zu entwickeln und zu etablieren, die faszinierende neue Möglichkeiten eröffnet. Damit

können neue, energieeffiziente und ressourcenschonende Prozesse und eine insgesamt effizientere Produktion realisiert werden. Mit Hilfe von neuartigen Verfahren soll der Sauerstoff auf bisher nicht erreichte niedrige Werte reduziert werden. Diese Werte sind um Größenordnungen geringer als in technisch erzeugtem Ultrahochvakuum. Prof. Dr.-Ing. Hans Jürgen Maier, Direktor des Instituts für Werkstoffkunde am Produktionstechnischen Zentrum Hannover und Sprecher des am 1. Januar 2020 offiziell startenden SFB, erklärt die Herausforderung: „Wo immer in der Produktionstechnik zwei Metalle in unmittelbarem Kontakt miteinander kommen, treffen eigentlich nicht die Metallatome aufeinander, sondern die auf den jeweiligen Oberflächen befindlichen Oxidschichten, die durch den Sauerstoff in der Umgebung gebildet werden. Diese Oxidschichten erschweren zum Beispiel das Fügen von Werkstücken, weswegen wir beim Schweißen, Lötten und in der additiven Fertigung durch oxidschichtfreie Werkstoffe große Vorteile erwarten. Ebenso könnte der





Verschleiß von Werkzeugen beim Spanen und Umformen durch die Abwesenheit von Sauerstoff signifikant reduziert werden.“

In unserem Projekt konzentrieren wir uns auf die grundlegenden Fragestellungen der sauerstofffreien Produktion. Hier soll mit Hilfe von Modellierungsmethoden ein grundlegendes Verständnis über die Vorgänge und Mechanismen in sauerstofffreier Umgebung erlangt werden. Diese Prozesse werden auf atomarer Ebene betrachtet, um die physikalischen Eigenschaften der Bindung der Fügepartner in der Kontaktzone am Beispiel des Walzplattierens zu untersuchen.

Für weitere Details siehe:  
[www.sfb1368.uni-hannover.de/de/forschung/projektbereich-c/teilprojekt-c05/](http://www.sfb1368.uni-hannover.de/de/forschung/projektbereich-c/teilprojekt-c05/)

In der ersten Förderperiode stehen die grundlegenden Fragestellungen in der Wirkzone im Vordergrund. Konkrete produktionstechnische

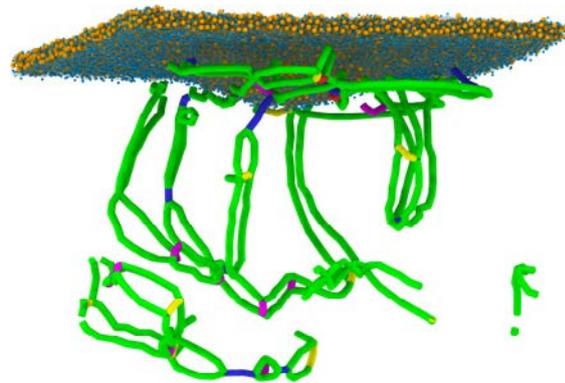
Verfahren des Urformens, Umformens, Fügens, Trennens und Beschichten sollen dann nach und nach entwickelt werden.

In dem von Jun.-Prof. Nina Gunkelmann geleiteten Teilprojekt des SFB wird mit Hilfe von klassischen Molekulardynamiksimulationen der Einfluss der Oxidschichten auf die physikalischen Eigenschaften der Bindung der Fügepartner in der Kontaktzone am Beispiel des Walzplattierens grundlegend untersucht. Teilprojektbearbeiter ist M.Sc. Hoang-Thien Luu, der bereits seit 2018 am SWZ arbeitet und umfangreiche Erfahrungen mit atomistischen Simulationen hat. Im SFB 1368 leitet SWZ-Juniorprofessorin Nina Gunkelmann zudem die Arbeitsgruppe Modellierung, die einen skalenübergreifenden Ansatz der Modellierungsprojekte erarbeitet, um ein grundlegendes Verständnis über die Vorgänge und Mechanismen in Prozessen der Fertigungs-, Montage- und Handhabungstechnik zu erlangen.

# DFG-Vorhaben „Einfluss von Oxidschichten auf die plastischen Eigenschaften von Metallen: Von der atomistischen zur mesoskopischen Skala“

Das DFG-Vorhaben „Einfluss von Oxidschichten auf die plastischen Eigenschaften von Metallen: Von der atomistischen zur mesoskopischen Skala“ ist für die Dauer von 3 Jahren in der AG Computational Material Sciences/Engineering unter der Leitung von SWZ-Juniorprofessorin Nina Gunkelmann bewilligt worden.

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. In diesem Projekt sollen die Einflüsse der Oxidation auf die plastischen Eigenschaften von Metallen unter Berücksichtigung der grundlegenden Abhängigkeiten von Sauerstoffkonzentration und Temperatur mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen studiert werden. Der wesentliche Erkenntnisgewinn ist das Verständnis der atomaren Mechanismen, die in sauerstoffhaltiger Umgebung auftreten und die plastischen Eigenschaften von Metallen beeinflussen. Durch die mikroskopische Modellierung mittels atomistischer Simulationen wird die große Anzahl physikalisch-chemischer Vorgänge der Makroskala auf die Wechselwirkung zwischen Atomen und Molekülen reduziert. Die atomistischen Simulationen sollen verwendet werden, um die Effekte der Nukleation



an oxidierten Oberflächen in mesoskopischen Versetzungssimulationen für dünne Schichten mittels eines stochastischen Modells zu implementieren. Damit soll ein physikalisch verlässliches Modell der Versetzungssimulation von oxidierten Oberflächen implementiert werden, das auf mit experimentellen Ergebnissen vergleichbaren Zeitskalen arbeitet.

Ein langfristiges Ziel des Projekts ist, ideale Prozessbedingungen bei Oberflächenbehandlungen zu finden, die zu besonders hochwertigen Materialien führen, beispielsweise in der Aluminiumindustrie. Idealerweise kann das Projekt zum Design neuer Werkstoffe beitragen, indem gezielt Beschichtungen aufgebracht werden, welche die Duktilität erhöhen.

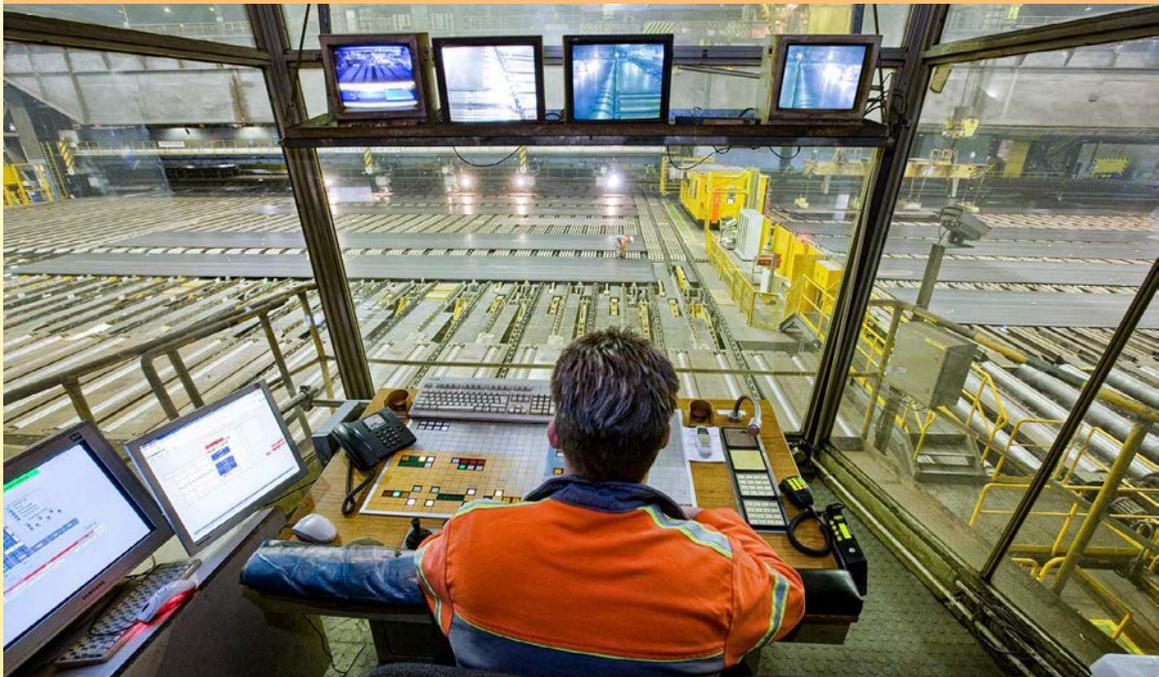
# SWZ-Industrieprojekt „Digitaler Logistikzwilling“ für das Walzwerk der AG der Dillinger Hüttenwerke

Eine wachsende Produktvielfalt verbunden mit stetig steigenden Qualitätsanforderungen in der Grobblechproduktion führen zu einer immer größeren Fertigungstiefe und komplexeren Verzweigungen der Bleche im Walzwerk und in der Vergütung bei gleichzeitig sinkenden Losgrößen.

Um diese hochindividuelle Produktion mit einem hohen Durchsatz zu ermöglichen, hat Dillinger die effiziente Produktionsplanung und -steuerung als eines der wesentlichen Zukunftsfelder für eine wettbewerbsfähige Produktion identifiziert.

Die Gruppe Dillinger produziert in ihren Walzwerken in Dillingen und Dünkirchen pro Jahr ca. 2 Mio. Tonnen an Grobblechen, die zu Off-shore-Windradtürmen, Bohrinselfußböden, Brückenträgern, Baggerschaufeln, Druckbehältern, Pipelines usw. weiterverarbeitet werden.

Da die Nachfrage in den einzelnen Segmenten starken Schwankungen unterliegt oder sogar auf Projektbasis erfolgt, ist es wichtig, dass die Fertigung unter ständig variierenden Randbedingungen bzw. für stark unterschiedliche Produktmische wirtschaftlich möglich ist.





Eine kosteneffiziente Produktionsplanung ist in einem Walzwerk mit über 1.500 möglichen Fertigungsschritten und ca. 75 Bearbeitungsstationen sowie den verschiedensten Transportmitteln zwischen den Stationen nicht auf Basis von einfachen Regeln möglich. Im Rahmen des Projektes „Digitaler Logistikzwilling“ wurden daher alle relevanten Produktionsschritte sowie deren Abhängigkeiten untereinander in Form eines Digitalen Zwillings abgebildet. Dabei wurden nicht nur die Bedienzeiten an den Maschinen berücksichtigt, sondern auch verfügbare Lagerflächen, Abhängigkeiten durch Transporte sowie die Kosten, die an den jeweiligen Stationen in Abhängigkeit von den verschiedenen Produkttypen anfallen.

Ziel des Projektes ist es, den Digitalen Zwilling als Entscheidungsunterstützungswerkzeug sowohl direkt in der Produktion als auch für den Vertrieb und das Management einsetzen zu können. Es kann untersucht werden, ob ein bestimmter Auftrag zu einem bestimmten Preis wirtschaftlich sinnvoll ist, in welcher Reihenfolge bestimmte Aufträge am besten in das Werk eingetaktet werden sollten und in welchen Lastsituationen welche möglichen Verzweigungen eines Produktes innerhalb der Fertigung am sinnvollsten sind. Auch können

strategische Investitionsentscheidungen auf Basis des Digitalen Zwillings bewertet und generell Flaschenhälse identifiziert werden. Das SWZ-Projekt „Digitaler Logistikzwilling“ wurde im Sommer 2017 gestartet und baut auf den im Rahmen der Industrie 4.0-Ertüchtigung im Walzwerk erhobenen Produktionsdaten auf. Erstes Ziel war die Bestimmung von kostenoptimalen Produktmischen. Da die Möglichkeiten des Digitalen Zwillings jedoch wesentlich weiterreichen, sollen ab 2021 in einem Folgeprojekt weitere Optimierungsfragen zur Prozessoptimierung im Walzwerk, zur Abwägung von Investitionsentscheidungen und zu einer direkteren Verbindung von Fertigung und Vertrieb gestartet werden. Auch eine Ausdehnung auf die Standorte Völklingen und Dünkirchen wird momentan angedacht.

Ein entscheidender Erfolgsfaktor für das Projekt stellt dabei die enge Verzahnung der Arbeitsgruppen innerhalb der TU Clausthal mit den entsprechenden Fachabteilungen von Dillinger dar. So ist es möglich, in Clausthal erarbeitete wissenschaftliche Konzepte schnell in die realen Prozess- und Produktionsplanungswerkzeuge zu integrieren, so dass der Knowhow-Transfer sowohl unmittelbar als auch langfristig wirksam ist.



