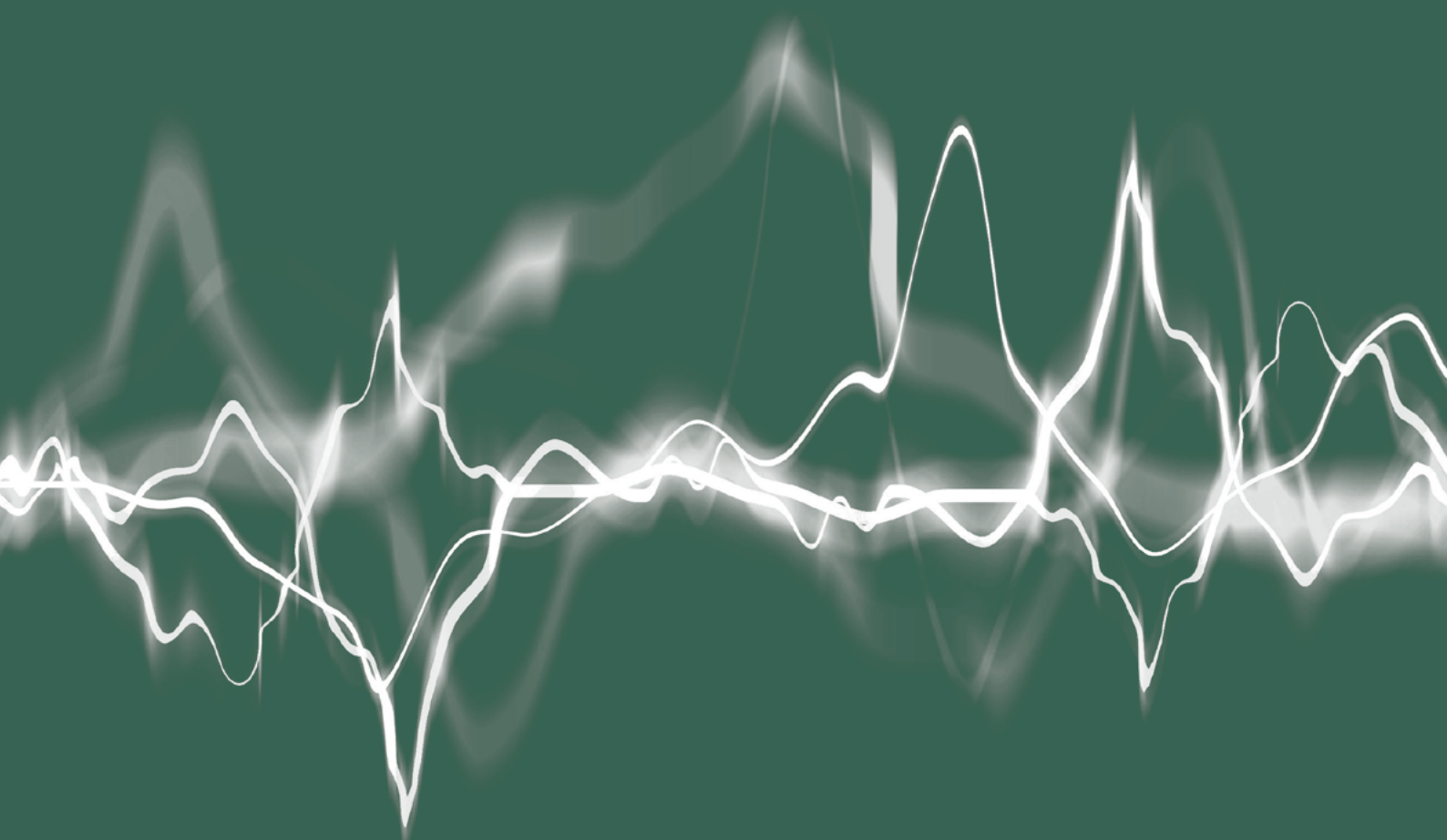




Stiftung
Werner-von-
Siemens-Ring

NEUE HORIZONTE IN TECHNIK UND NATURWISSENSCHAFT

ZUKUNFTSTHEMEN 2024



ZUKUNFTSTHEMEN 2024

NEUE HORIZONTE IN TECHNIK UND NATURWISSENSCHAFT
ZUKUNFTSTHEMEN 2024

Stiftung Werner-von-Siemens-Ring (Hrsg.)

Impressum

Stiftung Werner-von-Siemens-Ring
Steinplatz 1 – 10623 Berlin
www.siemens-ring.de

Vorsitzende des Stiftungsrats: Prof. Dr. Cornelia Denz
Geschäftsführer: Dr. Jan Fischer-Wolfarth
Stiftungsregister Berlin: AZ 3416 / 208 – II.2

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlags unzulässig und strafbar. Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbeschreibungen etc. berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten waren und von jedermann benutzt werden dürfen. Aus der Veröffentlichung kann nicht geschlossen werden, dass die beschriebenen Lösungen frei von gewerblichen Schutzrechten (z. B. Patente, Gebrauchsmuster) sind. Eine Haftung des Verlags für die Richtigkeit und Brauchbarkeit der veröffentlichten Programme, Schaltungen und sonstigen Anordnungen oder Anleitungen sowie für die Richtigkeit des technischen Inhalts des Werks ist ausgeschlossen. Die gesetzlichen und behördlichen Vorschriften sowie die technischen Regeln (z. B. das VDE-Vorschriftenwerk) in ihren jeweils geltenden Fassungen sind unbedingt zu beachten.

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.dnb.de> abrufbar.

ISBN 978-3-8007-6472-3

© 2024 VDE VERLAG GMBH · Berlin · Offenbach
Bismarckstr. 33, 10625 Berlin

Alle Rechte vorbehalten.

Titelbild: © Cyril Hou/Fotolia
Layout: Burga Fillery, bf-design.myportfolio.com
Druck: Salzland Druck GmbH & Co. KG, Staßfurt
Printed in Germany



Werner von Siemens, 1816 - 1892

INHALT

Vorwort	9
Einleitung	
Auszeichnung und Wertschätzung für herausragende Forschungstalente	10
Janine George	
Materialinformatik	14
Marcus Grum	
Mit Neuronalem Modellieren zur Prozessexzellenz	32
Yvonne Späck-Leigsnering	
Bridging Theory and Practice: Modeling and Simulation of Electromagnetic Phenomena	50
Florian Schiegg	
Cooperative Intelligent Transportation Systems (C-ITS)	66



VORWORT

Die Stiftung Werner-von-Siemens-Ring hat sich der Förderung von Forschungstalenten verschrieben. Zu diesem Zweck zeichnet sie seit 1916, dem hundertsten Geburtstag des Namensgebers Werner von Siemens, Lebensleistungen in Natur- und Technikwissenschaften mit dem Werner-von-Siemens-Ring aus.

Nach dem Vorbild des forschenden Unternehmers Werner von Siemens haben die Preisträgerinnen und Preisträger durch bahnbrechende Forschung und unternehmerisches Engagement Innovationen erschaffen, die unser aller Alltag dominieren. So steckt Werner-von-Siemens-Ring-prämierte Forschung beispielsweise im Kühlschrank, in moderner Fahrzeugtechnik, in riesigen Kreuzfahrtschiffen, in Diagnosegeräten, Krebstherapien und Impfstoffen.

1977 begann die Stiftung in Ergänzung zu Lebensleistungen auch Personen zu ehren, die bereits in frühen Karrierestadien Beeindruckendes geleistet haben. Fortan zeichnete sie Jungwissenschaftlerinnen und Jungwissenschaftler aus, die anschließend in das Netzwerk der Stiftung aufgenommen wurden und vom Austausch mit den Ringträgerinnen und Ringträgern profitieren durften. 2023 wurde diese Auszeichnung erstmals mit einer zusätzlichen finanziellen Wertschätzung von 10.000 € pro Person verbunden.

Doch der Fokus bleibt auf dem Netzwerkgedanken. In jährlichen gegenseitigen Besuchen an den Wirkungsstätten der Jungwissenschaftlerinnen und Jungwissenschaftler, bei Preisverleihungen und auf Diskussionsveranstaltungen bringt die Stiftung Werner-von-Siemens-Ring Forschende zusammen, die unsere Welt gestalten. Die beste Inspiration liefert dabei Werner von Siemens selbst mit dem Zitat „Wer neu und anders denkt, kann die Welt verändern“.

Die Arbeit der Stiftung Werner-von-Siemens-Ring wäre ohne das Engagement des Stiftungsrats und ihrer Förderer nicht möglich. Allen, die die Stiftung unterstützen, spreche ich hiermit meinen herzlichen Dank aus.

Ich wünsche allen Leserinnen und Lesern eine anregende Lektüre.

Prof. Dr. Cornelia Denz
Vorsitzende des Stiftungsrats
Präsidentin der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt

EINLEITUNG

AUSZEICHNUNG UND WERTSCHÄTZUNG FÜR HERAUSRAGENDE FORSCHUNGSTALENTE

Technik prägt unseren Alltag und bildet so eine wichtige Grundlage für menschlichen Fortschritt. Dabei markiert aktuell der Durchbruch künstlicher Intelligenz und ihrer Anwendungen in nahezu allen Lebensbereichen eine neue Stufe der digitalen Revolution. Durch und mit Technik verändert sich unsere Welt rasant. Diesen Wandel zu gestalten, ist nicht zuletzt die Aufgabe von Forscher:innen, die ihre Erkenntnisse aus der Wissenschaft als neue Produkte in die breite Anwendung bringen.

Nur so können technologische Antworten auf die großen Fragen unserer Zeit gefunden und effektiv als Lösungen in die Gesellschaft gebracht werden: Wie gestalten wir die Mobilität der Zukunft? Wie sichern wir unseren Lebensstandard unter dem Einfluss des Klimawandels? Wie gestalten wir eine nachhaltige Energiewende? Wie verstehen wir künstliche Intelligenz und gestalten mit ihr die Welt, in der wir leben wollen?

Die Stiftung Werner-von-Siemens-Ring ehrt seit fast fünfzig Jahren Jungwissenschaftler:innen, die sich gerade aufmachen, ihre Forschungswege zu gehen und dabei bereits herausragende und vielversprechende Ergebnisse erzielt haben.

Der digitale Wandel und die globalen Herausforderungen brauchen Forschungstalente mit wissenschaftlichem Engagement, Unternehmensgeist und Durchhal-

tevermögen, ihre Ideen in die Anwendung zu bringen und so Wirkung für die Gesellschaft zu erzielen.

Der jüngste Jahrgang von der Stiftung Werner-von-Siemens-Ring ausgezeichnete Jungwissenschaftler:innen findet unterschiedliche Ansätze, diesen Aufgaben zu begegnen. Was sie eint, sind die Begeisterung für Forschung dafür und der Glaube an die Gestaltungsmacht von Technologien, die ihren Weg aus dem Labor in die Gesellschaft finden.

Sie zeigen: Innovation made in Germany ist nach wie vor richtungsweisend. Damit tragen sie nicht nur zum tech-

nologischen Fortschritt bei, sondern helfen auch, Deutschlands Position als starken Wirtschaftsstandort zu bewahren. Doch der Weg in die Spitzenforschung ist oft steinig. Deshalb brauchen wir Talentförderung von der Schule über das Studium und den Beginn der wissenschaftlichen Karriere hinweg. Noch viel mehr Talente könnten sich aufgrund ihrer grundsätzlichen Begeisterung für Mathematik, Natur- und Technikwissenschaften für eine entsprechende Ausbildung und eine nachfolgende Karriere entscheiden. Dieses Potential zu heben ist eine wichtige Motivation für die Arbeit der Stiftung Werner-von-Siemens-Ring.

„Wandel gestalten heißt Verantwortung übernehmen.“

Die ausgezeichneten Jungwissenschaftler:innen des Jahrgangs 2023 zeigen dabei als Vorbilder, dass es sich lohnt und was bereits in jungen Jahren erreicht werden kann.

AUSGEZEICHNETE FORSCHUNG GESTALTET DIE ZUKUNFT

Die Stiftung zeichnete am 13. Dezember 2023 die Arbeiten der folgenden vier Forscher:innen aus:

Prof. Dr. Janine George **Bundesanstalt für Materialforschung** **und -prüfung | Friedrich-Schiller-** **Universität Jena**

Prof. Dr. Janine George erhält die Auszeichnung als Jungwissenschaftlerin für die Erforschung computergestützter Methoden zur beschleunigten Suche nach neuen und verbesserten Materialien für die Herausforderungen der Energieumwandlung. Durch ihre Arbeit können im großen Maßstab Informationen aus der Analyse chemischer Bindungen mit anderen Materialeigenschaften kombiniert werden, um so chemische Regeln zu überprüfen, oder neue abzuleiten und darüber hinaus auf der Basis maschinellen Lernens Modelle für Materialeigenschaften zu entwickeln. Durch die Anwendung solcher Regeln und Modelle wird die Suche nach optimierten Materialien z.B. für elektrische Batterien oder Solarzellen beschleunigt. Janine George leistet mit ihrer Arbeit einen wichtigen Beitrag zur Energiewende.

Jun.-Prof. Dr. Marcus Grum **Universität Potsdam**

Jun.-Prof. Dr. Marcus Grum wird als Jungwissenschaftler ausgezeichnet in Anerkennung seiner Entwicklung eines methodischen Ansatzes, der es ermöglicht, Maschinen und Geschäftsprozesse mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen (KNN) zu modellieren. Er hat mit Hilfe künstlicher neuronaler Netzwerke (KNN) das Forschungsfeld des prozessorientierten KI-basierten Systemdesigns erschlossen. KNN sind in der Lage, Sinneseindrücke und Wissen schnell und effektiv in verteilten Netzwerkstrukturen parallel zu verarbeiten. Dank des entwickelten Konzepts können positive Aspekte von KNN auf das Management von Geschäftsprozessen übertragen und die Nutzung von KNN-Wissensverarbeitungsmechanismen zur modellbasierten Simulation sowie Verbesserung von Systemen und Prozessen ermöglicht werden. Marcus Grum ist es damit bereits gelungen, Produktionsmaschinen auf Basis neuronaler Anweisungen zu steuern und zu verbessern, indem Vorhersagen über den Verlauf von Produktionslinien getroffen, auf Umwelтанpassungen reagiert und Produkte mit Hilfe von KNN-basierten Instruktionen produziert wurden.

» Die Materialinformatik ist ein aufstrebendes, junges und in hohem Maße dynamisches Gebiet. «

Dr.-Ing. Janine Georg

» Beim Neuronalen Modellieren treten menschliche Modellierer wie auch künstliche Intelligenzen an einen gemeinsamen Modellierungstisch – sie konstruieren eine KI interaktiv und gemeinsam. «

Dr.-Ing. Marcus Grum

”Collaboration powers innovation – this is true for both: C-ITS and research.“

Dr. Florian Schiegg

Dr. Florian Schiegg
Bosch Research

Dr. Florian Schiegg wird für seine Arbeit im Bereich vernetzter intelligenter Verkehrssysteme und der Entwicklung neuer Dienste für Fahrzeug-zu-alles-Kommunikation (V2X) geehrt. Er promovierte über vernetzte intelligente Verkehrssysteme und trug dazu bei, neue V2X-Dienste zu entwickeln, darunter verbesserte Satellitennavigation, Warnung vor kritischen Verkehrssituationen, Teilen von Objekten, die von Sensoren erfasst wurden und Koordination von Fahrmanövern. Eines seiner Forschungsziele ist ein besseres Verständnis des situationsabhängigen Informationswerts. Basierend auf seiner Analyse entwickelte er einen dezentralen, informationswertbasierten Ressourcenallokationsmechanismus, der die Nutzung des Kommunikationskanals optimiert. Wesentliche Teile seiner Dissertation sind in europäische Normen eingeflossen und sollen so zur Skalierbarkeit und dem flächendeckenden Einsatz von V2X beitragen.

Dr. Yvonne Späck-Leigsnering
Technische Universität Darmstadt |
Robert Bosch GmbH

Dr. Yvonne Späck-Leigsnering erhält die Auszeichnung als Jungwissenschaftlerin für ihren Beitrag zum Aufbau eines zukünftigen Energieverteilungssystems für erneuerbare Energien. An der TU Darmstadt erforscht sie die technische Umsetzbarkeit der Energiewende und hat sich zum Ziel gesetzt, Produkte und Systeme durch mathematische Modellierung und Feldsimulationen zuverlässiger und sicherer zu gestalten. Dr. Yvonne Späck-Leigsnering trägt durch ihre Zusammenarbeit mit der Industrie einen bedeutenden Beitrag zur Technologieführerschaft Deutschlands im Bereich erneuerbarer Energien sowie zur gesellschaftlichen Akzeptanz der notwendigen Maßnahmen zur Umsetzung der Energiewende bei. Ein konkretes Beispiel ist die Verfügbarkeit von zuverlässigen, unterirdisch verlegbaren Höchstspannungskabeln.

”It’s a privilege to work with young, smart and highly motivated people.“

Dr.-Ing. Yvonne Späck-Leigsnering

Diese vier Persönlichkeiten stehen als Individuen für eine Generation an Forschenden, die sich den Herausforderungen unserer Zeit stellen und Wandel als etwas begreifen, dass es zu gestalten gilt.

Welche Transformationsprozesse künftig auf uns zukommen und wie wir damit umgehen, wird die Zukunft zeigen. Eines bleibt dabei gewiss: Technikforschung wird den Weg mitbereiten. Es bleibt spannend.

Dr. Jan Fischer-Wolfarth
Geschäftsführer
der Stiftung Werner-von-Siemens-Ring





Foto © BAM

Janine George ist Leiterin einer Nachwuchsgruppe an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin und lehrt gleichzeitig als Universitätsprofessorin für Materialinformatik an der Friedrich-Schiller-Universität in Jena. In ihrer Forschung beschäftigt sie sich mit chemischen Regeln und maschinellem Lernen, um die Entwicklung neuer Materialien zu beschleunigen. Von 2013 bis 2017 promovierte sie im Bereich der computergestützten Festkörperchemie an der RWTH Aachen. Sie hatte ein Promotionsstipendium vom Fonds der chemischen Industrie. Von 2018 bis 2021 war sie Postdoc und später Marie-Curie-Fellow an der UCLouvain in Belgien. Für ihre Forschungen war sie 2021 als Finalistin nominiert im Falling-Walls-Wettbewerb für den Breakthrough of the Year in der Kategorie Physical Sciences. Derzeit ist sie Mitglied der Materials Project Software Foundation.

MATERIALINFORMATIK

JANINE GEORGE

MATERIALINFORMATIK

Was ist Materialinformatik?

Die Materialinformatik ist eine sehr junge Disziplin, die sich in den letzten ein, zwei Jahrzehnten im Grenzgebiet zwischen Chemie, Physik, Materialwissenschaften und Informatik entwickelt hat. Sie beschäftigt sich mit der Verarbeitung großer Datenmengen. Diese Daten können dann mit Methoden der Datenwissenschaft und des maschinellen Lernens ausgewertet werden. Ziel ist es, die Anzahl von Laborexperimenten zu reduzieren und den Suchraum für neue Materialien erheblich einzuschränken. Dadurch soll die Zeit bis zur Markteinführung neuer Materialien deutlich verkürzt werden. Das ist unter anderem der Hintergrund der Materials Genome Initiative (<https://www.mgi.gov/>).

Leider gibt es nur wenige Datenbanken, die ausschließlich auf experimentellen Daten basieren und für diesen Zweck verwendet werden können (z.B. Kristallstrukturdatenbanken). Oft sind experimentelle Daten nicht wiederverwendbar gespeichert und es gibt keine ausreichend genauen Informationen zu den durchgeführten Experimenten. Daher ist es in der Materialinformatik üblich, stattdessen Materialeigenschaften mit voraussetzungsfreien Methoden vorherzusagen. Zur Berechnung der Materialeigenschaften ist die Dichtefunktionaltheorie sehr wichtig, die dank der Entwicklungen in der theoretischen Physik und der theo-

retischen Chemie ein Standardwerkzeug ist. Walter Kohn erhielt für die Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie bereits 1998 einen Nobelpreis.^[1] Es werden auch weitere Theorieniveaus und Methoden eingesetzt. Datenbanken, die berechnete Materialeigenschaften enthalten, sind unter anderem die des Materials Project (<https://materialsproject.org/>), AFLOW (<https://afflowlib.org/>), OQMD (<https://www.oqmd.org/>). Beispielhaft sind in *Abbildung 1* Kristallstrukturen gezeigt, deren Eigenschaften im Materials Project berechnet wurden. Meine Gruppe und ich tragen vor allem zum Materials Project bei. Ich bin aktuell Teil der Materials Project Foundation, die sich vor allem um die Codes rund um das Materials Project kümmert. Das Materials Project

Resume:

Die Materialinformatik ermöglicht es, vorhandenes/etabliertes chemisches Wissen zu überprüfen, aber auch neues Wissen zu generieren. Zu diesem Zweck wurden automatisierte Methoden entwickelt, die es ermöglichen, große Datenbanken mit Materialeigenschaften zu berechnen. Diese Datenbanken mit berechneten Eigenschaften können nun mit Datenanalysetechniken und maschinellem Lernen ausgewertet werden. Unsere Entwicklungen ermöglichen es insbesondere, die Analyse der chemischen Bindung mit anderen Materialeigenschaften in großem Maßstab zu kombinieren. Auf der Grundlage von Deskriptoren für chemische Bindungen haben wir die ersten Schritte zur Entwicklung neuer chemischer Regeln unternommen. Daneben entwickeln wir weitere Programmcodes, die die Tätigkeiten in der Materialinformatik deutlich erleichtern.

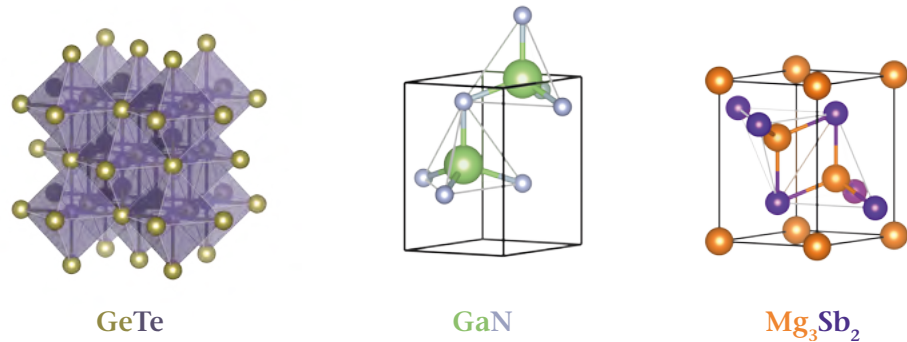


Abbildung 1:
Drei Beispielkristallstrukturen
aus dem Materials Project.

selbst blickt mittlerweile auf mehr als ein Jahrzehnt erfolgreiche Geschichte zurück. Unter anderem wurde ein neues Batteriematerial im Zusammenhang mit dem Materials Project entdeckt, das sich heute im Einsatz befindet.^[2] Das Materials Project hat weltweit mehr als 400.000 Nutzende, was die Bedeutung des Projektes für das Feld der Materialinformatik aufzeigt.

Automatisierung quantenchemischer Berechnungen

Um solch große Datenmengen reproduzierbar auf Supercomputern berechnen zu können, müssen Automatisierungscodes entwickelt werden, die es ermöglichen, verschiedene Methoden und Computerprogramme miteinander zu verknüpfen. Nur so ist die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse gewähr-

leistet und die Generierung großer Datenmengen kontrollierbar. Solche Automatisierungscodes enthalten auch Mechanismen für automatische Fehlerkorrekturen.

Im Rahmen des Materials Projects sind dabei einige Codes zur Automatisierung der Datengenerierung mittels Dichtefunktionaltheorie entstanden.

Pymatgen (<https://pymatgen.org/>) ist einer dieser Python-Codes. Er enthält unter anderem Repräsentationen für Kristallstrukturen, handhabt Ein- und Ausgabedateien für dichtefunktionaltheoretische Rechnungen und erlaubt es in großem Stil Materialanalyse zu betreiben.

Daneben gibt es noch Codes zur automatischen Fehlerkorrektur von dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen wie custo-

dian (<https://github.com/materialsproject/custodian>).

Wir verwenden den atomate2-Code (<https://github.com/materialsproject/atomate2>) für die Entwicklung und den Einsatz von vollautomatischen Workflows. Atomate2 ermöglicht es, Workflows für die computergestützte Materialwissenschaft zu schreiben. Die Workflows werden in Einzelaufgaben, sogenannte Jobs, unterteilt, die einzeln auf einem Supercomputer ausgeführt werden können. Zwischenergebnisse und -zustände werden in Datenbanken gespeichert. Unabhängige Teile eines Workflows können mit Hilfe dieser Workflowtools auch parallel auf einem Supercomputer berechnet werden. Eine der Python-Bibliotheken, die in atomate2 zur Definition der Workflows verwendet wird, ist jobflow.^[3]

Die Entwicklung einer solchen Automatisierung setzt voraus, dass die Berechnungen auf alle möglichen anorganischen Materialien ausgedehnt werden können. Dies ist nicht immer möglich. Außerdem müssen die Berechnungen und ihre Standardparameter so gut eingestellt sein, dass jede mögliche Berechnung ausreichend genau durchgeführt wurde. Die Genauigkeit ist hierbei gegen den Rechenaufwand abzuwägen. Dies erfordert oft eine große Anzahl von Testläufen, und gelegentlich müssen große Datensätze aufgrund numerischer Schwierigkeiten komplett neu erstellt werden. Häufig werden in diesem Zusammen-

hang auch Bugs in Simulationssoftware entdeckt und behoben. Selbst die Entwickler:innen von dichtefunktionaltheoretischen Codes nutzen mittlerweile Workflow-Tools, um die Funktionalitäten der Software zu validieren und zu verbessern.^[4,5]

Meine Gruppe trägt regelmäßig zu diesen Automatisierungscodes bei. Unter anderem haben wir einen Workflow entwickelt, der es ermöglicht, (harmonische) Schwingungseigenschaften von Materialien – sogenannte Phononen – in großem Maßstab zu berechnen (*siehe S. 18 Abbildung 2*). Diese sind wichtig, um das Temperaturverhalten und Phasenübergänge von Materialien zu verstehen. Dieser Workflow wurde bereits mehrfach in anderen Studien wiederverwendet.^[6,7] Er kombiniert mehrere hundert dichtefunktionaltheoretische Rechnungen und nutzt intern die Software Phonopy, um die Schwingungseigenschaften mit der Methode der endlichen Auslenkungen zu berechnen (<https://phonopy.github.io/phonopy/>).^[8]

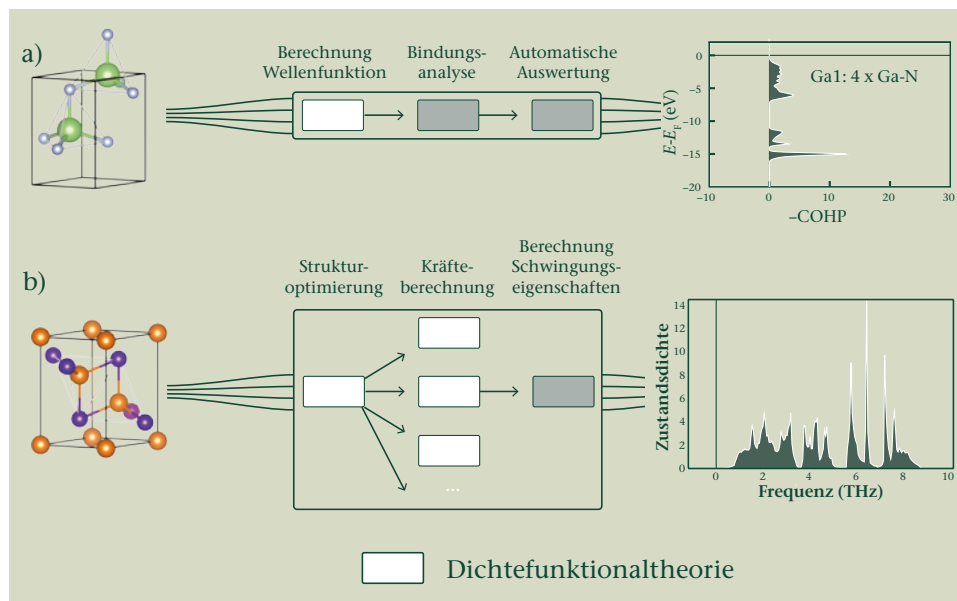
Neben der Software VASP kann aktuell bereits FHI-Aims für die dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen, die Teil des Workflows sind, eingesetzt werden. Wir nutzen diesen Workflow aktuell auch eingebettet in noch größere Workflows, um maschinengelernte Modelle automatisch zu trainieren und zu überprüfen.

„Die Materialinformatik ist ein aufstrebendes, junges und in hohem Maße dynamisches Gebiet.“

Janine George

Abbildung 2:

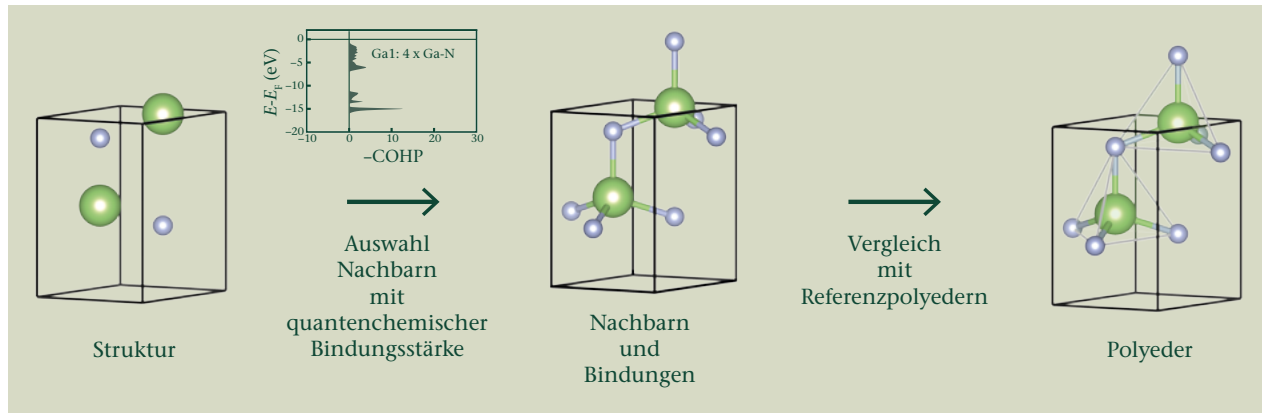
A) Schematische Darstellung eines Workflows für die Bindungsanalyse. Es wird eine dichtefunktionaltheoretische Rechnung mit zwei weiteren Berechnungsschritten kombiniert. Ein Zusammenfassungsplot für die Bindungssituation ist dann rechts gezeigt. B) Schematische Darstellung eines Workflows für die Berechnung von Schwingungseigenschaften. Als Eingabe wird auch hier eine Kristallstruktur verwendet. Danach wird mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie die Kristallstruktur „optimiert“ (d.h., Atompositionen und Gitterparameter werden so angepasst, dass die Energie minimal wird) und es werden danach dichtefunktionaltheoretische Rechnungen für die Bestimmung von Kräften durchgeführt. Mit deren Hilfe und der Berechnung von Kraftkonstanten lassen sich dann Schwingungseigenschaften berechnen. Rechts ist dann die Ausgabe, eine sogenannte Phononenzustandsdichte, gezeigt.



Außerdem haben wir einen Bindungsanalyse-Workflow entwickelt, der es ermöglicht, quantenchemische Informationen über die chemische Bindung von Festkörpern zu erhalten (Abbildung 2). Auch dieser kombiniert mehrere dichtefunktionaltheoretische Rechnungen. Die Bindungsdeskriptoren, die wir hier nutzen, sind unter anderem die Crystal Orbital Hamilton Population,^[9] die als bindungsgewichtete Zustandsdichte verstanden werden kann. Dazu nutzen wir noch integrierte Varianten hiervon, die sich als quantenchemische Bindungsstärke verstehen lassen. Neuere

Bindungsdeskriptoren für Festkörper entsprechen den altbekannten Bindungsordnungen aus der Molekülchemie.^[10] All diese Bindungsdeskriptoren können mit dem Programm LOBSTER (<http://cohp.de/>) berechnet werden.^[11]

Sie erlauben es, ein ähnliches Bild wie aus einem Molekülorbitaldiagramm zu erhalten. Sie ermöglichen auch den Zugriff auf die Besetzung von antibindenden Zuständen bestimmter Bindungen. Dies macht es möglich, Phasenumwandlungen und Defekteigenschaften von Materialien zu verstehen.



Um die Berechnung der Bindungseigenschaften zu automatisieren und die Bindungsdaten in maschinen-gelernten Modellen zu verwenden, entwickeln wir in der Gruppe einen eigenen Code – den Code LobsterPy (<https://github.com/jageo/lobsterpy>).^[12] LobsterPy erstellt dazu Zusammenfassungen in textlicher und maschinenlesbarer Form. Dieser Code stützt sich auf unsere pymatgen-Entwicklungen und ist auch Teil des atomate2-Workflows. Dieser Code erlaubt es unter anderem auch, lokale Umgebungen von Atomen (also, wie Atome sich gegenseitig umgeben) basierend auf dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen zu analysieren.^[13]

Hierbei greifen wir für die Bestimmung der sogenannten Koordinationspolyeder (Form der lokalen Umgebungen) auf frühe-

re Entwicklungen zurück, die es erlaubten, rein aus der Struktur, solche lokalen Umgebungen zu analysieren.^[14] Auch LobsterPy wurde bereits von anderen Arbeitsgruppen erfolgreich eingesetzt.^[12]

Es gibt neben atomate2 noch viele weitere Workflow-Tools für das computergestützte Materialdesign (pyiron^[15], Aiiida^[16], Quacc^[17], WFL^[18] und viele mehr). Bisher ist es leider noch nicht gelungen, hier einen einfachen Austausch von Workflow-Definitionen zu ermöglichen.

Materialsuche

Die automatisierten Berechnungen von Materialeigenschaften in Kombination mit den Datenbanken, die berechnete Materi-

Abbildung 3: Automatische Analyse von lokalen Umgebungen mit Hilfe von LobsterPy. Nachbaratome und damit Bindungen werden hier mittels quantenchemischen Bindungsstärken (den integrierten COHP-Werten) ausgewählt. Mit Hilfe der detektierten Nachbaratome, die typischerweise leicht verzerrte Polyeder bilden, findet dann ein Vergleich mit idealen Referenzpolyedern (ohne Verzerrung) statt. Danach kann der lokalen Umgebung ein idealer Polyeder zugeordnet werden, der den geringsten „Abstand“ zum tatsächlich detektierten Polyeder hat.

eigenschaften enthalten, ermöglichen die Suche nach Werkstoffen für bestimmte Anwendungen. Die Berechnungen können auch noch durch maschinengelernte Modelle beschleunigt werden.^[19]

Oft ist bekannt, welche Eigenschaften ein Material haben muss, um in einer bestimmten Anwendung eingesetzt werden zu können. Dieses Wissen kann genutzt werden, um nach neuen Materialien für Anwendungen zu suchen. Dies kann auf der Grundlage von Datenbanken mit Kristallstrukturen geschehen, oder es können mit Hilfe von Struktursuchalgorithmen völlig neue Materialien vorhergesagt werden.

”Die Materialinformatik ist sehr interdisziplinär, was sie besonders spannend und abwechslungsreich macht.“

Janine George

Die relevanten Eigenschaften werden dann Schritt für Schritt berechnet oder aus Datenbanken entnommen. In der Regel beginnt der Prozess mit der Eigenschaft, die am einfachsten zu berechnen ist. Die besten Materialien werden dann in den nächsten Schritt übernommen. Dann wird eine komplexere Eigenschaft berechnet. Am Ende wird eine Handvoll Materialien identifiziert, die für die Anwendung nützlich sein könnten. Diese können dann synthetisiert und charakterisiert werden. Ein solcher Hochdurchsatzfilter ist in *Abbildung 4* schematisch dargestellt.

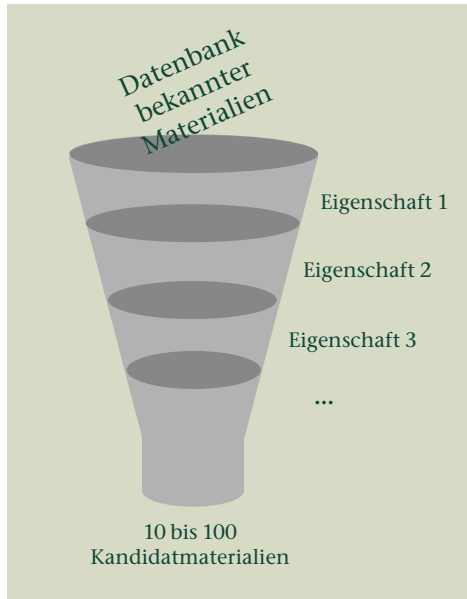
Ich war unter anderem schon an einer Suche nach neuen Solarzellenmaterialien basierend auf einem solchen Hochdurch-

satzansatz beteiligt. Wir konnten dann neue potentielle Solarzellenmaterialien auf Cu-Basis identifizieren.^[20] Suchkriterien waren hier: thermische Stabilität, Bandlücke, verschiedene Deskriptoren für die Elektronen- und Lochleitung und Punktdefekteigenschaften. All diese Eigenschaften sind entscheidend für ein Solarzellenmaterial. In einer darauf aufbauenden Studie konnten weitere vielversprechende Solarzellenmaterialien identifiziert werden und bei einem dieser $\text{Ba}_2\text{Cd}_2\text{P}_2$ erfolgte auch eine erfolgreiche Synthese mit anschließender experimenteller Charakterisierung. Hier stand vor allem die Stabilität der Materialien in Luft und Wasser im Vordergrund.^[21]

Auf diese Weise ist es auch möglich, nach Materialien für andere Anwendungen zu suchen. In der Literatur finden sich zahlreiche Beispiele für solche Hochdurchsatzstudien.^[22] Hochdurchsatzstudien und die daraus resultierenden Daten können auch zum besseren Verständnis von Materialien genutzt werden.^[23]

Altes chemisches Verständnis

Neben den Daten aus Hochdurchsatzstudien können die in Materialdatenbanken gespeicherten Daten auch zur Überprüfung des chemischen Verständnisses verwendet werden. Chemiker:innen haben in der Vergangenheit Heuristiken (Regeln) entwickelt, um chemische Probleme zu lösen. Ein typisches Beispiel hierfür ist das



Periodensystem. Hier konnte die Struktur des Periodensystems auf der Grundlage von Reaktivitäten und Massenverhältnissen der Elemente bestimmt werden, auch ohne dass die Quantenmechanik entwickelt war.

Solche Heuristiken werden häufig anhand von Daten über eine begrenzte Anzahl von Molekülen oder Materialien entwickelt. Sie sind aber dennoch von großem Nutzen.^[24] Mit den neu gesammelten Daten ist es nun möglich, diese zuvor aufgestellten Regeln zu testen.^[25] Außerdem wurden zahlreiche Python-Codes entwickelt, die chemische Konzepte (Oxidationszahlen, Koordinati-

onsumgebungen) implementieren und das Testen solcher Regeln erleichtern.^[25]

Auf diese Weise haben wir zum Beispiel die sogenannten Paulingschen Regeln^[26] an einem Datensatz von rund 5000 Oxiden (Verbindungen mit O^{2-} -Ion) getestet. Diese Regeln sollen die Stabilität von Kristallstrukturen vorhersagen. Sie verwenden lokale Umgebungen von Atomen und deren Formen (sogenannte Koordinationsumgebungen), um die Stabilität von Kristallen vorherzusagen.

Wir haben die fünf verschiedenen Regeln im Detail getestet und herausgefunden, dass fast alle ihre Schwächen haben.

Die erste Regel sagt die Koordinationsumgebung eines Kations (positiv geladenes Ion) mit Hilfe des Verhältnisses von Kationen- und Anionenradien voraus. Anionen sind negativ geladene Ionen. Hierbei wird angenommen, dass nur Anionen nächste Nachbarn des Kations sind und die Ionen werden als harte Kugeln betrachtet. Die abgeleiteten Koordinationsumgebungen kommen aus einfachen geometrischen Überlegungen.

Die erste Regel hat grundlegende Schwächen bei Kationen, die typischerweise eher ionische Bindungen aufweisen (z.B. Ca^{2+}). In diesen Fällen lassen sich die Koordinationsumgebungen nicht einfach aus den Radienverhältnissen vorhersagen. Selbst wenn die Oxidationszahlen berücksichtigt

Abbildung 4:

Typischer Hochdurchsatzfilter, der es durch schrittweise Berechnung von Materialeigenschaften, ermöglicht, Kandidatmaterialien für die experimentelle Synthese herauszusuchen.

werden, gibt es viele mögliche Umgebungen für Kationen wie Ca^{2+} in einem Oxid. Daher reicht ein einziges Radienverhältnis für ein Kation-Anion-Paar und eine daraus vorhergesagte Umgebung grundsätzlich nicht aus, um diese Vielfalt zu beschreiben. Die Oxidationszahlen geben die hypothetischen ionischen Ladungen der Atome an, wenn davon ausgegangen wird, dass die Verbindungen nur aus Ionen bestehen.

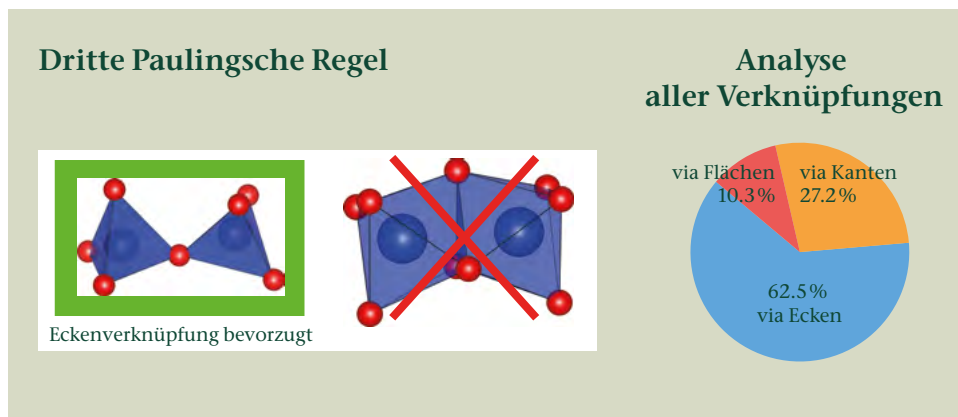
Die zweite Regel basiert auf dem lokalen Ladungsausgleich. Hier wird eine sogenannte Bindungsalenz definiert, die sich aus der Oxidationszahl dividiert durch die Anzahl der Nachbaratome errechnet. Damit Materialien stabil sind, sollten sich solche Bindungsalenzen möglichst ausgleichen. Auch hier konnten wir zeigen, dass diese Regel in dieser Form kaum eingehalten wird. Es gibt sehr viele Ausnahmen. Methoden, die auf dieser Regel aufbauen, werden aber auch heute noch erfolgreich in der Kristallographie eingesetzt, um Oxidationszahlen zu bestimmen und die Stabilität von Kristallstrukturen aufzuklären.^[27]

Die dritte und vierte Regel beziehen sich auf die Verbindungen von Koordinationsumgebungen. Sie wurde aus der sehr einfachen Überlegung abgeleitet, dass Verbindungen über Ecken und Kanten dazu führen, dass sich die positiv geladenen Ionen im Inneren des Polyeders weniger nahe kommen als bei Bindungen über Flächen und sie sich so weniger elektrostatisch abstoßen. Daher sollten solche Verbindungen bevor-

zugt werden, die überwiegend Ecken- und Kantenverknüpfungen aufweisen. Tatsächlich ist dies auch der Fall. Überraschenderweise gibt es aber auch viele Materialien, die trotzdem mindestens eine Flächenbindung aufweisen. Dazu gehören bekannte Kristallstrukturtypen wie Perowskite und Korund. Die Ergebnisse der Analyse der dritten Regel sind in *Abbildung 5* dargestellt.

Die letzte Regel bezieht sich auf verschiedene Koordinationsumgebungen einer Spezies (z.B. As^{5+} oder Ca^{2+}) innerhalb einer einzigen Kristallstruktur. Es wird angenommen, dass dies selten vorkommt. Auch hier haben wir zahlreiche Gegenbeispiele gefunden, in denen die gleiche Spezies mehrere Koordinationsumgebungen in einer Verbindung zeigt. Darunter ist z.B. As_2O_5 , in der As^{5+} sowohl tetraedrische als auch oktaedrische Umgebungen einnimmt.

Wir haben die Regeln zwei bis fünf an mehreren tausend Oxiden getestet, um herauszufinden, wie gut die Regeln insgesamt funktionieren. Wir fanden heraus, dass sie nur auf 13% der Materialien zutrafen. Daraus wird klar, dass diese Regeln verbessert werden müssen. Bisher ist es noch nicht gelungen, bessere Regeln aufzustellen. Es wurden aber bereits Versuche unternommen, Synthetisierbarkeit/Stabilität mit Methoden des maschinellen Lernens zu erlernen.^[28] Die Stabilität und Synthetisierbarkeit vorauszusagen stellt das Feld allerdings weiterhin vor große Herausforderungen.^[29]



Insgesamt haben wir also mit dieser Analyse das chemische Verständnis von Kristallen vorangebracht und alte chemische Erkenntnisse zum Teil widerlegt. Wir sehen die Überprüfung alter chemischer Regeln als eine der großen Möglichkeiten, die sich aus der Materialinformatik ergeben hat.^[25]

Neues chemisches Verständnis

Es ist auch möglich, mit Hilfe von Datenanalyse und maschinellem Lernen ein neues chemisches Verständnis zu gewinnen. Wir haben erste Schritte in diese Richtung unternommen.

In diesem Fall versuchen wir, einen Zusammenhang zwischen Materialeigenschaften und chemischer Bindung zu finden. Bin-

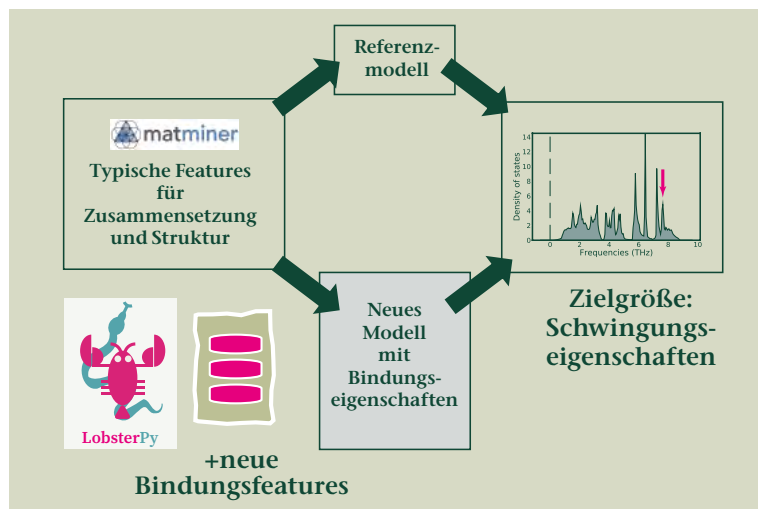
dungseigenschaften waren schon immer wichtig für das Verständnis von Materialien.^[30,31] Allerdings gibt es keinen quantenmechanischen Operator für die chemische Bindung, sodass verschiedene quantenchemische Deskriptoren existieren. Wir nutzen die bereits oben eingeführten Crystal Orbital Hamilton Populations (COHPs), die orbitalbasierte Deskriptoren sind. Daneben gibt es noch viele weitere Definitionen, unter anderem dichte-basierte.^[32]

Zu Verknüpfung von Bindungsdaten und Materialeigenschaften haben wir eine große Datenbank mit solchen quantenchemischen Bindungsdaten erstellt (>1500 Materialien).^[33] Dazu nutzten wir den oben vorgestellten automatisierten Workflow. LobsterPy wurde zusätzlich zur Analyse der Daten verwendet.

Abbildung 5: Schematische Darstellung der dritten Paulingschen Regel. Eckenverknüpfung der Polyeder ist gegenüber Flächenverknüpfung bevorzugt. Daneben ist die Analyse aller Verknüpfungen der Polyeder gezeigt. Die meisten Polyeder sind mittels Ecken verknüpft. Die Abbildung ist angepasst aus J. George, D. Waroquier, D. Di Stefano, G. Petretto, G. Rignanese, G. Hautier, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 7569–7575. Es ist unter einer CC BY 4.0 lizenziert (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abbildung 6:

In unserer Studie zur Bedeutung von quantenchemischen Bindungsstärken für Materialeigenschaften trainierten wir zwei einfache maschinen-gelernte Modelle.[33] Eines hatte typische Features, die die Zusammensetzung und Struktur beschreiben, das andere hatte zusätzlich quantenchemische Bindungsstärken als Features. Dabei sagten wir Schwingungseigenschaften voraus. Die quantenchemischen Bindungsstärken verbesserten die Vorhersage der Schwingungseigenschaften und es konnte eine klare Korrelation der Bindungsstärken mit der vorhergesagten Größe gezeigt werden.



Diese Datenbank ist frei zugänglich und kann für eigene Recherchen genutzt werden. Wir arbeiten daran, sie über eine Webseite bequemer durchsuchbar und zugänglich zu machen.

Wir validierten unsere Datenbank. Die berechneten atom- und orbitalprojizierten Zustandsdichten in unserem neuen Datensatz wurden im Detail mit Zustandsdichten aus anderen Methoden verglichen. Die mittels der Bindungsstärken identifizierten Koordinationsumgebungen wurden mit rein geometrisch bestimmten Koordinationsumgebungen abgeglichen. Zudem wurden die berechneten quantenchemischen Ladungen, die auch Teil der Datenbank sind,

idealisierten Oxidationszuständen gegenüber gestellt. Hierbei wurde nur getestet, ob Kationen und Anionen richtig identifiziert wurden. Für all diese Vergleiche fanden sich sehr gute Übereinstimmungen.

In einem nächsten Schritt verwendeten wir nun quantenchemische Bindungsdeskriptoren und trainierten zwei einfache maschinen-gelernte Modelle für die Beschreibung von Materialeigenschaften (Abbildung 6).

Hierbei nutzten wir Random-Forest-basierte Modelle. Es konnte gezeigt werden, dass die Bindungsdeskriptoren, die die Stärke der Bindung beschreiben sollen, extrem vorhergesagstark für Schwingungseigenschaften

sind. Wir fanden eine direkte Korrelation der integrierten Crystal Orbital Hamilton Populations (ICOHPs, eine Art Bindungsstärke) der stärksten Bindung mit der Breite der Schwingungszustandsdichte. Diese ICOHP-Werte waren das wichtigste Feature für unser neuen maschinen-gelernten Modells mit Bindungsstärken. Das stimmt sehr gut mit den Erwartungen von früheren kleineren Korrelationsstudien überein, die die ICOHPs bereits mit bindungsprojizierten Kraftkonstanten verglichen hatten.^[34] Im Unterschied zu dieser und weiteren früheren Studien konnten wir das nun aber für rund 1500 Materialien aufzeigen.

Hierzu muss noch einmal wiederholt werden, dass es sich bei diesen Bindungsdeskriptoren nicht um Kraftkonstanten handelt. Es ist demnach nicht direkt erwartbar gewesen, dass diese Korrelation für so viele Materialien standhält. Zudem zeigt diese Studie auf, dass die Methoden zur Berechnung der Bindungsdeskriptoren so zuverlässig geschah, dass eine solche Korrelation gezeigt werden konnte. Auch das war nicht unbedingt erwartbar. Ein Schritt in der Berechnung beinhaltet die Projektion von einem Basissatz, der ebene Wellen verwendet, auf einen, der atomzentrierte Orbitale verwendet. Auch hierfür könnten wir bestätigen, dass diese Projektion zuverlässig erfolgt.

Insgesamt lassen sich die Bindungsdeskriptoren schneller und mit weniger Rechenzeit-aufwand berechnen als die Kraftkonstanten, die sonst die Voraussetzung für die Berech-

nung der Schwingungseigenschaften sind. Die Nutzung dieser Bindungsdeskriptoren kann also tatsächlich die Vorhersage von Schwingungseigenschaften beschleunigen.

Das stimmt uns zuversichtlich, dass wir diese Bindungsdeskriptoren auch zukünftig für die beschleunigte Vorhersage anderer Materialeigenschaften einsetzen können.

Neben dieser großskaligen Studie kommt Bindungsanalyse in unserer Gruppe immer wieder zum Einsatz, um einzelne Materialien genauer zu untersuchen. Dabei untersuchte ich persönlich mittels Bindungsanalyse in der Vergangenheit bereits neue vorgeschlagene Ferroelektrika, Solarzellenmaterialien und Materialien für Spintronic-Anwendungen.^[20,23,35]

Ähnlich wie in einer Studie zu Magnetismus in Übergangsmetallen von Landrum und Dronskowski,^[36] konnten wir kürzlich antibindende Zustände in einer COHP nicht-magnetischen Berechnung der Elektronenstruktur von $\text{Yb}_{14}\text{Mn}_1\text{Sb}_{11}$ finden.^[13] Diese verschwinden, sobald die Elektronenstruktur ferromagnetisch berechnet wird (siehe S. 26 Abbildung 7). Diese antibindenden Zustände können also als Fingerabdruck für Ferromagnetismus gewertet werden. Ähnliche Fingerabdrücke helfen den Magnetismus in Legierungen wie CrCoNi zu verstehen.^[37]

”Die Materialinformatik ermöglicht es, die Entwicklung neuer Materialien ganz neu zu denken.“

Janine George

Abbildung 7:

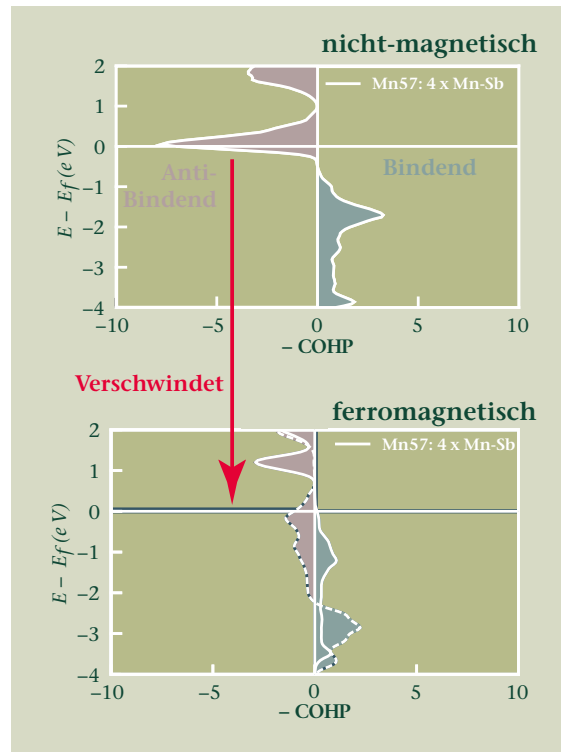
COHP Kurven für $\text{Yb}_{14}\text{Mn}_7\text{Sb}_{11}$, die einmal nicht-magnetisch und einmal ferromagnetisch berechnet wurden. Im nichtmagnetischen Fall befindet sich ein stark antibindender Peak (positive COHP) am Fermi-niveau (E_f). Dies ist ein Fingerabdruck für Ferromagnetismus. Dieser antibindende Peak verschwindet bei Anschalten des Ferromagnetismus. Dieses Bild ist angepasst aus J. George, G. Petretto, A. Naik, M. Esters, A. J. Jackson, R. Nelson, R. Dronskowski, G.-M. Rignanese, G. Hautier, *ChemPlusChem* 2022, 87, e202200123. Diese Bilder sind mit einer CC BY 4.0 lizenziert (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Eine neue Generation interatomarer Potentiale

Eine ebenfalls sehr vielversprechende Richtung im Feld der Materialinformatik ist es maschinen-gelernte interatomare Potentiale zu entwickeln. Interatomare Potentiale und sogenannte Kraftfelder werden schon sehr lange im Bereich der Chemie eingesetzt. Eines der berühmtesten interatomaren Potentiale ist das Lennard-Jones-Potential.

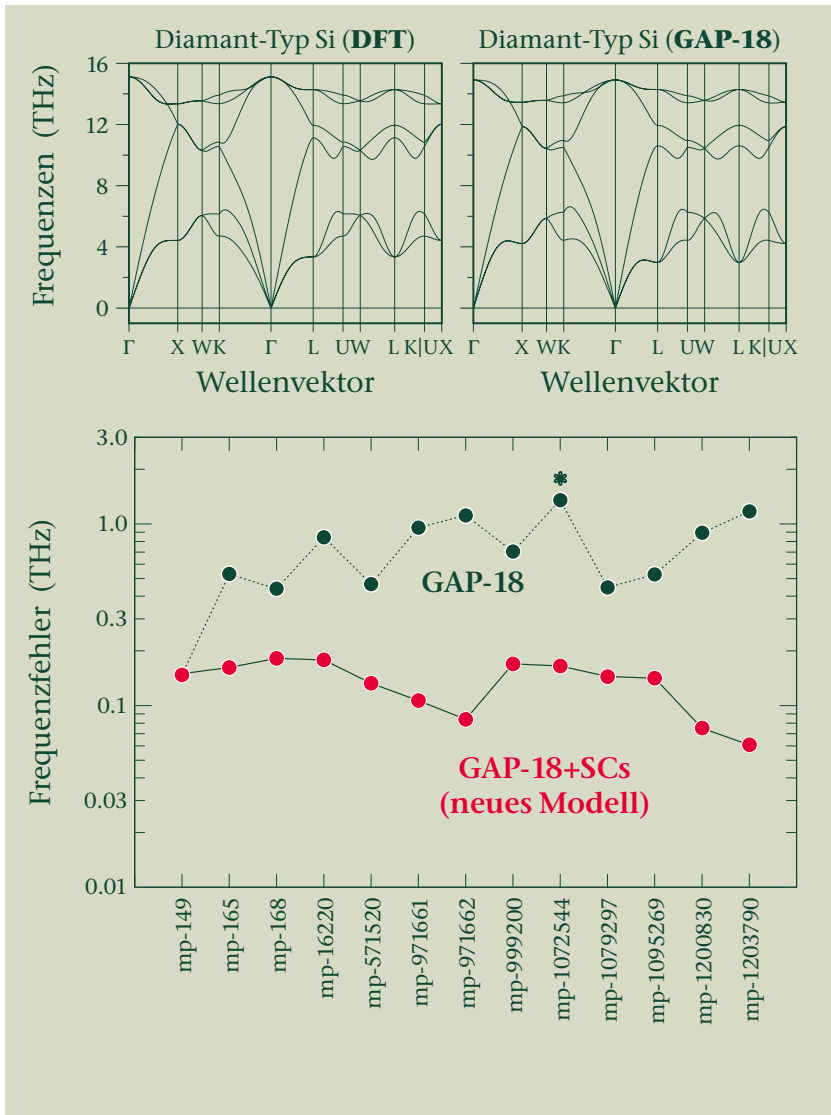
In den letzten Jahren wurden nun maschinen-gelernte Varianten hiervon entwickelt. Sie benötigen typischerweise eine Datenbank an Referenzenergien, und -kräften, die die Grundlage des maschinen-gelernten Modells bildet. Dabei nutzen sie unter anderem Beschreibungen der lokalen Umgebung eines Atoms, um diese Information zu lernen. Hier gibt es mittlerweile eine Vielzahl an Möglichkeiten, die Struktur mit Energien und Kräften zu verknüpfen.

Wir konnten unter anderem zeigen, dass sich mit solchen Potentialen Schwingungseigenschaften sehr zuverlässig für verschiedene Kristallstrukturen, die die gleiche Zusammensetzung teilen, berechnen lassen.^[19] Dies ist in *Abbildung 8* gezeigt. Der entscheidende Punkt war in diesem Fall, wie die Datenbank an Referenzstrukturen generiert wurde. Maschinen-gelernte Modelle haben typischerweise Probleme, in unbekannte Regionen zu extrapolieren. Für die Generierung solcher Daten kommen aktuell im-



mer mehr vollautomatische Workflows zum Einsatz.^[18]

Neben diesen eher spezialisierten Modellen wurden mittlerweile auch Modelle für das ganze Periodensystem entwickelt. Die meisten dieser Modelle nutzen aktuell die Daten des Materials Projects als Grundlage. Kürzlich waren wir an der Veröffentlichung eines neuen, sehr mächtigen Modells betei-

**Abbildung 8:**

Oben ist ein Vergleich einer Phononenbandstruktur aus Dichtefunktionaltheorie mit einem maschinengelernten interatomaren Potential (GAP-18) gezeigt.

Die Phononenbandstrukturen sind fast nicht zu unterscheiden. Unten sind die Fehler der maschinengelernten interatomaren Potentiale im Vergleich zur Dichtefunktionaltheorie gezeigt. GAP-18+SCs wurde im Rahmen unserer Arbeit entwickelt und zeigte auf, dass Schwingungseigenschaften hervorragend mit maschinengelernten Potentialen berechnet werden können. Die Bilder sind mit einer CC BY 4.0 lizenziert (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). Sie sind aus J. George, G. Hautier, A. P. Bartók, G. Csányi, V. L. Deringer, *J. Chem. Phys.* 2020, 153, 044104.

ligt – MACE-MP-0.^[6] Dieses wurde an Relaxierungstrajektorien von Kristalldaten des Materials Projects trainiert, d.h. es hat nur Strukturen, Energien und Kräfte von anorganischen Kristallen gesehen. Es konnte dann gezeigt werden, dass das Modell in der Lage ist, auch Kristalle zu beschreiben, die Moleküleinheiten haben, wie z.B. sogenannte metallorganische Gerüstverbindungen (= metallorganic frameworks).

„Die Materialinformatik ist auf dem Weg, die Materialentwicklung zu revolutionieren, und Antworten für drängende Fragen rund um Energiewende, Transport und Nachhaltigkeit zu finden.“

Janine George

Daneben konnten ganze Festkörperbatterien und deren Reaktionsverhalten simuliert werden. Es war also in der Lage, über die eigentlichen Trainingsdaten hinaus, eingesetzt zu werden.

Ich war an der Untersuchung der Vorhersagekraft für die Schwingungseigenschaften beteiligt. Hier kamen unter anderem unsere Workflows für die Berechnung von Schwingungseigenschaften zum Einsatz. Diese können nämlich nicht nur im Zusammenhang mit dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen eingesetzt werden, sondern haben ein deutlich breiteres Einsatzspektrum. Im Falle der Schwingungseigenschaften konnte hier gezeigt werden, dass MACE-MP-0 zwar deutlich besser als erwartet abschneidet, aber noch nicht als vollständiger Ersatz für dichtefunktionaltheoretische Rechnungen eingesetzt werden kann.

Verknüpft mit automatischer Datengenerierung und Methoden des aktiven Lernens scheinen diese Methoden eine sehr vielversprechende Zukunft für die Untersuchung und das Design von Materialeigenschaften zu haben.^[38]

Einen Nachteil haben solche Methoden allerdings aktuell. Da sie vor allem deep-learning-basiert sind, sind sie Black-Box-Verfahren und es bleibt oft unklar, warum sie wie gut funktionieren.^[39]

Open Science

Unsere Forschung ist getrieben vom Open-Science-Gedanken. Wir veröffentlichen unsere Software und Daten mit Lizenzen, die die Wiederverwendung erlauben. Wir integrieren Teile unserer Software in große Software-Projekte wie die des Materials Projects, um die langfristige Wartung dieser Beiträge zu garantieren. Solche Open-Source-Software erlaubt es, dass Wissenschaft insgesamt schneller auf vorhandenem Wissen aufbauen und schneller voranschreiten kann.

Dabei verfolgen wir höchste Code-Standards und schreiben automatisierte Test-Codes, um die Qualität des Codes langfristig zu erhalten.

Daneben schreiben wir für all unsere Software Dokumentationen und Tutorials, die die Nachnutzung dieser Software durch andere Gruppen erlauben (z.B. auf <https://github.com/JaGeo/LobsterPy>). Das gilt gleichermaßen für unsere Workflow-Tools (siehe <https://github.com/materialsproject/atomate2>).

Die Softwareprojekte, zu denen wir beitragen, sind getragen von weltweiten Kooperationen, die vor allem über Software-Plattformen wie Github oder gitlab koordiniert werden. Das ermöglicht auch eine weltweite Vernetzung. Hier habe ich unter anderem neue Kooperationen gefunden. Auch für meine Forschungsgruppe ist es eine gute Möglichkeit, sich schon früh weltweit zu vernetzen.

Wir sehen die Entwicklung solcher Software als Teil des Transfers von Wissenschaft in die Wirtschaft. Unter anderem sind diese oben beschriebenen Software-Werkzeuge bereits von großen Firmen für Projekte genutzt worden.

Daneben stellen wir auch offene Datenbanken bereit. Neben der Bindungsdatenbank veröffentlichte ich kürzlich auch eine Datenbank von geometrisch-bestimmten

Koordinationsumgebungen als Teil des Materials Projects. Diese Datenbank erlaubt es, rein geometrisch bestimmte Koordinationsumgebungen für mehr als 100.000 Materialien kostenlos abzufragen und zu analysieren.

Neben unseren individuellen wissenschaftlichen Publikationen haben auch diese Entwicklungen einen großen Einfluss auf das Feld der Materialinformatik.

”Der Erfolg der Materialinformatik ist unter anderem auf die Open-Science-Entwicklungen der vergangenen Jahre zurückzuführen. Dies bedeutet, dass Codes und Daten für alle Mitglieder der Community zugänglich sind.“

Janine George

>>

Referenzen

- [1] “The Nobel Prize in Chemistry 1998,” can be found under <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/kohn/lecture/>, 2024.
- [2] “Searching in a material world,” can be found under <https://berkeleysciencereview.com/article/2021/05/28/searching-in-a-material-world>, 2024.
- [3] A. S. Rosen, M. Gallant, J. George, J. Riebesell, H. Sahasrabudde, J.-X. Shen, M. Wen, M. L. Evans, G. Petretto, D. Waroquiers, G.-M. Rignanese, K. A. Persson, A. Jain, A. M. Ganose, *JOSS* 2024, 9, 5995.
- [4] S. P. Huber, E. Bosoni, M. Bercx, J. Bröder, A. Degomme, V. Dikan, K. Eimre, E. Flage-Larsen, A. Garcia, L. Genovese, D. Gresch, C. Johnston, G. Petretto, S. Poncé, G.-M. Rignanese, C. J. Sewell, B. Smit, V. Tseplyaev, M. Uhrin, D. Wortmann, A. V. Yakutovich, A. Zadoks, P. Zarabadi-Poor, B. Zhu, N. Marzari, G. Pizzi, *Npj Comput. Mater.* 2021, 7, 136.
- [5] E. Bosoni, L. Beal, M. Bercx, P. Blaha, S. Blügel, J. Bröder, M. Callsen, S. Cottenier, A. Degomme, V. Dikan, K. Eimre, E. Flage-Larsen, M. Fornari, A. Garcia, L. Genovese, M. Giantomassi, S. P. Huber, H. Janssen, G. Kastlunger, M. Krack, G. Kresse, T. D. Kühne, K. Lejaeghere, G. K. H. Madsen, M. Marsman, N. Marzari, G. Michalíček, H. Mirhosseini, T. M. A. Müller, G. Petretto, C. J. Pickard, S. Poncé, G.-M. Rignanese, O. Rubel, T. Ruh, M. Sluydts, D. E. P. Vanpoucke, S. Vijay, M. Wolloch, D. Wortmann, A. V. Yakutovich, J. Yu, A. Zadoks, B. Zhu, G. Pizzi, *Nat. Rev. Phys.* 2023, 6, 45–58.
- [6] I. Batatia, P. Benner, Y. Chiang, A. M. Elena, D. P. Kovács, J. Riebesell, X. R. Advincula, M. Asta, W. J. Baldwin, N. Bernstein, A. Bhowmik, S. M. Blau, V. Cărare, J. P. Darby, S. De, F. Della Pia, V. L. Deringer, R. Elijošius, Z. El-Machachi, E. Fako, A. C. Ferrari, A. Genreith-Schriever, J. George, R. E. A. Goodall, C. P. Grey, S. Han, W. Handley, H. H. Heenen, K. Hermansson, C. Holm, J. Jaafar, S. Hofmann, K. S. Jakob, H. Jung, V. Kapil, A. D. Kaplan, N. Karimitari, N. Kroupa, J. Kullgren, M. C. Kuner, D. Kuryla, G. Liepuoniute, J. T. Margraf, I.-B. Magdău, A. Michaelides, J. H. Moore, A. A. Naik, S. P. Niblett, S. W. Norwood, N. O’Neill, C. Ortner, K. A. Persson, K. Reuter, A. S. Rosen, L. L. Schaaf, C. Schran, E. Sivonxay, T. K. Stenczel, V. Svahn, C. Sutton, C. van der Oord, E. Varga-Umbrich, T. Vegge, M. Vondrák, Y. Wang, W. C. Witt, F. Zills, G. Csányi, 2023, DOI 10.48550/arXiv.2401.00096.
- [7] B. Deng, Y. Choi, P. Zhong, J. Riebesell, S. Anand, Z. Li, K. Jun, K. A. Persson, G. Ceder, *arXiv* 2024.
- [8] A. Togo, *J. Phys. Soc. Jpn.* 2023, 92, 012001.
- [9] R. Dronskowski, P. E. Blöchl, *J Phys Chem* 1993, 97, 8617–8624.
- [10] P. C. Müller, C. Ertural, J. Hempelmann, R. Dronskowski, *J Phys Chem C* 2021, 125, 7959–7970.
- [11] R. Nelson, C. Ertural, J. George, V. L. Deringer, G. Hautier, R. Dronskowski, *J Comput Chem* 2020, 41, 1931–1940.
- [12] A. A. Naik, K. Ueltzen, C. Ertural, A. J. Jackson, J. George, *JOSS* 2024, 9, 6286.
- [13] J. George, G. Petretto, A. Naik, M. Esters, A. J. Jackson, R. Nelson, R. Dronskowski, G.-M. Rignanese, G. Hautier, *ChemPlusChem* 2022, 87, e202200123.
- [14] D. Waroquiers, J. George, M. Horton, S. Schenk, K. A. Persson, G.-M. Rignanese, X. Gonze, G. Hautier, *Acta Cryst B* 2020, 76, 683–695.
- [15] J. Janssen, S. Surendralal, Y. Lysogorskiy, M. Todorova, T. Hickel, R. Drautz, J. Neugebauer, *Comput. Mater. Sci.* 2019, 163, 24–36.

- [16] S. P. Huber, S. Zoupanos, M. Uhrin, L. Talirz, L. Kahle, R. Häuselmann, D. Gresch, T. Müller, A. V. Yakutovich, C. W. Andersen, F. F. Ramirez, C. S. Adorf, F. Gargiulo, S. Kumbhar, E. Passaro, C. Johnston, A. Merkys, A. Cepellotti, N. Mounet, N. Marzari, B. Kozinsky, G. Pizzi, *Sci. Data* 2020, 7, 300.
- [17] A. Rosen, 2024, DOI 10.5281/zenodo.11406172.
- [18] E. Gelžinytė, S. Wengert, T. K. Stenczel, H. H. Heenen, K. Reuter, G. Csányi, N. Bernstein, *arXiv* 2023, DOI 10.48550/arXiv.2306.11421.
- [19] J. George, G. Hautier, A. P. Bartók, G. Csányi, V. L. Deringer, *J. Chem. Phys.* 2020, 153, 044104.
- [20] D. Dahliah, G. Brunin, J. George, V.-A. Ha, G.-M. Rignanese, G. Hautier, *Energy Environ. Sci.* 2021, 14, 5057–5073.
- [21] Z. Yuan, D. Dahliah, M. R. Hasan, G. Kassa, A. Pike, S. Quadir, R. Claes, C. Chandler, Y. Xiong, V. Kyveryga, P. Yox, G.-M. Rignanese, I. Dabo, A. Zakutayev, D. P. Fenning, O. G. Reid, S. Bauers, J. Liu, K. Kovnir, G. Hautier, *Joule* 2024, 8, 1412–1429.
- [22] G. Hautier, *Comput Mater Sci* 2019, 163, 108–116.
- [23] W. Chen, J. George, J. B. Varley, G.-M. Rignanese, G. Hautier, *Npj Comput Mater* 2019, 5, 72.
- [24] H. Park, A. Onwuli, K. Butler, A. Walsh, *Faraday Discuss.* 2024, 10.1039.D4FD00063C.
- [25] J. George, G. Hautier, *Trends Chem* 2021, 3, 86–95.
- [26] L. Pauling, *J Am Chem Soc* 1929, 51, 1010.
- [27] M. O’Keefe, N. E. Brese, *J. Am. Chem. Soc.* 1991, 113, 3226–3229.
- [28] J. Jang, G. H. Gu, J. Noh, J. Kim, Y. Jung, *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 18836–18843.
- [29] C. J. Bartel, *J. Mater. Sci.* 2022, 57, 10475–10498.
- [30] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Cornell University Press, 1960.
- [31] J. K. Burdett, J. K. Burdett, *Chemical Bonding in Solids*, Oxford University Press, 1995.
- [32] R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*, Oxford : Clarendon Press, 1990.
- [33] A. A. Naik, C. Ertural, N. Dhamrait, P. Benner, J. George, *Sci. Data* 2023, 10, 610.
- [34] V. L. Deringer, R. P. Stoffel, M. Wuttig, R. Dronskowski, *Chem. Sci.* 2015, 6, 5255–5262.
- [35] M. Markov, L. Alaerts, H. P. C. Miranda, G. Petretto, W. Chen, J. George, E. Bousquet, P. Ghosez, G.-M. Rignanese, G. Hautier, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2021, 118, e2026020118.
- [36] G. A. Landrum, R. Dronskowski, *Angew Chem Int Ed* 2000, 39, 1560–1585.
- [37] S. Ghosh, K. Ueltzen, J. George, J. Neugebauer, F. Körmann, *Preprint* 2024, DOI 10.21203/rs.3.rs-3978660/v1.
- [38] H. Yang, C. Hu, Y. Zhou, X. Liu, Y. Shi, J. Li, G. Li, Z. Chen, S. Chen, C. Zeni, M. Horton, R. Pinsler, A. Fowler, D. Zügner, T. Xie, J. Smith, L. Sun, Q. Wang, L. Kong, C. Liu, H. Hao, Z. Lu, *arXiv* 2024, DOI <http://arxiv.org/abs/2405.04967>.
- [39] F. Oviedo, J. L. Ferres, T. Buonassisi, K. T. Butler, *Acc. Mater. Res.* 2022, 3, 597–607.

MIT NEURONALEM MODELLIEREN ZUR PROZESSEXZELLEENZ



Foto © privat

Dr.-Ing. Marcus Grum ist Juniorprofessor für KI-basierte Anwendungssysteme der Wirtschaftsinformatik an der Universität Potsdam und Leiter des „Labors für Grüne KI-Gestaltung“. Er vertritt das Institut für Wirtschaftsinformatik und Digitale Gesellschaft e.V. als Vorstandsmitglied. Als studierter M.Sc.mult. in Informatik sowie Betriebswirtschaftslehre promovierte er 2021 an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Univ. Potsdam, wo er mit dem Dissertationspreis 2022 der Wissenschaftlichen Gesellschaft für Arbeits- und Betriebsorganisation und der Auszeichnung als Jungwissenschaftler 2023 der Stiftung Werner-von-Siemens-Ring geehrt wurde. Zu seinen Forschungsinteressen gehören die KI-Systemgestaltung, insb. Themen rund um künstliche neuronale Netzwerke, Prozessmodellierung, Simulationsgestaltung, Industrie4.0 und Wissenstransfer. Damit verfolgt er die Vision, dass zukünftige KI-Systeme nicht mehr nur Werkzeuge, sondern intelligente Kollegen:innen im symbiotischen Wissensaustausch für Wirtschaft und Gesellschaft sein sollen.

MARCUS GRUM

MIT NEURONALEM MODELLIEREN ZUR PROZESSEXZELLENZ

Einleitung

Die herkömmlichen Verfahren einer Geschäftsprozessmodellierung münden zu meist in aufwändigen und teuren Vorhaben. Typischerweise werden von Modellierungsexperten zahlreiche Interviews mit Mitarbeitenden durchgeführt und Prozessdokumentationen erstellt. Mit umfragebasierten Vorgehensweisen kann der manuelle Aufwand zwar reduziert werden, dennoch müssen auch hier widersprüchliche Aussagen verschiedener Mitarbeiter im Nachgang mit persönlichen Gesprächen geklärt werden. Das Modellierungsergebnis hängt in hohem Maße von dem jeweiligen Prozessmodellierenden ab, denn er lässt beim Erstellen der Modellierung viel Wissen und Erfahrung in die Modellerstellung einfließen. Mehr Objektivität kann durch den datengetriebenen Einsatz von Process-Mining-Techniken erreicht werden, wobei die hier erstellten Geschäftsprozessmodelle oft überflüssige Details aufzeigen und einer manuellen Nachbearbeitung bedürfen, um zur Prozessdokumentation herangezogen werden zu können. Im prozessdatengestützten Abgleich von Prozessstandards und tatsächlich ablaufenden Geschäftsprozessen werden im Zuge des Monitorings von Prozessen, Einsichten über Abweichungen von Plan- und Ist-Abläufen ermöglicht. Generalisierbare Erkenntnisse darüber, warum ein Prozess abläuft, wie er beobachtet wird, werden von datengestützten

Process-Mining-Techniken jedoch nicht generiert.

