

IC-MPPE
Integrated Computational
Materials, Process and Product
Engineering

Programm: COMET – Competence
Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-K2 Zentrum

Projekttyp: P1.1 Atomic-Nano-
Micro, 2017-2021, strategisch



Logo des MCL Software Pakets GreenALM, Bild: MCL

GREENALM – EINE NEUARTIGE SOFTWARE FÜR DIE BERECHNUNG VON LEGIERUNGSEIGENSCHAFTEN

DAS MCL ENTWICKELT MIT DEM **GREENALM CODE** EINE NEUARTIGE SOFTWARE ZUR PARAMETERFREIEN BERECHNUNG VON LEGIERUNGSEIGENSCHAFTEN, DIE BEI EINEM HOCHKARÄTIG BESETZTEN HANDS-ON TUTORIAL EINEM INTERNATIONALEN PUBLIKUM ERFOLGREICH VORGESTELLT WURDE.

Das MCL ist bereits seit 15 Jahren in der atomistischen Modellierung von Legierungseigenschaften aktiv. Einen besonderen Schwerpunkt bilden dabei sogenannte Ab-initio-Methoden: Diese Methoden beruhen allein auf grundlegenden physikalischen Gleichungen und ermöglichen die Vorhersage von Materialeigenschaften ohne Verwendung experimenteller Parameter. Eine besondere Variante der Ab-initio-Methoden basiert auf einer Implementierung der sogenannten *Green's-Funktions-basierten Dichtefunktionaltheorie* und hat besondere Stärken, wenn es darum geht, Legierungen mit vielen verschiedenen Komponenten oder komplexen magnetischen Eigenschaften zu berechnen. Diese besondere Methode wird auch im GreenALM-Code verwendet, der seit 2017 am MCL

von einem Entwicklerteam rund um Dr. Oleg Peil entwickelt wird. GreenALM steht für „**Green's** function based **Alloy Modeling**“ und ist in der Lage, auch die Eigenschaften komplexer Materialien wie Stähle oder Hochentropielegierungen effizient vorherzusagen, bei denen konventionelle Ab-initio-Programme oft an ihre Grenzen stoßen.

Nach einer Entwicklungszeit von zweieinhalb Jahren fand 2019 ein erster MCL-interner Workshop statt. Nach weiteren Verbesserungen von GreenALM wurde im Oktober 2021 in Zusammenarbeit mit dem Psi-k Netzwerk und dem Team vom Vienna Scientific Cluster ein internationales virtuelles Hands-on Tutorial durchgeführt. Bei diesem Tutorial stellten einerseits international führende Forscherinnen und

SUCCESS STORY

Forscher Grundlagen und moderne Anwendungen des atomistischen Modellierens von Legierungseigenschaften vor. Dabei erhielten die Teilnehmenden eine Einführung in den GreenALM Code und konnten anhand von einer Reihe von vorbereiteten Beispielen selbst Berechnungen mit dem Code erlernen und durchführen. Zu diesem Zweck erhielten die Teilnehmenden Zugriff zum Hochleistungsrechner VSC-4 in Wien und wurden in Kleingruppen von 4-7 Personen von MCL Tutoren persönlich betreut. Die Beispiele selbst wurden mithilfe sogenannter Jupyter-Notebooks durchgeführt, bei denen GreenALM-Berechnungen interaktiv in komplexere Berechnungsabläufe eingebettet und grafisch ausgewertet werden konnten.

Insgesamt registrieren sich 80 Personen aus 18 Ländern und allen Kontinenten für das GreenALM Tutorial, wobei die Teilnehmerzahl für den praktischen Teil auf 40 Personen begrenzt war. Das Feedback der Teilnehmenden war äußerst positiv, mit einer durchschnittlichen Bewertung von 8.76 von 10 Punkten (93% Rücklaufquote).

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

Projektpartner (Auszug)

- KTH Royal Institute of Technology, Schweden
- The University of British Columbia, Kanada
- Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Deutschland
- Academy of Sciences of the Czech Republic, Tschechien
- Montanuniversität Leoben, Österreich
- Österreichische Akademie der Wissenschaften, Österreich

Diese Success Story wurde von der Zentrumsleitung und den genannten Projektpartnern zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMDW, und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt. Weitere Informationen zu COMET: www.ffg.at/comet



Ein Ausschnitt der Teilnehmer am GreenALM Workshop 2021, Bild: MCL

Nähere Informationen finden sich auch unter <https://psi-k.net/report-on-the-virtual-psi-k-greenalm-hands-on-tutorial-2021/>

Im Zusammenhang mit dem Tutorial wurde auch die GreenALM-Webseite des MCL fertiggestellt (siehe <https://www.mcl.at/software/greenalm/>), die nähere Informationen darüber enthält, wie GreenALM funktioniert, was man damit tun kann und wie man eine Lizenz erwerben kann.