

MaterialDigital

Digitalisierung der Materialforschung





Vorwort

Mehr Fortschritt wagen – das steht über dem Koalitionsvertrag. Und wer wie ich will, dass dieses Motto Gestalt annimmt, der braucht dazu auch die Materialforschung. Denn sie ist ein entscheidender Taktgeber des Fortschritts. Sie lässt uns moderner, wettbewerbsfähiger und klimafreundlicher werden. Sie bringt die Medizin, die Elektromobilität und natürlich auch die Digitalisierung voran. Gerade die Digitalisierung ist es aber umgekehrt auch, die die Art und Weise fundamental verändert, wie wir künftig Materialien erforschen und wie wir sie entlang der Wertschöpfungskette verarbeiten können.

Dabei fällt auf: Die Grenzen zwischen dem physischen Material und den virtuellen Daten schwinden immer mehr. Denn Materialien dienen einerseits als Träger von Daten und Informationen. Und Daten werden andererseits immer häufiger zum virtuellen Abbild realer Werkstoffe und Komponenten – zu sogenannten digitalen Zwillingen. An die Stelle von langwierigen experimentellen Versuchsreihen treten dadurch zunehmend rechnergestützte Methoden. Das macht vieles leichter: Werkstoffe lassen sich viel schneller und effizienter designen, Fälle von Materialversagen besser prognostizieren und Schäden leichter vermeiden. So entstehen Produkte und Infrastrukturen, die sicher und zuverlässig sind. Das ist Fortschritt, wie wir ihn wollen.

Das Bundesministerium für Bildung und Forschung treibt die Digitalisierung der Materialforschung darum gezielt voran. Wir stärken damit unsere Position im globalen Wettbewerb und tragen zu einem technologisch souveränen Europa bei.

Die vorliegende Broschüre präsentiert unsere Förderinitiative „MaterialDigital“ mit der gleichnamigen Innovations- und Koordinationsplattform. Sie stellt die Projekte der ersten Förderrunde vor, durch deren Grundlagenarbeit neue digitale Methoden und Tools für die Materialforschung entstehen. Dabei haben wir stets im Blick, dass die Wirtschaft diese Ergebnisse optimal nutzen kann – insbesondere auch kleine und mittlere Unternehmen in den verschiedensten Branchen. Ihnen zeigen wir durch vielfältige Beispiele Potenziale und Anknüpfungspunkte für die eigenen Aktivitäten auf.

Liebe Leserinnen und Leser, hiermit lade ich Sie herzlich ein, an diesem Prozess mitzuwirken. Lassen Sie uns die digitale Transformation der Materialforschung gemeinsam gestalten. Lassen Sie uns die Initiative „MaterialDigital“ zu einem Erfolg machen. Lassen Sie uns mehr Fortschritt wagen.

Bettina Stark-Watzinger
Mitglied des Deutschen Bundestages
Bundesministerin für Bildung und Forschung

Inhaltsverzeichnis

Ziele und Inhalte der Förderinitiative

2

Die Innovationsplattform MaterialDigital	4
--	---

1 Projektbeschreibungen

6

1.1 Der Lebenslauf von Kupfer wird digital – für innovatives Materialdesign bis zum Recycling	6
1.2 Vom Stahlblech zur Crashsicherheit mit innovativen digitalen Strategien	8
1.3 Mit Hilfe Künstlicher Intelligenz zur Optimierung langlebiger Stahlbauteile	10
1.4 Neue Materialien für den 3D-Druck von Aluminium	11
1.5 Digitale Materialentwicklung für den industriellen metallischen 3D-Druck	13
1.6 Vollautomatisches intelligentes Expertensystem zur Hochdurchsatz-Glasentwicklung	15
1.7 Innovative Multilayerkeramiken für Kommunikation, Automobil und Energietechnik	17
1.8 Mit digitalen Methoden zur klimaverträglichen Kühlung der Zukunft	19
1.9 Digitalisierung smarter Materialien und ihrer Herstellungsprozesse	21
1.10 Besser und effizienter produzieren durch digitale Kautschukverarbeitung	22
1.11 Verlängerung der Lebensdauer von Windkraftanlagen mittels digitaler Zwillinge	24
1.12 Betondesign digital: Potenziale für das Bauwesen	26
1.13 Vorhersage der Qualitätseigenschaften von Lithium-Ionen-Batterien durch maschinelles Lernen	28
Projektübersicht	30

2 Glossar und Abkürzungen

32

Impressum

33



Ziele und Inhalte der Förderinitiative

Der rapide Wandel hin zu einer informationsbasierten und vernetzten Entwicklung und Produktion ist auch für die Materialforschung von besonderer Bedeutung, da zukünftig die theoretischen Simulationen mit praktischen Experimenten noch enger verzahnt und große Datenmengen einfacher bearbeitet werden müssen. So entsteht zu jedem Werkstoff ein „digitaler Zwilling“, der den gesamten Lebenszyklus eines Materials von seiner Produktion bis zum Recycling repräsentiert und den Einsatz von Energie und Ressourcen minimiert. Diese digitale Transformation verändert bestehende Produktionsweisen und Geschäftsmodelle von Grund auf. Dieses Potenzial soll nachhaltig adressiert und anwendungsorientiert genutzt werden.

Im Kontext dieses technologischen Wandels soll eine zielgerichtete Transformation der Materialforschung hin zu einer digitalisierten Multidisziplin erfolgen. Um dieses Ziel zu erreichen, wurde die BMBF-Initiative „MaterialDigital“ ins Leben gerufen. In diesem Rahmen sollen Datenstrukturen und Schnittstellen gemeinschaftlich erarbeitet und in konkreten Softwarewerkzeugen implementiert werden. Hierbei werden Beiträge aus allen mit der Materialentwicklung und -verarbeitung befassten Sektoren (von der Forschung

bis zur Herstellung) zusammengeführt. Unterstützt wird die Initiative durch die Innovationsplattform MaterialDigital. Ziele sind unter anderem die Durchdringung der deutschen und europäischen/internationalen Forschungs- und Industrielandschaft sowie ein Andocken an die Methoden von Industrie 4.0, um Fertigungsprozesse um die digitale Betrachtung des Materials zu ergänzen und sie damit vollständig digital abbilden zu können. Entwicklungszeiten können so perspektivisch deutlich reduziert werden.

Die ersten im Jahr 2021 gestarteten Projekte zur Förderung der digitalen Materialforschung sind multidisziplinäre akademische Verbünde, die digitale Methoden und Tools entwickeln, um Materialien im Hinblick auf konkrete industrielle Anwendungen zu etablieren oder signifikant zu verbessern. Grundlage hierfür ist die Etablierung eines einheitlichen Systems zur formalen Beschreibung von Materialien anhand von Begriffen und Daten sowie Regeln über deren Zusammenhang, das als sogenannte Materialontologie bezeichnet wird. Insgesamt fördert das BMBF in dieser ersten Ausschreibungsrounde 13 Projekte mit

einem Fördervolumen von rund 20 Millionen Euro. Mit dem zweiten Förderaufruf vom Juli 2021 werden gezielt Industrieunternehmen eingebunden, um die Anwendungsnähe der Projekte weiter zu steigern. Weitere Maßnahmen sind geplant, um Deutschland eine Vorreiterrolle in diesem Zukunftsfeld zu sichern. Übergreifendes Ziel ist es, die digitale Materialforschung als branchenübergreifende Schlüsseltechnologie zu etablieren und damit die Innovationsfähigkeit insbesondere von kleinen und mittleren Unternehmen (KMU) zu stärken.



Überblick zu Zielen, Inhalten und Akteuren der Fördermaßnahme MaterialDigital

Kontakt

Ansprechpartner für Fragen zur Fördermaßnahme MaterialDigital ist:
Dr. Stefan Pieper
Projektträger Materialien und Werkstoffe
VDI Technologiezentrum GmbH, Düsseldorf

E-Mail: pieper@vdi.de

Internet: werkstofftechnologien.de/programm/digitalisierung

Die Innovationsplattform MaterialDigital

Die Plattform MaterialDigital (PMD) steht für die vom BMBF geteilte Vision, in Deutschland einen industriell relevanten Werkstoffdatenraum zu schaffen. Als Kooperationsprojekt zwischen fünf großen deutschen Forschungsinstituten der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, (dem Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik, Karlsruher Institut für Technologie, Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Leibniz-Institut für werkstofforientierte Technologien sowie der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung) entwickelt die PMD gemeinsam mit der wissenschaftlichen Community eine geteilte digitale Plattform. Virtuelles Materialdesign entlang ganzer Wertschöpfungsketten und die digitale Begleitung von Materialien im Produktlebenszyklus sollen so der neue Standard werden. Um ein einheitliches, systematisches Vorgehen auf dem Weg zum virtuellen Material zu ermöglichen, entwickelt die PMD dabei skalenübergreifende Werkzeuge und Standards, mit denen die Digitalisierung der Materialien vorangebracht wird und ihren Weg in die industrielle Anwendung finden kann.

Materialforschungsdaten sollen dazu innerhalb der PMD „FAIR“ sein: die notwendigen Voraussetzungen, um Daten nachnutzbar zu machen, indem sie auffindbar (findable), zugänglich (accessible), interoperabel mit gängigen Verarbeitungsformen kompatibel (interoperable) und so letztlich wiederverwendbar (reusable) werden. Die Umsetzung dieses Ziels erfordert als Basis eine gemeinsame Sprache, sogenannte Materialontologien, deren Entwicklung als gemeinsame Anstrengung der gesamten materialwissenschaftlichen Community in Angriff genommen werden muss. Die PMD bringt mit diesem Ziel die Teilnehmerinnen und Teilnehmer aus der Industrie, der Forschung und internationalen Netzwerken zusammen und moderiert den Austausch: In einer ersten BMBF-Ausschreibungsrounde in Zusammenhang mit der PMD wurden beispielsweise Forschungsprojekte zum Lebenszyklus von Kupferlegierungen oder für den Baustoff Beton und entsprechende Ontologie-

entwicklungen für die Prozesskette der Herstellung und Verarbeitung angestoßen. Vergleichbare Projekte für andere Werkstoffe (z. B. Keramiken, Stähle, Batteriematerialien) und exemplarische Herstellungsarten (z. B. 3D-Druck) erweitern das Spektrum.

Neben den Daten sollen auch die Auswertungsrouter im Rahmen der Plattform in Zukunft „FAIR“ sein. Dazu werden in einer maßgeschneiderten Softwareumgebung Workflows bereitgestellt, die es erlauben, einzelne Prozessschritte in einer Kette nachvollziehbar und automatisiert ablaufen zu lassen. Die nach diesen Standards ausgelegten Methoden können in der Wissenschaft und der Industrie später um ein Vielfaches besser nachgenutzt werden, als es heute gängige Praxis ist.

Hierfür wird auch eine sichere und lokal zu implementierende Serverarchitektur entwickelt. Diese ermöglicht unterschiedlichen Usergruppen die lokale Speicherung ihrer Daten innerhalb eines vernetzten Datenraums. Sämtliche Ressourcen verbleiben immer in der Hand ihrer Urheber, die darüber entscheiden, ob und mit wem diese geteilt werden. Forschungseinrichtungen, Industrie und Mittelstand erhalten durch die PMD so einen universellen digitalen Werkzeugkasten, der es erlaubt, Forschungsergebnisse immer wieder neu zu verwenden oder gegebenenfalls durch neue Geschäftsmodelle weiter zu vermarkten, und zwar ohne Souveränität abzugeben.

Um in der digitalen Zukunft der industriellen Wertschöpfung angesichts beschleunigter Innovationszyklen nachhaltige und ressourcenschonende Lösungen zu entwickeln, ist die Digitalisierung der Materialwissenschaft der nächste große Schritt. Dies erfordert bereits im Entwicklungsprozess die breite Beteiligung vieler Stakeholder. Informieren Sie sich unter materialdigital.de über die Möglichkeiten der Mitgestaltung.

Kurzinterview mit Prof. Dr. Peter Gumsch
*Leiter des Fraunhofer-Instituts für Werkstoffmechanik (IWM)
und des Instituts für Angewandte Materialien am KIT
Sprecher der Plattform MaterialDigital*



Wo steht Deutschland/Europa in Bezug auf die Digitalisierung der Materialforschung im Vergleich zu anderen Wirtschaftsregionen (USA, Asien)?

Die USA und China haben bei den atomistischen Methoden zur Vorhersage von Molekül- oder Kristalleigenschaften einen Vorsprung gegenüber uns in Europa. Wenn es um die Veränderung des Materials in der Fertigung und die Verfolgung der sich ändernden Werkstoffeigenschaften bei der Bauteilherstellung oder im Einsatz geht, ist das anders. Hier sind wir vorne dran und leisten mit der PMD Pionierarbeit.

Was ist Ihre Vision für die Weiterentwicklung der Plattform in den nächsten fünf bis zehn Jahren?

Die PMD wurde zunächst mit fünf akademischen Einrichtungen konzipiert. Mit den ersten wissenschaftlichen Projekten schaffen wir jetzt exemplarische Lösungen für einzelne Werkstoffe oder Fertigungsschritte. Als Nächstes müssen exemplarisch industrielle Fertigungsketten ins Visier genommen werden, um perspektivisch einen Datenraum zu schaffen, der einen Werkstoff mit seinem digitalen Zwilling im gesamten Lebenszyklus verfolgen kann.

Wie können sich nicht direkt geförderte KMU im Bereich der Materialforschung beteiligen und welchen Nutzen bietet die Plattform?

Die PMD bietet schon heute ein öffentliches Forum für den Austausch innerhalb der Forschungscom-

munity rund um die Digitalisierung der Materialien. Über unsere Website wird man jederzeit mit aktuellen Informationen versorgt. Zusätzlich bietet die PMD auch niederschwellig direkte Austauschmöglichkeiten für sämtliche interessierten Stakeholder an.

Wie wird die Datensicherheit und -hoheit bei der Plattform sichergestellt?

Die PMD orientiert sich dazu am „Industrial Data Space“ (IDS), der durch ein starkes Netzwerk großer Unternehmen gestützt zum De-facto-Architekturstandard für Souveränitätsfragen beim Austausch von Industriedaten wird. Wir übertragen die Logik nun auf die Welt der Materialien. Ziel ist, Daten in der Hoheit des Datenerzeugers zu belassen und diesem so die volle Kontrolle zu geben, wem er welche Information zu welchem Zeitpunkt preisgeben will.

Welche Aktivitäten gibt es zur Anbindung an das Thema Industrie 4.0?

Erst durch eine durchgängige digitale Repräsentation von Materialien werden sich die Wertschöpfungspotenziale der Industrie 4.0 wirklich ausschöpfen lassen. Die PMD sieht ihre Arbeit daher als notwendige Ergänzung der Industrie 4.0. Für uns steht die Entwicklung einer maschinenverständlichen, formalisierten Beschreibungslogik für Werkstoffe und ihre Eigenschaften im Vordergrund, die dann in Zukunft mit Daten aus der Industrie 4.0 angereichert und kombiniert wird.

1 Projektbeschreibungen

1.1 Der Lebenslauf von Kupfer wird digital – für innovatives Materialdesign bis zum Recycling

Worum geht es?

Kupfer ist aufgrund seiner guten mechanischen Eigenschaften und der hervorragenden Leitfähigkeit ein Schlüsselwerkstoff für die elektrische Übertragung von Energie und Daten. Im Zuge der digitalen Transformation der Gesellschaft sowie der Energie- und der Mobilitätswende nimmt die Bedeutung von Kupfer rasant zu. Hierbei spielen nicht nur großvolumige Anwendungen wie elektrische Leiter für Generatoren, Leitungssysteme und Motoren eine Rolle, sondern im Besonderen auch innovative kleinteilige Anwendungen, wie beispielsweise hochbelastbare und zuverlässige Steckverbinder für Sensoren und Steuerungselemente, die im Kontext von Industrie 4.0 ein besonders starkes Wachstum verzeichnen. Aufgrund der strategischen Bedeutung von Kupfer und der zunehmenden Bedeutung der internationalen Lieferketten ist ein effizienter Umgang von der Rohstoffgewinnung bis zum Recycling von elementarer Bedeutung für den Standort Deutschland.

Übergeordnetes Projektziel ist die Schaffung der technischen Grundlagen (Konzepte) für ein Datenökosystem, das es ermöglicht, die unterschiedlichen Werkstoffanforderungen und Verarbeitungsschritte von Kupfer über den gesamten Lebenszyklus abzubilden und für digitale Optimierungsschritte zu nutzen. Von der Erfassung der Stoffströme und der Kenntnis von Stoff- und Prozessrouten sowie den Materialeigenschaften profitieren vor allem wichtige Bereiche wie die Legierungsentwicklung durch die Verbesserung des Entwicklungsprozesses und die Eigenschaftsoptimierung neuer Legierungen sowie die Recyclingverfahren. Grundlage hierfür ist der Aufbau sogenannter Ontologien, die als eine Art Wissensnetz verstanden werden können. Sie dienen als gemeinsame Standards für die Beschreibung von

Werkstoffen und technischen Vorgängen. Sie helfen bei der digitalen Erfassung von Prozessschritten sowie von Materialeigenschaften. Parallel dazu werden Konzepte für Datenstrukturen, die Speicherung und den Austausch von Werkstoff- und Prozessdaten über neu zu definierende Schnittstellen erarbeitet. Das Datenökosystem wird zwar repräsentativ für die Werkstoffklasse Kupfer entwickelt, ist aber ebenso auf weitere Materialklassen übertragbar.

Methodik und Tools

Das Konsortium bringt ein umfassendes Know-how entlang der Wertschöpfungskette der Kupferverarbeitung ein, wobei der Fokus auf folgenden Teilaспектen liegt:

- Ontologieentwicklung sowie Digitalisierung von Material-, Prozess- und Simulationsdaten
- Digitale Abbildung der Prozesse Legierungsentwicklung und Strangguss
- Einspeisen numerischer und realer Werkstoffdaten für das Datenökosystem
- Datenvielfältigung durch Mikrostrukturanalyse und Bauteilprüfung
- Digitalisierung der Werkstoffkreisläufe mit Fokus auf das Recycling

Im Ergebnis soll es mit dem Datensystem möglich sein, Kupferlegierungen auf Basis maschinenlesbarer Beschreibungen vorgelagerter und nachfolgender Abschnitte des Lebenszyklus digital zu entwickeln.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- Flow3D (CFD) für Gießsimulation
- Thermo-Calc-Software CALPHAD für Phasengleichgewichte
- Data Space Management System DSMS
- HSC Chemistry von Outotec; zur Berechnung und Analyse von thermodynamischen Parametern von chemischen Reaktionen und Prozessen
- RDF Processing Toolkit, RDFUnit, PySHACL, RML-Mapper, LIMES



Anwendungspotenziale

Die Bereitstellung digitalisierter Lebenszyklen von Kupfer ist für die Industrie von hohem Nutzen. Unternehmen mit innovativen Lösungen beispielsweise für die Industrie 4.0 oder die Energiewende werden durch digitale Tools befähigt, neue Kupferlegierungen proaktiv hinsichtlich ökonomischer und ökologischer Kriterien für ihre Wertschöpfungsketten zu bewerten. Beispielsweise ließe sich unter dem Gesichtspunkt der Nachhaltigkeit und gesetzlicher Vorgaben der Aufwand an Energie für das Recycling einer Legierung

abschätzen oder die Frage beantworten, ob Zulieferer die nötigen Rohmaterialien mit den entsprechenden Anforderungen und in der geforderten Zusammensetzung liefern können. Die Digitalisierung kann so wesentliche Impulse setzen, um den Umgang mit der strategischen Ressource Kupfer entlang der gesamten Wertschöpfungskette effizienter und Innovationen nachhaltiger zu gestalten. Das Projekt treibt den Ausbau der Kreislaufwirtschaft in Deutschland weiter voran und kann als Vorbild auch auf andere metallische Werkstoffe übertragen werden.

Projektdaten

Projekttitle	Datenökosystem für die digitale Materialforschung auf Basis Ontologie-basierter digitaler Repräsentationen von Kupfer und Kupferlegierungen (KupferDigital)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> fem Forschungsinstitut für Edelmetalle und Metallchemie
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> Deutsches Kupferinstitut Berufsverband e.V. Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM) Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Helmholtz-Institut Freiberg für Ressourcenelemente (HIF) Institut für Angewandte Informatik e.V. Fraunhofer Institut für Mikrostruktur von Werkstoffen und Systemen (IMWS)
Projektaufzeit	01.03.2021 – 28.02.2024
Förderkennzeichen	13XP5119A-G

1.2 Vom Stahlblech zur Crashsicherheit mit innovativen digitalen Strategien

Worum geht es?

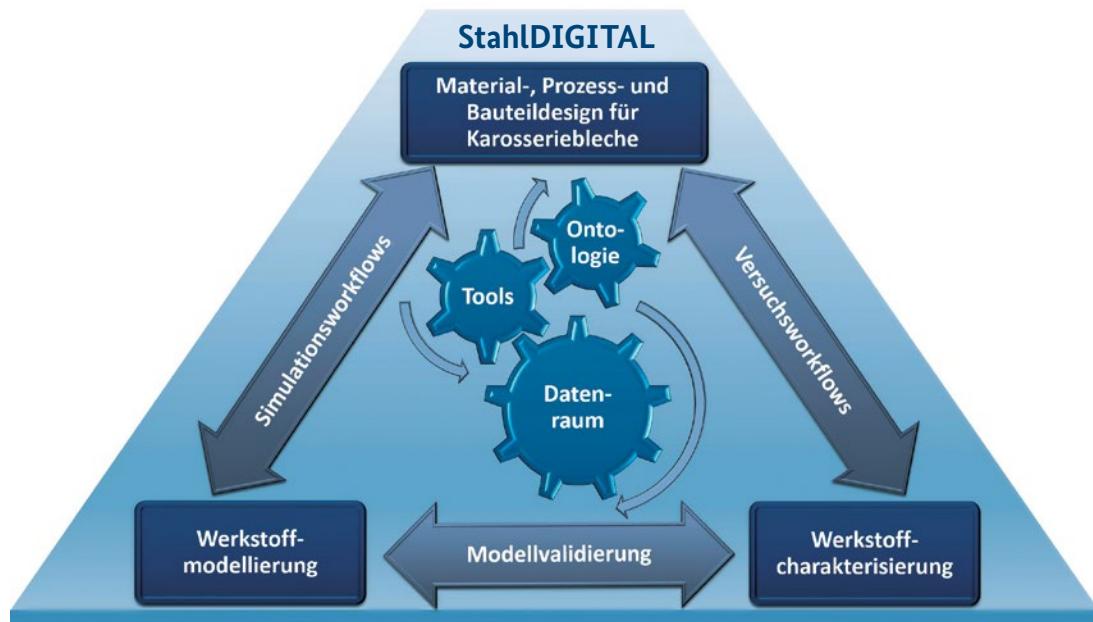
Die Innovationskraft der Stahlindustrie basiert auf der kontinuierlichen Weiterentwicklung von Stählen mit maßgeschneiderten Eigenschaften, wie Festigkeit und Duktilität, unter den Randbedingungen der Wirtschaftlichkeit und Herstellbarkeit. Ein Großteil der heute eingesetzten Stähle ist entweder weiter- oder neu entwickelt, wobei die Beherrschung der Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen eine entscheidende Rolle spielt. Um aus der Stahlschmelze durch nachgelagerte Verarbeitungsprozesse gewünschte Werkstoffeigenschaften gezielt einstellen zu können, sind Simulations- und Charakterisierungsmethoden unerlässliche Hilfsmittel. Problematisch ist bislang allerdings die Kopplung von Simulationsmethoden

entlang der Prozesskette unter Berücksichtigung unterschiedlicher Zeit- und Längenskalen. Hier setzt das Projekt StahlDigital an, das auf die Erarbeitung neuer digitaler Strategien für Stahlwerkstoffe zielt. Dabei werden sowohl die Herstellung des Materials, die Verarbeitungsprozesse wie auch das Design der fertigen Bauteile betrachtet, damit diese zukünftig schneller und passgenauer entwickelt werden können.

Methodik und Tools

Die Leistungsfähigkeit dieser Werkzeuge wird anhand industrieller Anwendungsszenarien im Rahmen der Entwicklung und Optimierung von Stahlblechen für Karosseriebauteile demonstriert. Dabei wird der gesamte Herstellungsprozess von der Halbzeugherstellung über die Bauteilherstellung bis zur Bauteileigenschaft (Crashsicherheit) mit einbezogen. Es existieren für jeden der betrachteten Prozessschritte geeignete Simulationswerkzeuge. Die wissenschaftliche Herausforderung besteht somit darin, eine Ontologie zu

Kategorie/Werkzeug (Lizenz)	Kurzbeschreibung
Atomistik	
<ul style="list-style-type: none"> • VASP (Lizenz am MPIE) • Sphinx (MPIE-Entwicklung, Open Source) • LAMMPS (Open Source) 	Dichtefunktionaltheorie Dichtefunktionaltheorie Molekulardynamik
Mikrostruktur-Eigenschaften	
<ul style="list-style-type: none"> • Dream3D (Dream3D License) • DAMASK (GPL3) • VirtualLab (Toolbox des Fraunhofer-IWM) 	Mikrostrukturgenerierung Multifeld-Kristallplastizität Mikrostruktursimulation
Wärmebehandlung	
<ul style="list-style-type: none"> • MICRESS (kommerziell) • OpenPhase (GPL3) • Zellulärer Automat (Toolbox des MPIE) • CALPHAD, DICTRA (kommerziell) 	Phasenfeld Phasenfeld CA für WBH-Simulation Thermodynamische Berechnungen
Prozess und Bauteile	
<ul style="list-style-type: none"> • Abaqus (kommerziell) • LS-Dyna (kommerziell) 	FEM-Programme für Blechumformung, Crashsimulation
Datenraum- und Workflowmanagement	
<ul style="list-style-type: none"> • DSMS (Open-Source-Lizenz) • SimPhoNy (Open-Source-Lizenz, BSD-ähnlich) • Pyiron (BSD3) 	Datenraum Kopplungstechnik Workflowplattform
Ontologiemanagement	
<ul style="list-style-type: none"> • VoCol (MIT) • QuitStore (GPL3) • RDFUnit (Apache 2.0) • JekyllRDF (MIT) 	Visualisierung/Kuratierung Kuratierung, Versionierung Qualitätsmessung Webvisualisierung



Digitale Strategien für das Material-, Prozess- und Bauteildesign von Karosserieblechen

entwickeln, auf deren Grundlage die einzelnen Programme gekoppelt werden können. Ein Cloud-basiertes virtuelles Labor erlaubt die Schaffung einer Datenbasis für die Optimierung der Halbzeugherstellung durch die Korrelation von Mikrostruktur und Eigenschaften in Abhängigkeit von der Prozesskette und dem Werkstoff. Auf dieser Basis wird eine intelligente Materialkarte für gekoppelte Umform-/Crashsimulationen in Abhängigkeit von der chemischen Zusammensetzung und den Prozessparametern entwickelt.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

Im Rahmen des Projektes StahlDigital ist jeweils der Einsatz verschiedener Softwaretools in den in der Tabelle aufgeführten Anwendungsbereichen vorgesehen.

