



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	Dr. Binh Duong Nguyen (FZ-Juelich, Juelich), Accelerating Defect Characterization in Semiconductors with Machine Learning
19:45		Dinner https://www.wolfbraeu.de/

04.03.2026

KIT, Campus South, Building 11.40, Room 231

8:00	8:10	Opening
8:10	8:40	Alicja Kerschbaum (IISB), Workflow for physics-based modelling of GaN growth by HVPE
8:40	9:00	Christopher Straub (IISB): PINNs für gekoppelten Wärmetransport
9:00	9:30	Christopher Straub (IISB), Defekterkennung von Aluminiumnitrid-Wafern
9:30	9:50	Break
9:50	10:20	Lucas Vieri (IKZ) Multi-Fidelity data fusion using Non-linear Autoregressive Gaussian Process
10:20	11:00	Alexei Plotnikov (FCM) Anwendung stark verrauschter Daten zur Automatisierung der Prozesssteuerung bei der Kristallzüchtung und ML-Aufgaben im Rahmen der VGF-Technologie
11:00	11:40	Georg Raming (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 Kerschbaum¹, M. Müller², J. Tomkovič², G. Lukin¹, H. Torkashvand¹, S. Besendörfer¹, J Friedrich¹, J. Heitmann^{2,1}

¹ Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany

² Institute of Applied Physics, TU Bergakademie Freiberg, Leipziger Str. 23, 09599 Freiberg, Germany
e-mail: alicia.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 Freiberger Compound Materials GmbH (grant no. 13XP5189A) for the inspiring cooperation.

PINNs für gekoppelten Wärmetransport

Christopher Straub¹

¹ 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 akkurate Approximation des Prozesses genutzt werden kann. Dabei betrachten wir Geometrien, die von realen Kristallzuchtanlagen inspiriert sind. Ziel des Vortags 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 Straub¹

¹ 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 Vieri¹

¹ 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 Plotnikov¹

¹ 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 Raming¹, Johanna Klinke¹, Ludwig Stockmeier¹, Markus Zenk²

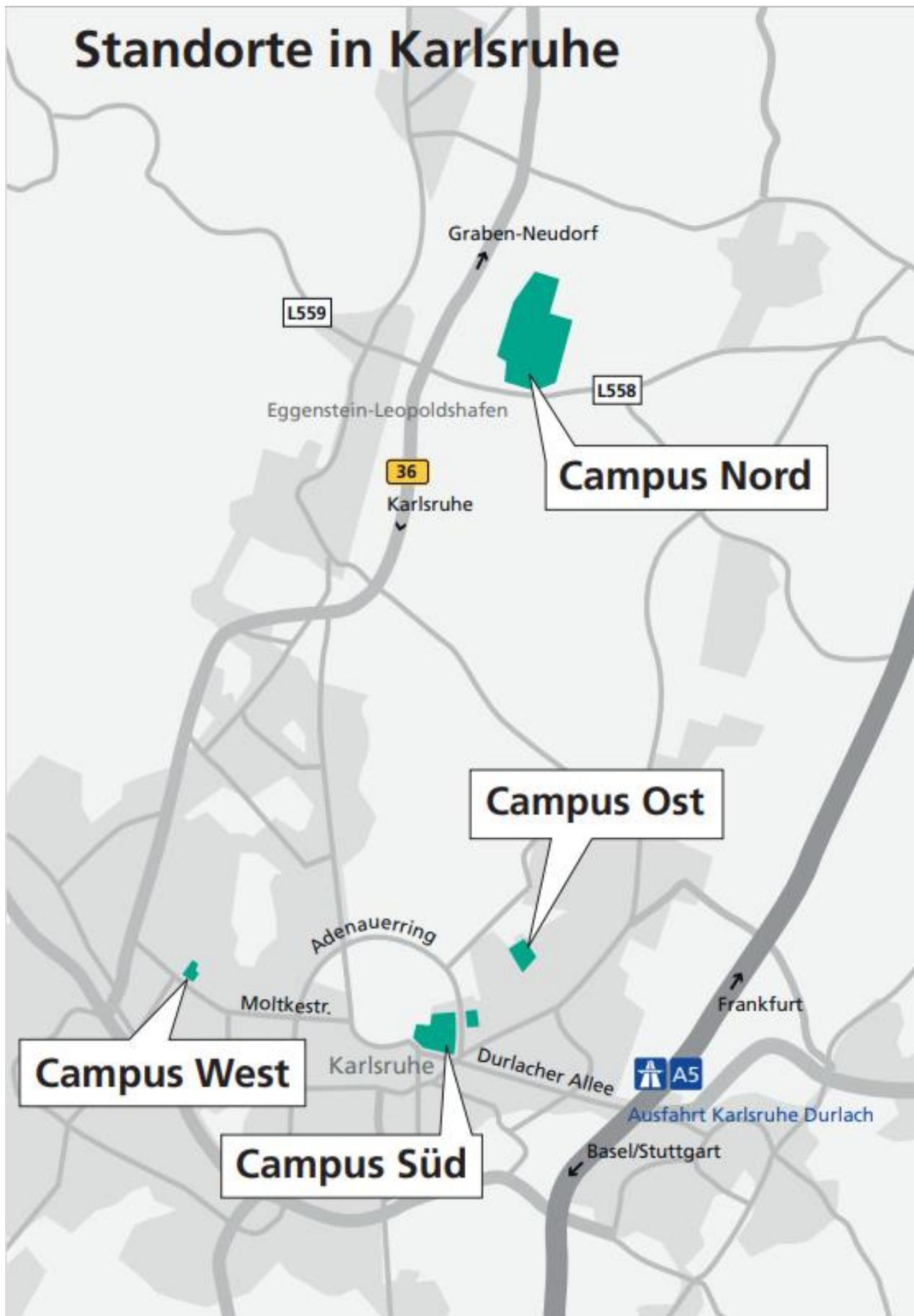
¹ Siltronic AG Berthelsdorfer Str. 113, 09599 Freiberg, Germany