## Rechenressourcen für die SWZ-Wissenschaftler

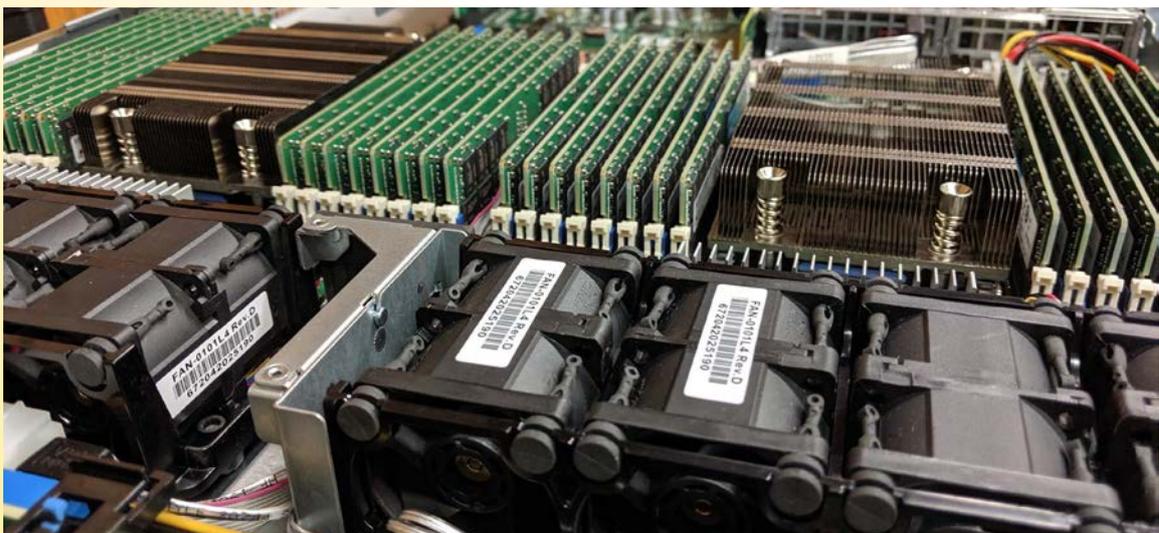
Während vor 50 Jahren Simulationen noch meist mit physischen Modellen z.B. in einem Windkanal durchgeführt wurden, sind heute „Simulation“ und „Computersimulation“ fast synonym. Für größere und komplexere Modelle wird dabei fortwährend mehr Rechenleistung benötigt. Klassische Felder für die Computersimulation sind numerische Simulationen (Strömungssimulationen z.B. für Wetter- und Klimaprognosen oder Verformungen von Festkörpern unter Druck, z.B. virtuelle Crash-Tests) sowie ereignisorientierte und agentenbasierte Simulationen (z.B. zur Analyse und Optimierung von Fahr- oder Flugplänen oder Produktionsprozessen). Mit KI-basierten Verfahren sind in den letzten Jahren komplett neue Ansätze zur Untersuchung von verschiedensten Fragestellungen entstanden, die nicht weniger rechenleistungsintensiv sind.

Zur Untersuchung großer Modelle stehen dafür Höchstleistungsrechner wie der HLRN (in der neuesten Ausbaustufe an der SWZ-Partneruniversität Göttingen) zur Verfügung. Für die Entwicklung und das Testen von Simulationsalgorithmen werden jedoch häufig kleinere, dafür aber

unmittelbar verfügbare Rechner benötigt. Konkret handelt es sich hier um Systeme mit einigen 100 bis einigen 1000 CPU-Kernen sowie teilweise speziellen Beschleunigern für numerische und KI-Rechenoperationen.

Um diesen Anforderungen für eine moderne Forschung gerecht zu werden, hat das SWZ 2019 und 2020 leistungsstarke, gemeinsam genutzte Rechenhardware angeschafft. Um den integrativen und interdisziplinären Ansatz des SWZ zu stärken, wurden die Anschaffungen dabei jeweils gemeinsam mit den Instituten für Technische Chemie, Physikalische Chemie, Software Systems Engineering sowie mit dem Rechenzentrum der TU Clausthal durchgeführt. Auf diese Weise steht allen Einrichtungen gemeinsam ein weitaus leistungsstärkeres System zur Verfügung, als es die Teileinrichtungen jeweils eigenständig hätten anschaffen können.

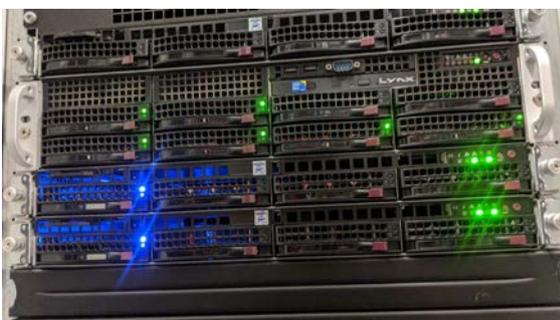
In der ersten Ausbauphase 2019 bestand das System aus drei Rechenknoten mit insgesamt 96 physischen CPU-Kernen und in Summe 2,5 TB Arbeitsspeicher. 2020 erfolgte die Ertüchtigung





eines der drei Systeme sowie die Anschaffung eines vierten Rechenknotens mit weiteren 64 physischen Kernen und 1 TB Arbeitsspeicher sowie einer GPU-Beschleunigerkarte und einer FPGA-Karte. FPGAs (Field Programmable Gate Array) sind Chips, in die zur Laufzeit verschiedene Schaltungen geladen werden können. FPGAs weisen zwar niedrigere Taktfrequenzen als klassische CPUs auf, dafür können in sie immer wieder neue Schaltungen zur direkten Ausführung spezieller Befehle geladen werden, die in CPUs nur durch den Einsatz einer Folge von vielen Befehlen abbildbar wären.

Bei den numerischen Materialsimulationen auf atomarer Ebene nutzt die Arbeitsgruppe von Nina Gunkelmann das ausgebaute Rechensystem, das zur Hälfte durch Gelder aus dem Sonderforschungsbereich (SFB) 1368 „Sauerstofffreie Produktion“ finanziert wurde (siehe Seite 15). Denn die Erweiterung um die beiden Beschleuniger kommt besonders Numerik-Berechnungen und solchen im Bereich der Künstlichen Intelligenz (KI) zugute. Auf dem Gebiet der KI-Forschung arbeitet an der TU Clausthal Professor Rüdiger Ehlers (Institute for Software and Systems Engineering). Der Informatiker hat sich ebenfalls maßgeblich in die Finanzierung des neuen Rechenknotens eingebracht. Er verwendet das System künftig für das Training und die Anwendung von neuronalen Netzen.