Projektdaten

Projekttitle	Ontologie-basierte interoperable Workflows zur Entwicklung und Optimierung von Stahlwerkstoffen für den Bauteileinsatz: Von der Blechhalzeugherstellung zur Crashsicherheit (StahlDigital)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> Max-Planck-Institut für Eisenforschung
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> Institut für Angewandte Informatik e. V. Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM)
Projektlaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5116A-C

Anwendungspotenziale

Die Projektergebnisse legen die Grundlagen für die beschleunigte Einführung von neuen Werkstoffen und Prozessen in der Produktentwicklung von Blechbauteilen. Entwicklungszeiten und -kosten können so reduziert werden. Aufgrund der Übertragbarkeit der Projektergebnisse, insbesondere über die Plattform MaterialDigital, werden die Materialforschung sowie die Herstellung und Verarbeitung von Materialien mit digitalen Methoden, Konzepten und Verfahren nachhaltig gestärkt. Eine Optimierung im Bereich des Materials hat einen großen Einfluss auf die Nachhaltigkeit durch die Einsparung von Legierungselementen, Material, Energie und ist auch aufgrund der sich ändernden Rohstoffsituation und regulatorischen Anforderungen von hoher strategischer Bedeutung für die deutsche Industrie.

1.3 Mit Hilfe Künstlicher Intelligenz zur Optimierung langlebiger Stahlbauteile

Worum geht es?

Künstliche Intelligenz revolutioniert viele Bereiche unseres täglichen Lebens, angefangen bei personalisierter Internetwerbung über selbstfahrende Automobile bis hin zu selbstoptimierenden Industrieanlagen. Das Projekt iBain hat sich zum Ziel gesetzt, Künstliche Materialintelligenz zur Optimierung hochfester Stähle zu etablieren. Bainit, ein bestimmtes Stahlgefüge, hat aufgrund seiner komplexen inneren Struktur herausragende mechanische Eigenschaften, die bei der Herstellung bewusst eingestellt werden können. Dabei sind bainitische Mikrostrukturen hierarchisch mehrskalig und weisen Struktureigenschaften bis hinunter zur Nanoskala auf. Deshalb ist bereits die experimentelle Charakterisierung höchst komplex und stark von der subjektiven Erfahrung des Experimentators abhängig. Durch den Einsatz Künstlicher Intelligenz sollen im Projekt iBain signifikante Fortschritte erzielt werden im Hinblick auf:

- einen systematischen Zugang zur Charakterisierung der Mikrostrukturen
- Reduzierung des „menschlichen Faktors“
- Korrelationen zwischen Prozess, Mikrostruktur, Materialeigenschaften und Lebensdauer
- Schaffung der Voraussetzungen für ein intelligent-daten geführtes Prozessdesign

Methodik und Tools

Als Methodik werden automatische Mustererkennung und Simulationen zur Ergänzung experimenteller Befunde eingesetzt. Die Ausbildung bainitischer Mikrostrukturen wird in einem Multiskalenansatz

numerisch simuliert. Ein besonderer Fokus liegt in der Abhängigkeit der Mikrostruktur vom Prozess, wobei simulierte 3D-Mikrostrukturen mit experimentellen Mikrostrukturen korreliert und verifiziert werden. Statistische Methoden der Versuchsplanung (sogenanntes Design of Experiments) helfen, Experimente und Simulationen zu planen sowie Redundanzen zu vermeiden. Schließlich wird eine automatisierte Steuerung des Arbeitsablaufs und Datenflusses („automated workflow“) etabliert. Als Ergebnis wird ein maßgeschneiderter Produktionsablauf vorgeschlagen, um optimierte Erzeugnisse mit überlegenen Eigenschaften produzieren zu können.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

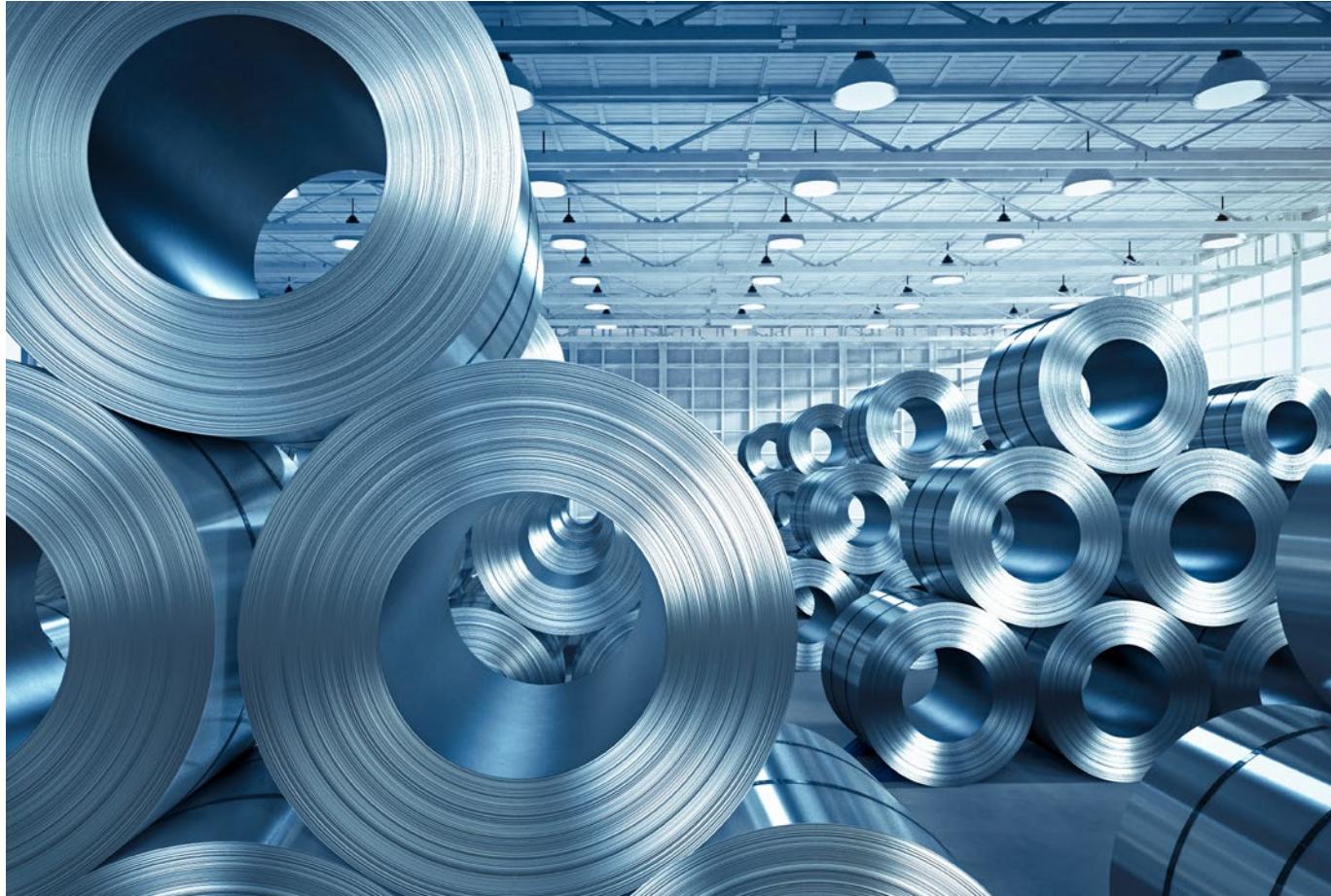
- KMI-basierte Mikrostrukturanalyse der experimentellen und simulierten Daten mittels maschinellen Lernens und Deep-Learning-Verfahren in Python
- Pyiron als Workflowmanager
- Phasenfeldsimulationen der Mikrostrukturdynamik mittels OpenPhase

Anwendungspotenziale

Das Projekt iBain ist als ein „Demonstrator“ zu sehen für ein vollständig automatisiertes Management-System zur Material- und Prozessoptimierung unter Kopplung moderner, skalenübergreifender experimenteller Analysemethoden mit skalenübergreifender Simulation. Die Erzeugung virtueller Mikrostrukturen sowie die auf Künstlicher Intelligenz basierte Mikrostrukturanalyse lassen sich auf eine Vielzahl technischer Prozesse übertragen und sind deshalb für den Industriestandort Deutschland und Europa sehr relevant. Durch beschleunigte und vereinfachte Produktentwicklung wird somit zur Sicherung von Arbeitsplätzen am Hochlohnstandort Deutschland und zu einer nachhaltigen Industrieproduktion beigetragen.

Projektdaten

Projekttitle	Intelligent-daten geführtes Prozessdesign für ermüdungsresistente Stahlbauteile am Beispiel bainitischer Mikrostruktur (iBain)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> • Ruhr-Universität Bochum – Institut für Werkstoffe – Mikromechanische und makroskopische Simulation – ICAMS
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM) • Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen – Institut für Eisenhüttenkunde
Projektlaufzeit	01.04.2021 – 31.03.2023
Förderkennzeichen	13XP5118A-C



1.4 Neue Materialien für den 3D-Druck von Aluminium

Worum geht es?