Ist ein Prozessmodell einmal erstellt, kann es in die Simulationsumwelt überführt und zur Simulation verschiedener Prozessszenarien herangezogen werden. Beispielsweise können so die im Geschäftsprozess hergestellten Produktionsgüter oder auftretende Qualitätsdefekte errechnet werden. Hierbei hängt die Simulationsgenauigkeit des simulierten Prozesses jedoch von den Modellierungsdetails ab, die ein Simulationsmodellierender in die Simulationsmodelle eingearbeitet hat. Schnell wird auch die Erstellung detaillierter Simulationsmodelle

Resume:

Die vorliegende Arbeit adressiert das Geschäftsproblem von ineffizienten Prozessen, unpräzisen Prozessanalysen und -simulationen sowie intransparenten künstlichen neuronalen Netzwerken, indem ein Modellierungskonzept zum neuronalen Modellieren konstruiert wird. Dieses neuartige Konzept des neuronalen Modellierens (CoNM) fungiert als flexibler und effizienter Ansatz zum Modellieren, Simulieren und Optimieren von Prozessen mithilfe von neuronalen Netzwerken. Es wird mittels einer Modellierungssprache, dessen mathematische Formalisierung und technische Substantiierung sowie der Sammlung von neuartigen Subartefakten beschrieben. Mit deren Implementierung und Verwendung der CoNM-Werkzeuge können somit neue Arten einer Neuronalen-Prozess-Modellierung (NPM), Neuronalen-Prozess-Simulation (NPS) sowie Neuronalen-Prozess-Optimierung (NPO) realisiert werden. Die Wirksamkeit der erstellten Artefakte wurde anhand von sechs Experimenten demonstriert sowie in einem Simulator in realen Produktionsprozessen gezeigt.

aufwändig und eine Simulation wird zu einem zeit- und kostenintensiven Vorhaben. Zudem ist die erzielbare Simulationsgenauigkeit begrenzt, denn das Modellierungsergebnis ist nach wie vor in hohem Maße von der Erfahrung des Simulationsmodellierenden abhängig. Auch er lässt beim Erstellen der Modellierung viel Wissen und Erfahrung in die Modellerstellung einfließen. Eine sich selbst organisierende Simulationstechnik, welche eine beliebige Simulationsgenauigkeit erzielen kann, existierte bis dato nicht.

Eine Prozessverbesserung kann gut durch den Vergleich von zwei simulierten Prozessen festgestellt werden. Hierbei wird ein Ist-Prozess als Referenz mit mindestens einem veränderten Soll-Prozess verglichen. Sofern bei letzterem eine Verbesserung bzgl. zu definierender Aspekte festgestellt wird, kann der Ist-Prozess durch den besseren Soll-Prozess ersetzt werden. Um einen Soll-Prozess zu erzeugen, werden in der Regel bewährte, oft branchenspezifische Prozesspraktiken und erfahrene Prozessexperten herangezogen. Insofern hängt das Modellierungsergebnis von Soll-Prozessen wieder in hohem Maße von der Erfahrung und der Kreativität des Prozessmodellierenden ab, denn er lässt beim Erstellen der Modellierung viel Wissen und Erfahrung in die Modellerstellung einfließen.

”Mit dem CoNM treten menschliche und KI-basierte Modellierer an einen Modellierungstisch.“

Marcus Grum

Für die zuvor beschriebenen Einschränkungen zeigen herkömmliche Prozessmodellierungs-, -simulations- und -verbesserungsansätze, insbesondere künstliche neuronale Netzwerke (KNN), ein besonderes Potenzial auf. KNN folgen dem biologischen Vorbild von vernetzten Neuronen im Nervensystem von Lebewesen und sind daher im besonderen Maße fähig Sinneseindrücke bzw. Informationen schnell und effizient in verteilten Netzwerkstrukturen parallel zu verarbeiten. Außerdem können sie robust mit Abweichungen (wie z.B. widersprüchlichen Aussagen) von erlernten Mustern umgehen sowie sich durch Lernprozesse eigenständig an veränderte Umweltbedingungen anpassen und ihre Leistung eigenständig auf Basis ihrer Sinneseindrücke verbessern. Gelänge es, diese Fähigkeiten von KNN in den Bereich des Managements von Geschäftsprozessen zu übertragen, so können KNN-Mechanismen zur Modellierung, Simulation und Verbesserung von Prozessen nutzbar gemacht werden. KNN können, datengetrieben, neuronale Strukturen eigenständig herausbilden, vorhandene Strukturen verändern und sind in der Lage, eine beliebige Approximationsgenauigkeit zu erzielen. Hierbei können die von den KNN gebildeten Strukturen und dessen Wirkweise dann interpretiert werden, sodass Erkenntnisse über die Realwelt abgeleitet werden können. Dies ist insbesondere zur Steuerung von Maschinen attraktiv, da z.B. Vorhersagen über den Ablauf in Produktionsstraßen, mit einer beliebigen Genauigkeit, erstellt und Produkte mittels KNN-basierter Instruktionen her-

gestellt werden können. Weiter besitzt KNN das Potenzial, Veränderungen in bestehenden Prozessmodelle einzuführen, die auf dem von KNN erzeugten Wissen gründen.

Eine Analyse von Gestaltungsanforderungen an Neuronales Modellieren

Das Ziel ist die Erschließung des Potenzials von KNN für die Prozessdomäne. Dazu wird ein methodischer Ansatz entwickelt, das sogenannte Konzept für neuronales Modellieren (engl.: Concept of Neuronal Modeling, kurz: CoNM). Es ermöglicht die Modellierung abgegrenzter Systeme mit Hilfe von KNN. Diese Systeme passen sich schnell, effizient und autonom an ihre Umwelt sowie Umweltveränderungen an. Einerseits betrifft dies natürliche Systeme (z.B. menschliche Wissensträger), materielle und nicht-materielle Objekte (z.B. Ressourcen oder Dienstleistungen) und deren Zusammenspiel in Prozessnetzwerken. Andererseits betrifft es auch Drittsysteme, wie z.B. physische und ortsgebundene Industrieanlagen sowie externe virtuelle und KI-basierte Systeme, welche mittels eines Ansatzes integriert betrachtet und einheitlich gehandhabt werden können. Insbesondere für den zielgerichteten Aufbau von Modellen dieser Systeme auf neuronaler Ebene, für deren Management und für ihre Evaluierung sind für ein CoNM problemspezifische und adäquate Verfahren und Methoden bereitzustellen. Dadurch wird eine neuronale Prozessmodellierung erst möglich. Da

die Methodenvielfalt für das Prozess- und Wissensmanagement sowie die Simulations- und KNN-Trainingsansätze groß ist und eine adäquate Auseinandersetzung mit der neuronalen Prozessmodellierung bis dato noch nicht realisiert worden ist, verbindet der hier gezeigte Forschungsbeitrag diverse Domänen miteinander. Dazu gehören die Simulations-, Prozess-, Wissensmanagement- sowie KNN-bezogenen Domänen. Darüber hinaus schafft der Forschungsbeitrag eine integrierte, neuartige KNN-Prozessdomäne. Ziel der Gestaltung des Konzepts zur neuronalen Modellierung von Prozessen ist es, die Anpassbarkeit, Lernfähigkeit und robuste Informationsverarbeitung von KNN in der Prozessmodellierung, Prozesssimulation und Prozessverbesserung anwendbar zu machen.

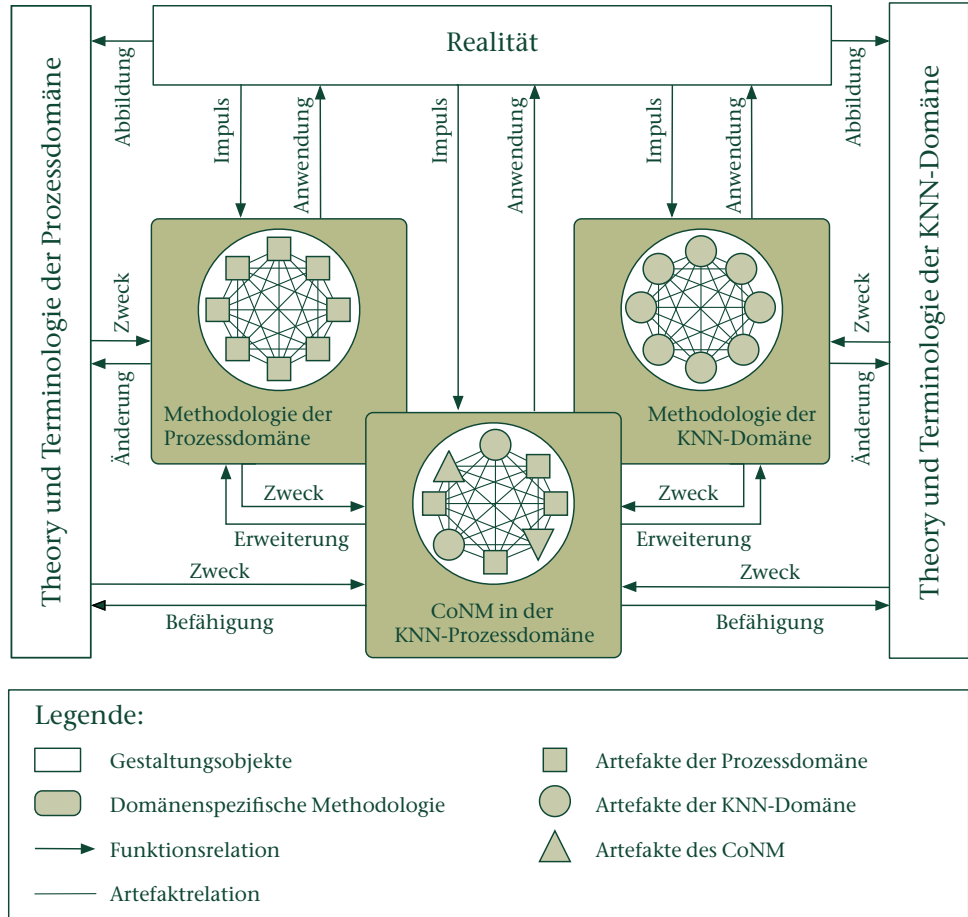
Die Entwurfsvision der KNN-Prozessdomäne

Als Begriffsverständnis wird zunächst die KNN-Prozessdomäne aufgespannt (s. S. 36 *Abb. 1 mittig dargestellter Methodologiebereich*), dessen neuartige Methodologie für eine Prozessmodellierung, Prozesssimulation und Prozessverbesserung (*Herkunft: Prozessdomäne, s. Abb. 1 links dargestellter Methodologiebereich*) mit Techniken einer neuronalen Informationsverarbeitung mittels KNN

”Die NMDL dient als verständliches Kommunikationsmedium für menschliche und KI-basierte Modellierer.“

Marcus Grum

Abbildung 1:
Elaboration der KNN-Prozess-
domäne als Differenzmenge
der Prozess- und KNN-
Domäne



untermauert wird (Herkunft: KNN-Domäne, s. *Abb. 1* rechts dargestellter Methodologiebereich). Es werden hierfür nachfolgende Leitdefinitionen elaboriert.

Unter dem Begriff „Neuronale Prozessmodellierung“ (engl. Neuronal Process Modeling, kurz: NPM) wird die Modellierung von Prozessen auf neuronaler Ebene mit einer gemeinsamen Prozessmodellierungssprache, einer Neuinterpretation der gemeinsamen Prozessmodellierung auf Basis dieses Verständnisses sowie einer neuartigen Modellierungsansätzen als Differenzmenge herkömmlicher Prozessmodellierungs- und KNN-Modellierungsansätze verstanden (Grum und Gronau, 2018).

Die „Neuronale Prozesssimulation“ (engl. Neuronal Process Simulation, kurz: NPS) bezieht sich, erstens, auf die Prozesssimulation gängiger Prozessmodelle unter Berücksichtigung von KNN als Wissensmodelle von Prozessteilnehmern (Personen und Maschinen), zweitens, die Simulation gängiger Prozessmodelle interpretiert als tiefes neuronales Netz, drittens, die Simulation neuronaler Prozesse interpretiert als organisatorische Prozesse, und, viertens, neuartigen Simulationsansätzen als Differenzmenge herkömmlicher Prozesssimulations- und KNN-Simulationsansätze (Grum und Gronau, 2018).

Unter der „Neuronalen Prozessverbesserung“ (engl. Neuronal Process Optimization, kurz: NPO) versteht man, erstens, die

gängigen Prozessoptimierungsverfahren, die auf neuronaler Ebene realisiert werden (Beispiele hierfür finden sich beim Double-Loop-Learning auf neuronaler Ebene), zweitens, die neuartigen Formen von Prozessoptimierungen, die aufgrund der Lernfähigkeit von KNN im Bereich gängiger Prozessmodelle realisiert werden können, und, drittens, die neuartigen Verbesserungs- und Optimierungsansätze als Differenzmenge herkömmlicher Prozessverbesserungs- und KNN-Optimierungsansätze bzw. -Lernverfahren (Grum und Gronau, 2018).

Im Rahmen dieser Definitionen bezieht sich eine neuronale Aktivität somit auf die rechnerische Aktivierung eines einzelnen Neurons. Diesem wird eine Prozessbedeutung und realitätsbildende sowie realitätsabbildende Rolle zugeschrieben. Eine neuronale Aufgabe bezieht sich im Sinne Heraclit's relational konstituierenden Seins (Kirk et al., 1983; Rescher, 2000; Lachs et al. 2008) und Whitehead's Prozessverständnis (Whitehead, 1920, 1925, 1929) somit auf die rechnerische Aktivierung einer Menge von mindestens einem Neuron, also der Sammlung kausal wirkender tatsächlicher Entitäten (1. Phase der Prehension), der Einführung einer Neuheit aufgrund der Modifikation und Integration der Aktivierung vorgeordneter Neuronen (2. Phase der Concrescence) sowie der Konstitution tatsächlicher Entitäten mit Etablie-

„Mit der Extraktion von KI-Wissen erhalten wir einen direkten Einblick in die subjektive Realität der KI.“

Marcus Grum

zung eines gemeinsamen Musters (3. Phase der Satisfaction) (Grum, 2020; Grum, 2022). Dieser neuronalen Aufgabe wird eine von Menschen lesbare und interpretierbare Bezeichnung zugeordnet, wie es in der Prozessmodellierung üblich ist. Somit sind neuronale Aufgaben und neuronale Aktivitäten in allen NPM, NPS und NPO beteiligt.

Vorgehen

Zur Verbindung abgegrenzter Domänen und der wohldefinierten Spezifikation des Konzepts für neuronales Modellieren ist ein Modellierungskonzept als Referenzrahmen erarbeitet worden, welches relevante Modellierungselemente und deren Beziehungsgeflecht im Kontext einer KNN-basierten Prozessmodellierung bereitstellt. Um ein Gesamtverständnis der neuronalen Prozess-

„Mit dem CoNM ist eine Konstruktion von KI wie beim Spielen mit Lego-Bausteinen möglich.“

Marcus Grum

systeme zu schaffen, sind zunächst Prozess- und Geschäftsprozesselemente sowie KNN-Mechanismen in einer Taxonomie integriert und in einem generischen Metamodell für Modellierungssprachen zusammengestellt worden. Zeitgenössische Forschungsartefakte und Techniken relevanter Domänen des Simulation-, Prozess-, Wissensmanagement- und KNN-bezogenen

Bereichs sind anschließend sowohl mittels einer systematischen Literaturrecherche als auch eines hierfür entwickelten Auswahl- und Evaluationsverfahrens und zugehörigem Werkzeug „SESS“ (1) analysiert worden (vgl. Abb. 2, S. 40; s. Anwendung des Artefakts mit der Nr. 1). Auf Basis dieser Analysen ist eine geeignete Grundlage zur Konstruktion des CoNM identifiziert worden. Der entwickelte Referenzrahmen adressiert die identifizierte Forschungslücke durch weitere acht neuartige Artefakte. Jedes dieser acht Artefakte ist durch einen individuellen Forschungszyklus entstanden und wird im Folgenden charakterisiert, wobei die in Abb. 2 rechts gezeigte Artefaktnummerierung von (1) bis (9) zur verständlichen Einordnung hierbei weiterhin aufgegriffen wird.

Artefakte des Neuronalen Modellierens in der Übersicht

Mittels der entwickelten neuronalen Modellierungs- und Beschreibungssprache „NMDL“ (2) werden u.a. Prozess- und Simulationsmodelle veranschaulicht. Die neuen Konzepte zur systematischen und algorithmischen Extraktion von Wissensobjekten aus KNN namens „SEKO“ (3) visualisieren Wissen der prozessmodelluntermauernden KNN und vervollständigen zugehörige Prozessmodelle automatisch mittels der NMDL.

Somit fungieren die NMDL-Modelle als Kommunikationsplattform, welche es ermöglicht, menschlichen und KI-basierten Modellierern Modelle interaktiv zu gestalten, sich hierbei auszutauschen und neue Erkenntnisse zu generieren. Menschlichen Modellierern werden hierbei von der KI gebildete, neuartige Strukturen und Erkenntnisse präsentiert und in den Modellen visualisiert. KI-Modellierern werden hierbei vom Menschen Strukturen vorgegeben und somit die Entwicklung der KI-Modellierer und zugehöriger KNN gesteuert. Da hierfür sämtliche Modellierungsperspektiven und -elemente algorithmisch ausgelesen, interpretiert und mit KI-Mechanismen untermauert werden, können NMDL-Modelle aktiviert, in Trainings verwendet und in Simulationen eingesetzt werden. Neue Lernprinzipien (4) ermöglichen außerdem die auf KNN-basierte Simulation und neuronale Optimierungen sowie das steuernde Eingreifen des menschlichen Modellierers in die KI-Entwicklung. Das geschaffene Vorgehensmodell (5) verdeutlicht ferner die Arbeitsschritte, die bei der Anwendung des CoNM im realen Umfeld zu realisieren sind. Unternehmen, Forschern und Alltagsanwendern wird so eine Schritt-für-Schritt-Anleitung an die Hand gegeben, welche den Einsatz des neuronalen Modellierens erleichtert. Das neu konzipierte symbiotische Wissensmanagement namens „NKMM“ (6) systematisiert das Manage-

ment von menschlichen und KNN-basierten Wissensträgern und Modellierern. Der Einsatz einer neuen, neuronalen Unternehmensarchitektur „NEA“ (7) dient als Orientierung für die Implementierung eines Software-Prototyps (8) und dessen Einbettung in die Realität. Es werden somit beispielsweise die notwendigen Recheninfrastrukturen und Daten-Pipelines ausgestaltet und an das CoNM angeschlossen, sodass das CoNM samt seiner Teilartefakte in einem Unternehmen zum Einsatz kommen kann. Sechs Experimente (9) belegen schließlich die Funktionsfähigkeit einzelner Artefakte und demonstrieren deren gemeinsame Anwendung. Die acht Artefakte sind auf eine Weise erarbeitet worden, dass sie in der Demonstrationsphase in einem auf „Mixed-Method-Design“-basierendem Vorgehen kombiniert werden können.

Die kombinierte Anwendung der erstellten Artefakte ist in *Abbildung 2* visualisiert. Sie zeigt die aufeinander aufbauenden Demonstrationen, Experimente und Evaluationen, sowie Erkenntnisse, welche mit jeder weiteren Ebene einer pyramidalen Anordnung gewonnen werden. Somit interpretiert sie die Artefakhierarchie des CoNM.

„Es kann die Transparenz von künstlichen Neuronalen Netzwerken mit dem CoNM erhöht werden.“

Marcus Grum

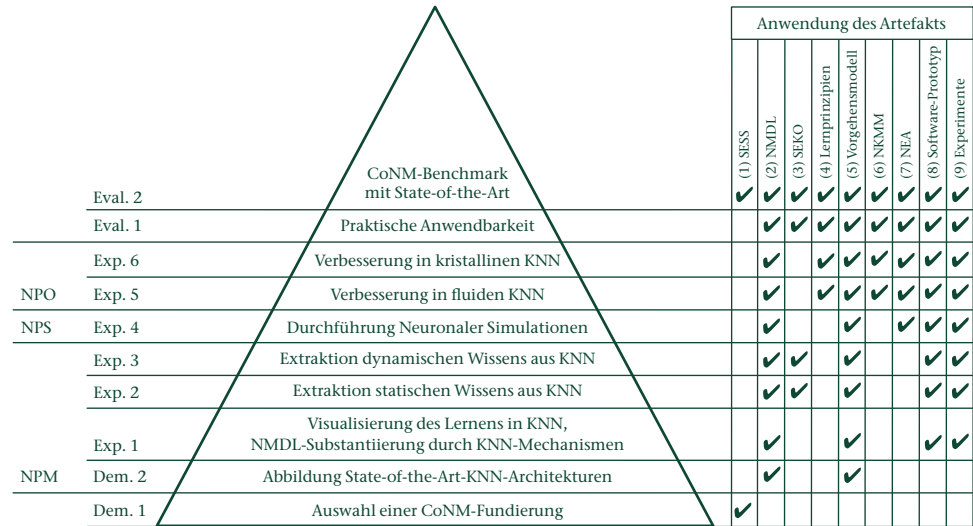


Abbildung 2:
Experimentgetriebener
Erkenntnisgewinn
der Dissertation.

Auf der linken Seite der Abbildung wird die Zuordnung von Demonstrationen, Experimenten und Evaluationen zu den Bereichen des NPM, NPS und NPO (oder gesamt als NPx) ersichtlich (vgl. mit der zuvor vorgestellten Entwurfsvision der KNN-Prozessdomäne). Stufenweise werden die Bereiche des CoNM mit systematisch komplexer werdenden Anwendungen adressiert. Während die durch die Forschungstätigkeit erzielte Erkenntnis sich in der Abbildung zentral als Ebene wiederfindet, wird die Anwendung der erstellten Artefakte hierbei auf der rechten Seite der Abbildung erkenntlich. Obwohl Artefakte stets im Verbund angewendet worden sind, wird die gezielte und

systematische Anwendung und Untersuchung hinsichtlich einzelner Anwendungsperspektiven deutlich.

Demonstrationen

Die erste Demonstration (vgl. Abb. 2) verdeutlicht, wie die konzipierte Auswahlmethode anzuwenden ist. Aus 35 Techniken ist eine geeignete Grundlage zur Konstruktion des CoNMs identifiziert worden. In einer nachgelagerten, erneuten Anwendung ist die gleiche Methode zur Evaluation des finalen CoNM in einem Benchmark verwendet worden. Es wurde festgestellt, dass

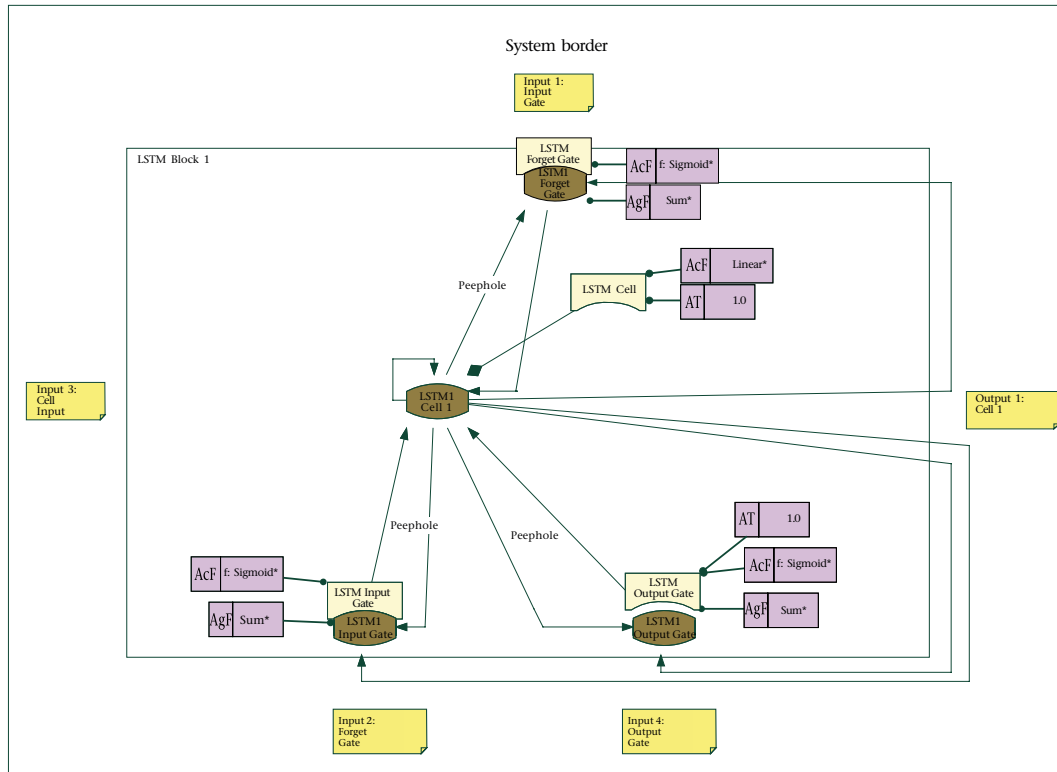
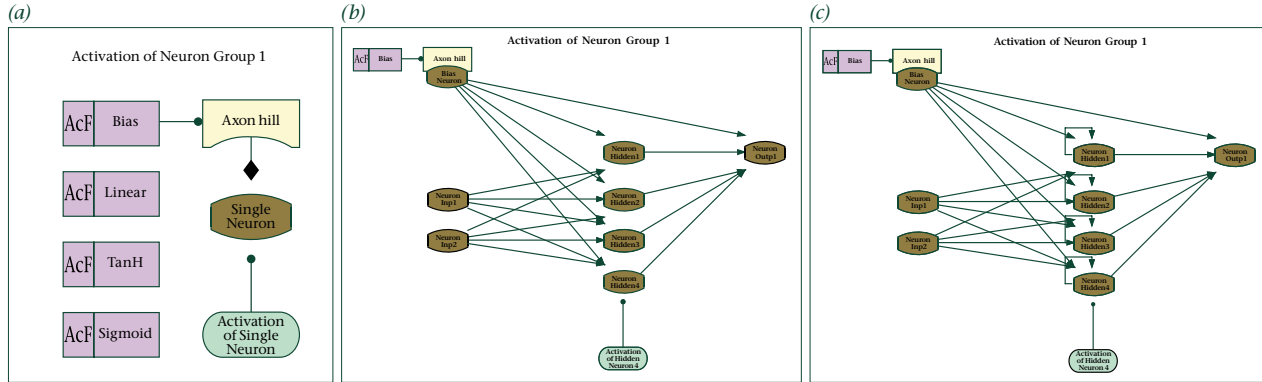


