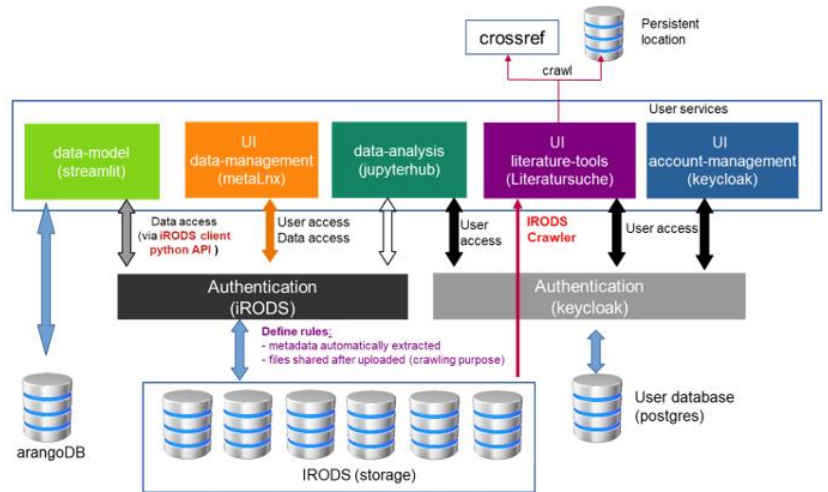


IC-MPPE
Integrated Computational
Materials Process and Product
Engineering.

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekttyp: MCacceL, 2021-2026, strategisches Projekt



Architektur der MCL-Materialentwicklungsplattform ALPmat. Bild: MCL

SOFTWARE-PLATTFORM FÜR KI-BASIERTE MATERIALENTWICKLUNG

AM MCL WIRD BESTEHENDES MATERIALWISSEN MIT KÜNSTLICHER INTELLIGENZ VERBUNDEN, UM DIE MATERIALENTWICKLUNG DEUTLICH ZU BESCHLEUNIGEN.

Bei vielen modernen Materialien sind sowohl die Zusammensetzung als auch der Herstellungsprozess komplex. Deshalb ergibt sich eine riesige Anzahl an Möglichkeiten, die Materialeigenschaften zu verbessern. Gleichzeitig ist die Materialherstellung und -charakterisierung oft mit erheblichem Ressourceneinsatz verbunden. Der Einsatz von Methoden der künstlichen Intelligenz (KI) ist hier vielversprechend, stößt aber auch an seine Grenzen, weil die Anzahl der verfügbaren Datenpunkte sehr gering ist. Deshalb gilt es, das bestehende Wissen sowohl in der Form von Daten als auch in Form von physikalischen Zusammenhängen bestmöglich auszunutzen. Das wird durch die Plattform für beschleunigte Materialentwicklung namens ALPmat ermöglicht, die im Rahmen des Projektes MCacceL am MCL aufgebaut wird. Der Name ALPmat leitet sich von „Active Learning Platform for Materials Development“ ab.

Beim Active Learning handelt es sich um eine KI-Methode, bei der ein Algorithmus iterativ dazulernt

(s. Abb. 1). Nachdem das Design-Ziel definiert ist, wird unter Berücksichtigung des bestehenden Wissens ein Modell erstellt, das die bestehenden Daten beschreibt und die Eigenschaften neuer Daten vorhersagt.

Mithilfe dieses Modells werden Vorschläge für neue Zusammensetzungen oder Prozessparameter gemacht. Anhand dieser Vorschläge werden neue Materialien hergestellt und

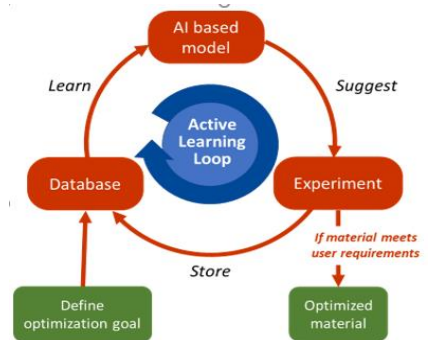


Abb. 1: Der Active Learning Loop.

SUCCESS STORY

charakterisiert, wodurch sich die Anzahl der Datenpunkte erweitert. Damit wird das Modell verbessert (das Modell „lernt“ von den neuen Daten) und die nächste Iteration gestartet. So kann Entwicklungsprozess deutlich verkürzt werden.

Die Materialbeschleunigungsplattform ALPmat muss eine Reihe von Aufgaben und Anforderungen erfüllen. Dazu zählen das automatisierte Hochladen, Speichern und der Austausch von Daten samt Metadaten aus Messung und Simulation, die dann verarbeitet, visualisiert und in die KI-Algorithmen eingespeist werden können. Zudem muss die Plattform die Zusammenarbeit vieler Anwender:innen aus den Bereichen Materialherstellung, Charakterisierung, Simulation und datengestützter Modellierung ermöglichen. Schließlich muss sie erweiterbar sein und in Bezug auf die Datensicherheit den neuesten Stand der Technik erfüllen. Bei der ALPmat wird dies durch einen modularen Aufbau und die Virtualisierung auf mehreren Ebenen erreicht (Bild ganz oben).

Wirkungen und Effekte

Standardisierte Daten samt Metadaten aus Messung und Simulation können automatisiert hochgeladen

und durch digitalisierte Literaturdaten ergänzt werden. Alle verfügbaren Daten lassen sich einfach analysieren und verarbeiten. Zudem bietet die ALPmat die Möglichkeit, die Daten anhand von KI-basierten Algorithmen auszuwerten, das gewonnene Wissen mit empirischen Gleichungen zu verknüpfen und dadurch die Eigenschaften bisher unbekannter Materialien am Computer vorherzusagen. Durch ein Datenmodell werden die experimentellen Abläufe am Computer abgebildet und jedes Messergebnis eindeutig einer gemessenen Probe und ihrem Zustand zugeordnet. Außerdem ermöglicht es das Datenmodell, die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Messungen und Probenzuständen zu beschreiben.

Die ersten Anwendungsfälle für die ALPmat sind die Verbesserung der Energiespeichereigenschaften von perowskitischen Materialien für die Kurzzeitspeicherung und Umwandlung von elektrischer Energie sowie die Duktilisierung hochfester bainitischer Stähle, die uns z.B. als Gebirgsanker in unseren Tunneln erhöhte Sicherheit geben. Der ersten Iterationen haben bereits vielversprechende Ergebnisse geliefert. Die ALPmat wird am MCL in neuen Forschungsprojekten angewandt und künftig auch über Lizenzierung für die Allgemeinheit zur Verfügung gestellt werden.

Projektkoordination (Story)

Dr. Jürgen Spitaler
Key Scientist Computational Materials Design
Materials Center Leoben Forschung GmbH
T +43 (0) 3842 45922-70
Juergen.spitaler@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

- Know-Center GmbH, Graz, Österreich
- Monanuniversität Leoben, Österreich
- University of British Columbia, Vancouver, Kanada
- Technische Universität Wien, Österreich
- KTH Stockholm, Schweden
- Czech academy of sciences, Institute of Physics of Materials, Brno, Tschechische Republik

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.

SUCCESS STORY



 **Bundesministerium**
Klimaschutz, Umwelt,
Energie, Mobilität,
Innovation und Technologie

 **Bundesministerium**
Arbeit und Wirtschaft



Österreichische
Forschungsförderungsgesellschaft mbH
Sensengasse 1, A-1090 Wien
T +43 (0) 5 77 55 - 0
office@ffg.at
www.ffg.at