Additive Fertigungsverfahren wie der 3D-Druck gewinnen in vielen industriellen Anwendungsfeldern zunehmend an Bedeutung. Ein wesentlicher Vorteil gegenüber konventionellen Fertigungsverfahren ist die erheblich höhere Gestaltungsfreiheit, die beispielsweise Leichtbaustrukturen mit deutlich effizienterem Materialeinsatz ermöglichen. Beim metallischen 3D-Druck mittels selektiven Laserstrahlschmelzens (SLM-Verfahren) lassen sich die Leichtbaupotenziale aufgrund einer eingeschränkten Materialverfügbarkeit noch nicht voll ausschöpfen. Speziell bei Aluminium ist die Auswahl auf wenige 3D-druckbare Legierungen beschränkt, die allerdings geringe Festigkeitswerte aufweisen. Hochfeste und dabei gleichzeitig duktile Legierungen konventioneller Umformprozesse lassen sich aufgrund eines geringen

Heißrisswiderstandes mittels Laserstrahlschmelzens üblicherweise nicht rissfrei verarbeiten. Die Verarbeitbarkeit von Aluminiumlegierungen hängt vor allem vom Erstarrungsverhalten ab, welches durch die chemische Zusammensetzung, den Temperaturgradienten und die Erstarrungsgeschwindigkeit maßgeblich beeinflusst wird. Eine systematische Optimierung von Aluminiumpulverlegierungen im Hinblick auf die Verarbeitbarkeit mittels SLM-Verfahren ist bislang vor dem Hintergrund einer Vielzahl von Einflussfaktoren und Wirkmechanismen noch nicht möglich. Ziel des Projektes ist es, eine digitale Strategie zu entwickeln, welche den Heißrisswiderstand eines digitalen Materialwillings bewertet. Hierzu wird eine Ontologie für den Stofffluss und die einzelnen Prozessschritte erarbeitet und auf Basis dieser können optimierte Aluminiumlegierungen für das SLM-Verfahren mit Hilfe digitaler Methoden entwickelt werden.

Methodik und Tools

Um die Projektziele zu erreichen, forschen die Projektpartner an einem speziellen Computermodell zur Beschreibung des Aluminiumwerkstoffes und des Metall-3D-Druck-Prozesses (hier der SLM-Prozess). Das Computermodell berücksichtigt physikalische Effekte, die im Nanometer- (Größenordnung der wechselwirkenden Atome) bis Millimeterbereich (Größe einer Stecknadel) wirken und das Ergebnis des Metall-3D-Drucks beeinflussen. Als Grundlage werden Daten experimentell erhoben und in ein Modell überführt, das schließlich verifiziert wird.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- Modellierung des Temperaturfeldes über Finite-Elemente-Methode (Abaqus)
- Modellierung der Erstarrung des Gefüges mittels der Phasenfeldmethode (MICRESS)
- Molekulardynamiksimulation zur Modellierung des zweiphasigen (flüssig/fest) Zugversuchs (LAMMPS, nanoSculpt)
- Molekulardynamiksimulation zur Modellierung der Kavitation (LAMMPS, nanoSculpt)
- Bildanalyse zur Validierung der Heißrisse (ImageJ)
- Thermodynamische Methoden zur Bestimmung der thermophysikalischen Eigenschaften der Legierungen (Thermocalc)

Projektdaten

Projekttitle	Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißeisswiderstandsfähigen Al-Pulverlegierungen für SLM (DiStAl)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> • Materialprüfungsanstalt – Universität Stuttgart
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Universität Stuttgart – Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)
Projektlaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5115A-B

Anwendungspotenziale

Bei einem Erfolg des Projektes wird künftig ein digitales Werkzeug bereitstehen, das die Einsatzmöglichkeiten des 3D-Drucks mit Aluminiumlegierungen erweitert und auch auf andere Metalle übertragen werden kann. Beispielsweise bei Gas- und Dampfkraftwerken ist durch die Anwendung hochwarmfester Legierungen in Kombination mit der Geometriefreiheit des additiven Fertigungsverfahrens mit einer deutlichen Steigerung der Einsatztemperaturen und damit des Wirkungsgrades zu rechnen. Aber auch in anderen Anwendungsfeldern wie dem Automobil- und Maschinenbau bestehen Potenziale für optimierte Leichtbaulösungen. Die digitale Entwicklung der optimierten Legierungen ermöglicht den Unternehmen eine signifikante Kosten- und Zeitersparnis.



1.5 Digitale Materialentwicklung für den industriellen metallischen 3D-Druck

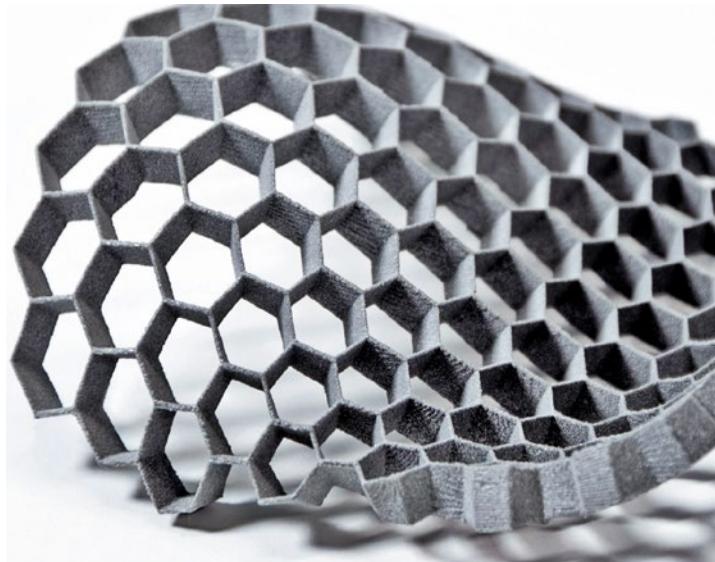
Worum geht es?

Additive Fertigungsverfahren werden immer häufiger bei der Herstellung von technischen Systemen und Komponenten eingesetzt. Mittlerweile lassen sich viele verschiedene Materialien mit additiven Verfahren verarbeiten und Werkstücke mit sehr anspruchsvollen geometrischen Formen drucken. Stahlwerkstoffe für additive Fertigungsverfahren stehen seit einigen Jahren im Fokus umfangreicher Forschungsaktivitäten. Neben schon länger etablierten Anwendungsfeldern des 3D-Drucks wie Rapid Prototyping und Rapid Tooling werden additiv gefertigte Bauteile zunehmend dauerhaft in Produkten und Maschinen eingesetzt. Dies stellt erhöhte Anforderungen an zyklische Kennwerte und -kurven von Materialparametern. Das Wissen um die genauen Eigenschaften der gedruckten Materialien, die stark von den gewählten Prozessen und eingestellten Prozessparametern abhängen, ist oft noch unzureichend. Daher lassen sich viele Einsatzgebiete 3D-gefertigter Bauteile heute noch nicht vollständig erschließen und Potenziale der Technik nicht voll ausschöpfen. Eine bessere Kenntnis dieser Werte hilft dem Wirtschaftsstandort Deutschland, diese Technik für zukünftige Anwendungen, z. B. im Leichtbau für Energie- und Ressourceneinsparungen, zu nutzen.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

Es werden verschiedene Simulationsmodelle und Tools eingesetzt, darunter:

- ein Ansatz zur Prognose der Spannungs-Dehnungs-Verhalten, basierend auf mehrskaligen Crystal-Plasticity-Finite-Elemente-Methoden (OOF2, Neper, Abaqus)
- Modellierungen mittels FEM zur Makrostruktursimulation PBF-LB/M-gefertigter Stähle (Abaqus FEA)
- FEM zur Gefüge-, Eigenspannungs- und Verzugsermittlung der Makrostruktur für die mit DED-Arc verarbeiteten Stähle (simufact welding)
- Protégé als Ontologieeditor
- automatisierte Generierung anisotroper Materialkarten für additiv verarbeitete Stähle aus Ontologiedaten (Python, OWL)



Durch LBM (Laser Beam Melting) hergestellte Wabenstruktur

Methodik und Tools

Den Schwerpunkt des Projektes bildet die experimentelle und numerische Charakterisierung der statischen und zyklischen Materialkennwerte additiv hergestellter Stahlstrukturen. Dabei werden drei verschiedene Fertigungsverfahren – Laserstrahlschmelzen, Extrusion von Kompositen und Auftragschweißen – unter Variation der Prozessparameter am Beispiel nichtrostender Stahllegierungen miteinander verglichen. Ein wichtiger Aspekt hierbei sind Erweiterungen in der Mehrskalenmodellierung zur präzisen Prognose von Kennwerten und Kennkurven, wobei Eingangsparameter insbesondere aus mikrostrukturellen Untersuchungen erhalten werden. Für die sich aus den verschiedenen Verfahren ergebenden Materialkennwerte sind konkrete Ontologien und digitale Workflows zu entwickeln, die es erlauben, die zusammengetragenen Materialinformationen prozessorientiert und physikalisch adäquat abzubilden, zu kategorisieren und anschließend auf Basis semantischer Abfragen auszuwerten und zu analysieren.