² Fraunhofer IISB, Schottkystrasse 10, 91058 Erlangen, Germany

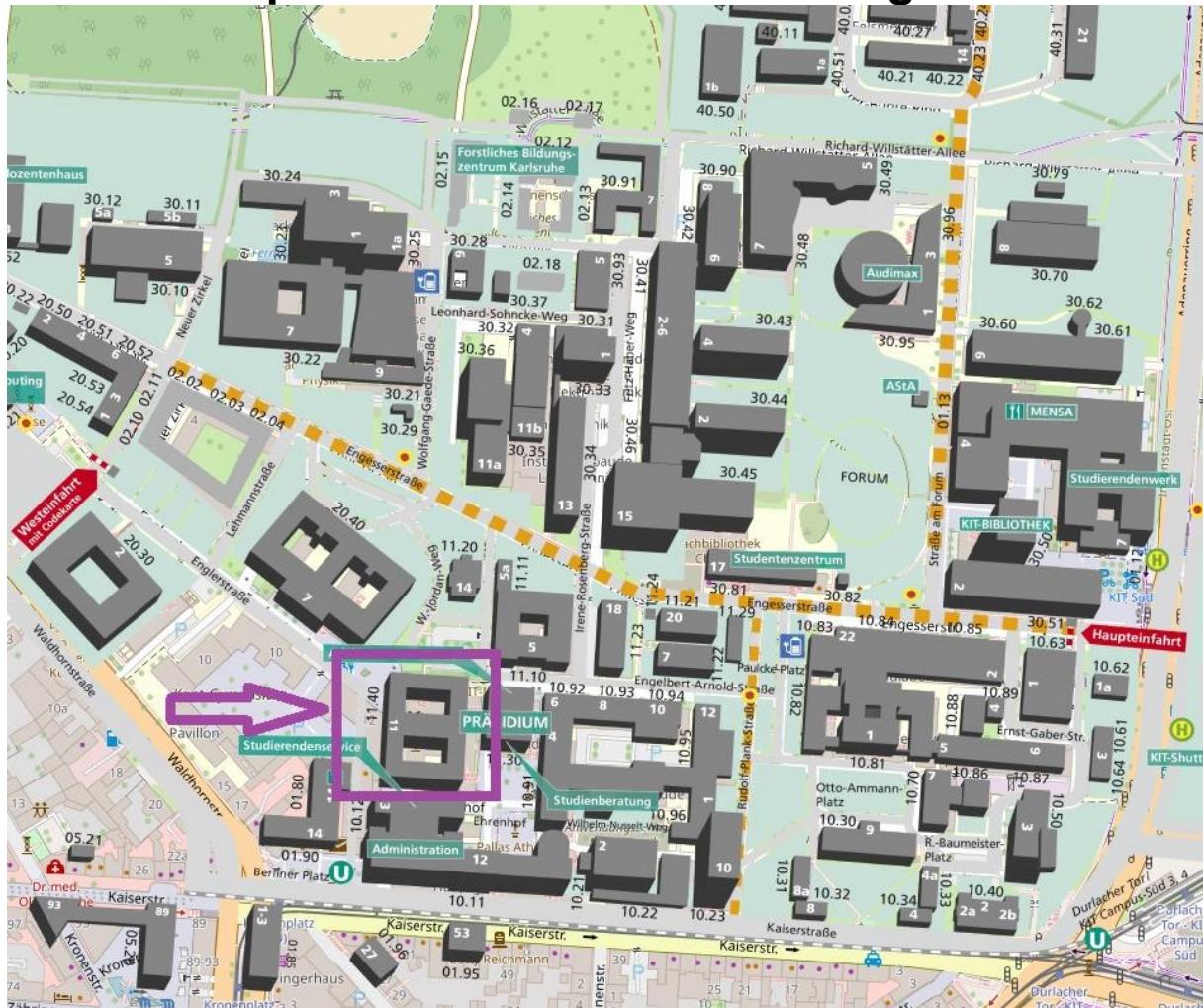
Die Siltronic AG arbeitet an digitalen Zwillingen (DZ), unter anderem auch für das Kristallziehen. Bei einem DZ handelt es sich dabei um eine digitale Repräsentation eines Produkts oder Prozesses. Hierzu gehören die notwendigen Daten aber auch die Modelle für sowohl die Daten als auch für die physikalischen 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.