Abbildung 3:
 Beispielhafte Darstellung zeitgenössische KNN-Architekturen mit der NMDL.
 (a) Einzelnes Neuron.
 (b) Vorwärtsgerichtetes KNN.
 (c) Rückwärtsgerichtetes KNN.
 (d) Langzeit-Kurz-Zeit-Speicher-Block (Engl.: Long-Short-Term-Memory Block, kurz: LSTM)

(d)

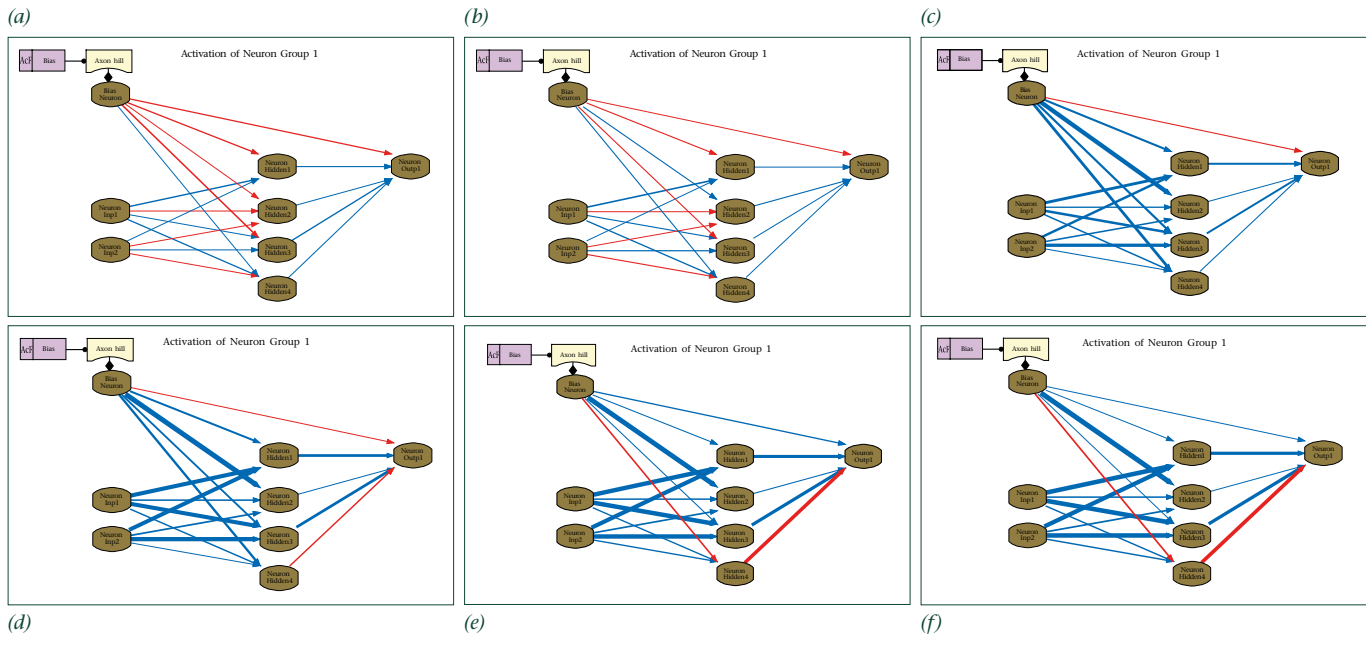


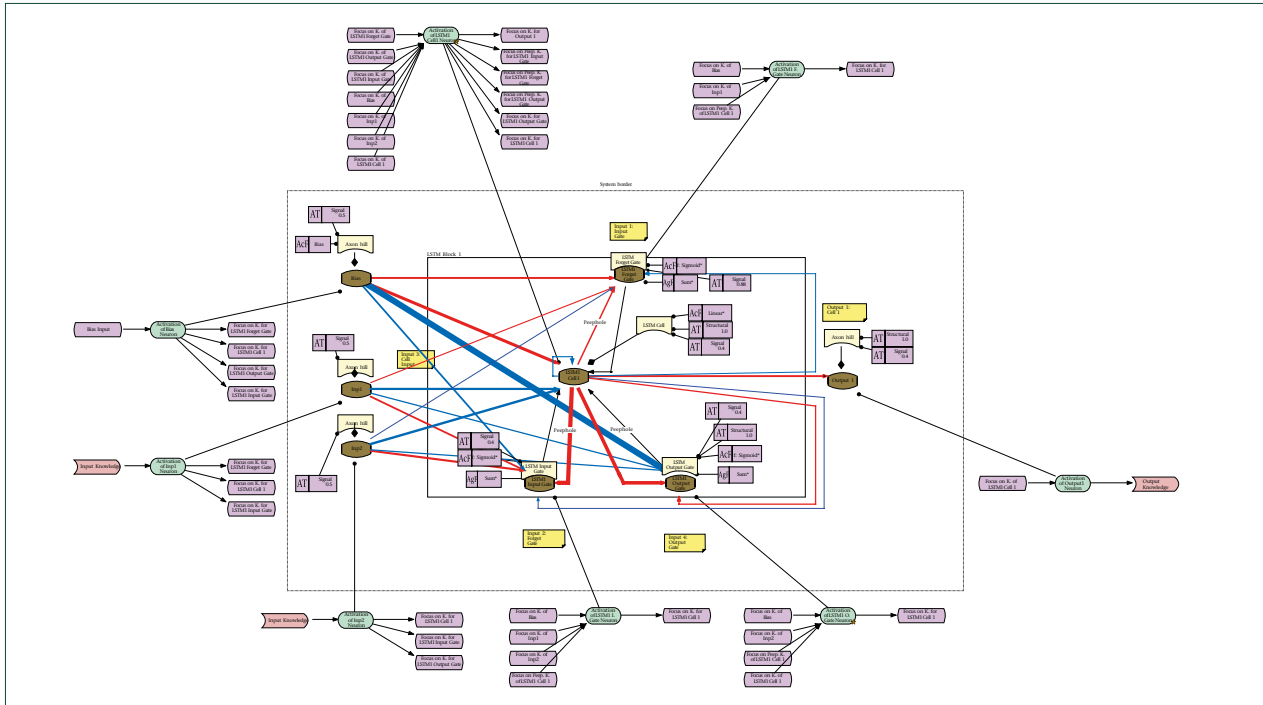
Abbildung 4:
 Entwicklung eines
 vorwärtsgerichteten KNN
 im Trainingsverlauf.
 (a) Lerniteration 1
 (b) Lerniteration 10
 (c) Lerniteration 100
 (d) Lerniteration 300
 (e) Lerniteration 500
 (f) Lerniteration 1.000

das CoNM den aktuellen Stand der Technik vorangebracht und die Varianz in seiner Bewertung verringert hat. Die zweite Demonstration klärt anhand theoretischer Modelle, wie zeitgenössische KNN-Architekturen mittels der NMDL aufgebaut werden können. *Abbildung 3* (s. S. 41) zeigt dies exemplarisch für ausgewählte neuronale Strukturen.

Experimente

Mit Hilfe von sechs Experimenten ist die Funktionsfähigkeit von KNN-Architekturen, die mit der NMDL modelliert wurden, wie folgt nachgewiesen worden. Das erste

Experiment befasst sich mit der Spezifikation von KNN sowie der NMDL-Substantiierung durch KNN-Mechanismen. Das Trainieren und Testen von KNN ist mittels der graphischen Modellierung erfolgreich spezifiziert und durchgeführt worden. Dies hat zu einer Erhöhung der Transparenz im Umgang mit KNN geführt, da deren zahlenbasierte Strukturen und der Umgang mit KNN-Strukturen mittels graphischer Modellierungsbausteine visualisiert und gesteuert werden können. So kann zum Beispiel ein Einblick in die Entwicklung eines KNN gegeben werden, wie sie in *Abbildung 4* dargestellt ist. Hier werden Einträge exzitatorischer Neurotransmitter, wel-



che Signale der Nervenübertragung erregen, in Rot und inhibitorische Neurotransmitter, welche eine hemmende Wirkung der Signalübertragung haben, in einem Blau dargestellt.

So wird beispielsweise die Rollenfindung des Bias-Neurons im neuronalen Gefüge ersichtlich, welche sich ab der fünfhundertsten Lerniteration etabliert hat. Erst ab der fünfhundertsten Lerniteration (s. links in Abb. 4 (e) bis (f) auf die einzige rote eingehende und ausgehende Verbindung des untersten Neurons der mittleren bzw. versteckten Schicht) kann hier ein stetiger exzitatorischer Einfluss festgestellt werden. Zuvor, also in den

Lerniterationen 1 bis 300, wechseln die Einflüsse der neuronalen Verbindungen im gesamten KNN häufig, was anhand der wechselnden Farben und Pfeilstärken in Abb. 4 (a) bis (d) deutlich wird.

In zwei weiteren Experimenten wird gezeigt, wie eine neuronale Prozessmodellierung durchgeführt werden kann, sodass Wissen auf neuronaler Ebene durch CoNM-Mechanismen automatisch identifiziert und in bestehenden NMDL-Modellen angereichert wird. Hierbei fokussiert sich das zweite Experiment auf die Extraktion von Wissen aus statischen KNN-Strukturen – es identifiziert statische Wissensobjekte.

Abbildung 5: Extraktion statischen Wissens aus KNN gezeigt am Beispiel einer LSTM-Architektur.

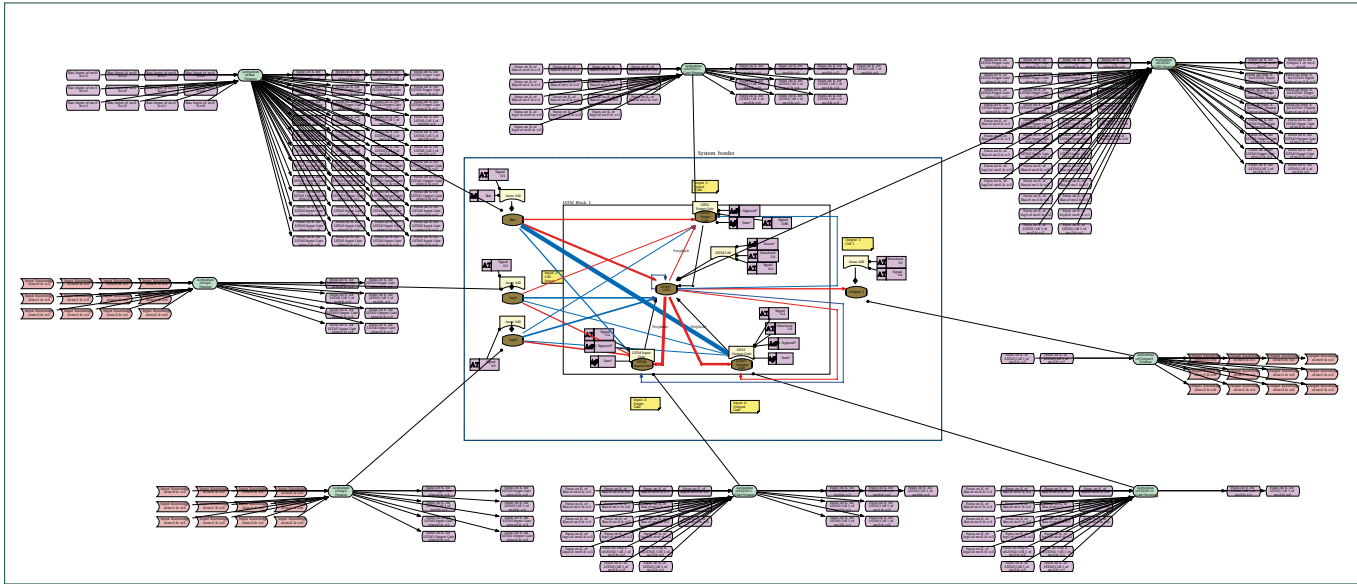


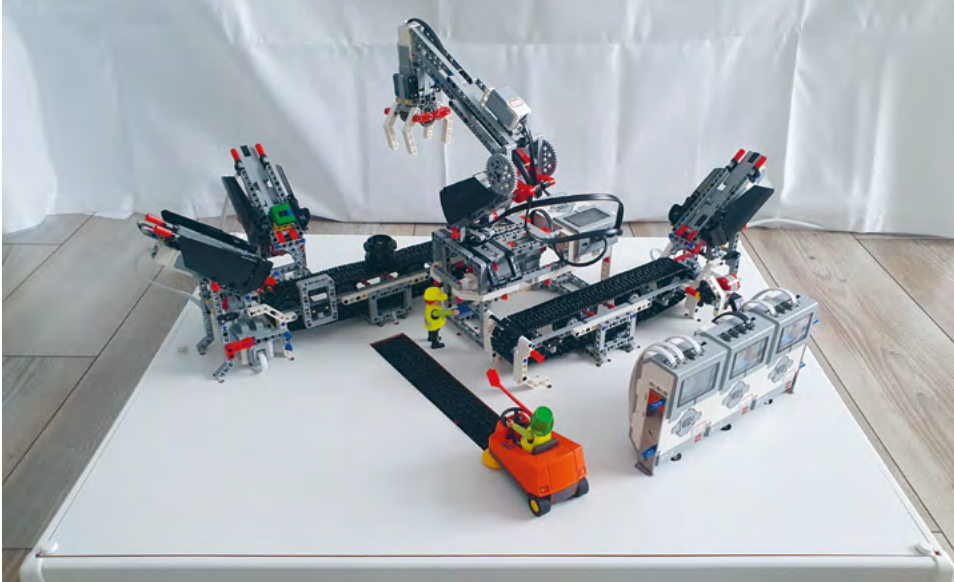
Abbildung 6:
Extraktion dynamischen
Wissens aus KNN gezeigt
am Beispiel einer
LSTM-Architektur.

Abbildung 5 (s. S. 43) zeigt die Entstehung dieses KI-Wissens am Beispiel eines LSTM-Blocks. Hier werden die lila dargestellten statischen Wissensobjekte vom CoNM extrahiert und algorithmisch im Modell platziert. Diese konnten sodann zur Erklärung des neuronalen Verhaltens herangezogen werden und die Funktionsfähigkeit der erarbeiteten Neuronenstruktur validieren.

Im dritten Experiment werden dynamische Effekte zur Wissensextraktion auf Basis des Verhaltens von KNN im Prozesskontext betrachtet. Dies hat zur Identifizierung dynamischer Wissensobjekte geführt.

Abbildung 6 zeigt die Entstehung dieses KI-Wissens am Beispiel desselben LSTM-Blocks. Hier werden die in lila dargestellten dynamischen Wissensobjekte vom CoNM extrahiert und algorithmisch im Modell platziert. Diese konnten ebenfalls zur Erklärung des neuronalen Verhaltens herangezogen werden und die Funktionsfähigkeit der erarbeiteten Neuronenstruktur auf eine zweite Weise validieren.

Mit dem zweiten und dritten Experiment sind erstmalig neuronale Konversionen dargestellt und die Entstehung von Wissen ist auf neuronaler Ebene beschrieben worden.

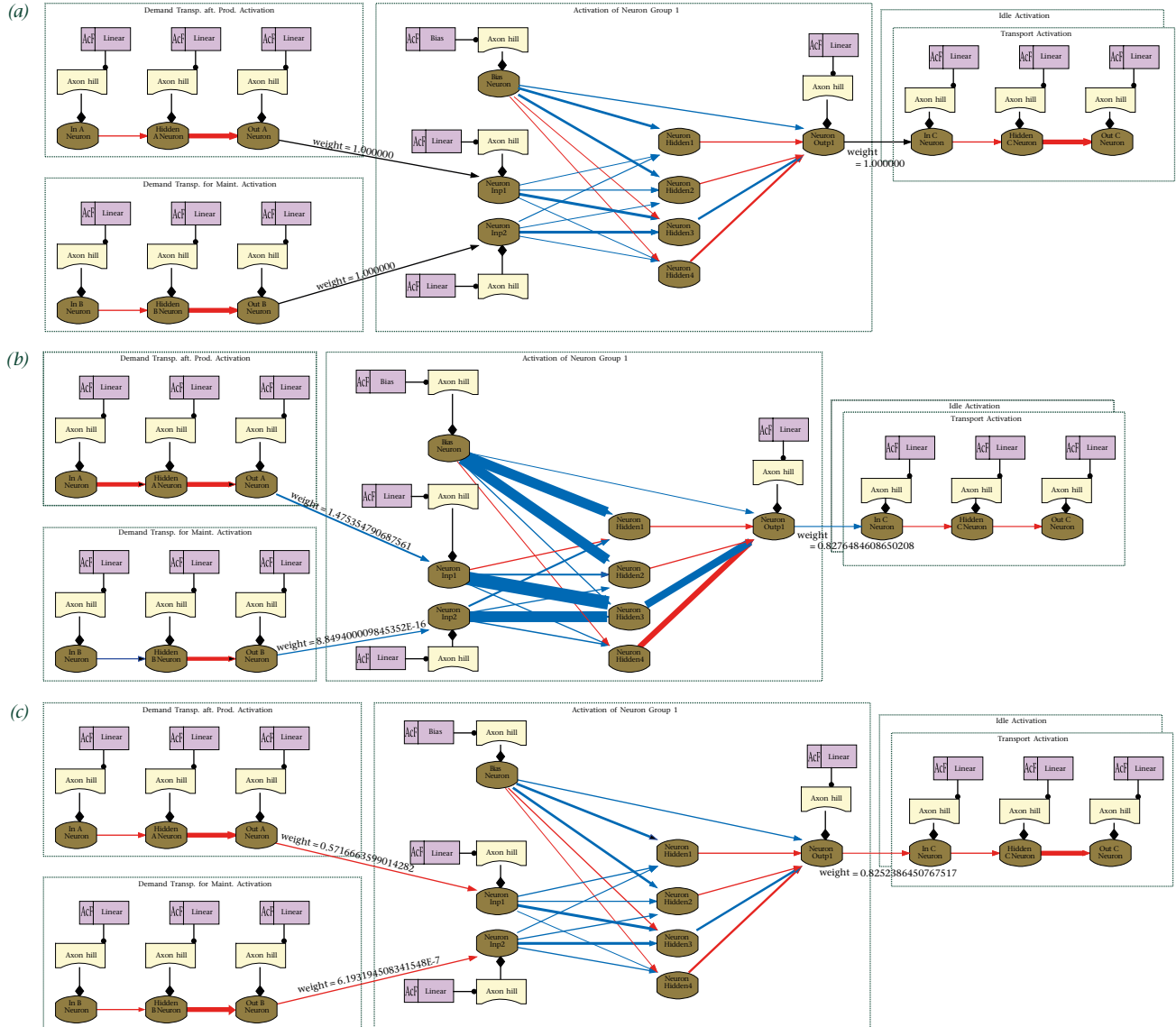


Dies hat die Transparenz in KNN erhöht, da die Wissensgenerierung durch KNN nun visualisiert und zur Erklärung neuronalen Verhaltens herangezogen werden kann. Im Abgleich mit einem zu erwartenden Verhalten ermöglicht die Analyse identifizierter Wissensobjekte ein Debugging von KNN.

Das vierte Experiment demonstriert, wie neuronale Prozesssimulationsmodelle aufgebaut werden können. Dieses wurde anhand eines durchgehenden Realbeispiels, einer eigens entwickelten Industrie4.0-Produktionsanlage durchgeführt (siehe *Abbildung 7*).

Mittels der NMDL wurden in der gezeigten Anlage die Geschäftsprozesse und Simulationsmodelle des Realbeispiels dargestellt. Ferner wurden neuronale Strukturen und Wirkungsvorgänge mit den graphischen Modellierungsbausteinen der NDML erstellt und das Trainieren und Testen von KNN automatisiert realisiert. Während im Training anhand von NMDL spezifiziertem Lernmaterial in der Regel Gewichte zwischen den Neuronen modifiziert werden, wird beim Testen auf Grundlage der bereits im Training modifizierten Gewichte anhand eines für das KNN unbekanntes Testmaterials überprüft, inwiefern ein Lernerfolg vorliegt.

Abbildung 7:
Modellanordnung der selbstentwickelten Industrie4.0-Produktionsanlage.



Relevante Parameter werden weiterhin mit der NMDL beschrieben und durch die hinterlegten Mechanismen automatisch berücksichtigt. Der entwickelten neuronalen Unternehmensarchitektur folgend, wurden die im Produktionsfeld erhobenen 23 Informationsströme aus den Maschinen der Produktionsanlage als Datenquellen direkt über die graphische Modellierung verbunden und in den entwickelten Software-Prototypen eingespeist. Die vom CoNM generierten Erwartungswerte wurden in Form von maschinenspezifischen Instruktionen zurück auf die jeweiligen Maschinen im Feld gespielt und von den Industrie4.0-Anlagen (s. *Abbildung 7*, S. 45) umgesetzt. Auf Basis dieser Instruktionen sind in der gezeigten Modellanordnung Produkte erfolgreich hergestellt worden. Da die Durchführung von Simulationen auf Basis dieser Modelle zu plausiblen Interpretationen geführt hat, können KNN-basierte Instruktionen nun auch zur Steuerung von Maschinen einer realen Produktionsanlage zum Einsatz kommen.

Hiermit ist die KNN-Transparenz weiter erhöht worden, da die innere Arbeitsweise von KNN im Prozesskontext visualisiert wird und somit nachvollziehbar gemacht werden kann. Weiterhin ist hier das Zusammenspiel menschlicher sowie maschinenbasierter Modellkonstrukteure im rekursiven Top-Down- und Bottom-Up-Modellieren verdeutlicht worden. Während das Top-Down-Modellieren von vorhandenen Modellen ausgeht und rekursiv solange

neuronale Substrukturen bildet und in bestehende Modelle integriert, bis ein zu definierendes Gütekriterium erfüllt ist, werden beim Bottom-Up-Modellieren ausgehend von vorhandenen Daten solange übergeordnete neuronale Strukturen gebildet, bis diese in einer gemeinsamen Modellbasis unter Erfüllung eines zu definierenden Gütekriteriums (z.B. der Simulationsgenauigkeit) integriert werden können. In Analogie zur Rekursion kann dies als Kursion bezeichnet werden.

Die zwei abschließenden Experimente befassen sich mit der Durchführung einer neuronalen Prozessoptimierung. In jeweils zwei Optimierungsansätzen pro Experiment hat der Einsatz des CoNM zu plausiblen Ergebnissen geführt, die in der praktischen Anwendung in einem realen Umfeld Prozesse verbessern. Während das fünfte Experiment dabei Lernvorgänge anhand von architektonischen Ebenen, die mit komplexeren kognitiven Strukturen vergleichbar sind, auf eine neuartige Weise steuerbar gestaltet und ausgewählte KNN-basierte Wissensstrukturen kristallisiert, fokussiert sich das sechste Experiment auf Lernvorgänge in fluiden Wissensstrukturen von KNN und verändert sämtliche Prozessstrukturen. *Abbildung 8* zeigt die strukturellen Veränderungen während der neuronalen Prozessoptimierung. Hierbei wird in *Abbildung 8 (a)* die initiale KNN-Struktur des Ist-Prozesses deutlich.

Abbildung 8 (b) zeigt die strukturelle Veränderung unter Verwendung ausschließlich

Abbildung 8 (links):
Strukturelle Veränderung in KNN während der Prozessoptimierung.
(a) *Initiale KNN-Struktur.*
(b) *Neuronale Prozessoptimierung unter Verwendung fluiden Wissensstrukturen (Exp. 5).*
(c) *Neuronale Prozessoptimierung unter Verwendung kristallisierter Wissensstrukturen (Exp. 6).*

fluider Wissensstrukturen, wobei sich insbesondere die Gewichte des mittig angeordneten neuronalen Sub-Systems verstärken. Im Vergleich hierzu bleiben dieselben

„Die Übertragung des CoNM auf weitere Anwendungsbeispiele und -gebiete lässt auf aufregende Ergebnisse hoffen.“

Marcus Grum

neuronalen Strukturen unverändert, siehe *Abbildung 8 (c)* (s. S. 46), da sie kristallisiert wurden. Ein Grund neuronale Strukturen zu kristallisieren wäre es, dass man mit der Leistung einer Teil-

struktur zufrieden ist und das hier erzeugte Wissen bewahren möchte. Die Experimente 5 und 6 haben die Transparenz in KNN weiter erhöht, da die inneren Vorgänge im KNN während des Lernprozesses gesteuert werden können. Die Steuerung und optimierte Simulation realer Maschinen durch das CoNM ist mittels der in *Abbildung 7* (s. S. 45) gezeigten Industrie4.0-Modellanlage eines cyberphysischen Produktionssystems in realer Umgebung nachgewiesen worden.

Konklusion

Das CoNM, welches durch die hier beschriebene Forschung konstruiert worden ist (Grum, 2022), ermöglicht somit das neuartige Schaffen von Prozessmodellen, neuronaler Strukturen, Simulationen und Optimierungen sowie deren technische Untermauerung durch KNN-Mechanismen auf einer graphischen Modellierungsebene. Systemverantwortliche bzw. Modellieren-

de werden so in die Lage versetzt, die Rolle menschlicher und KNN-basierter Wissens-träger effizient zu konzipieren, zu bewerten, zu analysieren und zu entwickeln sowie deren Verhalten in Prozessen zu simulieren, zu prognostizieren, zu verbessern, zu steuern und zu verwalten. Die Ansätze bieten insbesondere für den Einsatz im wirtschaftlichen Kontext ein hohes Potenzial, da Modellierungsaufwände reduziert und Verbesserungen datengetrieben automatisch festgestellt werden können. Da neuronale Simulationen tolerant mit Störungen der Umwelt umgehen können und Prognosen innerhalb von Simulationsläufen erstellen, ist ein Einsatz des CoNM insbesondere zur Steuerung von Maschinen geeignet.

Inspiziert aus der Softwareentwicklung hat das CoNM das Potenzial für ein Debugging von KNN, da Wissen und das Verhalten von KNN visualisiert und mit einem intendierten Zustand abgeglichen werden kann. Neben einer Anwendung des CoNM auf den Gegenstandsbereich von Produktions- und Geschäftsprozessen ist eine Anwendung u.a. auf physikalische, chemische und astronomische Prozesse vielversprechend. Zum einen stehen hier Daten im großen Umfang zur Verfügung und zum anderen könnten in Simulationen mit entstandenen KNN-Modellen und Analysen von den hier selbstgebildeten neuronalen Strukturen und Aktivierungsmustern neue Erkenntnisse erzielt werden könnten.