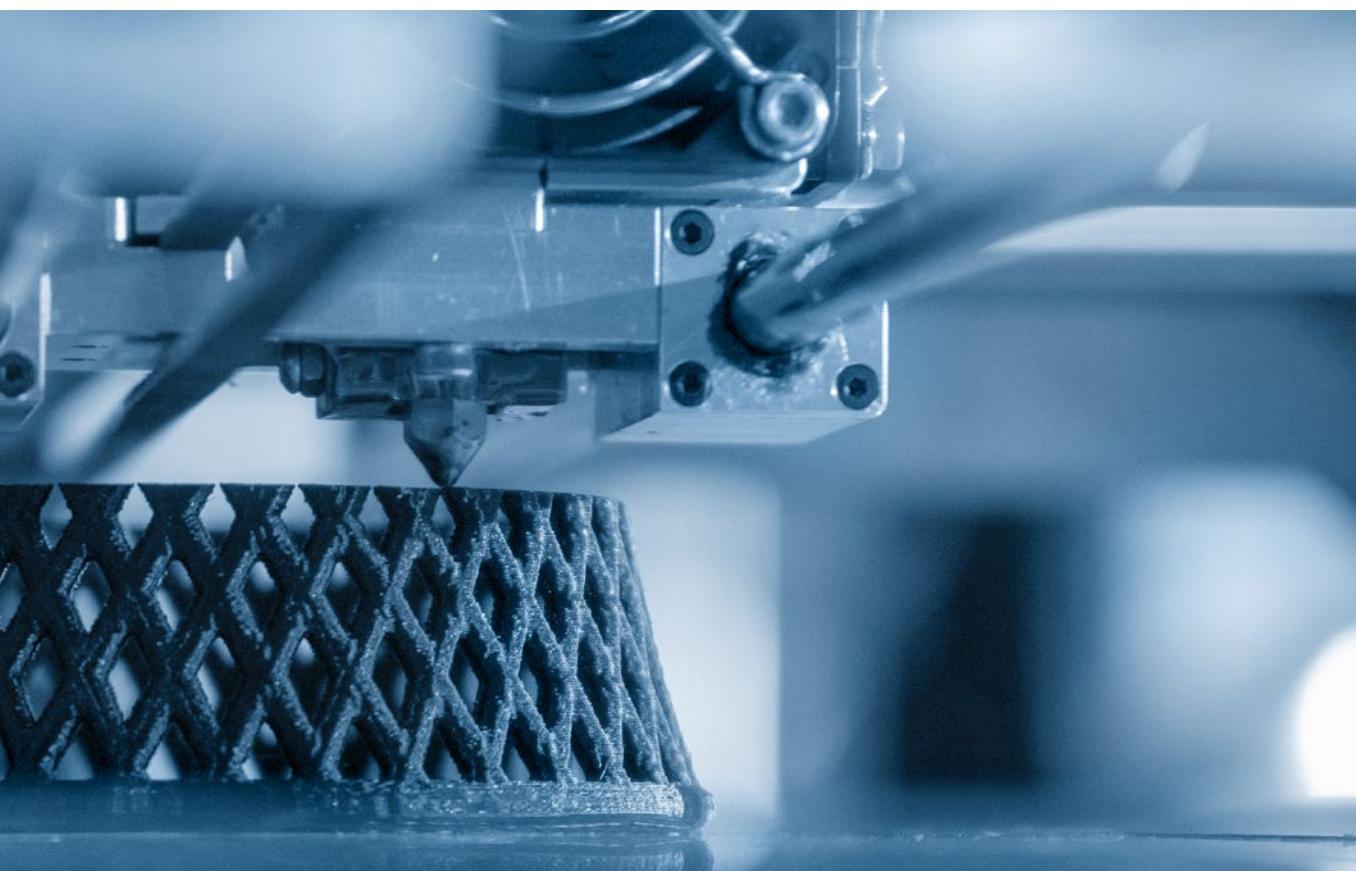
Anwendungspotenziale

Das im Projekt entwickelte Datensystem kann einen Machbarkeitsnachweis zur Etablierung einer Systematisierung von Materialentwicklung und -anwendung mit Fokus auf die industrielle Anwendbarkeit erbringen. In der Industrie wie z. B. im Automobilbau werden zunehmend additive Fertigungsverfahren und Konzepte des Rapid Prototyping oder des Rapid Tooling und teilweise auch das Rapid Manufacturing

angewendet. Teilweise ist angedacht, das komplette Management von Ersatzteilen über digitalisierte, datenbasierte Ansätze zu realisieren. Durch die im Vorhaben eingebundenen Industriepaten erfolgt ein unmittelbarer Praxistest für unterschiedliche Wirtschaftsbereiche. Im Falle eines Projekterfolges sind aus den datenbasierten Anwendungen hohe wirtschaftliches Potenziale und gesellschaftlicher Nutzen zu erwarten.

Projektdaten

Projekttitle	Ontologien für die dezentrale Erfassung von mehrskaligen statischen und zyklische Kennwerten von additiv gefertigten Stahlstrukturen aus Experiment und Simulation (ODE_AM)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> Materialforschungs- und -prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> Fraunhofer-Einrichtung für Gießerei-, Composite- und Verarbeitungstechnik Technische Universität Ilmenau, Fachgebiet Fertigungstechnik Technische Universität Hamburg – Institut für Digitales und Autonomes Bauen
Projektaufzeit	01.03.2021 – 29.02.2024
Förderkennzeichen	13XP5117A-D





Prototyp einer robotischen Glasschmelzanlage in Aktion. Eine weiterentwickelte Anlage soll Kernstück eines vollautomatischen und intelligenten Expertensystems zur Glasentwicklung werden.

1.6 Vollautomatisches intelligentes Expertensystem zur Hochdurchsatz-Glasentwicklung

Worum geht es?

Der Werkstoff Glas zeichnet sich durch die weite und kontinuierliche Einstellbarkeit seiner chemischen Zusammensetzung sowie einzigartige schmelzbasierte Formgebungsverfahren aus. Durch das breit einstellbare Eigenschaftsspektrum, die kostengünstige Darstellbarkeit variabler Geometrien und die bereits jetzt erreichte hohe Recyclingquote und damit Nachhaltigkeit sind Glaswerkstoffe Schlüsselkomponenten moderner und zukünftiger Hochtechnologien. Die resultierenden Anforderungen an die Effizienz der Glasentwicklung sind jedoch derzeit nicht erfüllbar. Die gezielte Anpassung physikalischer und chemischer Eigenschaften an die anwendungsbezogenen Anforderungen erfolgt in der Regel empirisch und ist

aufgrund des geringen Automatisierungsgrades kosten-, energie- und zeitintensiv. Besondere Herausforderungen sind dabei die breite Variabilität möglicher chemischer Zusammensetzungen, die notwendigen hohen Prozesstemperaturen sowie große Lücken in den verfügbaren Datenbanken – insbesondere bezüglich der Prozessdaten. Datengetriebene Methoden zur Glasentwicklung und Prozessoptimierung sind nicht etabliert. Das Verbundvorhaben GlasDigital zielt auf den Aufbau einer Ontologie-basierten digitalen Infrastruktur und die Entwicklung darin eingebetteter vollautomatischer intelligenter Expertensysteme zur Hochdurchsatz-Glasentwicklung. Durch den Einsatz robotischer Syntheseverfahren in Kombination mit selbstlernenden Maschinen wird die Entwicklung neuartiger – zum Beispiel mechanisch festerer – Gläser erheblich beschleunigt und kostengünstiger.

Methodik und Tools

Die Projektarbeiten basieren auf dem Prototyp einer robotischen Glasschmelzanlage, für den zunächst Inline-Sensorik zur Prozessüberwachung und -optimierung (u.a. Schäumen, Viskosität beim Guss) entwickelt und implementiert wird. Für die Schmelzüberwachung und Optimierung werden zudem auf maschinellem Lernen basierende Algorithmen eingesetzt sowie Methoden zur Hochdurchsatzanalyse von Gläsern u.a. in Bezug auf Zusammensetzung, Dichte und Homogenität erarbeitet. Parallel werden ML-basierte lernfähige Algorithmen zur Glasformulierung ggf. unter Einbindung von lernfähigen Softwaretools zur Literaturauswertung entwickelt und adaptiert sowie die Grundlagen für eine ontologische Beschreibung der Materialklasse Glas gelegt.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- Programmiersprache Python (Anaconda-Distribution) und die integrierte PyCharm-Entwicklungsumgebung
- Integrierte Pyiron-Entwicklungsumgebung für die Erstellung von Workflows
- Comsol Multiphysics für die Erstellung des digitalen Workflows

Projektdaten

Projekttitle	Datengetriebener Workflow für die beschleunigte Entwicklung von Glas (GlasDigital)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> • Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Technische Universität Clausthal – Institut für Nichtmetallische Werkstoffe • Friedrich-Schiller-Universität Jena – Otto Schott-Institut für Materialforschung • Fraunhofer-Institut für Silicatforschung ISC
Projektaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5122A-D