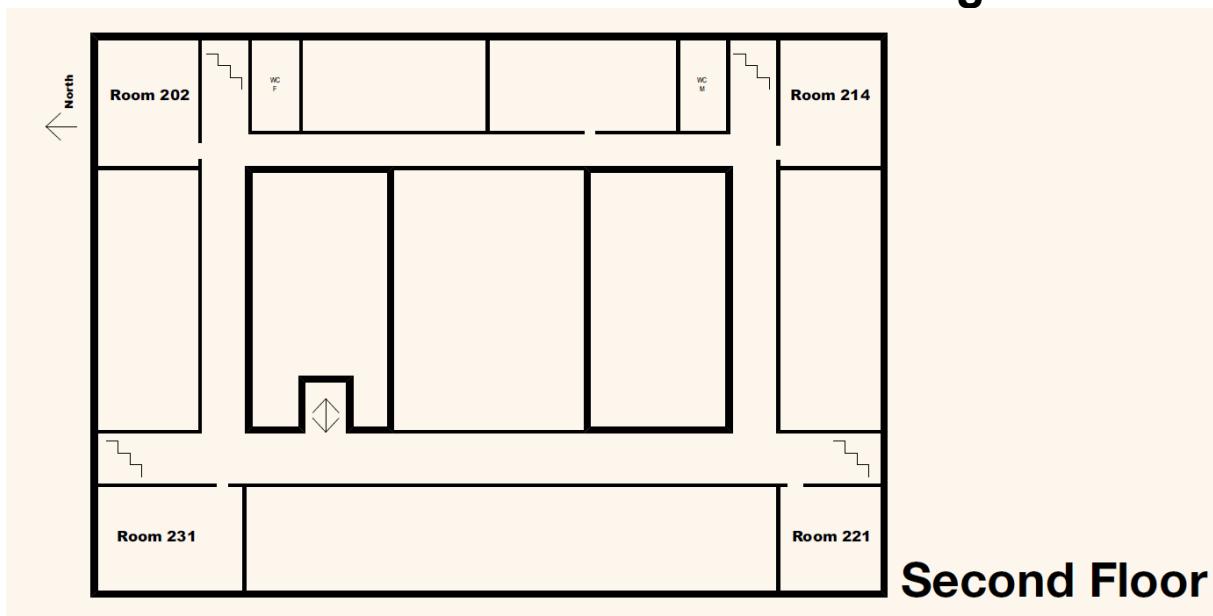
Orientation



Campus-South Location Building 11.40



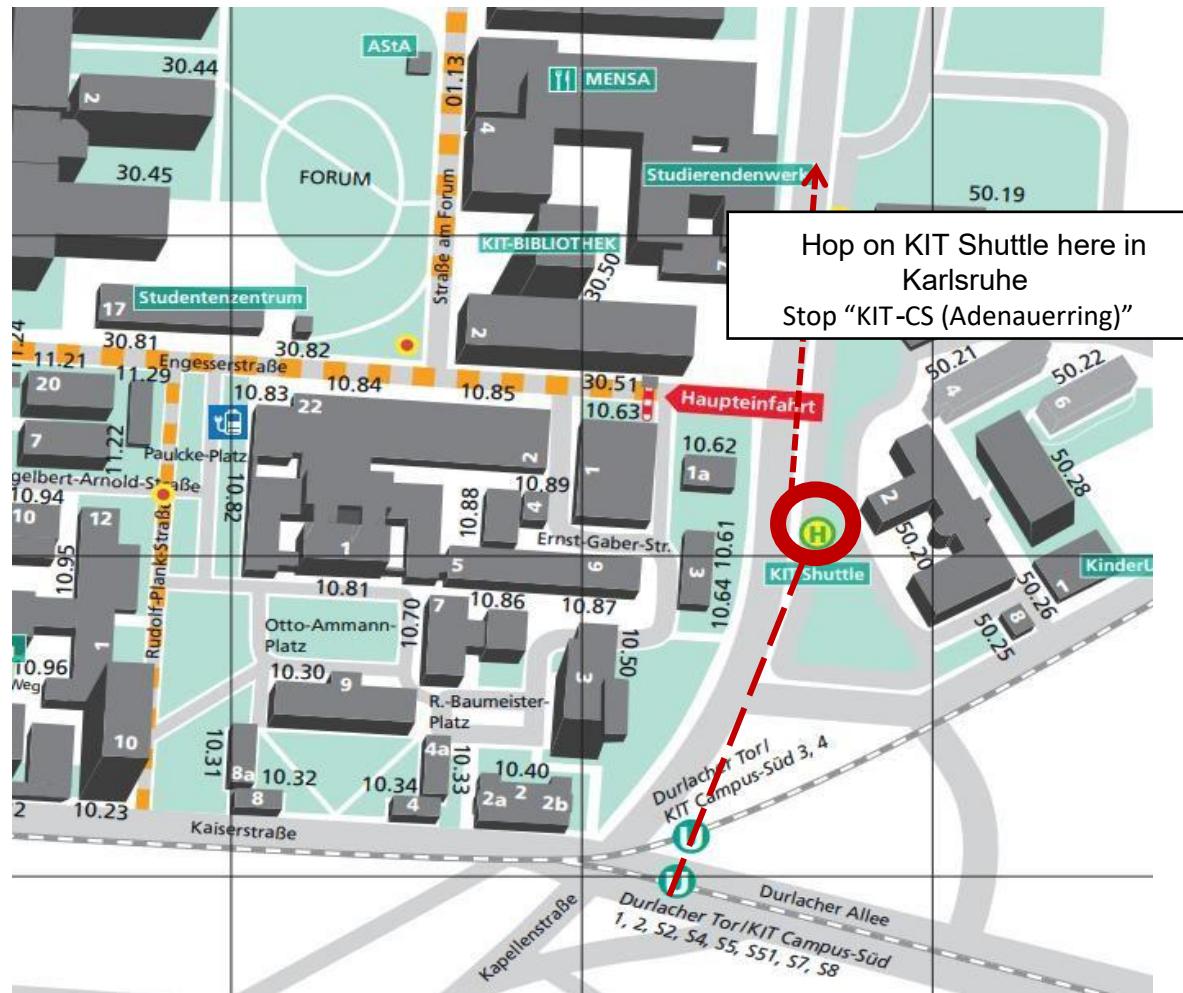
Room 231 on second Floor of Building 11.40