Für 2021 ist als nächste Ausbaustufe die Installation eines Systems, welches seine Rechenleistung hauptsächlich aus GPUs zieht, geplant. GPUs, die in Desktop-Rechnern in Grafikkarten arbeiten, sind im Gegensatz zu allgemeinen Prozessoren auf einige wenige Befehle (z.B. Matrixmultiplikationen) beschränkt, führen diese jedoch deutlich schneller und massiv parallelisiert aus. Dafür eignen sie sich in besonderem Maße für Simulationen, die genau diese Befehle intensiv nutzen. Dies sind insbesondere numerische Simulationen und das Training sowie die Anwendung von KI-Algorithmen.

### 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 Mitarbeiter direkt zugänglich
- **Knoten 2:**
  - CPUs: 2x AMD Epyc 7282 (insgesamt 32 physische Kerne)
  - RAM: 1024 GB
  - Hauptsächlich von den chemischen Instituten genutzt
  - 2020 von Epyc 7281 auf Epyc 7282 CPUs aufgerüstet
- **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, Xilinx Alveo U50
  - RAM: 1024 GB
  - Hauptsächlich von SWZ und Software Systems Engineering genutzt

Alle Rechenknoten sind in das Forschungsnetzwerk der TU Clausthal integriert. Insbesondere stehen die Festspeicher-Systeme im RZ der TU Clausthal für die Datenablage zur Verfügung.

## Virtual-Reality-Labor am SWZ

Seit Januar 2020 wird von der Arbeitsgruppe „Dynamik chemischer Prozesse“ des Instituts für Chemische und Elektrochemische Verfahrenstechnik der TU Clausthal im SWZ ein VR-Labor betrieben. Mit Hilfe eines von Prof. Dr.-Ing. Wehinger gewonnenen Senior Fellowship des Stiftverbandes für Deutsche Wissenschaften ist es im Rahmen der Lehrveranstaltung „CFD in der Verfahrenstechnik“ den Studierenden nun möglich, die meist komplexen Zusammenhänge zwischen Geometrie und Zielgrößen wie Umsatz, Wärmeübertragung oder Druckverlust zu verstehen.

Die Senior Fellowship Auszeichnung bezog sich auf das Projekt „Mit Virtual Reality eintauchen ins forschende Lernen in der Verfahrenstechnik“. In verfahrenstechnischen Apparaten und Reaktoren laufen sehr komplexe Transportphänomene ab. Die dabei auftretenden Strömungen werden durch numerische Strömungsmechanik detailliert beschrieben. Diesen Modellierungsansatz wenden die Clausthaler Studierenden in der Lehrveranstaltung an, um aktuelle, praxisnahe Fragestellungen, beispielsweise die Anströmung eines



Autokatalysators, zu erforschen. Sie nutzen dazu CFD-Simulationen und passen sie veränderten Rahmenbedingungen an.

Neben dem Einsatz in der Lehrveranstaltung steht das VR-Labor dabei auch in der von der Arbeitsgruppe betriebenen Forschung zur Verfügung. Diese setzt Simulationen zur Verbesserung der chemischen Prozesse und Reaktoren in Effizienz und Nachhaltigkeit ein. Besonderes Augenmerk wird auf die Wechselwirkung von lokalen Transportphänomenen und lokaler Kinetik gelegt.



# Vorstand des Simulations- wissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen

Auf der SWZ-Mitgliederversammlung im Mai 2019, die im Rahmen des Clausthal-Göttingen International Workshop on Simulation Science stattfand, wurde auch ein neuer Vorstand für das SWZ gewählt. Die Amtszeit des Vorstands beträgt jeweils zwei Jahre. Der Vorsitz im Vorstand wechselt nach jeder Amtszeit zwischen Clausthal und Göttingen.

Der aktuelle Vorstand des Simulationswissenschaftlichen Zentrums Clausthal-Göttingen besteht aus:

## **Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum** (Vorstandsvorsitzender)

Prof. Baum ist ursprünglich als SWZ-Juniorprofessor an die Universität Göttingen gekommen und wurde dort 2019 zum W3-Professor am Institut für Informatik für das Thema „Data Fusion“ berufen.

## **Prof. Dr. Jens Grabowski**

Prof. Grabowski ist Leiter der Arbeitsgruppe „Softwaretechnik für Verteilte Systeme“ am Institut für Informatik der Universität Göttingen sowie Dekan der Fakultät für Mathematik und Informatik in Göttingen.

## **Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann**

(Stellvertretende Vorstandsvorsitzende)  
Prof. Gunkelmann ist seit 2017 SWZ-Juniorprofessorin an der TU Clausthal. Sie leitet die Arbeitsgruppe „Computational Material Sciences“ und ist an dem 2020 gestarteten DFG-Sonderforschungsbereich „Sauerstofffreie Produktion“ beteiligt (siehe Seite 15).

## **Prof. Dr. Jörg Müller**

Prof. Müller leitet die Arbeitsgruppe „Wirtschaftsinformatik“ am Institut für Informatik der TU Clausthal, ist Direktor des Instituts für Informatik und koordiniert als Sprecher des Forschungsfeldes „Offene Cyberphysische Systeme und Simulation“ (OCSS) maßgeblich das HerMes-Projekt (siehe Seite xx).

## **Dr.-Ing. Andreas Reinhardt**

Dr. Reinhardt leitet die Arbeitsgruppe „Energieinformatik“ am Institut für Informatik der TU Clausthal.

## **Fabian Sigges, M.Sc.**

Herr Sigges ist Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe „Data Fusion“ von Prof. Baum am Institut für Informatik der Universität Göttingen.



# Clausthaler Graduiertenschule zur Mensch-Maschine-Interaktion (HerMes)

Die Digitalisierung durchdringt die Wirtschaft. In der industriellen Produktion wird es immer wichtiger, dass Menschen mit Robotersystemen flexibel zusammenarbeiten können. Hierzu forschen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der TU Clausthal in der Graduiertenschule „Heterogene Mensch-Maschine-Teams“ (HerMes). Das zum 1.1.2019 gestartete Programm umfasst vier geförderte Promotionsprojekte und mehrere assoziierte Promovierende.