- Protégé als Ontologieeditor sowie OntoDocker für den Zugriff auf Blazegraph-Instanzen und als Framework für den Aufbau einer Ontologie-basierten digitalen Infrastruktur
- Scikit-learn- und PyTorch-Machine-Learning-Bibliotheken sowie Support-Vector-Regression-, Random-Forest-Regression-, Neural-Networks- und Gaussian-Process-Regression-Methoden zur Erstellung von Machine-Learning-Modellen zur Vorhersage von Glaseigenschaften

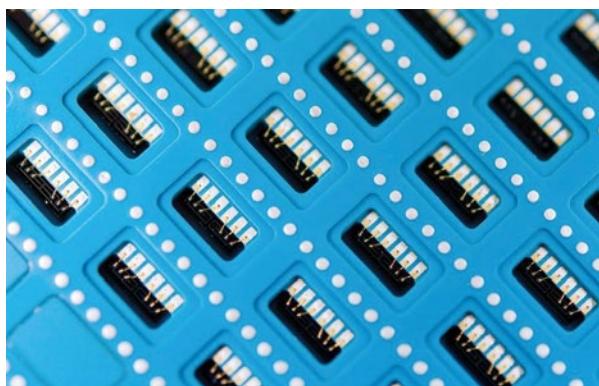
Anwendungspotenziale

Die erarbeiteten Ergebnisse sind generell für die Glasentwicklung von Interesse, insbesondere für Multikomponentengläser für Displays, Glasfaserverbunde, Glaskeramiken, Lotmaterialien und andere glasig-kristalline Funktionswerkstoffe. Breite Anwendungspotenziale bieten sich beispielsweise in der Optik und Medizintechnik, der Mikroelektronik und der Mikroelektromechanik. Auch in Bezug auf aktuelle technologische Herausforderungen sowie die Entwicklung von Gläsern höherer Festigkeit für die Substitution von Kunststoffen, beispielsweise in Verpackungsanwendungen, kann das Projekt wichtige Lösungsbeiträge generieren.

1.7 Innovative Multilayerkeramiken für Kommunikation, Automobil und Energietechnik

Worum geht es?

Technische Keramiken werden in der Mikroelektronik häufig eingesetzt, wenn das zu fertigende Bauteil hohen Belastungen wie beispielsweise Temperaturschwankungen ausgesetzt ist. Die technischen Anforderungen an Verdrahtungsträger in den Bereichen Telekommunikation, Sensorik oder Automobil sowie eine weiter zunehmende Miniaturisierung erfordern häufig die Integration gedruckter Metallstrukturen in mehrlagige keramische Bauteile („Multilayer-technologie“). Eine wesentliche Gemeinsamkeit aller Multilayerkonzepte ist die Kombination der Keramik mit anderen Werkstoffen. Hierbei müssen prinzipiell mechanische Fehlpassungen durch unterschiedliche Schwindung und thermische Ausdehnung sowie Grenzflächenreaktionen beachtet werden. Die typischen Folgen dieser Effekte sind Rissbildung, Delamination, Verzug und Veränderung der physikalischen Eigenschaften. Aufgrund der komplexen Wechselwirkungen zwischen den Materialien in den zahlreichen Fertigungsschritten erfordert die Entwicklung innovativer Bauteilkonzepte zeitaufwendige und kostenintensive experimentelle Versuchsreihen. Das Projekt KNOW-NOW verfolgt das übergeordnete Ziel, digitale Werkzeuge zu implementieren, die experimentelle Daten aus der Werkstoffentwicklung und Multilayertechnik zusammenführen und für die industrielle Anwendung schneller nutzbar machen.



Packung von Beschleunigungssensoren im glaskeramischen Multilayer in Nutznfertigung als Beispiel für Anwendungen in der Mikrosystemtechnik

Methodik und Tools

Im Projekt wird eine erweiterbare Ontologie für die keramische Multilayertechnik erarbeitet, die materialbezogene und technologische Daten mit Simulationen automatisiert verknüpft und für ingenieurstechnische Fragestellungen auswertbar macht. Als Fallbeispiele werden zwei Designs vom Pulver bis zum Bauteil experimentell realisiert und begleitend simuliert. Die relevanten Daten werden dabei durchgängig erfasst, Zusammenhänge und Entscheidungs-szenarien werden erstmals in Form einer Ontologie abgebildet. Die Schwerpunktsetzung der Simulation erfolgt auf den Co-Sinterprozess, weil hier die in vorgelagerten Fertigungsschritten auf verschiedenen Skalen eingeprägten Materialeigenschaften der Grünfolien sowie Ofen- und Prozessparameter in besonderer Weise zusammenwirken und eine Vorhersage des Ergebnisses mit klassischen Simulations- oder Prozessüberwachungstools noch nicht erfolgreich demonstriert wurde.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- Diskrete-Element-Methode zur Simulation der Dichteverteilung bei der Lamination der bedruckten Einzellagen (LIGGGTHS)
- Finite-Elemente-Methode zur Simulation der Schwindung und der Eigenspannungen beim Co-Sintern der mehrlagigen Bauteile (ANSYS)
- Finite-Elemente-Methode zur Multiphysik-Simulation der Funktionseigenschaften von Bauteilen (COMSOL)