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

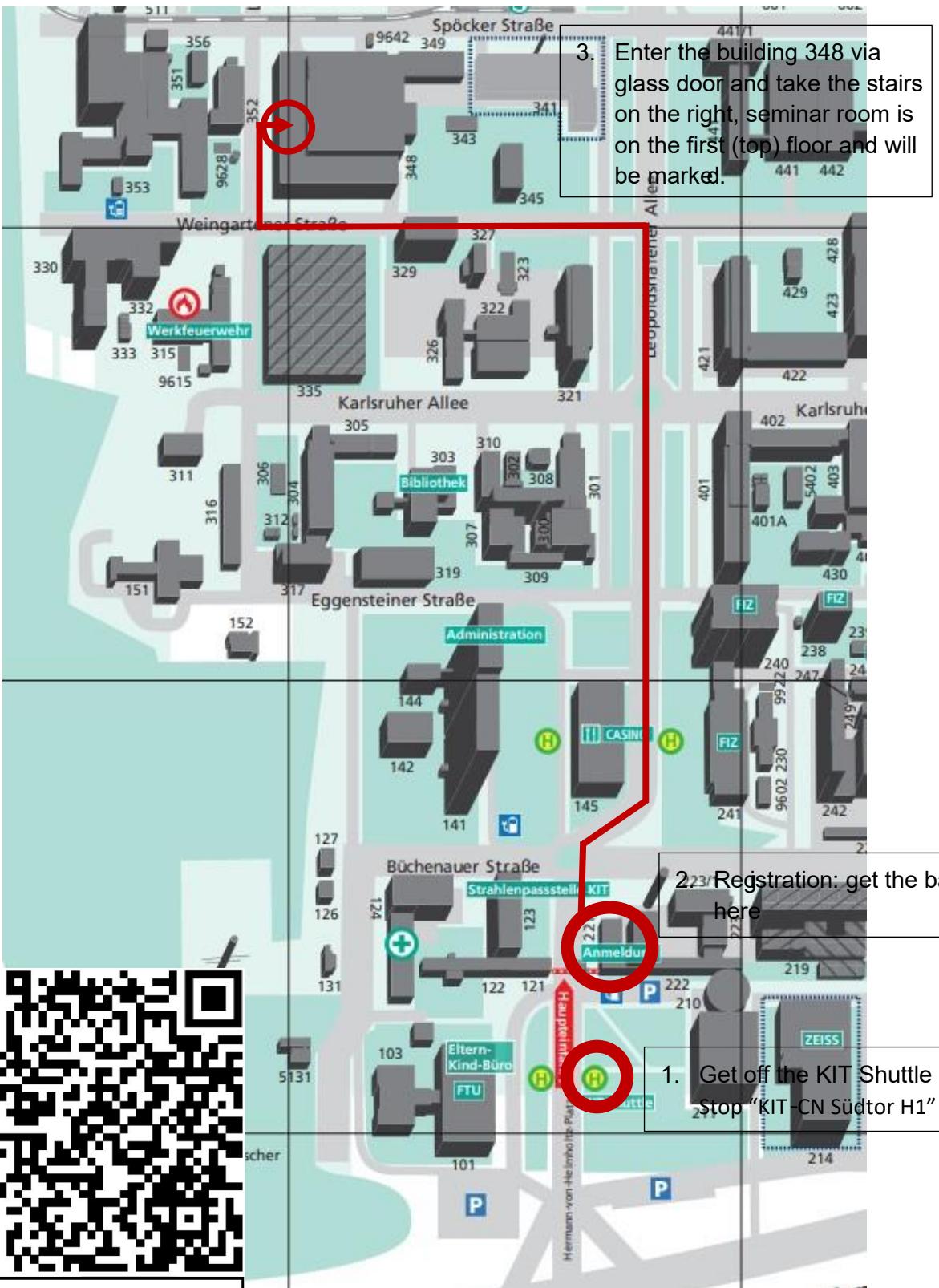
Option A – KIT shuttle between Campus South and Nord
([Shuttle Schedule Link](#))

