

IC-MPPE
Integrated Computational
Materials Process and Product
Engineering.

Programm: COMET – Competence
Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekttyp: Hybrid20, 01/2022-
12/2026, strategisch



Bild: Tara Winstead auf Pexels

NUTZUNG PROBABILISTISCHER PROGRAMMIER- SPRACHEN FÜR MATERIALMODELLE

FORSCHER:INNEN DES MCL UND DER TU WIEN NUTZEN NEUE
PROGRAMMIERSPRACHEN UM MATERIALMODELLE AUSSAGEKRÄFTIGER ZU
MACHEN

Wissenschaftler:innen nutzen seit jeher mathematische Modelle um Forschungsfragen zu bearbeiten. Oft werden dabei bekannte Zusammenhänge in Gleichungen formuliert und damit virtuelle Experimente durchgeführt. Ein Aspekt dabei ist die Betrachtung von Unsicherheiten. Beispielsweise kann eine Eingangsgröße des Modells aufgrund von Messfehlern schwanken und man möchte verstehen, wie sich diese Schwankung auf das Ergebnis auswirkt. Oft wird auch die umgekehrte Frage gestellt: Angenommen das Endresultat ist bekannt, mit welcher Sicherheit kann man dadurch auf die Werte der Eingangsgrößen schließen?

Obwohl die Theorie zu dieser Art von Fragestellungen existiert (Probabilistische Modelle), hat es in der Vergangenheit an praktischen Möglichkeiten der Programmierung und numerischer Lösungsverfahren gefehlt. In den letzten Jahren haben spezialisierte Programmiersprachen für probabilistische Modelle, kurz PPLs, allerdings große Fortschritte gemacht. Forscher des Materials Center Leoben (MCL) haben sich mit Kollegen:Kolleginnen der Fakultät für Informatik der TU Wien zusammengetan um probabilistische Programmiersprachen auf material-wissenschaftliche Problemstellungen anzuwenden. Dabei werden einerseits offene Forschungsfragen der Materialwissenschaftler:innen bearbeitet, andererseits wird aber auch der Frage

SUCCESS STORY



nachgegangen, wie probabilistische Programmiersprachen weiterentwickelt werden können. Besonderes Augenmerk wird dabei auf Zusatzfähigkeiten der Programmierumgebungen gelegt. Beispielsweise der Visualisierung von probabilistischen Modellen oder neue Möglichkeiten der Fehlersuche. Prof. Jürgen Cito sagt dazu: „PPLs haben sich rasant entwickelt. Jetzt ist es an der Zeit, zusätzliche Werkzeuge zu schaffen um den Menschen den effektiven Einsatz zu ermöglichen.“

Wirkungen und Effekte

Ein gut beschriebenes und ausführbares probabilistisches Modell ist ein mächtiges Werkzeug für viele Forschungsaufgaben. Zum Beispiel für die Versuchsplanung. Ein probabilistisches Modell kann dabei helfen, zielgerichtet Experimente zu planen, welche ein Maximum an Informationen liefern, wodurch die Kosten für Experimente reduziert werden können. Ein weiterer Nutzen ist das bessere Identifizieren von Aussagen, welche mit aktuellem Wissensstand schon mit großer Zuverlässigkeit

getroffen werden können. Dies erleichtert das Überleiten von Forschungsergebnissen in die Praxis, während an offenen Fragen weiter geforscht wird.



Bilder der beteiligten Forscher:innen, Zusammenstellung: MCL

Am MCL werden die neuen Modelle bei der raschen- mit künstlicher Intelligenz (KI) gestützten - Entwicklung von neuen Materialien (Legierungen) eingesetzt, wo geringe Abweichungen in der Zusammensetzung sehr hohe Effekte auf die Materialeigenschaften haben.

Projektkoordination (Story)

Dr. Julien Magnien
Group Leader Services
Department Microelectronics
Materials Center Leoben Forschung GmbH
T +43 (0) 3842 45922-531
Julien.Magnien@mcl.at

IC-MPPE / COMET-Zentrum

Materials Center Leoben Forschung GmbH
Roseggerstrasse 12
8700 Leoben
T +43 (0) 3842 45922-0
mclburo@mcl.at
www.mcl.at

Projektpartner

- Technische Universität Wien, Österreich
- Universität Heidelberg, Deutschland
- FH JOANNEUM GmbH, Österreich
- Montanuniversität Leoben, Österreich
- Technische Universität Graz, Österreich
- Linz Center of Mechatronics GmbH, Österreich

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMAW, und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt.