



## DGKK AK Simulation und Machine Learning

on 03/04.03.2026 in Karlsruhe

KIT, Campus South,  
Building 11.40,  
Englerstraße 11,  
76131 Karlsruhe

**03.03.2026**

**KIT Campus Nord, Seminar Room B348,**

17:30	18:30	<b>Dr. Binh Duong Nguyen</b> (FZ-Juelich, Juelich), Accelerating Defect Characterization in Semiconductors with Machine Learning
19:45		Dinner <a href="https://www.wolfbraeu.de/">https://www.wolfbraeu.de/</a>

**04.03.2026**

**KIT, Campus South, Building 11.40, Room 231**

8:00	8:10	Opening
8:10	8:40	<b>Alicja Kerschbaum</b> (IISB), Workflow for physics-based modelling of GaN growth by HVPE
8:40	9:00	<b>Christopher Straub</b> (IISB): PINNs für gekoppelten Wärmetransport
9:00	9:30	<b>Christopher Straub</b> (IISB), Defekterkennung von Aluminiumnitrid-Wafern
9:30	9:50	Break
9:50	10:20	<b>Lucas Vieri</b> (IKZ) Multi-Fidelity data fusion using Non-linear Autoregressive Gaussian Process
10:20	11:00	<b>Alexei Plotnikov</b> (FCM) Anwendung stark verrauschter Daten zur Automatisierung der Prozesssteuerung bei der Kristallzüchtung und ML-Aufgaben im Rahmen der VGF-Technologie
11:00	11:40	<b>Georg Raming</b> (Siltronic) Untersuchung Funktionaler Daten und Ihre Verwendung in ML-Modellen
11:40	12:00	Discussion and End

**Start of DKT**

# Abstracts

---

## Workflow for physics-based modelling of GaN growth by HVPE

Alicja Kerschbaum<sup>1</sup>, M. Müller<sup>2</sup>, J. Tomkovič<sup>2</sup>, G. Lukin<sup>1</sup>, H. Torkashvand<sup>1</sup>, S. Besendörfer<sup>1</sup>, J. Friedrich<sup>1</sup>, J. Heitmann<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup> Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany

<sup>2</sup> Institute of Applied Physics, TU Bergakademie Freiberg, Leipziger Str. 23, 09599 Freiberg, Germany  
e-mail: [alicja.kerschbaum@iisb.fraunhofer.de](mailto:alicja.kerschbaum@iisb.fraunhofer.de)

We present main steps of workflow for modelling GaN growth by HVPE. This includes the description of physical experiments set, calibration of the model, design of experiments and building a metamodel. Here, we focus on the calibration of the physical model as the basis to demonstrate a path toward a digital twin of the HVPE growth process.

### References

[1] J. Tomkovič, G. Lukin, H. Torkashvand, A. Kerschbaum, M. Müller, S. Besendörfer, J. Heitmann, and J. Friedrich, Workflow for DOE-based modeling species transport and growth kinetics in GaN HVPE, *Advanced Engineering Materials: Special Issue MaterialDigital 2*, submitted.

**Acknowledgments:** The authors thank the German Federal Ministry of Research, Technology and Space (BMFTR) for financial support of the project Innovation-Platform MaterialDigital through project funding grant nos. 13XP5189C (TUBAF) and 13XP5189B (IISB). The authors thank the project partners General Numerics Research Lab e.V. (grant no. 13XP5189C) and Freiburger Compound Materials GmbH (grant no. 13XP5189A) for the inspiring cooperation.