KIT Campus South



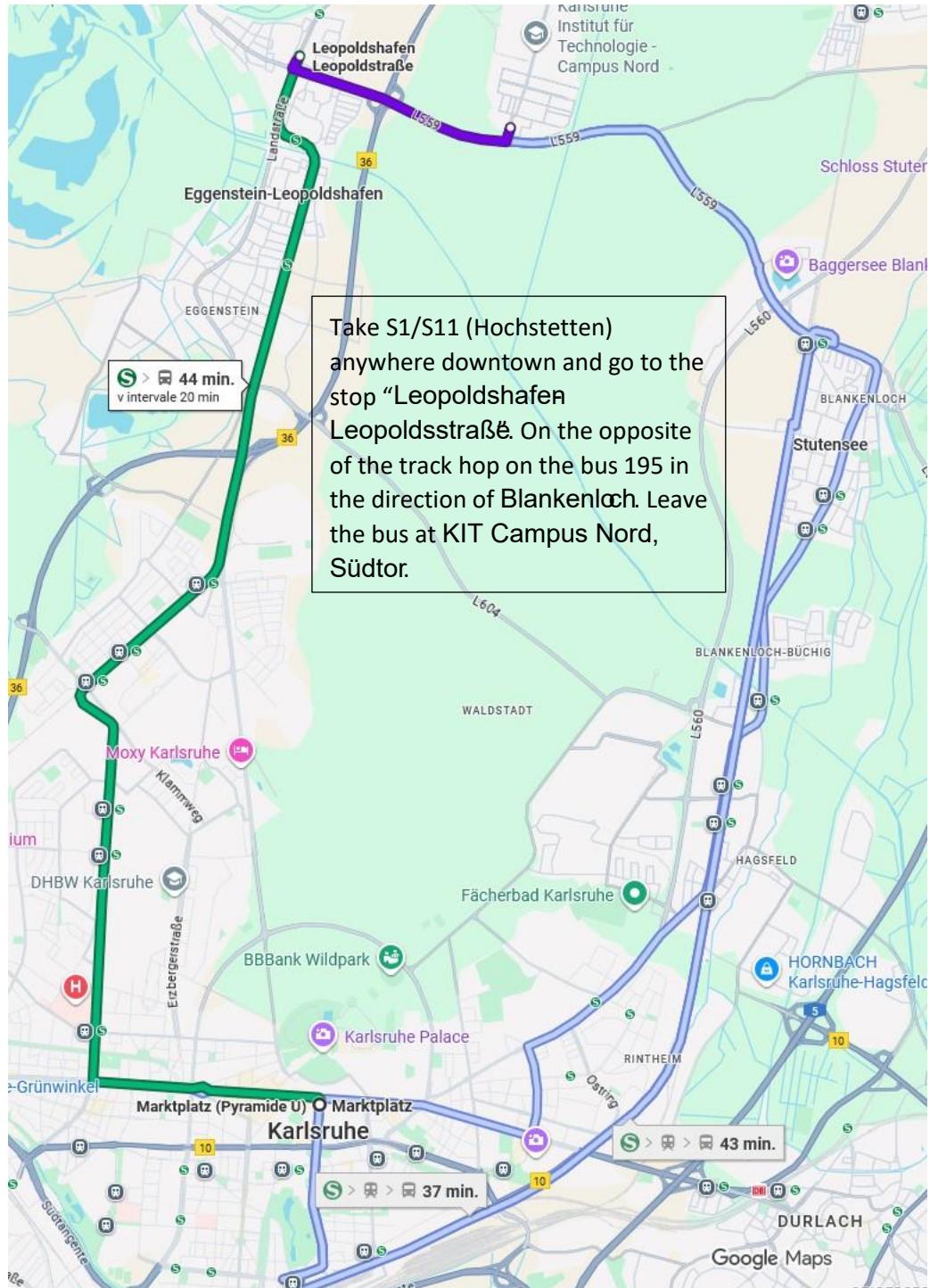
Google maps

KIT Campus Nord

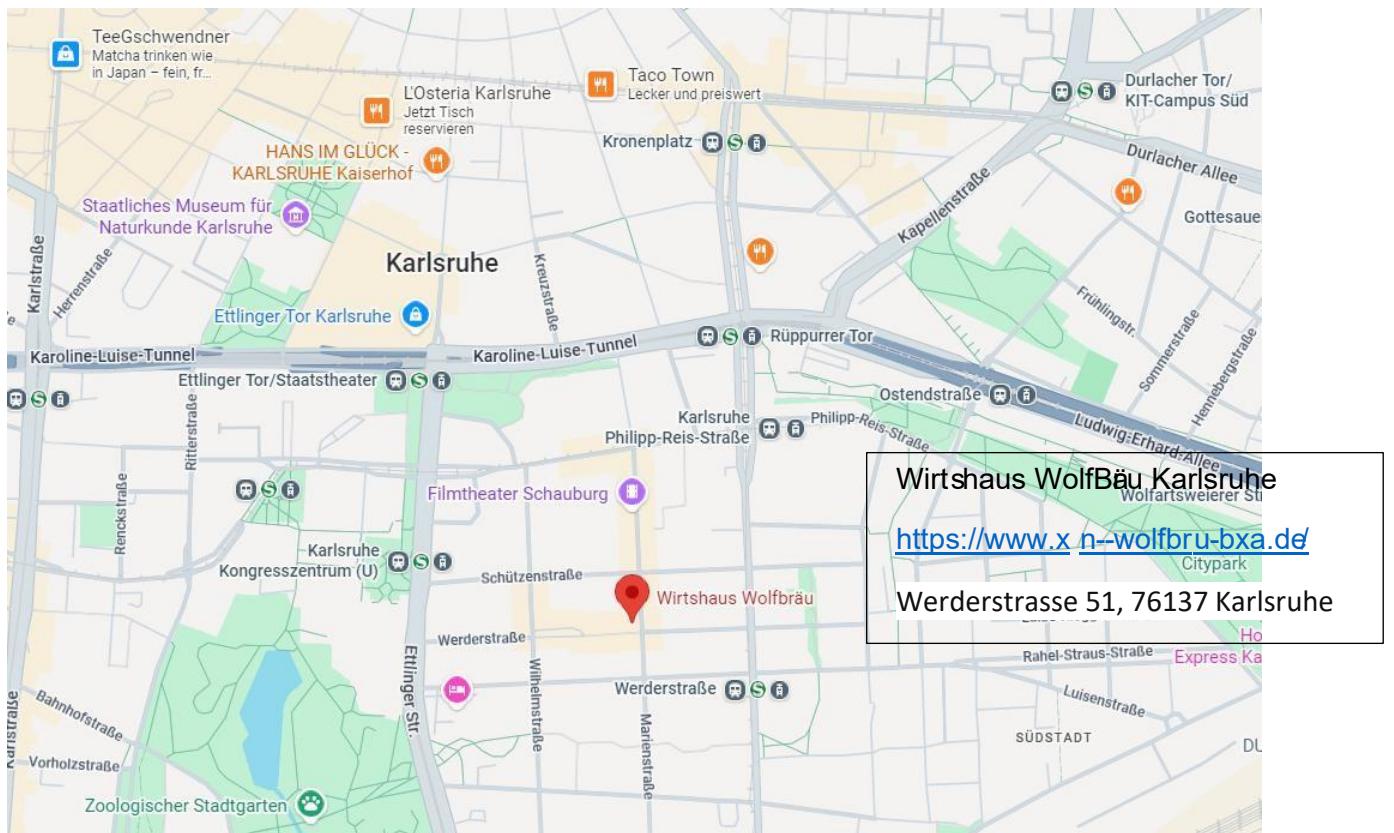


Google maps

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



Dinner 03.03.2026, 19:45-20:00



The screenshot shows the homepage of the Wirtshaus Wolfbräu Karlsruhe website. The header features a white wolf logo on the left and the restaurant's name in the center. Below the header, there is a large image of the interior of the pub with wooden tables and chairs. Overlaid on this image is the text "Wirtshaus Wolfbräu ... wild seit 1885." At the bottom left of the image, there is a green button with the text "Über uns". The top navigation bar includes links for "Home", "Speisekarte", "Galerie", and "Kontakt".