## Teilprojekte innerhalb von HerMes

Innerhalb des Mensch-Maschine-Interaktion Projektes erfolgt die Forschung momentan zu vier Themengebieten:

- Sichere Ad-Hoc Kooperation zwischen Mensch und autonomer Maschine
- Sensorbasierte Abschätzung der Kontrollfähigkeit von Personen in der Interaktion mit Maschinen
- Datenassimilation zur sensorgestützten Modellierung von Bewegungsmustern menschlicher und maschineller Akteure
- Modellierung und Optimierung der Koordination heterogener Mensch-Maschine-Teams

Weitere Informationen:  
[www.simzentrum.de/hermes](http://www.simzentrum.de/hermes)

Die Technische Universität Clausthal fördert Verbundvorhaben zur Profilbildung in der Forschung. HerMes ist ein solches Leitprojekt. Dahinter steht das Forschungsfeld „Offene Cyberphysische Systeme und Simulation“. Ziel der Fördermaßnahme ist es, daraus zukünftig größere geförderte Verbundprojekte in der Grundlagenforschung – zum Beispiel Sonderforschungsbereiche, Graduiertenkollegs oder Forschergruppen der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) – nach TU Clausthal zu holen.

Finanziert wird die Graduiertenschule HerMes mit einem Gesamtvolumen von etwa 800.000 Euro aus dem Forschungspool der Universität und vom Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal-Göttingen (SWZ). Am SWZ in Clausthal haben die Doktorandinnen und Doktoranden des Programms auch ihren Platz. „Sie werden dort drei Jahre lang gemeinsam und mit ihren Betreuern an anspruchsvollen Fragen der Koordination von Mensch-Maschine-Teams in den Bereichen Produktion, Refabrikation und Recycling arbeiten“, erklärt Professor Jörg P. Müller, der Koordinator des Forschungsfeldes. Neben ihm engagieren

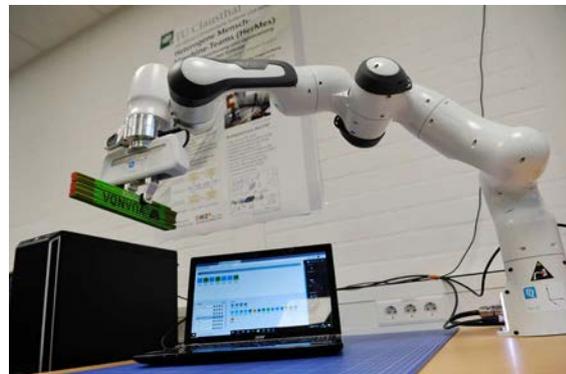




sich in der Betreuung die Clausthaler Wissenschaftler Michael Prilla, Andreas Rausch, Andreas Reinhardt, Christian Rembe, Christoph Schwindt, Stephan Westphal und Jürgen Zimmermann sowie Jan Gertheiss (HSU Hamburg) und Delphine Reinhardt (Universität Göttingen).

„Das Gestalten und Optimieren von Mensch-Maschine-Teams, beispielsweise auf dem Gebiet Industrie 4.0, ist von eminenter Bedeutung für die zukünftige Wettbewerbsfähigkeit des Forschungs- und Wirtschaftsstandortes Deutschland“, sagt Projektentwickler Michael Krause. In so entstehenden soziotechnischen cyberphysischen Systemen stellen Softwarekomponenten, Maschinen, Förder- und Transportmittel sowie intelligente Objekte Akteure dar, die zunehmend mit Autonomie und Selbststeuerungsfähigkeit ausgestattet sind und sich dabei mit Menschen abstimmen und mit ihnen zusammenarbeiten.

Die Entwicklung, Absicherung und Optimierung der so entstehenden heterogenen Mensch-



Maschine-Teams sei mit großen wissenschaftlichen Herausforderungen verbunden, weiß Krause. In der Graduiertenschule HerMes, die von einem externen Expertengremium begleitet und beraten wird, stellen sich Clausthaler Promovierende dieser Aufgabe. Sie haben die Chance, Innovationen voranzutreiben und sich selbst das Fundament für eine erfolgreiche wissenschaftliche Karriere zu legen.

## Kollaborativer Roboter für Graduiertenschule HerMes

Die Promovierenden und Professor/innen im Forschungsprojekt „Heterogene Mensch-Maschine Teams“ (HerMes) freuen sich über einen neuen Kollegen. Der Kollaborative Roboter (Cobot) CoRA ist das Herzstück eines interaktiven Demonstratorsystems, mit dem das HerMes-Team seine interdisziplinäre Forschung zur Mensch-Maschine-Interaktion in praxisnaher Umgebung durchführen kann.

In der industriellen Produktion von morgen werden Menschen und intelligente Roboter immer stärker gleichberechtigt und in Teams zusammenarbeiten. So kann die Flexibilität der Menschen mit der Präzision und Kraft von Maschinen kombiniert werden, um beispielsweise komplexe Produkte wie Elektrofahrzeuge für das Recycling zu demontieren. Ziel des HerMes-Projekts ist es, Roboter in die Lage zu versetzen, mit Menschen flexibel, vorausschauend und sicher zusammenzuarbeiten. „Wie in menschlichen Teams ist eine Herausforderung, das gegenseitige Vertrauen zwischen Mensch und Roboter herzustellen“, erklärt Professor Michael Prilla, Experte für Mensch-Maschine-Interaktion. Der Roboter müsse dazu zum einen in der Lage sein, Aufmerksamkeit und Kontrollfähigkeit des Menschen bei der gemeinsamen Aufgabe zu erfassen; zum anderen müsse das maschinelle Teammitglied zuverlässig, natürlich und vorhersagbar agieren.

### Betreut von zehn Professorinnen und Professoren

Das Forschungsvorhaben ist ein strategisches Projekt des Forschungsfeldes „Offene Cyberphysische Systeme und Simulation“ (OCSS) der TU Clausthal. Besonders ist neben seinem interdisziplinären Charakter

die Organisation als Graduiertenschule: „Hier forschen Promovierende aus Informatik, Ingenieurwissenschaften und Operations Research gemeinsam an Modellen und Methoden zur Mensch-Maschine-Kollaboration. Diese werden anhand des gemeinsamen Anwendungsbeispiels entwickelt und evaluiert“, sagt Professor Jörg P. Müller, Sprecher des Forschungsfelds OCSS und des HerMes-Projekts. Die vier Promovierenden Basel Alhaji, Janine Beecken, Felix Merz und Niels Rohweder durchlaufen ein begleitendes Qualifizierungsprogramm. Betreut werden sie von einem Kollegium aus zehn Professorinnen und Professoren.

### Ziel ist es, Roboter CoRA ein bisschen „menschlicher“ zu machen

Ein aktuelles Anwendungsproblem ist die gemeinsame Demontage geöffneter Antriebsbatterien aus E-Fahrzeugen. Um diese sicherheitskritischen Prozesse flexibel und zugleich gefahrlos zu gestalten, muss die Reaktionsfähigkeit des Cobots auf menschliches Verhalten mit Hilfe von Sensorik, Digitalisierung und Künstlicher Intelligenz (KI) verbessert werden. Für eine solche, vertrauenswürdige Zusammenarbeit erforscht das HerMes-Projektteam Modelle, Software und Hardware, die eine ganzheitliche Beschreibung eines Mensch-Maschine-Teams sowie eine effiziente Ressourcennutzung bei mehreren, dynamisch agierenden Teams ermöglichen sollen. Mit anderen Worten: Es geht darum, Systeme wie Cobot CoRA ein bisschen „menschlicher“ zu machen, sie also zunehmend mit Autonomie und Wahrnehmungsfähigkeit auszustatten und damit einen wichtigen Schritt hin zu echter Teamarbeit zwischen Mensch und Maschine zu machen.

# Digitalisierung für nachhaltige Mobilität

Anfang Dezember 2020 fand die virtuelle Konferenz „nachhaltig digital - digital nachhaltig“ in der Reihe „Wissenschaft für Frieden und Nachhaltigkeit“ statt. Sie wurde von der Universität Göttingen gemeinsam mit der Stiftung Adam von Trott, Imshausen e.V. und der Vereinigung Deutscher Wissenschaftler e.V. (VDW) organisiert.

Im Rahmen der Konferenz moderierte SWZ-Vorstandsvorsitzender Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum den Workshop „Digitalisierung für nachhaltige Mobilität“.

Die Digitalisierung der Mobilität bietet grundlegend neue Möglichkeiten zur Bewältigung des steigenden Verkehrsaufkommens (z. B. im Rahmen von automatisierten Fahrzeugen oder Carsharing-Diensten). Eine zentrale Herausforderung dabei ist die Entwicklung von energieeffizienten und umweltverträglichen Verkehrssystemen. In diesem Zusammenhang beschäftigte sich dieser Workshop mit der Frage, inwiefern die Digitalisierung dabei hilft, Mobilität nachhaltig zu gestalten.



# Weitere Nachrichten

## Reisestipendium an SWZ-Forscher vergeben

Mai 2019

Die American Physical Society hat ein Reisestipendium an Herr Hoang-Thien Luu, Mitarbeiter von Frau Jun.-Prof. Nina Gunkelmann, vergeben, welches ihm den Besuch der 21. Biennial Konferenz der APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter (SHOCK19) vom 16. bis zum 21. Juni 2019 in Oregon (USA) ermöglichte.

„In seinem Vortrag hat Herr Luu Molekulardynamik-Simulationen (MD) von Stoßwellen in polykristallinem Eisen vorgestellt. Es wurden Simulationen für Modelle von fast einem Mikrometer Länge durchgeführt: die bisher größte MD-Simulation von Stoßwellen in Eisen, die mehr als 250 Millionen Atome abdeckt.

Zudem haben wir in der Arbeitsgruppe diese Ergebnisse kürzlich auf Hochdruckphänomene in Eisen-Kohlenstoff übertragen, bei denen wir die Wechselwirkung von linearen und planaren Defekten in Eisen und Fe-C mit dem Umwandlungsprozess untersucht haben. Diese Ergebnisse hat Herr Luu im September 2019 auf der Dislocations-Konferenz in Haifa (Israel) vorgestellt.“



## SWZ startet Kooperation zur Vietnamesisch-Deutschen Universität in Ho-Chi-Minh-Stadt

Juni 2019

Ab Mai 2019 besuchten zwei Masterstudierende der Vietnamesisch-Deutschen Universität in Ho-Chi-Minh-Stadt für vier Monate das SWZ, um dort ihre Abschlussarbeit zu schreiben. „Heutzutage wird es für die Studierenden immer wichtiger, globale Perspektiven zu entwickeln sowie neue Kulturen und Sprachen zu entdecken“, sagt SWZ-

Juniorprofessorin Nina Gunkelmann. Sie betreute die beiden Gäste aus Südostasien, die an der Vietnamese-German University (VGU) den Studiengang „Computational Engineering“ studieren. Dank der finanziellen Unterstützung durch den Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD) und der Förderung des CompEng-Masterprogramms an der Ruhr-Universität Bochum konnten



die Studierenden Van-Ba Tran und Kieu-Anh Doan vier Monate von Juni bis September 2019 im SWZ verbringen. Jährlich fördert der DAAD jeweils vier Studierende der VGU, um ihre Masterarbeit in Deutschland zu absolvieren. Herr Van-Ba Tran wird an druckinduzierten Phasenübergängen in Eisen-Kohlenstoff arbeiten und Frau Kieu-Anh Doan wird Forschung zum Thema Molekulardynamiksimulationen der Oxidation von porösen Metallen durchführen. Beide Projekte wurden unter der Leitung von Juniorprofessorin Gunkelmann und Professor Klaus Hackl (Universität Bochum) durchgeführt und von SWZ-Mitarbeiter Hoang-Thien Luu, M.Sc. unterstützt.

**Best Poster Award für SWZ-Masterandin**

Auf der Summerschool Material 4.0 an der TU Dresden wurde das Paper Molecular dynamics simulations of nanoindentation into Aluminium: Influence of oxidation von SWZ-Masterstudentin Kieu-Anh Doan mit dem „Best Poster Award“ ausgezeichnet.

In ihrer Arbeit werden Molekulardynamik-Simulationen eingesetzt, um den Einfluss der Oxidation auf die Indentation in Aluminium zu untersuchen. Dieses Material wird durch Oxidation stark beeinflusst, denn selbst unter Ultravakuumbedingungen ist Aluminium stets mit Oxidschichten bedeckt.