---

## PINNs für gekoppelten Wärmetransport

Christopher Straub<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany

In diesem Beitrag stellen wir ein physik-informiertes neuronales Netz (PINN) zur Beschreibung eines, für Hochtemperaturprozesse in der Kristallzüchtung charakteristischen, gekoppelten Wärmetransports vor. Im Zentrum steht ein Modell, das die Wärmeleitung mit thermischer Strahlung koppelt und auch den Einfluss von Heizern berücksichtigt. Insbesondere die Randbedingung, welche die thermische Strahlung beschreibt, ist für PINNs unüblich und stellt besondere Anforderungen an die Formulierung der Verlustfunktion sowie die Wahl der Trainingsstrategie. Wir demonstrieren in einem prototypischen Szenario, wie ein PINN für eine derart gekoppelte Randbedingung implementiert, daten-frei trainiert und zur akkuraten Approximation des Prozesses genutzt werden kann. Dabei betrachten wir Geometrien, die von realen Kristallzuchtanlagen inspiriert sind. Ziel des Vortrags ist es, aufzuzeigen, wie sich die Lücke zwischen der Methodik der PINNs und anwendungskritischen Fragestellungen der Kristallzüchtung schrittweise überbrücken lässt und welche Perspektiven sich daraus für die zukünftige Einbindung in inverse Problemstellungen ergeben.

---

## Defekterkennung von Aluminiumnitrid-Wafern

Christopher Straub<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany*

In diesem Beitrag präsentieren wir einen Workflow zur automatisierten Erkennung von Defekten auf Aluminiumnitrid-Wafern. Ziel ist die zuverlässige Identifikation verschiedener Defektklassen, darunter Punktdefekte, Stapeldefekte sowie zusammenhängende Defektcluster. Als Basis für die Objekterkennung dient eine modifizierte ResNet-Architektur, die speziell an die Wafer-Aufnahmen angepasst wurde. Aufgrund der großen Bildgröße werden die Aufnahmen zunächst in überlappende Tiles zerlegt und einer Reihe von Standard-Pre-Processing-Schritten (Normalisierung, Rauschunterdrückung, Kontrastverstärkung) unterzogen. Für jedes erkannte Defektobjekt wird ein Confidence-Score berechnet und in einem zusätzlichen Post-Processing eine Defektdichtematrix für den gesamten Wafer berechnet. Das trainierte Modell ist in einen automatisierten Workflow integriert und über eine benutzerfreundliche Web-Applikation zugänglich, sodass Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler die Analyse mit minimalem Aufwand durchführen können.

---

## Multi-Fidelity data fusion using Non-linear Autoregressive Gaussian Process

Lucas Vieri<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Leibniz-Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Straße 2, 12489 Berlin, Germany*

In scientific and industrial applications, there exists a fundamental trade-off between the fidelity and availability of data sources. High-fidelity (HF) data accurately represent physical processes but are often scarce and costly, whereas low-fidelity (LF) data are abundant yet less precise; many Machine-Learning-based predictive approaches also neglect uncertainty quantification. The Non-linear Autoregressive Gaussian Process [1] (NARGP) framework integrates LF and HF data by modeling their non-linear correlations, improving predictions while providing calibrated uncertainty estimates. This work applies NARGP to a synthetic multi-fidelity dataset that emulates a representative physical process. The study evaluates robustness under varying data scarcity, noise, and inter-fidelity nonlinearity.

### References:

[1] P. Perdikaris, M. Raissi, A. Damianou, N. D. Lawrence, G. E. Karniadakis; Nonlinear information fusion algorithms for data-efficient multi-fidelity modelling. Proc. A 1 February 2017; 473 (2198): 20160751

---

# **Anwendung stark verrauschter Daten zur Automatisierung der Prozesssteuerung bei der Kristallzüchtung und ML-Aufgaben im Rahmen der VGF-Technologie**

**Alexei Plotnikov<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Freiberger Compound Materials GmbH, Am Junger-Löwe-Schacht 5, 09599 Freiberg, Germany*

Bei der industriellen Züchtung von einkristallinem Galliumarsenid mittels gerichteter Erstarrung (Vertical Gradient Freeze, VGF) ist nur eine indirekte Prozesssteuerung anhand von Temperatur- bzw. Leistungsdaten für die Heizer möglich. Dabei können einige Heizer durch direkte Leistungsvorgabe gesteuert werden, während bei anderen die Leistung durch die Temperatur des entsprechenden Thermoelements geregelt wird. Durch die Analyse des Verhaltens abhängiger Parameter - sowohl der Leistung als auch der Temperatur - kann der Prozessstand in Bezug auf bestimmte kritische Punkte (Prozessmarken) ermittelt werden. Zu den wichtigsten Prozessmarken gehören unter anderem der Punkt des vollständigen Aufschmelzens des Einsatzes (Aufschmelzmarke) und der endgültigen Erstarrung der Schmelze (Enderstarrungsmarke). Ein geringes Signal-Rauschen-Verhältnis (für die Leistung), Stufigkeit des Signals aufgrund der endlichen Auflösung des ADC (für die Temperatur) und die Anforderung einer Online-Analyse innerhalb eines begrenzten Datenfensters erschweren die Analyse. Es werden verschiedene Varianten und Algorithmen vorgestellt und deren Anwendbarkeit sowie Stabilität diskutiert. Unter Berücksichtigung der sich ändernden thermischen Eigenschaften kann eine zuverlässige Erkennung der Prozessmarken für die effektive Anwendung von ML-Algorithmen zur Automatisierung der Steuerung der VGF-Kristallzüchtung von entscheidender Bedeutung sein.

---

## **Untersuchung Funktionaler Daten und Ihre Verwendung in ML-Modellen**

**Georg Raming<sup>1</sup>, Johanna Klinker<sup>1</sup>, Ludwig Stockmeier<sup>1</sup>, Markus Zenk<sup>2</sup>**

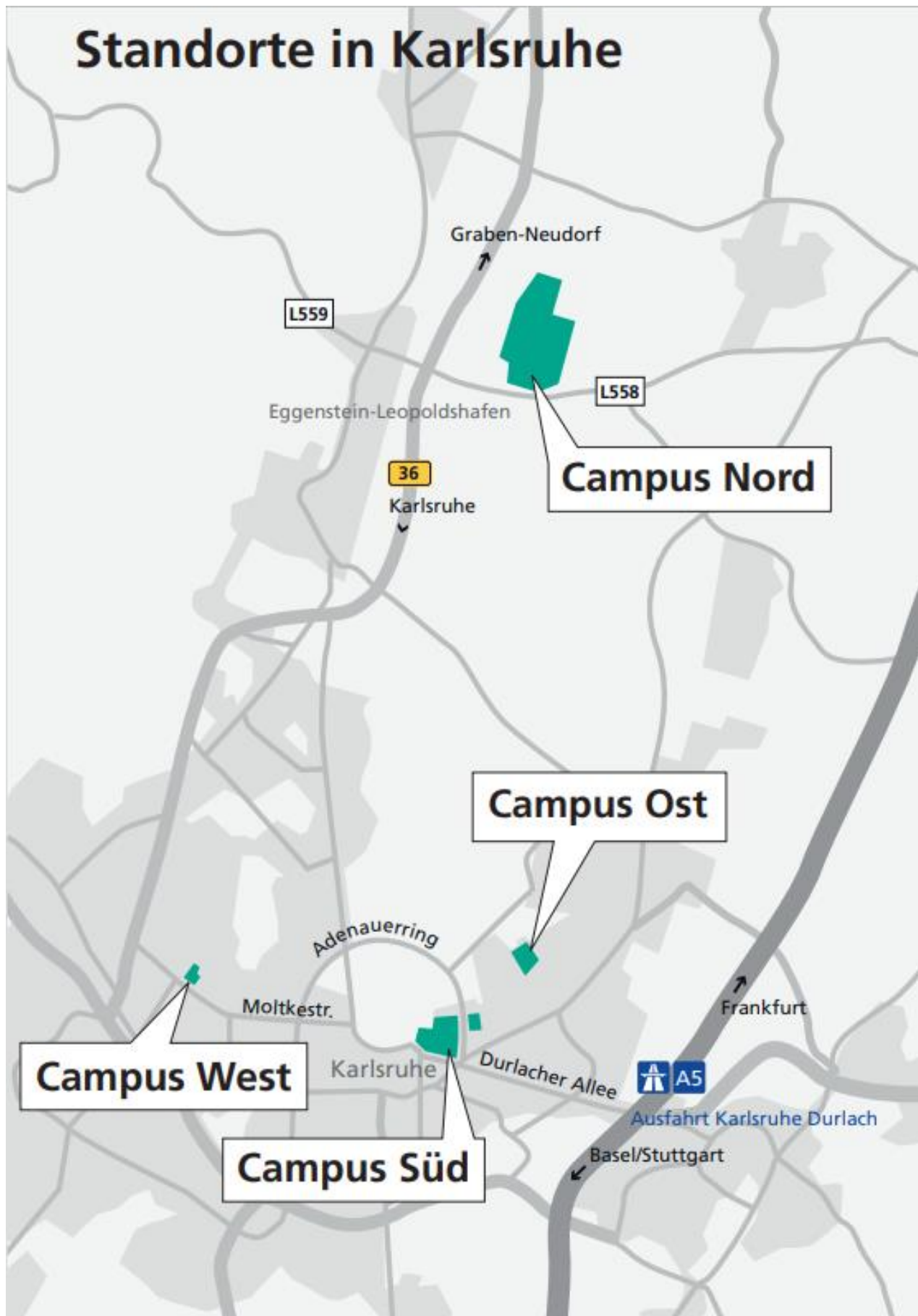
<sup>1</sup> *Siltronic AG Berthelsdorfer Str. 113, 09599 Freiberg, Germany*

<sup>2</sup> *Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany*

Die Siltronic AG arbeitet an digitalen Zwillingen (DZ), unter anderem auch für das Kristallziehen. Bei einem DZ handelt es sich dabei um eine digitale Repräsentation eines Produkts oder Prozesses. Hierzu gehören die notwendigen Daten aber auch die Modelle für sowohl die Daten als auch für die physikalischen Prozesse. Mit DZ soll die Arbeit der Prozessentwickler erleichtert werden, so sind dort z.B. alle Daten für die Bewertung der Qualität des Kristalls zu finden. Es wird auch an Modellen gearbeitet, um die Prozessentwicklung, z.B. für den Sauerstoffgehalt zu unterstützen.

Funktionale Daten sind Kurven, z.B. radiale Verläufe von Messgrößen, oder Zeitreihen. In diesem Beitrag werden funktionale Daten, z.B. der radiale Sauerstoffverlauf, bewertet und in einer vereinfachten Darstellung (feature engineering) in einem ML-Modell verwendet. Wenn man nun verschiedene Daten vergleichen will, entsteht neben dem Problem der unterschiedlichen Skalierung auch ein Frequenzproblem. Letzteres bedeutet, dass bestimmte Daten in einer höheren Frequenz zur Verfügung stehen als andere. Wie diese Datenreihen in einem ML-Modell verknüpft werden können, soll in diesem Beitrag diskutiert werden.

# Orientation



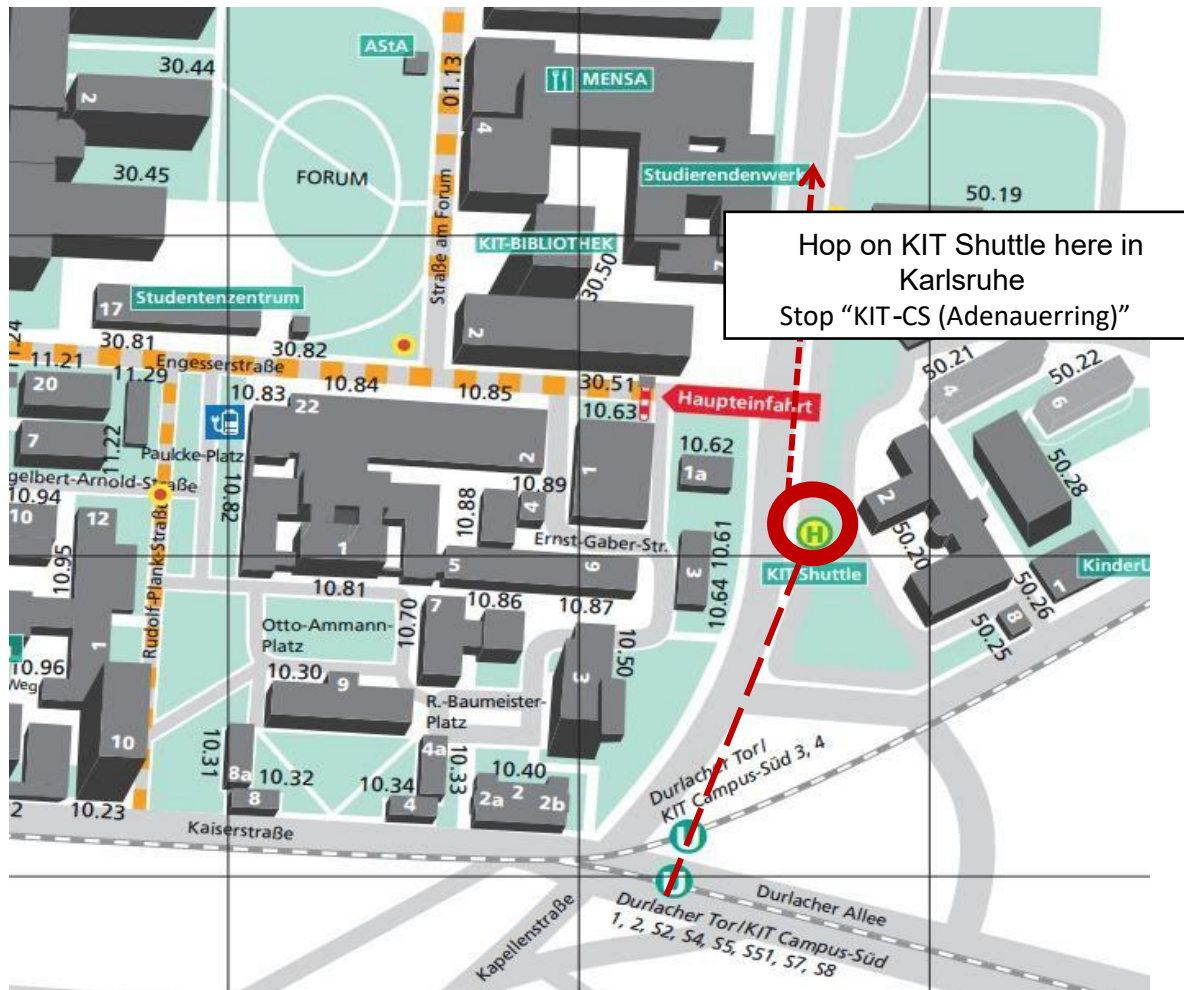
The floor plan of the Second Floor is a rectangular layout. It features four main rooms: Room 202 in the top-left, Room 214 in the top-right, Room 231 in the bottom-left, and Room 221 in the bottom-right. A central corridor runs horizontally through the middle of the floor. At the bottom of this central corridor, there is a small square area with a double-headed arrow, likely representing an elevator or a central staircase. Stairs are indicated by small step symbols: one set of stairs leads up from Room 202, another set leads down from Room 214, and a third set leads down from the bottom-left corner of the floor plan. A north arrow is located in the top-left corner, pointing towards the top of the page. The text 'Second Floor' is written in a large, bold font at the bottom right of the image.



**Campus Nord, B348, Hermann-von-Helmholtz-str 1. 76344, Eggenstein Leopoldshafen:**

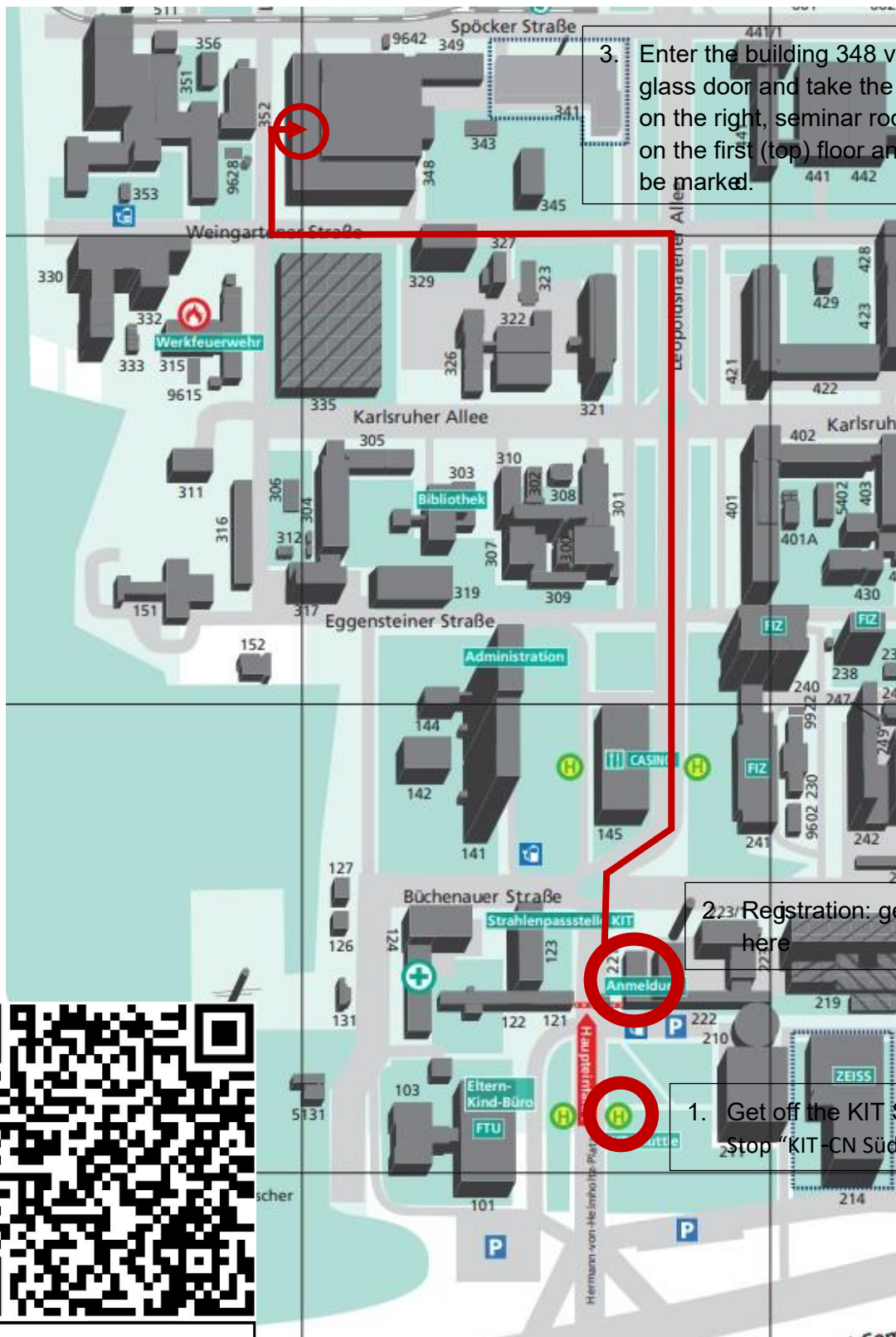
**Option A – KIT shuttle between Campus South and Nord**  
**([Shuttle Schedule](#) Link)**

### KIT Campus South



Google maps

KIT Campus Nord



3. Enter the building 348 via glass door and take the stairs on the right, seminar room is on the first (top) floor and will be marked.