Referenzen

- Grum, M. (2020). "Managing Human and Artificial Knowledge Bearers – The Creation of a Symbiotic Knowledge Management Approach". In: Proceedings of the Tenth BMSD, pp. 182–201. DOI: 10.1007/978-3-030-24854-3_7.
- Grum, M. (2022). Construction of a Concept of Neuronal Modeling. Springer Gabler Wiesbaden. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-35999-7>
- Grum, M. und Gronau, N. (2018). "A Visionary Way to Novel Process Optimization Techniques – The Marriage of the Process Domain and Deep Neuronal Networks". In: Springer LNBIP, pp. 1–24.
- Kirk, G.S., Raven, J.E. and Schofield, M. (1983). The Presocratic Philosophers: A Critical History with a Selction of Texts. Cambridge University Press. ISBN: 9780521274555. URL: <https://books.google.de/books?id=kFpd86J8PLsC>.
- Lachs, C.P.P.J., Lachs, J. and Talisse, R.B. (2008). American Philosophy: An Encyclopedia. Taylor & Francis. ISBN: 9781135948870. URL: <https://books.google.de/books?id=oP6TAgAAQBAJ>.
- Rescher, N. (2000). Process Philosophy: A Survey of Basic Issues. University of Pittsburgh Press. URL: <https://books.google.de/books?id=E6rOyLVeBOcC>.
- Whitehead, A.N. (1920). The Concept of Nature: The Tarner Lectures Delivered in Trinity College, November 1919. Dover Publications.
- Whitehead, A.N. (1925). Science and the Modern World. New York: Free Press.
- Whitehead, A.N. (1929). Process and Reality: An Essay in Cosmology. Free Press.

BRIDGING THEORY AND PRACTICE – MODELING AND SIMULATION OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA



Foto © Frank Eppeler for the Bosch Zünder

Dr.-Ing. Yvonne Späck-Leigsnering is an expert in modeling and simulation of multiphysical nonlinear problems electrical engineering. She is currently head of the ME/EMC simulation team at Robert Bosch GmbH and holds an Athene Young Investigator Fellowship from the Technische Universität (TU) Darmstadt. She obtained her MSc in Electrical Engineering and Information Technology from TU Darmstadt in 2014. In 2019, Späck-Leigsnering earned her PhD in “Electrothermal modeling, simulation and optimization of surge arresters” at TU Darmstadt. She and her team develop precise, yet reduced, modeling approaches and simulation methods for application-oriented electromagnetic and electrothermal field problems in the fields of energy technology, electromagnetic compatibility and particle acceleration.

YVONNE SPÄCK-LEIGSNERING

BRIDGING THEORY AND PRACTICE – MODELING AND SIMULATION OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

1 Introduction

For over a century and a half, Maxwell's equations have stood as the cornerstone of electromagnetic theory. This set of partial differential equations describes the nature of electric and magnetic fields. We apply these equations to explore and comprehend our world from the vast expanse of the universe down to the intricate workings of everyday technology, encompassing transmission power lines, electric vehicles, and mobile phones.

As engineers and researchers, however, we are faced with a huge challenge: how to translate these equations into practical models that allow a quick yet accurate evaluation of real-life electrical systems. Our task is to create feasible models that balance fidelity with computational efficiency. To achieve this, we introduce assumptions and simplifications, to break down the complexity inherent in the full set of Maxwell's equations. Thus, precise yet streamlined mathematical descriptions and electromagnetic simulations become essential tools at the interface of theory and application.

Consider the consequences if our supply of electrical energy were less secure or reliable. Our daily lives would undergo dramatic changes, and many conveniences we take for granted would falter. Simultaneously, our world is becoming increasingly electri-

fied as we combat climate change. How can we navigate this delicate balance between technology and social responsibility? How do we inspire the next generation to contribute to a better future?

As simulation engineers, our role is pivotal. We enhance the reliability and robustness of products and systems through mathematical modeling and numerical simulations. In the dynamic landscape of energy transmission and electric mobility, modeling and simulation serve as indispensable

Co-authors:

Christian Bergfried,

Jonas Bundschuh,

Dr.-Ing. Laura D'Angelo,

Greta Ruppert-Schmidt

Resume:

The development of novel numerical techniques and simulation frameworks plays a key role in the design and operation of electrical equipment, contributing to the advancement of renewable energy technologies and the development of more resilient and efficient power transmission infrastructure. This article explores the challenges and opportunities in modelling and simulation of electromagnetic problems for power transmission and electromobility and describes advanced computational techniques and innovative approaches to provide engineers with tools for simulation-based product development. The research projects presented here address the complexities of high voltage direct current transmission (HVDC) cable systems, insulation systems in electrical machines, foil windings and superconducting accelerator magnets. Each of the projects extends the field of electromagnetic simulation and has the potential to have a significant impact on the reliability, efficiency and performance of electrical systems.

tools. These powerful techniques provide insights into complex electromagnetic field behaviors, empowering engineers and researchers to address critical challenges. As development cycles shorten and experiments become costlier, especially prototyping, the demand for simulation during early design phases intensifies. Traditional design concepts no longer suffice, particularly for energy transmission systems and electric machines. The following challenges are identified: First, realistic problems are characterized by a high complexity. Applying recently developed finite element (FE) modeling and simulation methods to realistic problems is demanding. The finite element simulation technique is a numerical discretization approach for electromagnetic problems that involves dividing the problem domain into smaller, interconnected elements. Each element is then analyzed individually using mathematical equations to determine the electromagnetic behavior within that element. By combining the results from all the elements, a comprehensive understanding of the electromagnetic behavior of the entire system can be obtained. The simulation of real-world scenarios involves intricate geometries, material properties, and operating conditions. Thus, balancing accuracy with computational efficiency is crucial. Second, first-principle-based modeling, also known as physics-based modeling, involves developing mathematical models and simulations based on fundamental physical laws and principles, in our case Maxwell's equations. This approach aims to accurately

represent the underlying physics and mechanisms of a system, allowing for predictive and explanatory capabilities. By directly incorporating physical laws into the model, first-principle-based modeling provides a deeper understanding of the system's behavior and can be used to make predictions and optimize designs. However, while a full first-principle-based modeling approach is desirable, it may be unfeasible due to incomplete understanding of certain problems. Researcher must thus decide which parts of the model are sensitive to quantities of interest (QoI) and which can be simplified without sacrificing accuracy. Third, energy transmission systems and electric machines operate in a multidisciplinary environment. Considerations include electromagnetic-thermal-mechanical couplings, material behavior, and uncertainties. Integrated simulation approaches must account for all relevant aspects.

In this book chapter, we explore the challenges and opportunities in modeling and simulating electromagnetic problems for energy transmission and electric mobility. By developing advanced simulation techniques and innovative approaches, we provide engineers with tools to unlock the full potential of modern electric equipment. Our research group "Quince" (Quasistatics in Computational Engineering) is working in the domains of energy technology, electromagnetic compatibility and particle acceleration. In the following sections, we will showcase our computational developments

and contributions. In the first section, Greta Ruppert discusses the simulation challenges posed by HVDC cable systems. She develops computational sensitivity analysis tools to systematically optimize field grading materials of cable joints. Subsequently, Christian Bergfried introduces his research on insulating materials in electric machines. He develops and applies model calibration techniques to robustly simulate the system electrothermally. Third, Jonas Bundschuh shows how a clever modeling approach overcomes the numerical limitations of simulating problems with very thin layers such as in foil windings of transformers. Finally, Laura D’Angelo showcases her research on superconducting magnets that are essential components of particle accelerator systems. Her novel numerical techniques are tailored to the special needs of quench simulation.

2 Research Projects

2.1 Electrothermal characterization and advancements of insulation systems for HVDC cable joints by simulation

Greta Ruppert-Schmidt contributes to research in the field of HVDC power transmission systems.

It’s often the little things that make the difference. Cable joints, for example, which electrically connect two cable sections. These components play an important role in the SüdOstLink, the planned

“electricity highway” that will carry energy from Saxony-Anhalt to Bavaria. Over distance of more than a thousand kilometers of cable, significantly more than 500 of these connecting elements are required. In line with Germany’s energy transition, there is a growing push for renewable energy sources. The Energy Expansion Act has set ambitious targets, aiming for 80% of Germany’s energy to be sourced from renewables by 2035 and achieving complete carbon neutrality by 2045. Wind energy, produced primarily in northern Germany, is crucial to meeting these goals. However, efficiently transmitting wind energy to southern consumer centers poses a significant challenge to the power grid, necessitating the development of new transmission lines.

”With the help of mathematical modeling and field simulations, she aims to make products and systems more reliable and robust.”

Yvonne Späck-Leigsnering

Given that long-distance power transmission is most economically feasible using high-voltage direct current (HVDC) technology, several new HVDC transmission lines are planned (*see Fig. 1, p. 54*). These new HVDC lines will prioritize underground cables instead of conventional overhead power lines, a decision driven by public resistance and aesthetic concerns. Their downsides are significantly higher construction costs and increased risk of failure.

Despite the advantages, the use of HVDC underground cables introduces new chal-



Source Map Fig. 1:
www.cleanenergywire.org/factsheets/set-and-challenges-germanys-power-grid

Figure 1:
Planned high-voltage direct current transmission lines in Germany (Clean Energy Wire I').

lenges. The immense weight of the cable drums limits the length of a single cable to 1–1.5 kilometers due to transportation constraints (see Fig. 2a). Consequently, transmitting power over long distances requires connecting many short cable segments using cable joints (see Fig. 2b).

Our aim is to contribute to the reliability of the power supply by providing engineers with dedicated field simulation tools for HVDC cable joint simulation and design. Simulation is a valuable tool that enables detailed analysis and optimization of cable joint designs under various operational conditions without the need for extensive physical prototypes. By accurately modeling the electrothermal behavior of cable joints, simulations can identify potential failure points and areas of high stress that might not be evident through experimentation

alone. This approach not only enhances our understanding of the complex interactions within cable joints but also enables us to predict performance, improve design, and mitigate risks.

From a numerical perspective, the strong nonlinearity and multi-physical nature of the problem, which involves both electrical and thermal phenomena, present significant challenges. Furthermore, the large number of design parameters makes optimization difficult and time-consuming. To address these issues, we have developed the freely available Python-based finite element framework Pyrit I' that features solvers specifically designed for the simulation of HVDC accessories. This solver allows for an accurate simulation of the electrothermal behavior of cable joints both during DC operation and transient events, such as



switching operations. The solver accounts for strong differences in the time scales of the thermal and electric phenomena by implementing a multi-rate time stepping approach. Additionally, it can handle strongly field- and temperature-dependent materials, which are often present in cable joints. The framework provides tools to enable a systematic investigation of important design parameters and quantities of interest. For instance, sensitivity computation using the adjoint variable method enables efficient sensitivity analysis, with computational costs that are nearly independent of the number of design parameters ^[1, 2]. Sensitivity analyses allow us to identify critical areas and significant design parameters. Instead of laboriously examining a hundred joint designs in a high-voltage laboratory, researchers and engineers can leverage these tools to gain deeper insights into the factors

influencing cable joint performance and reliability. This knowledge contributes to the development of more resilient and efficient energy transmission systems.

Since 2020, we intensely collaborate with Professor Myriam Koch and her team from the Technical University of Munich and TU Darmstadt, who are experts of high voltage technology. Both research teams organized the first edition of the HVDC Cable Systems Symposium: Theory and Practice ~ in January 2022. The symposium brought together more than 100 scientists and industry representatives to discuss current trends and challenges in the field of HVDC cable system technology.

Figure 2:
*Cable drum of a HVDC cable (Prysmian I').
(b, right) On-site installation of an underground cable joint (T&D I').*

In conclusion, the transition to renewable energy in Germany requires innovative solutions to manage the complexities of HVDC transmission. Our advanced simulation framework plays an important role in this effort, providing the means to optimize cable joint designs and improve their reliability. By addressing the numerical and physical challenges inherent in HVDC systems, we can contribute to the development of a more robust and efficient power transmission infrastructure, helping to support Germany's ambitious energy goals.

2.2 Electric and thermal stresses in electric machine insulation systems

Christian Bergfried's research focuses on modeling and simulation of insulation systems in electric machines.

Engineers aim for electric machine designs, which meet high requirements with respect to efficiency, reliability and resilience against adversary operation conditions. Insulation systems in electric machines must ensure electric and thermal stability under regular and adverse operating conditions.

Unfortunately, a good electrical insulator is usually also a good thermal insulator. Electrical insulation prevents the flow of current between individual parts and separates the electrical potentials. Thermal in-

simulation hampers the heat dissipation from the winding to the cooling channel. The insulating layers in an electrical machine are therefore vulnerable to thermal overload and electrical stress, which limits the permissible operating range and significantly determines the service life.

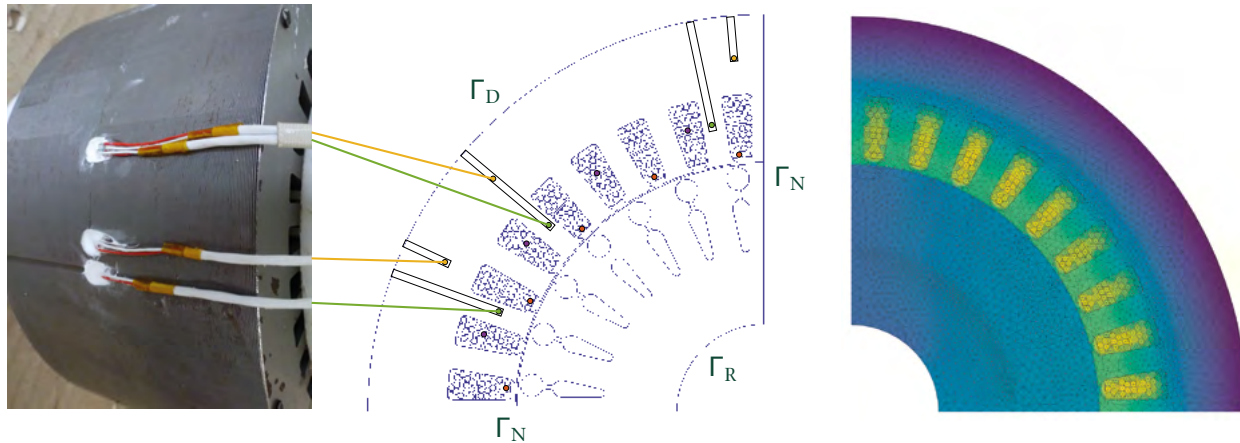
Experimental investigation and diagnostic approaches for insulation systems in electric machines, aimed at detecting aging effects and preventing breakdowns during operation, are often limited and expensive.

Field simulation provides several advantages. First, it allows for the accurate resolution of electrothermal field phenomena in machine insulation systems over both space and time. Second, engineers gain insights into the internal field and temperature load distribution that cannot be accessed through measurements alone. To initiate these investigations, a simple machine model is necessary. As a starting point, twodimensional models suffice, as they balance adequate results with cost-effective calculations. Typically, material data is taken from data sheets or standard textbooks.

However, for highly accurate FE simulations, relying solely on material properties from data sheets may fall short. We recognize that accuracy often demands calibration. This motivates us to develop dedicated approaches for the realm of electrical machines: First, we investigate approaches to characterize insulating materials and obtain accurate

”We deliver valuable insights into electromagnetic field distributions and mutual electromagnetic couplings.”

Yvonne Späck-Leigsnering



material data. Second, our models are thoroughly validated against benchmark cases or well-characterized systems. Finally, for specialized materials (e.g., composites, ferrites), we create custom material models that capture their unique behavior. A central aim of the research stay at the Institute for Electrical Drive Technology and Machines (EALS) (Prof. Annette Mütze) at TU Graz was the measurement and extraction of these parameters at the example of a 3.7 kW squirrel cage induction machine^[3]. By utilizing an inverse problem, it was possible to calibrate the two-dimensional model, which accurately reproduces the measurements.

The calibrated model allows for a simulation-based and therefore safer and cheaper investigation of various operating con-

ditions of the machine, even beyond the permitted operation range. Additionally, a variation of the insulation system can be studied as well as the sensitivity towards manufacturing inaccuracy.

This research project is part of the Collaborative Research Centre TRR361/F90: CREATOR. In close collaboration with Professor Annette Mütze of TU Graz we are working towards an improved understanding of the insulation system on the machine's behavior and durability.

Figure 3: Calibration of a machine model. On the left side, the stator core of an induction machine equipped with sensors is displayed. The collected sensor data are introduced into the machine model (middle) and used to calibrate material parameter and boundary conditions Γ , resulting in a field distribution (right).

2.3 Homogenized field models for foil windings

The research of Jonas Bundschuh contributes to the field of electromagnetic compatibility.

In the tapestry of modern technological advancements, transformers stand out as pivotal components that silently empower various aspects of our daily lives. From the buzzing power lines that crisscross our cities to the intricate electronic devices that populate our homes, transformers are integral in ensuring the smooth operation and efficiency of numerous systems. Their ability to transfer electrical energy between circuits through electromagnetic induction has made them indispensable in both industrial and consumer applications.

Central to the functionality of transformers are coils, meticulously wound spirals of conductive material that form the backbone of these devices. These coils, through their interactions, enable the stepping up or stepping down of voltage levels, facilitating the safe and efficient distribution of electrical power. Whether in the massive transformers

of power grids or the compact versions in household appliances, the role of coils is fundamental.

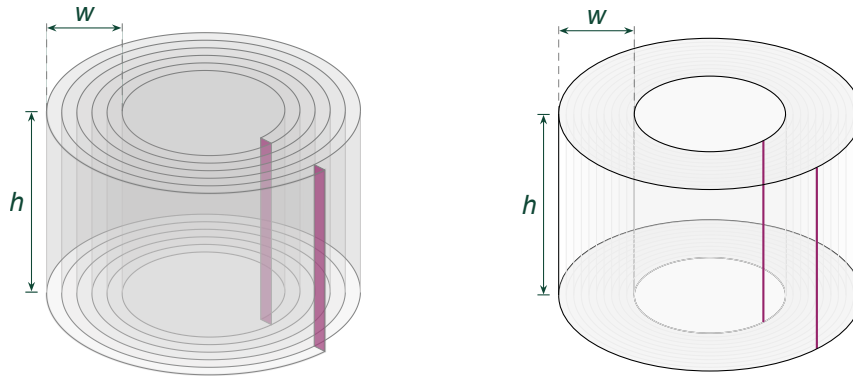
Classically, coils are built from winding an insulated wire many times. But there are also other approaches that use an insulated foil instead of a wire. The resulting coil is then called a foil winding (*see Fig. 4a*).

Foil winding come with advantages over traditional wire windings. Their production is for instance easier and more cost effective. Also, foil windings have better thermal properties than wire windings. Due to the high thermal conductivity of the metallic foil, the produced heat during operation can be dissipated much more efficient in comparison to a wire winding. There, the insulation of the wire with a low thermal conductivity hampers the heat dissipation towards the surface of the winding.

Foil winding have also different electromagnetic properties than wire windings. If we compare the cross section of a foil and a wire, one major difference is the scales in different directions. The wire has an equal scale in all directions. For instance, a wire with a diameter of 1 mm has this scale in all directions, even if it gets deformed during the winding process. The foil, however, has

”Industry and science can only thrive if they work together.”

Yvonne Späck-Leigsnering



(a) A simple foil winding with $N = 5$ turns.
Taken from [4]

(b) Smoothed geometry of a foil winding.

a large scale difference in different directions. Its thickness is usually very small in comparison to its height.

These scale differences are crucial for an important electromagnetic effect: the skin effect. In simple terms it states that a high frequency magnetic field gets forced out of a conductor. Applied to the foil windings geometry it follows that the magnetic field gets repelled much more towards the height of the foil and compared to the direction of the thickness of the foil. Due to the equal scales for wire windings, the magnetic field gets repelled approximately the same in all directions.

We are mainly interested in the question: How can foil windings be simulated within the finite element method? As we have already pointed out, foil windings have distinct electromagnetic and thermal properties. Thus, a special computational model is necessary to replicate these properties in the simulation [5]. Also, because the foil is very thin, it is very costly to resolve the single turns of the winding in the computational model. For larger 3D simulations this gets nearly impossible.

The foil winding model therefore uses a homogenization method. It replaces the winding region, i.e., the region occupied by

Figure 4: Schematic representations of a foil winding. a shows a simple foil winding with $N = 5$ turns. The single turns are visible and the terminals are highlighted in purple. b shows the smoothed version of the foil winding domain. The single turns are not visible but indicated. The terminals collapsed into lines here and are also highlighted in purple.

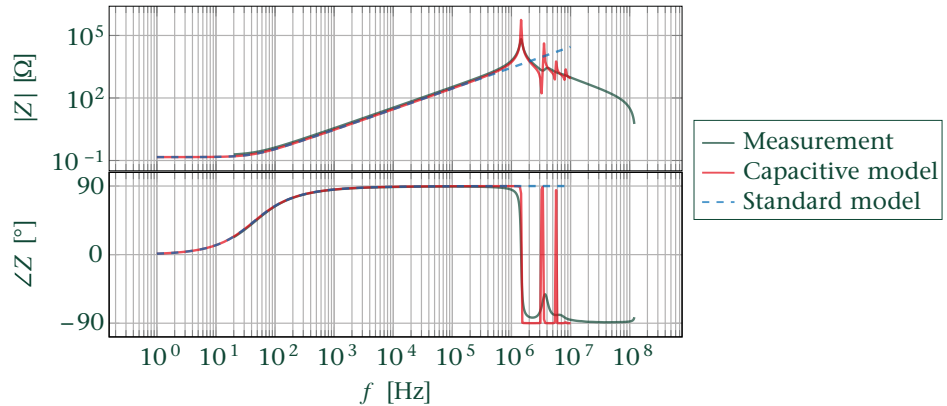


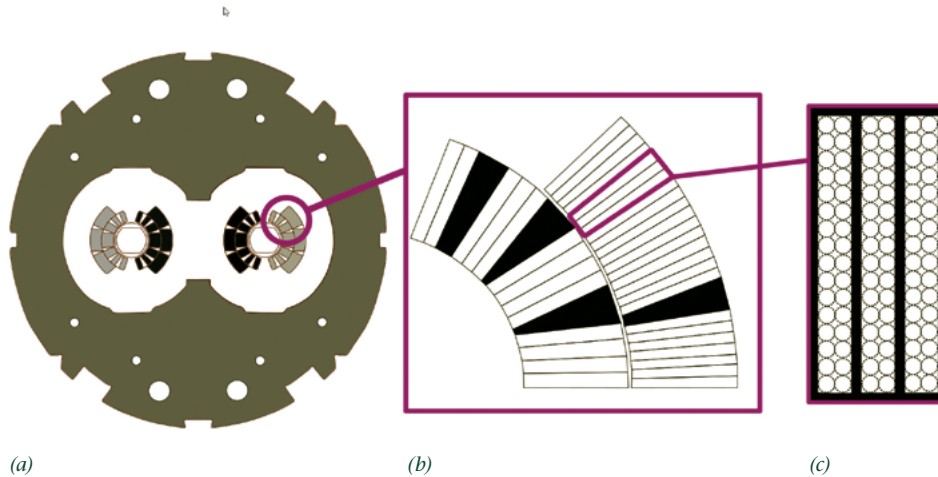
Figure 5: Plot of the absolute value and phase of the impedance Z of a foil winding over the frequency f . Measurement results are plotted in dark green, simulation results from the capacitive model in red and from the standard model in dashed blue.

the turns of the foil winding, in the computational domain by an artificial material with complex material properties (see Fig. 4b, p. 59). So the actual turns of the foil winding are not visible in the computational model anymore. For this artificial material, a rather coarse resolution can be used. Additionally, further equations are stated on the foil winding domain to ensure the correct behavior.

When increasing the operating frequency of a foil winding, the capacitive effects between the single turns become important. They can drastically change the behavior of the foil winding. At a sufficiently high frequency, the current can flow across the insulation as a capacitive current. The result is that the foil winding, which acted as a coil for lower frequencies, now acts as a capaci-

tor. Such higher frequencies are used for example in different kinds of power converters for the internal switching frequencies.

With these capacitive effects, the foil winding has a very different behavior. Consequently, the former computational model cannot be used anymore in the simulation. However, we have found a way to extend this former model so that it incorporates the capacitive effects [4]. With that, from a practical point of view, all ingredients used in the simulation model without the capacitive effects can be reused and only an additional term has to be added to the new model. The improvements of the extended, capacitive model compared to the standard model can be seen in Fig. 5, where the impedance Z of a foil winding is plotted over a large frequency range. The figure contains



a graph for measurement results and for the simulation results of the capacitive and the standard model. For low frequencies, both models give good results in accordance with the measurement results. But only the capacitive model is able to represent the resonance at around 1.6 MHz as well as the capacitive behavior beyond this frequency. The standard model cannot provide these results and predicts an inductive behavior even for these high frequencies.

2.4 Quench simulation for superconducting magnets: increasing resolution in time and space

Dr.-Ing. Laura D'Angelo researches and tailors novel numerical approaches for superconducting accelerator magnet simulation.

She finished her PhD project in 2023 and is now working as a research group leader at the TEMF institute of TU Darmstadt.

Particle accelerators play a key role in solving the existential mysteries of our universe. In order to do that, higher and higher particle energies are sought, at which particles are collided in the hope to generate and detect new exotic particles, as it was done with the Higgs boson in 2012 at the Large Hadron Collider at CERN. To handle such high energies and to keep the particle collider compact, superconducting technology plays a huge role for designing accelerator magnets (see Fig. 6). Because superconducting magnets are neither limited by the saturation effect of an iron yoke nor by the heat losses produced in the coils (as they have zero electrical resistance), they can enable the

Figure 6: The cross-section of the LHC main dipole (a) consists of an iron yoke around two beam pipes, which are surrounded by superconducting coils. The coil configuration (b) consists of superconducting cables (white) and copper keystones (black). The cables (c) are wrapped by a glass fibre insulation (thick black lines), and consist of several superconducting multi-filamentary wires (circles).