Sie freut sich sehr über die Auszeichnung: „Die Teilnahme am DCMS 4.0-Posterwettbewerb ermöglichte es mir, meine Forschungsarbeiten den führenden Experten aus dem Bereich Materialwissenschaften vorzustellen und mich mit Studenten anzufreunden, die derzeit an ähnlichen Themen arbeiten. Der Inhalt des Posters ist mein Masterthema, an dem ich an der TU Clausthal gearbeitet habe und ich hatte nicht gedacht, dass ich eine Chance hätte, den Posterpreis zu gewinnen. Ich möchte mich bei meiner Betreuerin Jun.-Prof. Nina Gunkelmann und M.Sc. Luu Hoang Thien im Simulation Science Center Clausthal / Göttingen dafür bedanken, dass sie mir eine gute Anleitung und wertvolle Anregungen für meine Forschung sowie die Erstellung eines Posters gegeben haben.“



## Prof. Dr. Anita Schöbel übernimmt Leitung des Fraunhofer ITWM

September 2019

Prof. Dr. Anita Schöbel, SWZ-Gründungsmitglied und langjähriges Mitglied im Vorstand des SWZ, übernahm im September 2019 die Leitung des Fraunhofer-Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik in Kaiserslautern. In ihrer Zeit an der Universität Göttingen war Professorin Schöbel an mehreren SWZ-Projekten zur Simulation und Optimierung von Fahrplänen beteiligt. Insbesondere ist sie seit 2015 Sprecherin der DFG-Forscherguppe 2083 „Integrierte Planung im öffentlichen Verkehr“.



## Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann als Gastprofessorin an der Universitas Padjadjaran in Bandung, Indonesien

Oktober 2019:

Im Oktober 2019 ist Frau Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann der Einladung von Herrn Prof. Dr. Yudi Rosandi, Leiter des Theoretical and Computational Geophysics Laboratory am Department für Geophysik der Universität Padjadjaran, gefolgt, als Gastprofessorin in Bandung (Indonesien) einen Blockkurs zum Thema Computational Fluid Dynamics zu halten.

Frau Jun.-Prof. Dr. Gunkelmann und Herrn Prof. Rosandi pflegen bereits eine langjährige Kooperation zum Thema Molekulardynamiksimulationen von porösen Strukturen. Im Dezember 2019 wird Herr Prof. Rosandi eine Vorlesung an der TU Clausthal im Rahmen der International Teaching Staff Week zum Thema High Performance Computing for Physical Modeling and Simulation halten. Zur Festigung der Kooperation wurde ein Memorandum of Understanding zwischen der Universität Padjadjaran und der TU Clausthal unterzeichnet.



Die Universität Padjaran ist auf der Insel Java gelegen und ist eine der größten Hochschulen Indonesiens. Da die Vorlesungen im Master-Studiengang Geophysik an der Universität Padjadjaran durchgängig auf Englisch gehalten werden, bietet dies ideale Voraussetzungen, um Forschung und Lehre in Indonesien aus eigener Perspektive zu erleben. Die Vorlesung, die ca. 20 Studierende besuchten, wurde von praktischen Aufgaben mit der Open Source Software OpenFoam begleitet. Da in dem Institut kein Computerraum vorhanden ist, arbeiteten die Studierenden mit ihren eigenen Laptops und installierten selbstständig die notwendige Software. Die Teilnehmer waren sehr

motiviert und erledigten die gestellten Aufgaben innerhalb kurzer Zeit.

Das Thema Fluidodynamik ist für das Department Geophysik von besonderem Interesse, da insbesondere in tropischen Ländern wie Indonesien die Bewirtschaftung von Wasserressourcen und die Wasserqualität in Flüssen von großer Bedeutung sind. Der Citarum-Fluss fließt durch eine sehr große Region in der West-Java-Provinz, die sowohl Siedlungs-, Landwirtschafts- als auch Industriegebiete umfasst. Aufgrund des raschen Bevölkerungswachstums und der damit einhergehenden Waldrodung verändert sich dieses Gebiet momentan sehr stark, wodurch das empfindliche Ökosystem erheblich gestört wird. Um die Auswirkungen dieser Zerstörung durch Besiedlung, Landwirtschaft und Industrie abzuschwächen, sind vielfältige Umweltsanierungsmaßnahmen erforderlich.

Die Basis für fast alle Sanierungsmaßnahmen stellt die Überwachung und Analyse des Zustands des Flusses und des Flussufers dar, welches daher zentraler Bestandteil der Forschung am Department für Geophysik ist. Transportphänomene von Wasser und Ablagerungen, die durch Abholzung und Landnutzungsänderung verursacht werden, werden dabei durch Methoden der numerischen Strömungsmechanik modelliert.

Mit diesem Thema befasst sich im Rahmen seiner Dissertation an der Universität Padjadjaran auch Herr Bambang Wijatmako, welcher von Frau Jun.-Prof. Dr. Gunkelmann als externe Betreuerin begleitet wird. In diesem Kontext spielt die Modellierung von granularen Materialien, mit der sich die Arbeitsgruppe Computational Material Science an der TU Clausthal beschäftigt, eine große Rolle. Ein Gegenbesuch des Doktoranden am Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal-Göttingen ist für das nächste Jahr geplant.

## Priv.-Doz. Dr. Umut Durak zum Vizepräsidenten für Lehre der Society of Modeling and Simulation International gewählt

Oktober 2019

Priv.-Doz. Dr. Umut Durak, Forscher am Institut für Informatik und Mitglied des SWZ, wurde zum Vizepräsidenten für Lehre der Society of Modeling



and Simulation International (SCS) gewählt. Die 1952 gegründete SCS befasst sich als führende technische Gesellschaft mit dem Einsatz von Modellierung und Simulation zur Lösung von Problemen aus der realen Welt. Sie widmet sich der Förderung der Simulation und verwandter Computer-basierter Wissenschaften und verfolgt das Ziel, die Kommunikation zwischen Fachleuten auf dem Gebiet der Simulation zu verbessern. Außerdem wurde Herr Durak zum Associate Fellow des American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) gewählt. Mit fast 30.000 individuellen Mitgliedern aus 91 Ländern und 95 institutionellen Mitgliedern ist die AIAA die weltweit größte technische Gesellschaft, die sich dem globalen Luft- und Raumfahrtsektor widmet. Mit dem Titel eines Associate Fellow werden Einzelpersonen ausgezeichnet, die wichtige ingenieur- oder naturwissenschaftliche Arbeiten in dem Bereich der Luft- und Raumfahrt durchgeführt oder geleitet haben.