2. Registration: get the badge here

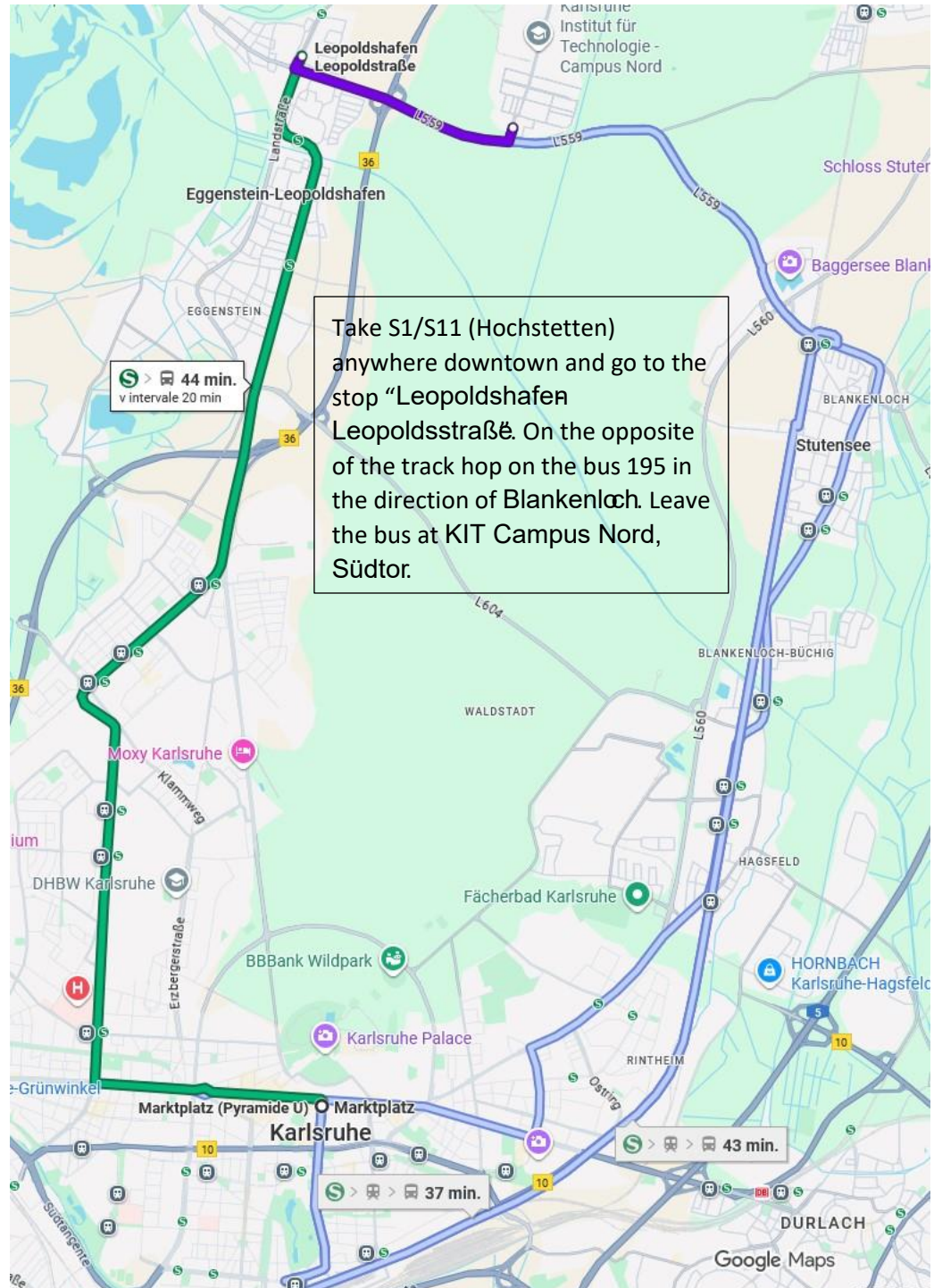
1. Get off the KIT Shuttle here, Stop "KIT-CN Süd H1"