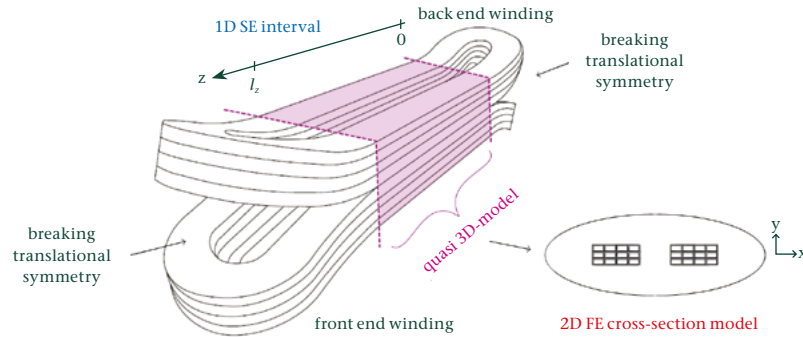


Figure 7: Concept of the quasi-3D method: The geometrically symmetrical part of the accelerator magnet is decomposed into a cross-section resolved by a 2D finite-element method and a longitudinal direction handled by a 1D spectral-element method. This hybrid approach is computationally very efficient. The asymmetrical parts, i.e., the end coil windings, are either taken into account by other methods or can be neglected.

required high magnetic field strengths for bending high energy particle beams. However, this indispensable technology comes with some costs and challenges:

- The magnets have to be operated at cryogenic temperatures in order to obtain the superconducting state. Surpassing the critical temperature of the superconducting material results into a so called “quench”, i.e., the magnet shifts to a normal-conducting state, where the electrical resistance is typically very high and which can lead to thermal runaways with high damaging potential. Therefore, it is crucial to analyze and understand the thermal behavior in such magnets in addition to their magnetic properties.
- The material and construction cost for superconducting coils are very high, with one single magnet costing 1.5 to 2 million Euros. Additionally, the construction

time for one single magnet can take half a year. It is, thus, no economically viable option to construct many prototype magnets until the best design is found. The chosen magnet design has to work straight away.

- The multi-physical and multi-scale properties of the magnets impose huge challenges for the numerical simulation, which standard simulation approaches are not able to handle. At the same time, there is a high requirement on the accuracy of such simulations in order to be able to design reliable and working accelerator magnets. We cannot allow too crude approximations.

In our research we are developing novel numerical techniques for the special needs of superconducting accelerator magnet simulation. The main idea is to decompose the magnet model into different parts that are

handled by different numerical discretization approaches being able to resolve the respective magnet model part especially well. While the individual numerical approaches, if applied to the whole magnet model, would struggle with the complexity of the overall problem, their combination leads to a significant boost in computational efficiency.

In one project, we are using a 2D finite-element method for the cross-section of the magnet in order to resolve the geometrical details, and a 1D spectral-element method along the magnet's length to achieve an accurate representation of the quench phenomenon in the longitudinal direction. This concept is shown in *Fig. 7*. This is called a quasi-3D method, as 3D physical effects can be represented in a 2D geometry ^[6].

In another project, we consider the magnet coil separately, utilizing Biot-Savart's law for computing the magnetic field generated by the transport current in the coil, while the other components of the magnet are treated in a finite-element model, which now does

not have to explicitly discretize the coil anymore, usually exhibiting a sophisticated winding design. Although this idea is not new and is known as a reduced magnetic vector potential approach since the 1990s, we recently published an updated version, in which we were able to reduce the computational cost of the method significantly by reformulating the problem ^[7].

Further types of combinations – even a mix of quasi-3D and reduced magnetic vector potential approaches – are theoretically possible to enable tailored and optimal simulation frameworks for difficult problems such as superconducting accelerator magnets. This enables more sophisticated and refined magnet design solutions, which would simply be unthinkable without efficient simulation methods.

”EMC is about ensuring that electronic equipment and systems don't affect each other or are disturbed by external sources.“

Yvonne Späck-Leigsnering

3 Conclusion

In conclusion, this book chapter has explored the challenges and opportunities in modeling and simulating electromagnetic problems for power transmission and electric mobility. The chapter showcased advanced computational techniques and innovative approaches to provide engineers with tools for simulation-based product development. The research projects presented in this chapter addressed the complexities of HVDC cable systems, insulation systems in electric machines, foil windings, and superconducting accelerator magnets.

Each introduced research project extends the field of electro-magnetic simulation and has the potential to significantly impact the reliability, efficiency, and performance of electric systems. The development of novel numerical techniques and simulation frameworks plays a pivotal part in the design and operation of electric equipment, contributing to the advancement of renewable energy technologies and the development of more resilient and efficient power transmission infrastructure.

References

- [1] M. G. Ruppert, Y. Späck-Leigsnering, J. Buschbaum and H. De Gersem. ‘Adjoint Variable Method for Transient Non-linear Electroquasistatic Problems’. In: *Electr. Eng.* 105 (Apr. 2023), pp. 2319–2325. ISSN: 1432-0487. DOI: 10.1007/s00202-023-01797-4.
- [2] M. G. Ruppert, Y. Späck-Leigsnering and H. De Gersem. ‘Transient Nonlinear Electrothermal Adjoint Sensitivity Analysis for HVDC Cable Joints’. In: *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* (May 2024). Submitted.
- [3] C. Bergfried, Y. Späck-Leigsnering, R. Seebacher, H. Eickhoff and A. Muetze. ‘Thermal finite element modeling and simulation of a squirrel-cage induction machine’. In: *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics Preprint* (2024), pp. 1–14. ISSN: 1875-8800. DOI: 10.3233/JAE-230233.
- [4] J. Bundschuh, Y. Späck-Leigsnering and H. De Gersem. ‘Considering Capacitive Effects in Foil Winding Homogenization’. In: *IEEE J. Multiscale Multiphys. Comput. Tech.* 9 (2024), pp. 179–187. ISSN: 2379-8793. DOI: 10.1109/JMMCT.2024.3396823.
- [5] J. Bundschuh, Y. Späck-Leigsnering and H. De Gersem. ‘Homogenization of foil windings with globally supported polynomial shape functions’. In: *Arch. Electr. Eng.* (Mar. 2024), pp. 77–85. ISSN: 1427-4221. DOI: 10.24425/aee.2024.148858.
- [6] L. A. M. D’Angelo, Y. Späck-Leigsnering and H. De Gersem. ‘Quasi-3D Magneto-Thermal Quench Simulation Scheme for Superconducting Accelerator Magnets’. In: *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* 32.6 (2022), pp. 1–5. DOI: 10.1109/TASC.2022.3159302.
- [7] L. A. M. D’Angelo et al. ‘Efficient Reduced Vector Potential Formulation for the Magnetic Field Simulation of Superconducting Magnets’. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 60.3 (Mar. 2024).

COOPERATIVE INTELLIGENT TRANSPORTATION SYSTEMS (C-ITS)



Foto © Bosch Group

Florian Schiegg is a senior expert in distributed systems at the corporate research of the Bosch Group. He manages the largest project in the strategic portfolio for intelligent communication technologies, comprising various publicly funded and internal customer projects related to reliable connectivity in the automotive and industrial domains. He holds two master's degrees: one in nuclear, particle and astrophysics and the other in management science with focus on marketing, strategy and leadership. His early research included contributions to the characterisation of stellar-mass black holes, the detection of muons, hadrons and the Higgs particle, and a customer and profitability analysis for stationary energy storage systems. In the scope of his doctoral work at Bosch, Schiegg dealt with connected intelligent transport systems (C-ITS). His research contributed to the development of new V2X services and laid the foundation for a Value-of-Information (VoI)-based data prioritization in C-ITS. Schiegg chairs the Bosch V2X Forum and leads the European standardization of the Collective Perception Service, establishing him as a key figure in the advancement of C-ITS technology on a global scale.

FLORIAN SCHIEGG

COOPERATIVE INTELLIGENT TRANSPORTATION SYSTEMS (C-ITS)

Introduction¹

The far-reaching technological advances of the past decades have led to unprecedented prosperity, but have also come along with considerable new challenges. An increasing demand for individual mobility and the vast deployment of transportation systems pose significant challenges to traffic safety, efficiency, and environmental sustainability. Vehicle registrations worldwide surpassed one billion in 2010, having doubled approximately every 25 years. The road traffic casualties have already exceeded 1.35 million annually, equivalent to nearly 4,000 deaths each day! Alarming, road injuries are the leading cause of death for children and young adults aged 5 to 29.

Beyond the tragic loss of life, rising traffic density introduces substantial additional challenges. With up to 50 million non-fatal traffic accidents each year, the global macroeconomic burden of traffic incidents exceeds EUR 1.5 trillion annually.

Traffic congestion is another critical issue. Prior to the COVID-19 pandemic, the average driver in the United States spent 42 hours annually in traffic jams, while in Europe, the figure was 31 hours. In major cities, this average can quadruple. Traffic jams not only waste time but also contribute significantly to greenhouse gas emis-

sions. In the US, France, Germany, and the UK alone, idle engines consume around six billion litres of fuel annually, generating over 15 million tons of CO₂. To compensate for these additional exhaust gases alone, 2.5 million hectares of tropical forests — an area the size of Belgium — would be needed.

Furthermore, the financial cost of fuel wasted in traffic jams exceeds EUR 1,500 per household annually, with projections indicating a sharp rise by 2030.

¹ The interested reader is kindly referred to [1] for the sources and derivation of the numbers offered in this section.

Resume

The rapid technological advancements of recent decades have brought unprecedented prosperity, but they have also introduced significant challenges, particularly in traffic safety, efficiency, and environmental sustainability. With over one billion vehicles registered globally and road traffic casualties surpassing 1.35 million annually, the need for innovative solutions has never been more urgent. Vehicle-to-Everything (V2X) technology emerges as a promising answer, enabling real-time communication between vehicles, infrastructure, and other road users. This technology enhances traffic safety by allowing vehicles to share critical information, such as detected hazards and traffic conditions, and to coordinate manoeuvres, greatly improving the functionality of Advanced Driver Assistance Systems (ADAS) and Autonomous Driving (AD). By optimizing the use of communication channels through Value of Information (VoI)-based resource allocation, V2X technology ensures that the most critical data is prioritized, enhancing situational awareness, and reducing accidents. As the cornerstone of Cooperative Intelligent Transportation Systems (C-ITS), V2X is set to revolutionize traffic management and provide a safer, more efficient, and environmentally friendly future for road users worldwide.

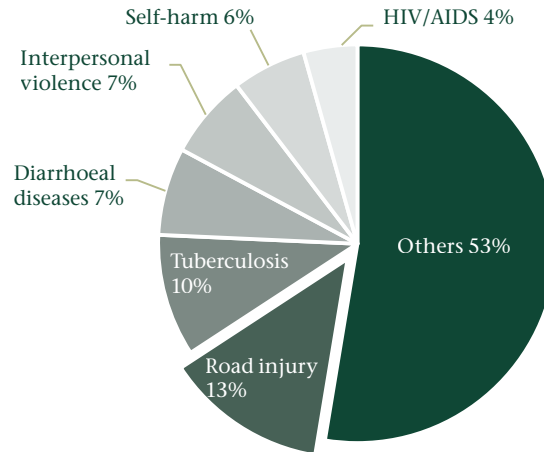


Figure 1:
Leading causes of death for children and young adults globally, based on WHO databases^[2].

Addressing these multifaceted challenges requires innovative solutions. Vehicle-to-Everything (V2X) technology has positioned itself as one of the most promising candidates. By enabling real-time communication between vehicles, infrastructure, and other road users, V2X allows traffic participants to behave cooperatively, e.g., warning each other of detected potential road hazards (e.g., animals, lost items, or frozen street segments), exchanging data related to the traffic (e.g., their own states, detected traffic participants, road signs, or traffic light phases), and even to coordinate manoeuvres by negotiating driving trajectories. V2X is thus expected to greatly enhance the functionality spectrum of Advanced Driver As-

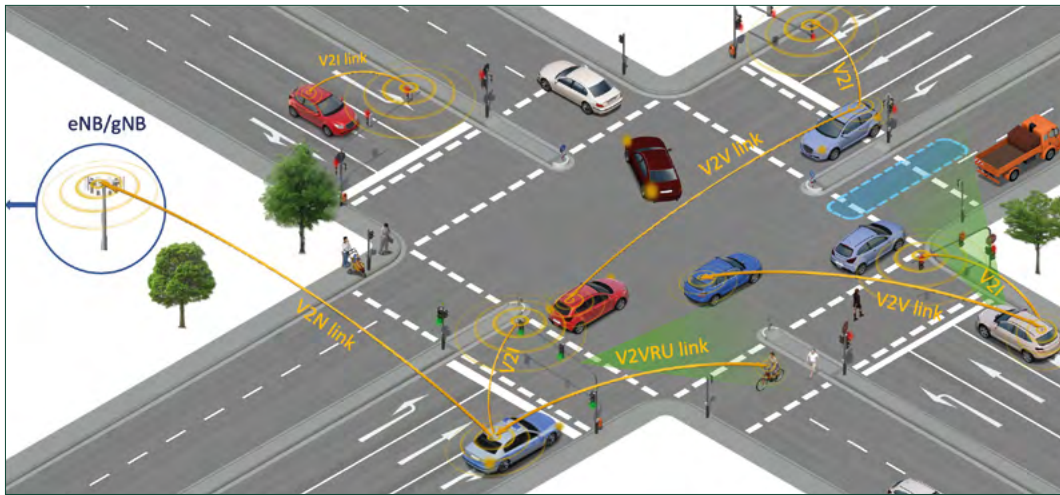
sistance Systems (ADAS) and Autonomous Driving (AD), significantly improving driving safety, efficiency, and comfort.

V2X Communication

V2X communication is, without a doubt, the main enabler of Cooperative Intelligent Transportation Systems (C-ITS). It allows traffic participants to exchange traffic-related information in a variety of ways, as shown in *Fig. 2*. In general, two types of communication links can be differentiated: (i) indirect communication, making use of an eNB or gNB base station to convey information by means of 4G and 5G communication respectively, and (ii) direct communication, allowing traffic participants to share information directly with each other using

”C-ITS is expected to greatly improve traffic safety.”

Florian Schiegg



the Wi-Fi-based ITS-G5^[3] or cellular-based C-V2X^[4]. Indirect communication over the cellular network is generally referred to as Vehicle-to-Network (V2N) communication.

The police car in *Fig. 2* could for example be obtaining information over V2N regarding the best route to reach its destination. For more time-critical data direct communication is used^[5]. This can be traffic light phases or objects detected by infrastructure sensors shared by means of Vehicle-to-Infrastructure (V2I) communication, kinematic and attitude information of vehicles and Vulnerable Road Users (VRUs), such as bicycles or pedestrians, shared via Vehicle-to-Vehicle (V2V) and Vehicle-to-VRU (V2VRU) communication respectively, or information regarding drivable regions detected, e.g., by means of vehicle on-board sensors.

Despite most direct V2X communication using broadcast, only selected links are visualized for the sake of clarity.

These links can transfer a range of different information, gathered by so-called V2X services. V2X services make use of a set of standardized message generation rules and message formats to ensure interoperability between different car and infrastructure vendors. Responsible for the standardization are so-called standards developing organizations, such as ETSI (Europe), SAE (USA), C-SAE (China), IEEE, 3GPP, ISO, supported by industrial alliances, such as C2C-CC, C-ROADS and 5GAA. In the following, some of the knownmost prominent V2X services are discussed.

Figure 2: Communication links between connected road users and infrastructure in a traffic scenario. Adapted from [1].

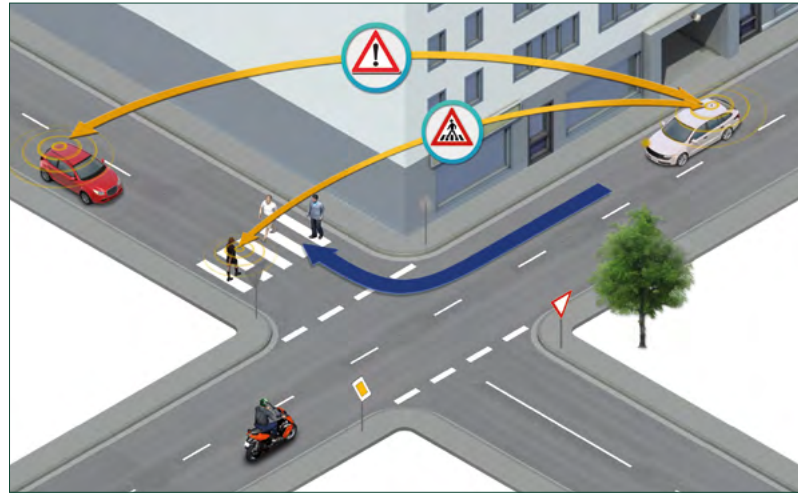


Figure 3:
Cooperative Awareness allows traffic participants to share their kinematic and attitude states with each other.
 Adapted from [6].

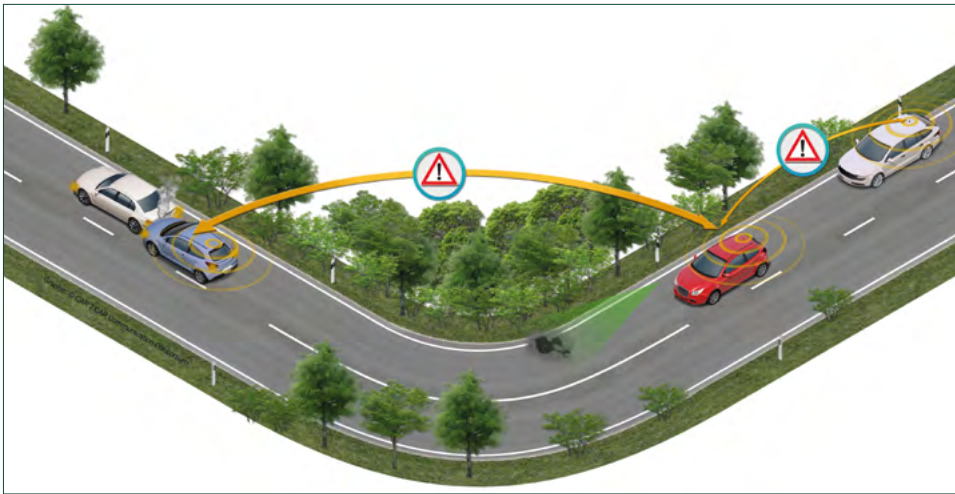
Cooperative Awareness

One of the two flagships of so-called Day 1 services, services that focus on basic environmental awareness, is Cooperative Awareness. In line with its name, Cooperative Awareness makes use of the Cooperative Awareness Message (CAM) in Europe and the Basic Safety Message (BSM) in the USA and China. It allows vehicles to share information about their kinematic and attitude state, such as their type, current and past positions, speed, and heading (*V2V link between both cars in Fig. 3*). The messages are transmitted via broadcast with rates of 1 to 10 Hz depending on the dynamics of the transmitter. The service is already being rolled out, with over 1.5 Mio series vehicles being equipped with it in Europe.

An extension to VRUs is pursued by means of the VRU Awareness service. It relies on the VRU Awareness Message (VAM) in Europe and the Personal Safety Message (PSM) in the USA. Apart from the information disseminated by CAMs and BSMs, it further allows to include a predicted trajectory, among others.

Decentralized Environmental Notification

The other Day 1 flagship is the Decentralized Environmental Notification basic service. Its purpose is to alert connected stations of hazardous situations and events, such as wrong way driving warning, stationary vehicle accident, signal violation warning, roadwork warning, collision risk warning, hazardous location, strong winds and reduced visibility. If one of the triggering



conditions is met, the detecting ITS station immediately generates a Decentralized Environmental Notification Message (DENM) to inform potentially affected traffic participants within a determined geographical area. Pendant to the European DENM are, e.g., Traveler Information Message (TIM) and Road Safety Message (RSM) in the US. Fig. 4 shows two DENM use-cases: (i) two vehicles involved in an accident generate a DENM to alert trailing vehicles. The DENM is additionally relayed by the red vehicle to inform the vehicle in its rear. (ii) A damaged road-section is detected by the red vehicle and broadcasted in a separate DENM.

Collective Perception

At the core of the Day 2 V2X services stands Collective Perception. Also known as Sensor Sharing, it allows traffic participants and

infrastructure to exchange data collected by their sensors, including cameras, radars and lidars. The exchanged data may include detected objects (such as pedestrians, obstacles, and other vehicles) and driveable regions (i.e., object- and infrastructure-free regions^[7]). Collective Perception not only increases the completeness of the environmental awareness of connected traffic participants, but also its accuracy^[8]. Especially the possibility “to see through the eyes of others”, in particular of infrastructure, opens a whole new field of applications. Sensors could for example be deployed by cities and road operators in particularly dangerous traffic environments to increase environmental awareness. This would help to overcome the physical line-of-sight limitations of conventional automotive on-board sensors and greatly contribute to the effi-

Figure 4: Decentralized Environmental Notification allows traffic participants to share information regarding hazardous situations. Adopted from [6].

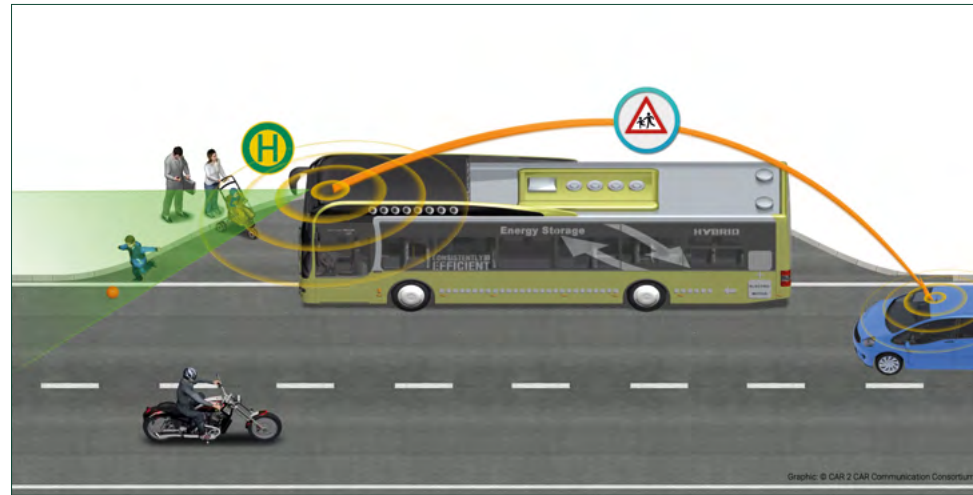
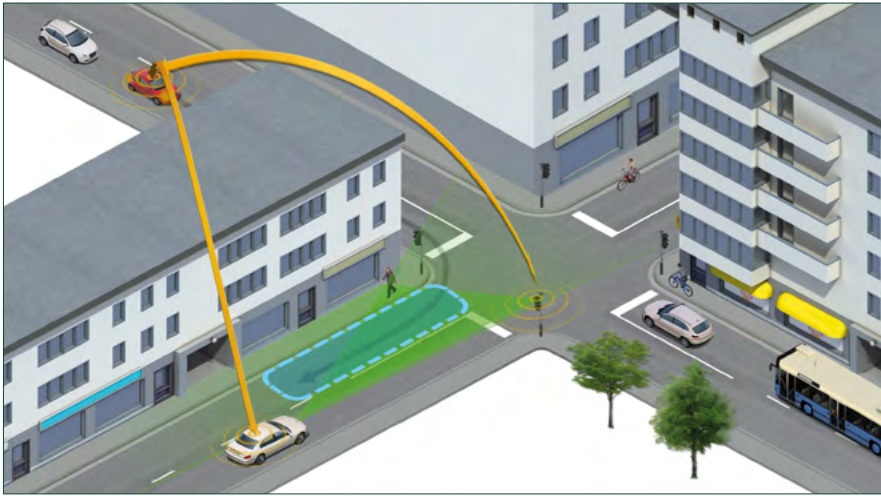


Figure 5: *Collective Perception allows traffic participants to share information regarding detected objects. It is also known as sensor data sharing. Adopted from [6].*

ciency of connected ADAS functionalities. Furthermore, Collective Perception is expected to significantly lower the required market penetration of V2X systems. While Cooperative Awareness only provides a thorough environmental perception once all traffic participants are V2X capable, Collective Perception requires only a fraction of the traffic participants to be equipped to achieve this goal (cf. next section). First standards for Collective Perception have been released in Europe, USA, and China, making use of the Collective Perception Message (CPM), the Sensor Data Sharing Message (SDSM), and the Sensor Sharing Message (SSM) respectively. The services generate these messages in a quasi-periodic manner, including detected objects and perceived regions with a frequency between 1 and 10 Hz, based on their dynamics. In

view of the importance of the service and the amount of data it may have to convey in complex high-density traffic scenarios, it is expected to consume a significant amount of communication resources^[9]. For this reason, a smart resource allocation is required. The development and analysis of such a mechanism is subject of the next section of this article.

Fig. 5 shows a child playing with a ball at a bus stop. The bus occludes the line-of-sight of the blue vehicle's driver or ADAS system. This potentially dangerous situation can be overcome by Collective Perception, where the V2X equipped bus detects the playing child and broadcasts its state together with other objects. The blue vehicle receives the transmitted CPMs and includes the child into its Local Dynamic Map (LDM), allowing



it to react accordingly. Besides allowing to share information about detected traffic-relevant objects, Collective Perception also enables the sharing of driveable regions, as indicated in blue in Fig. 6. While the sharing of objects is relevant, e.g., for Connected Automatic Engine Braking (C-AEB), the sharing of driveable regions allows vehicles to drive. Sole object sharing would not be sufficient for the latter, as the absence of detections may either indicate the absence of objects or incomplete detection capabilities of the transmitter in that region (e.g., due to an occluding object hindering the line of sight or as a result of an unknown object class). Thus, both data types are of high importance for traffic safety and efficiency, making them essential constituents of Collective Perception.

Manoeuvre Coordination

Among the Day 3 services, probably the most prominent one is the Manoeuvre Coordination service. By making use of this service, connected stations may engage in advanced AD functions, such as cooperative left turning (see Fig. 7, p. 74), highway merging, and overtaking on country roads. Some of the main drivers of this development have been the V2I-based EU-funded project TransAID, the French PAC-V2X, and the V2V-based German project IMAGinE. The service involves the exchange of potentially driveable trajectories among ITS stations. Despite a first finalized early standard in the USA, format and generation rules of the Manoeuvre Coordination Messages (MCMs)

Figure 6:

Collective Perception additionally allows traffic participants and infrastructure to share driveable regions, an increasingly important data class.

” Collective Perception allows to “see through the eyes of others”. “

Florian Schiegg

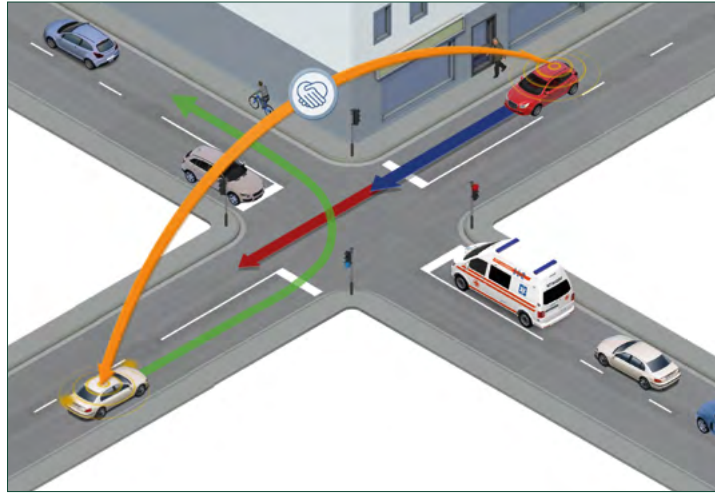


Figure 7:
Maneuver Coordination allows vehicles to optimize their driving behavior through cooperation. Adopted from [6].

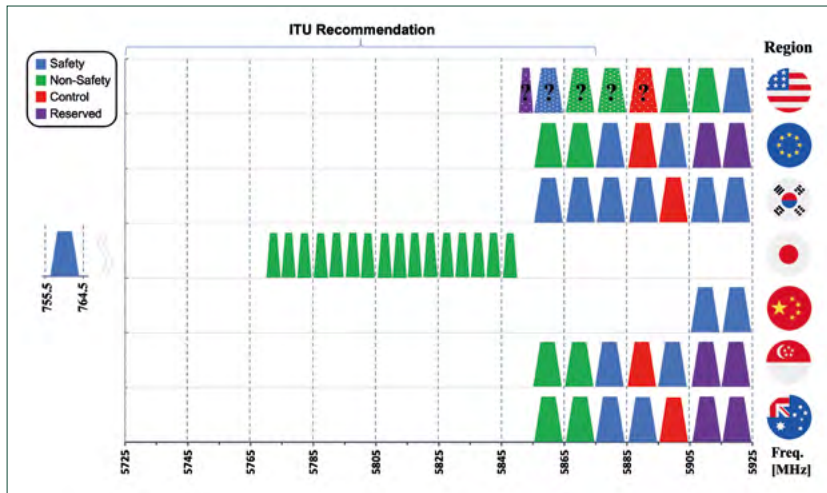
are still under development, and a deployment of the service is not expected before 2030. This is also due to the required high automation of the involved traffic participants, as they need to coordinate their driving behaviour automatically. A simple form of cooperation is visualized in Fig. 7, where the white vehicle, driving at a high speed, requests right of way permission from the slower red vehicle by means of a so-called request trajectory (green) after detecting a collision with the reference trajectory (red) periodically broadcasted by the red vehicle. After confirmation by the latter through the adjustment of its reference trajectory (blue), only a small change in speed by the red vehicle is required to perform the manoeuvre.

The Challenge of Limited Communication Resources

The efficiency and reliability of these V2X services are critically dependent on the effective utilization of the communication channels available in the different regions of the world (see Fig. 8). The spectrum allocated for C-ITS applications is inherently limited, and as the number of connected vehicles and services increases, the demand for bandwidth intensifies. This creates a significant challenge: how to ensure that the most critical and relevant information is transmitted and received in a timely manner, without too many packets being lost as a product of saturated communication resources.

”Anonymization is of central importance for C-ITS, especially in Europe.”

Florian Schiegg



Uncoordinated or excessive use of the communication channel can lead to network congestion, increased latency, and ultimately, the degradation of service quality^[10]. In extreme cases, critical safety messages could be delayed or lost, undermining the very purpose of V2X communications.

To address this challenge, the concept of Value of Information (VoI) becomes particularly relevant. The VoI is a measure that reflects the importance or usefulness of a piece of information in a given context, particularly in terms of its impact on situational awareness and decision-making processes. In the context of C-ITS, the VoI can be used to prioritize messages or parts of their content that are most critical for ensuring traffic safety, thereby optimizing the use of the available C-ITS bandwidth^[11].

With the purpose of maximizing the VoI shared among connected stations, C-ITS systems can employ algorithms that dynamically assess the importance of each piece of information based on current traffic conditions, vehicle states, and other relevant factors. These algorithms can then adjust the content, priority and frequency of messages accordingly.

For example, in a scenario involving Collective Perception, where vehicles and infrastructure share sensor data to create a comprehensive environmental view, VoI optimization can ensure that only the most relevant data is transmitted. This might involve prioritizing sensor data that reveals an unexpected hazard or a pedestrian hidden from a vehicle's direct line of sight, while less critical information, such as concerning

Figure 8: RF spectrum allocated to ITS applications in various regions of the world, adopted from [1].

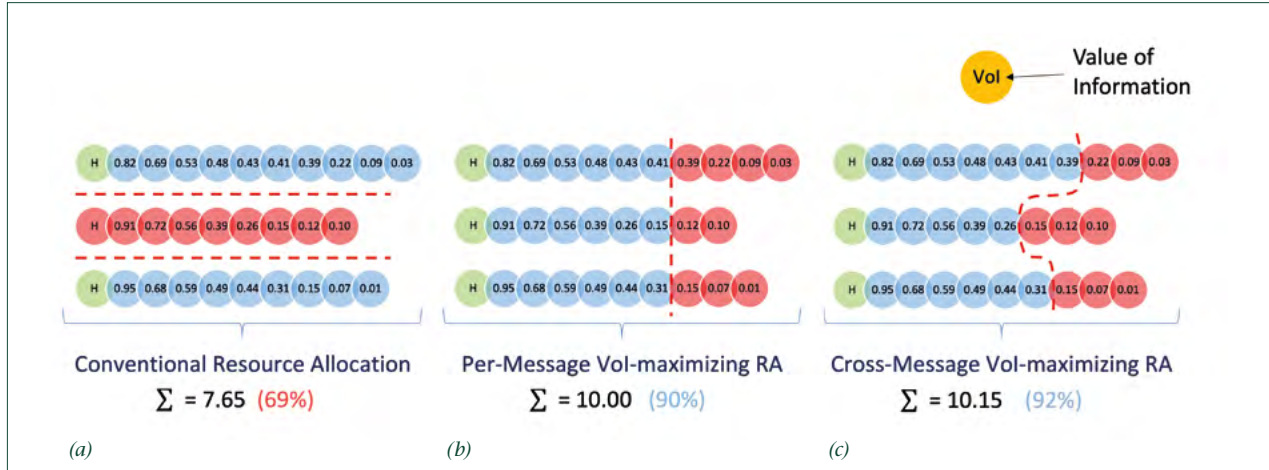


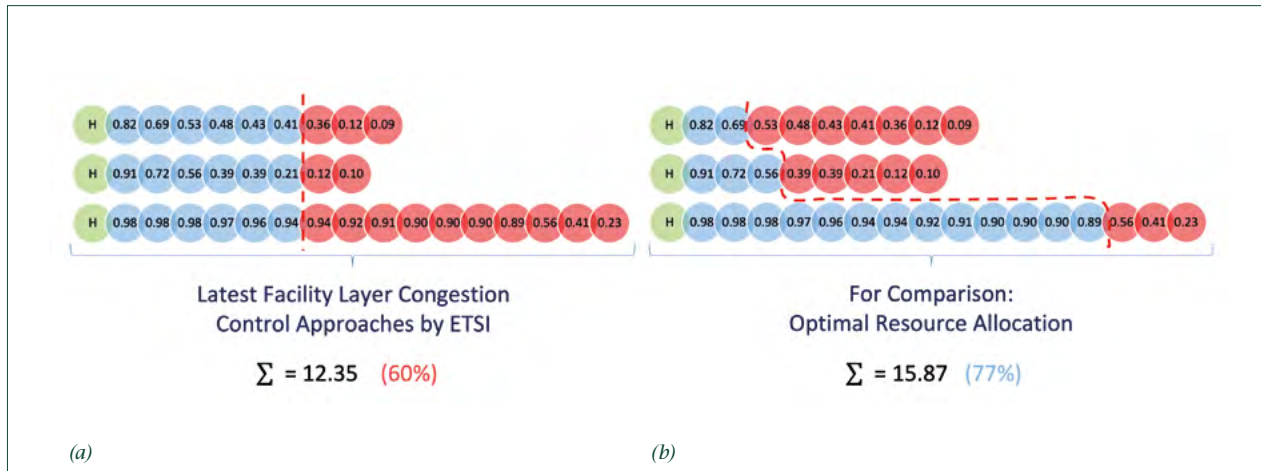
Figure 9:
Value of information conveyed within a C-ITS network under constrained communication resources for (a) conventional, (b) per-message VoI-optimizing, and (c) inter-message VoI-optimizing resource allocation.

properly parked vehicles, is transmitted at a lower frequency or aggregated before transmission.

For the other awareness messages, such as CAM, VAM, and DENM, VoI optimization can be integrated alongside CPM, allowing for a unified approach to enhancing environmental awareness. By optimizing the VoI across all these services, C-ITS systems can ensure that the most critical information is prioritized regardless of the message type. This cross-service optimization ensures a comprehensive and cohesive understanding of the environment, enabling vehicles and infrastructure to significantly enhance the completeness and accuracy of their LDMs.

A simple visualization of the great potential of a VoI-aware resource allocation is present-

ed in Fig. 9. It shows three dissemination strategies for data with heterogeneous VoI: (a) conventional VoI-agnostic data selection, (b) per-message VoI-optimizing data selection, and (c) cross-station VoI-optimizing data selection. Each scenario shows the same three V2X messages (each of these messages could belong to another V2X service and/or C-ITS station), with a mandatory message header and individual payloads. The payload is depicted by spheres with the corresponding VoI assigned to each, based on the contained data. Furthermore, the number of communication resources (spheres) is limited, with an upper limit of 21 in this example. In the following, the strategies to select the data to be transmitted with the given constraints are discussed.



Conventional resource allocation methods usually rely on fix message generation rules and are, to a large extent, VoI-agnostic. Simple methods generate data only complying with regulatory requirements, but do not take into account the number of available resources. In this case, data is lost due to packet collisions and interference instead of active selection. Other methods, such as LIMERIC and A-DCC (see [1]), monitor the number of available resources, queuing and dropping messages to comply to a certain channel load, referred to as target Channel Busy Ratio (CBR_{tar} , see Fig. 11a). The result of all these conventional methods is that certain (random!) messages will not reach the receivers. Fig. 9a) shows that this leads to an effective VoI dissemination of 69% in our scenario.

More sophisticated methods take into account the VoI of the available data as well as the number of available resources, with the latter usually being estimated based on the CBR. These can either perform a per-message VoI optimization, assigning the same number of resources to each message, or optimize the disseminated VoI across all connected stations and services, assigning the same minimum-necessary VoI threshold to each message. An example is the VALUE of INformation Driven Resource Allocation (VALIDRA) protocol [1], which supports both dissemination methods. As can be seen in Fig. 9b) and Fig. 9c), this leads to VoI dissemination efficiencies of 90% and 92% respectively.

This simple example proves the importance of intelligent dissemination strategies to

Figure 10: Highly heterogeneous knowledge distribution within a C-ITS network performing (a) per-message VoI-optimizing, and (b) inter-message VoI-optimizing resource allocation.

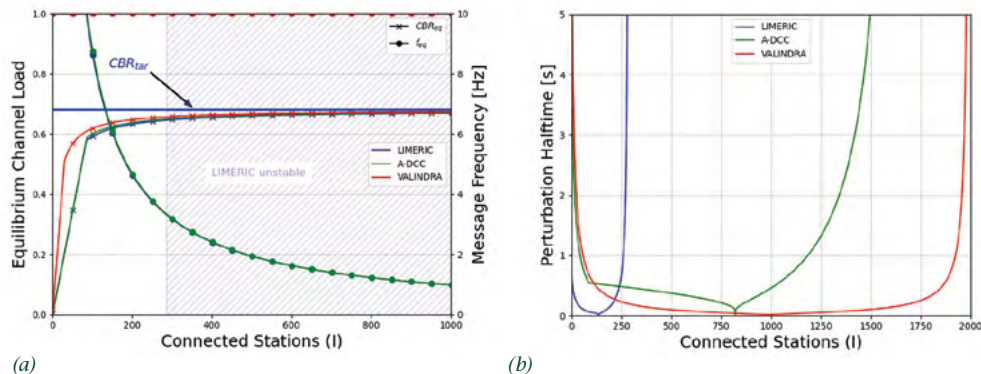
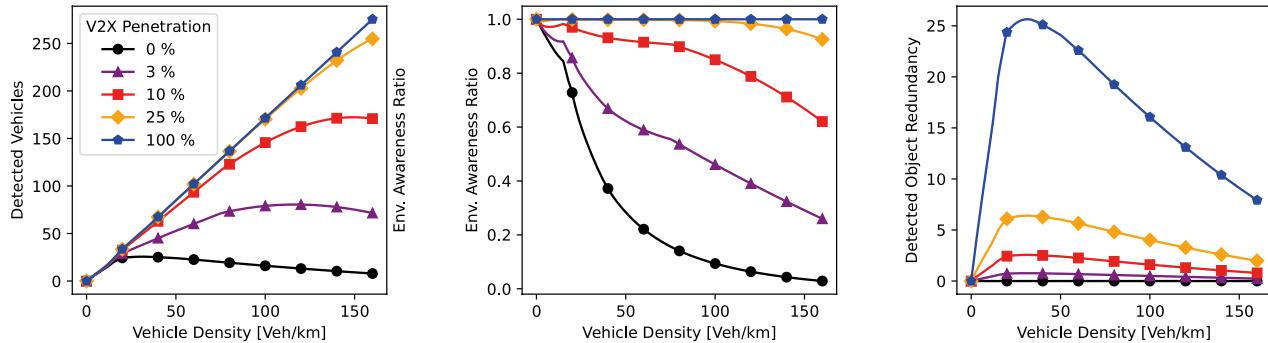


Figure 11: Protocol performances in terms of (a, left) equilibrium CBR and average message frequency, and (b, right) convergence speed as a function of the number of connected stations. Adopted from [1].

maximize the value of the information shared within the C-ITS network. For even more heterogeneously distributed data, as could be the case considering the much better perception capabilities of strategically placed infrastructure systems as compared to vehicles or bicycles, the benefit of protocols such as VALINDRA is even higher. (compare Fig. 10a and Fig. 10b). Besides optimizing the shared value of information, in real traffic scenarios with a multitude of connected stations it is essential to ensure the stability, closeness to the optimum CBR and a sufficient convergence speed of all deployed protocols. Fig. 11 compares some of the briefly introduced protocols LIMERIC, A-DCC and VALINDRA, showing that VALINDRA outperforms LIMERIC and A-DCC in all metrics and for almost all numbers of connected stations.

Example: VoI in Sensor Data Sharing

Conventional automotive sensor systems, such as those relying on cameras, radars, and LiDARs, face significant limitations primarily due to their dependence on line-of-sight (LOS) conditions. These systems are vulnerable to occlusions caused by nearby vehicles, buildings, or other obstacles, leading to incomplete or inaccurate environmental models. The field-of-view (FOV) of these sensors can be easily obstructed, preventing them from detecting objects outside their direct line of sight. As a result, conventional systems can only maintain an accurate perception of the environment when there is minimal obstruction, which is often not the case in dense traffic scenarios. This limitation reduces the reliability of ADAS and AD systems, as the vehicle may



miss detecting critical objects or hazards, compromising safety.

Additionally, the perception capabilities of a vehicle significantly depend on traffic density. As traffic density increases, so does not only the number of vehicles in proximity, but also the obstruction of the LOS. In scenarios where environmental awareness relies solely on onboard sensors (equivalent to a V2X market penetration of 0%), the number of detected objects increases only to the point where LOS occlusions become dominant. Thus, higher traffic densities may severely impact the Environmental Awareness Ratio (EAR), i.e. the fraction of detected traffic participants and objects in the vicinity (see Fig. 12b), and the Detected Object Redundancy (DOR), i.e. the number of additional information sources per

traffic-relevant object (see Fig. 12c). For example, at 0% V2X market penetration, the vehicle's environmental awareness diminishes rapidly with increasing traffic density, limiting the detection to only the nearest neighbors. Moreover, the DOR remains at zero, as the vehicle can only rely on information from its sensors.

As the V2X market penetration rises, the number of detected vehicles increases, leading to a significant improvement in the EAR. Already with a market penetration of 25%, the environmental awareness does not fall below 90%. However, while the DOR at first increases strongly, it is then subject to a fast decay as each vehicle will be detected by fewer other vehicles (comparable to 0% line in Fig. 12a).

Figure 12: Expected number of vehicles contained in a vehicles GEM (left), Environmental Awareness Ratio (EAR, middle), and Detected Object Redundancy (DOR, right) depending on the V2X penetration rate for a five-lane highway (Radar). Adopted from [12].

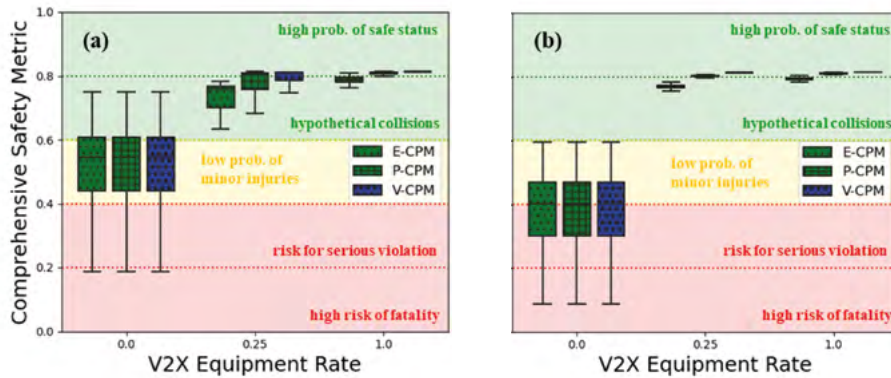


Figure 13:
*Highway scenario perceived
by a vehicle in adverse
weather conditions [13].*

While metrics like the EAR and DOR provide valuable insights into the effectiveness of vehicle perception systems, they fall short in fully capturing the safety implications of these systems. Specifically, these metrics do not account for the traffic relevance of detected objects. For example, detecting vehicles directly ahead is critical, but it is equally if not more important to detect vehicles in front of the vehicle ahead (*cf. Fig. 13*), as this information significantly enhances reaction time and overall safety. Additionally, the EAR and DOR metrics do not consider the dynamics of the traffic environment, such as the relative speeds and trajectories of surrounding vehicles, nor do they account for the accuracy of object detection. Without incorporating these factors, these metrics offer an incomplete picture of the safety enabled by the perception system, under-

scoring the need for a more comprehensive approach. This assessment gap is filled by the Comprehensive Safety Metric (CSM), as it integrates these critical aspects to provide a more accurate and meaningful assessment of a vehicle's safety performance.

To ensure high awareness levels in scenarios like *Fig. 13*, Collective Perception only needs one cooperative vehicle to share the relevant information, while e.g., Cooperative Awareness would require all vehicles to be equipped. *Fig. 14* helps evaluating the effectiveness of Collective Perception by showing the CSM for (a) low-density and (b) high-density highway scenarios. The CSM is computed for different V2X equipment rates and the three previously introduced dissemination modes, namely (i) ETSI CPM implementation based on A-DCC (E-CPM,



cf. Fig. 9a), (ii) a per-station implementation of VALINDRA (P-CPM, cf. Fig. 9b), and (iii) a full VALINDRA-based implementation (V-CPM, cf. Fig. 9c).

As expected, vehicles relying solely on their onboard sensor system face significant safety challenges. In low-density traffic, the CSM predicts a serious risk of safety violations (CSM Level II: “bad”) for nearly 25% of the driving time. Additionally, there is a moderate risk of minor injuries (CSM Level III: “good”) during 50% of the time, while the remaining 25% of the time involves a hypothetical risk of collisions without injuries (CSM Level IV: “very good”). High-density traffic is even more problematic, as the reduced perception range combined with closer inter-vehicle distances severely compromises safety. In this scenario, the

360° sensor system provides “bad” or even “insufficient” safety for more than half of the driving time.

The introduction of Collective Perception notably enhances traffic safety regardless of the examined CPM dissemination mode. As for the EAR at a 25% equipment rate, all modes deliver very good safety in both traffic scenarios, with V-CPM even leading to excellent safety most of the time. As could also be expected, full V2X equipment of the traffic also leads to excellent safety in most cases. These findings highlight the significant safety benefits of increasing V2X equipment rates beyond 25%, challenging earlier conclusions based solely on simpler metrics like EAR and DOR.

Figure 14: Comprehensive Safety Metric for (a) the low-density scenario and (b) the high-density scenario obtained with the investigated CPM dissemination modes showing the corresponding safety levels as stated in [14].

Conclusion – Let those talk who have the most relevant to share!

Traffic poses one of the greatest challenges for modern society, impacting lives through fatalities, significant economic losses, environmental damage, and the vast amount of time people spend in traffic jams. C-ITS represent the most promising solution to these challenges, enabling connected vehicles and infrastructure to share crucial traffic-related information via

V2X communication. Among these technologies, Collective Perception stands out, allowing vehicles to share sensor data, including information

about perceived objects and drivable regions, which significantly enhances overall traffic safety and efficiency.

However, given the large amount of information generated by each node in the communication network, a smart allocation of

communication resources is crucial to optimizing the environmental awareness of connected vehicles. To address this, various VoI-based mechanisms have been developed, which prioritize and allocate communication resources based on the relevance of the shared data. Studies have demonstrated that these mechanisms can substantially enhance traffic safety, often through a simple software update, making them a highly efficient and cost-effective solution.

Currently, one of these VoI-based mechanisms is already becoming part of the European standard for Collective Perception, and others may soon follow. These advancements in C-ITS, where those with the most critical information lead the communication, have the potential to revolutionize traffic management, significantly reducing accidents, improving traffic flow, and ultimately making our roads safer for everyone.

”Let those do the talking who have the most relevant to share!”

Florian Schiegg

References

- [1] F. Schiegg, „Vehicular Networks: A Value of Information Driven Distributed Resource Allocation Protocol (VALINDRA),“ Gottfried Wilhelm Leibniz Universität, Diss., Hannover, 2022.
- [2] World Health Organization (WHO), „Global Health Estimates 2019: Deaths by Cause, Age, Sex, by Country and by Region, 2000–2019,“ World Health Organization, Geneva, 2020.
- [3] F. A. Schiegg, D. Bischoff, J. R. Krost und I. Llatser, „Analytical Performance Evaluation of the Collective Perception Service in IEEE 802.11p Networks,“ in IEEE Wireless Communications and Networking Conference (WCNC), Seoul, Korea (South), 2020.
- [4] F. A. Schiegg, N. Brahmi und I. Llatser, „Analytical Performance Evaluation of the Collective Perception Service in C-V2X Mode 4 Networks,“ in IEEE Intelligent Transportation Systems Conference (ITSC), Auckland, New Zealand, 2019.
- [5] J. Thunberg, D. Bischoff, F. A. Schiegg, T. Meuser und A. Vinel, „Unreliable V2X Communication in Cooperative Driving: Safety Times for Emergency Braking,“ IEEE Access, Nr. 9, pp. 148024-148036, 2021.
- [6] F. A. Schiegg, S. Ollander, S. Li, D. Pototzky und I. Llatser, „Collaborative Localization: A new promising V2X Service,“ in 27th ITS World Congress and Exhibition, Hamburg, Germany, 2021.
- [7] F. A. Schiegg, J. Krost, S. Jesenski und J. Frye, „A Novel Simulation Framework for the Design and Testing of Advanced Driver Assistance Systems,“ in IEEE 90th Vehicular Technology Conference (VTC2019-Fall), Honolulu, HI, USA, 2019.
- [8] F. A. Schiegg, I. Llatser, D. Bischoff und G. Volk, „Collective Perception: A Safety Perspective,“ Sensors, Bd. 21, Nr. 1, p. 159, 2020.
- [9] E. Xhoxhi und F. A. Schiegg, „A First Study on the Spectrum Needs for Release 2 V2X Services,“ in IEEE 98th Vehicular Technology Conference (VTC2023-Fall), Hong Kong, Hong Kong, 2023.
- [10] D. Bischoff, F. Schiegg, T. Meuser und R. Steinmetz, „Impact of Imperfect Communication on Cooperative Vehicular Maneuvering at Intersections,“ in IEEE VTC2020-Spring, Antwerp, Belgium, 2020.
- [11] D. Bischoff, F. A. Schiegg, D. Schuller, J. Lemke, B. Becker und T. Meuser, „Prioritizing Relevant Information: Decentralized V2X Resource Allocation for Cooperative Driving,“ IEEE Access, Bd. 9, pp. 135630 - 135656, 2021.
- [12] F. A. Schiegg, I. Llatser und T. Michalke, „Object Detection Probability for Highly Automated Vehicles: An Analytical Sensor Model,“ in 5th International Conference on Vehicle Technology and Intelligent Transport Systems (VEHITS2019), Heraklion, Crete - Greece, 2019.
- [13] G. Volk, Q. Delooz, F. A. Schiegg, A. V. Bernuth, A. Festag und O. Bringmann, „Towards Realistic Evaluation of Collective Perception for Connected and Automated Driving,“ in IEEE International Intelligent Transportation Systems Conference (ITSC), Indianapolis, IN, USA, 2021.
- [14] G. Volk, J. Gamerding, A. v. Bernuth und O. Bringmann, „A Comprehensive Safety Metric to Evaluate Perception in Autonomous Systems,“ in 2020 IEEE Intelligent Transportation Systems Conference (ITSC), Rhodes, Greece, 2020.