## Adolf-Martens-Preis für Nina Gunkelmann

Februar 2020

Nina Gunkelmann vom Institut für Technische Mechanik der TU Clausthal sowie dem Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal – Göttingen (SWZ) hat den Adolf-Martens-Preis auf einer Festveranstaltung der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin für ihre hervorragende Arbeit in der Forschung zu Stoßwellen in heterogenen Materialien entgegen genommen. Seit 2017 ist die junge Wissenschaftlerin, Fachgebiet „Computational Material Sciences/Engineering“, an der TU Clausthal tätig und entwickelt unter anderem Computersimulationen zur Analyse von Werkstoffen auf Molekül- und Atomebene. Seit vergangenem Oktober ist sie zudem stellvertretende Vorsitzende des SWZ. Während des Festakts präsentierte die Preisträgerin in einem Vortrag ihre Forschung zum Verhalten von polykristallinen bis porösen (heterogenen) Materialien unter Stoßkompression. Die Stoßwellen sind von elementarem Interesse beispielsweise für geologische und kosmische Prozesse, bei denen sie ein besseres Verständnis von Meteoriteneinschlägen ermöglichen. Die Resultate können verwendet werden, um Materialien mit verbesserten Eigenschaften bei Hochgeschwindigkeitsstößen zu konzipieren oder auch um die Materialeigenschaften von Eisen unter extremen Bedingungen zu studieren.

Seit 1991 wird der Adolf-Martens-Preis alle zwei Jahre unter anderem für Arbeiten aus den



Bereichen der Werkstoffwissenschaften, Materialforschung und -prüfung oder der Analytischen Chemie vergeben. Er ist mit einem Preisgeld von 3000 Euro dotiert und wird vom Adolf-Martens-Fonds e.V. getragen, der sich das Ziel gesetzt hat, vor allem den wissenschaftlichen Nachwuchs zu fördern.

## DAAD-Stipendium für Sa Ly Dang

August 2020

Frau Sa Ly Dang, Doktorandin am SWZ in der Arbeitsgruppe von Frau Jun.-Prof. Nina Gunkelmann (AG Computational Material Sciences), hat über das Internationale Zentrum Clausthal (IZC) das STIBET DAAD-Stipendium erhalten. Das Stipendium hat eine Laufzeit 6 Monaten und soll dazu dienen, Frau Dang bei der Arbeit an ihrer Dissertation, in der es um die Untersuchung der Dynamik und Nukleation von Versetzungen mit Multiskalensimu-

lationen sowie um Indentation und Nanoritzen in einkristallinen und polykristallinen Metallen mit Molekulardynamik und Versetzungsdynamik geht, zu unterstützen. Als erstes Ergebnis dieser Arbeiten ist bereits das Preprint „Thermodynamic dislocation theory: Application to bcc-crystals“ (<https://arxiv.org/abs/2007.05429>) erschienen. Neben dem SWZ ist an diesem Projekt Prof. Le von der Ton Duc Thang University in Ho Chi Minh City und der RU Bochum beteiligt.

# Mitglieder des SWZ

## Professoren und Lehrstufvertreter

### Prof. Dr.-Ing. Marcus Baum

(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

### Priv.-Doz. Dr. 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

### Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann

(Stellvertretende Vorstandsvorsitzende)  
Arbeitsgruppe Computational Material Sciences,  
Institut für Technische Mechanik,  
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.-Ing. Dieter Meiners

Institut für Polymerwerkstoffe und Kunststofftech-  
nik, Technische Universität Clausthal

### Prof. Dr.-Ing. Dietmar P.F. Möller

Arbeitsgruppe Stochastische Modelle in den  
Ingenieurwissenschaften, Institut für Mathematik,  
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

**Dr.-Ing. Andreas Reinhardt**

Arbeitsgruppe Energieinformatik,  
Institut für Informatik,  
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

**Prof. Dr. Horst Zisgen**

(SWZ Angehöriger)  
Hochschule Darmstadt

**Wissenschaftliche Mitarbeiter****Tobias Ahlbrecht, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Computational Intelligence,  
Institut für Informatik,  
Technische Universität Clausthal

**Janine Beecken, M.Sc.**

Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal

**Thore Bergmann, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Computational Material Sciences,  
Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal

**Alexander Bufe, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Strömungsmechanik,  
Institut für Technische Mechanik,  
Technische Universität Clausthal

**Mirko Dahlbeck, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Optimierung, Institut für  
Numerische und Angewandte Mathematik,  
Georg-August-Universität Göttingen

**Martin Dahmen, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Diskrete Optimierung,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal

**Sa Ly Dang, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Computational Material Sciences,  
Simulationswissenschaftliches  
Zentrum Clausthal-Göttingen,  
Technische Universität Clausthal

**Niklas Fiekas, B.Sc.**

Arbeitsgruppe Computational Intelligence,  
Institut für Informatik,  
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

**Dr. Wiebke Klünder**

Arbeitsgruppe Stochastische Modelle  
in den Ingenieurwissenschaften,  
Institut für Mathematik,  
Technische Universität Clausthal

**Fabian Korte, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Softwaretechnik für  
Verteilte Systeme, Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen

**Dipl.-Wirtschaftsing. Thomas Krüger**

Arbeitsgruppe Anlagenprojektierung und  
Materialflusslogistik, Institut für Maschinelle  
Anlagentechnik und Betriebsfestigkeit,  
Technische Universität Clausthal

**Hoang-Thien Luu, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Computational Material Sciences,  
Simulationswissenschaftliches Zentrum Clausthal-  
Göttingen, 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

**Julius Pätzold, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Optimierung, Institut für  
Numerische und Angewandte Mathematik,  
Georg-August-Universität Göttingen

**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

**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

**Marlon Welter, M.Sc.**

Arbeitsgruppe Theoretische Informatik  
und Algorithmische Methoden,  
Institut für Informatik,  
Georg-August-Universität Göttingen

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

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

**Postanschrift**

Simulationswissenschaftliches Zentrum Clausthal-Göttingen  
Geschäftsstelle  
Dr. Alexander Herzog  
Arnold-Sommerfeld-Straße 6  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
E-Mail: simzentrum@tu-clausthal.de  
Telefon: +49 5323 72-2966

**Impressum**

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

**Bildnachweis:**

Titelbild – stock.adobe.com (© striZh)  
Uwe Braun, SHS – Stahl-Holding-Saar: S. 18, 19  
Melanie Bruchmann, TU Clausthal: S. 31  
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM): S. 32  
DLR: S. 14  
Christian Ernst, TU Clausthal: S. 22, 24, 25  
Fraunhofer ITWM: S. 30 (oben)  
Alexander Herzog, SWZ: S. 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13  
Hoang-Thien Luu, SWZ: S. 28 (oben)  
Christian Marg, TU Clausthal: S. 20, 21  
Christian Kreuzmann: S. 23, 27  
Maximilian Weiss, Leibniz Universität Hannover: S. 15, 16

Hier nicht erwähnte Bilder stammen von den Autoren.

**DOI 10.21268/20210315-0 (<https://doi.org/10.21268/20210315-0>)**



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