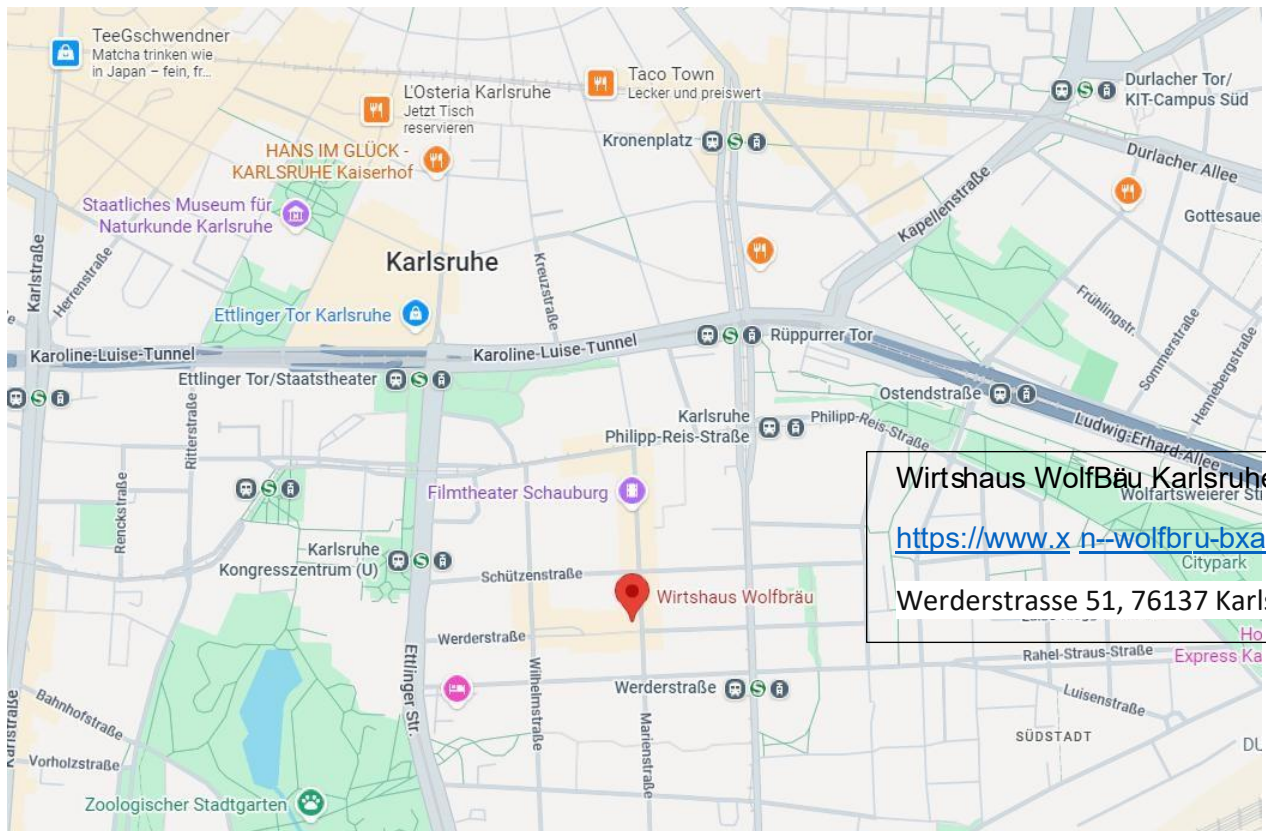
Google maps



## Option B – Public Transport (check [kvv](#) nach: KIT-campus nord, südtor)



## Dinner 03.03.2026, 19:45-20:00



Wirtshaus Wolfbräu Karlsruhe

<https://www.xn-wolfbru-bxa.de/>

Werderstrasse 51, 76137 Karlsruhe



Wirtshaus Wolfbräu Karlsruhe

Home

Speisekarte

Galerie

Kontakt

Wirtshaus Wolfbräu  
... wild seit 1885.

Über uns