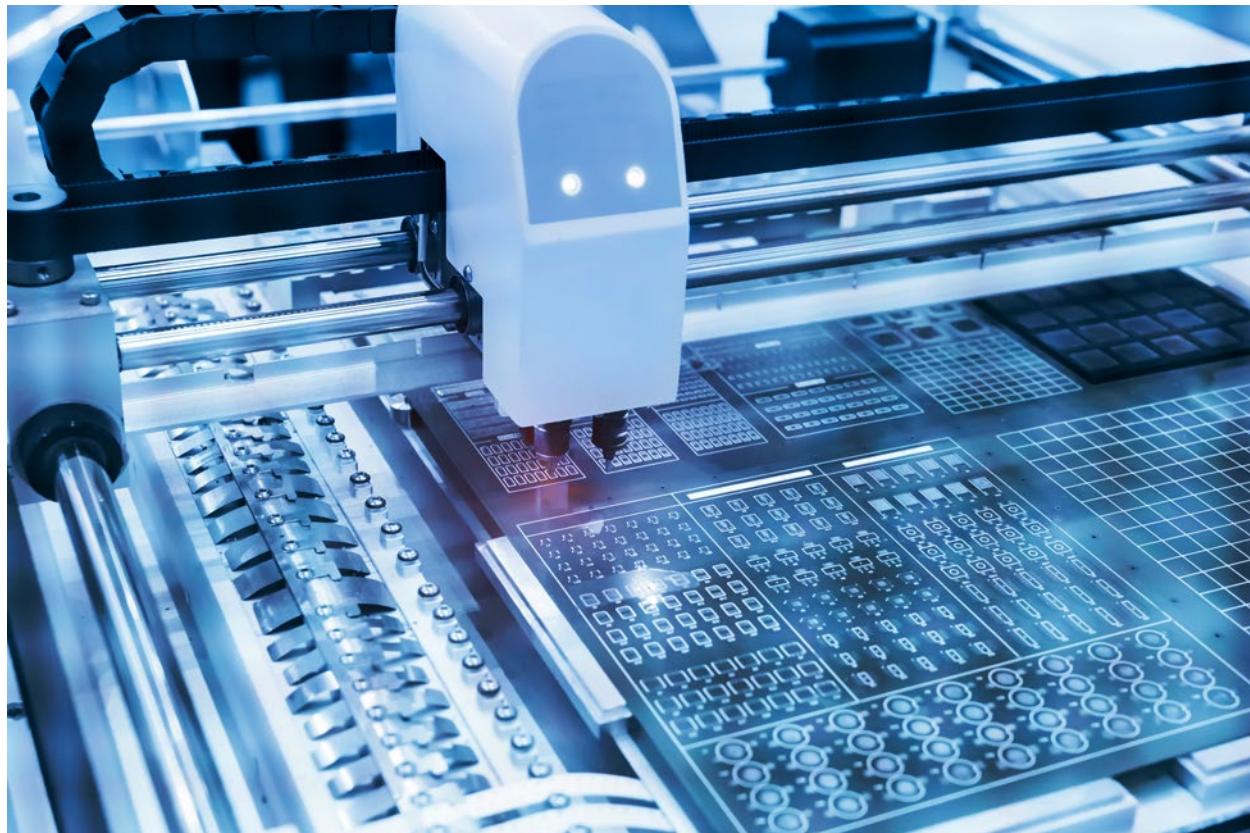
Anwendungspotenziale

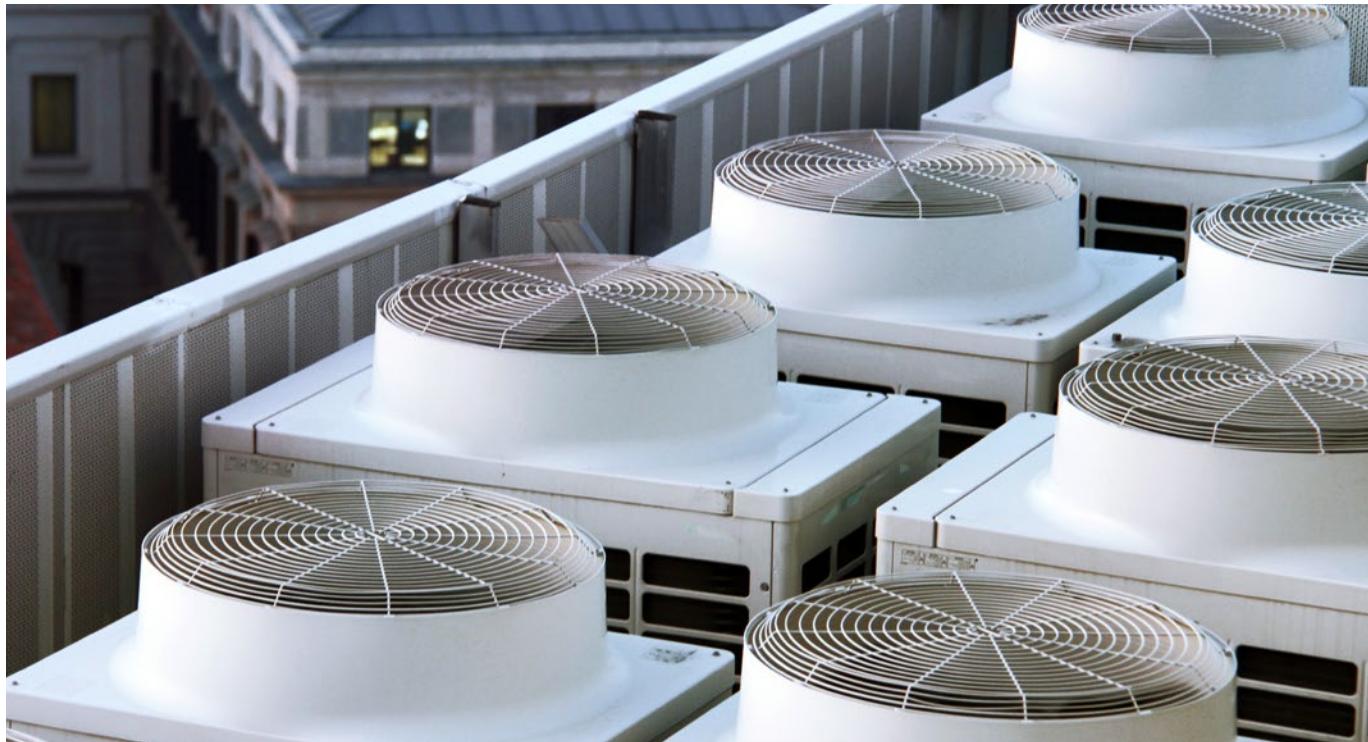
Die Projektergebnisse werden Unternehmen der keramischen Industrie zur Verfügung stehen, um künftige Produktentwicklungen beispielsweise im Bereich Energietechnik schnell zur Marktreife zu führen und damit einen möglichst frühen Markteintritt zu ermöglichen. Hochleistungskeramiken mit neuen Eigenschaftskombinationen sind eine Voraussetzung für Innovationen in vielen Schlüsseltechnologien und ermöglichen dadurch eine positive Hebelwirkung für

den Wirtschaftsstandort Deutschland, beispielsweise in den Zukunftsbereichen Elektromobilität, autonomes Fahren oder Industrie 4.0. Anwendungsbeispiele innovativer Multilayerkeramiken sind keramische Vielschichtkondensatoren in der Mikroelektronik, planare Festoxidbrennstoff-/elektrolysezellen für Power-to-Gas-Anlagen, Steuergeräte in der Automobilindustrie sowie Schaltungsträger für Hochfrequenzanwendungen (Antennen, Filter etc.) in der Telekommunikation.

Projektdaten

Projekttitle	Keramische Multilayer-Entwicklung durch Neugestaltung Ontologie-basierter Wissenssysteme (KNOW-NOW)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> Technische Universität Berlin – Institut für Werkzeugmaschinen und Fabrikbetrieb Ernst-Abbe-Hochschule Jena – University of Applied Sciences Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS)
Projektlaufzeit	01.03.2021 – 29.02.2024
Förderkennzeichen	13XP5123A-D





1.8 Mit digitalen Methoden zur klimaverträglichen Kühlung der Zukunft

Worum geht es?

Die gesamte Klimatechnik, aber auch aktuelle und zukünftige Schlüsseltechnologien wie Künstliche Intelligenz oder Quantencomputer, sind ohne Kühlgeräte überhaupt nicht denkbar. Dies gilt für den Standort Deutschland, aber in noch größerem Maße für die USA, China oder Indien. Aktuell werden fast ausschließlich elektrisch betriebene Kompressoren für die Kälteerzeugung genutzt, bei denen Wärme durch das Komprimieren und Entspannen gasförmiger Kühlmittel von einer kalten zu einer warmen Seite transportiert wird, wobei viel Energie verbraucht wird. Für die Verringerung des damit verbundenen CO₂-Ausstoßes sind alternative Kühl- und Heizkonzepte, die weniger Strom benötigen und umweltverträgliche Materialien nutzen, von großer Bedeutung. Mit den in diesem Projekt betrachteten „magnetokalorischen“ Materialien sollen technische Innovationen gelingen, die zu einer stromsparenden und umweltschonenden Kälteerzeugung beitragen – und das vom Privathaushalt bis zur industriellen Nutzung. Magnetokalorische Materialien erwärmen sich, sobald sie auf

ein magnetisches Feld treffen, und geben die entstandene Wärme an die Umgebung ab. Beim Entfernen des Feldes kühlst sich das Material dann schlagartig ab und ermöglicht so ein steuerbares Kühlverfahren ohne umweltschädliche Kühlmittel. Magnetokalorische Kühlsysteme besitzen dabei einen bis zu 30 Prozent höheren Wirkungsgrad als Kompressoren. Bisher hat das Verfahren aber noch keine praktische Bedeutung, da einerseits extrem große Magnetfelder für eine ausreichende Kühlleistung notwendig sind und andererseits kritische Rohmaterialien wie seltene Erden verwendet werden. Lösungsansätze werden von bisher nicht bekannten Verbindungen auf Basis sogenannter Heusler-Legierungen erwartet, die sich aus den nichtmagnetischen Metallen Kupfer, Mangan und Aluminium zusammensetzen. Durch die Kombination verschiedener Metalle ist die Vielfalt möglicher Heusler-Verbindungen so groß, dass eine vollständige experimentelle Untersuchung unmöglich ist. Hier setzt das Projekt DiProMag an, das ein digitales Datensystem entwickelt, auf dessen Basis sich Materialeigenschaften mit Künstlicher Intelligenz vorhersagen und sich so aussichtsreiche Materialkombinationen deutlich schneller ermitteln lassen.

„In der Zusammenarbeit mit der PMD steht für alle Beteiligten ein intensiver Austausch zum Voneinanderlernen und für die zukünftige Zusammenarbeit im Vordergrund. Zu modellierendes Wissen, das für mehrere Projekte relevant ist, wird gemeinsam entwickelt und in die Kernontologie integriert. Das bedeutet dann weniger Arbeit bei der Modellierung für einzelne Projekte, eine potenziell bessere Modellierung und eine bessere Integrierbarkeit und Verständlichkeit der Daten verschiedener Projekte.“

Teilprojektleiter Dr. Basil Ell (Uni Bielefeld)

Methodik und Tools

Gemeinsam mit einem Industriepartner soll die gesamte Prozesskette von der experimentellen Herstellung und Charakterisierung der magnetokalorischen Materialien über deren theoretische Beschreibung bis zum Aufbau eines Demonstrators realisiert und durchgehend digitalisiert werden. Basierend auf einem neuen Ansatz zur skalierbaren Entwicklung umfangreicher Ontologien werden alle Prozessdaten und verfolgten Absichten digital repräsentiert. Über ein spezielles Verfahren werden diese strukturierten und unstrukturierten Daten zum Trainieren eines hochdimensionalen Datenraumes verwendet, um über Analogieschlüsse vollständig digital neues Wissen über materialphysikalische Zusammenhänge zu gewinnen. Langfristiges Ziel ist der Aufbau einer digitalen magnetokalorischen Materialbasis und deren Nutzung für die Entdeckung und Entwicklung besserer Materialeigenschaften, um zukünftig schneller, effektiver und kostengünstiger industrietaugliche Lösungen in kürzerer Zeit zu finden. In Zusammenarbeit mit einem Hersteller für Haushaltsgeräte sollen im Projekt aus identifizierten erfolgversprechenden Legierungen mittels Hybrid-3D-Drucker Komponenten für ein Kühlgregat erstellt werden, um die Praxistauglichkeit zu testen.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- DFT zur Extraktion von Heisenberg-Austauschkonstanten (VASP)
- Atomistische Spindynamik- und Monte-Carlo-Methoden zur Bestimmung des magnetischen Entropieänderung (CINOLA, Eigenentwicklung)
- Phasenfeldmethode zur Optimierung der Schichtdicken für die martensitische Transformation (Comsol Multiphysics)
- Finite-Elemente-Simulationen des vollständigen Kältezyklus eines prototypischen Devices (Comsol Multiphysics)

Anwendungspotenziale

Die industrielle Anwendung der Magnetokalorik hat das Potenzial für einen Quantensprung im Hinblick auf die Etablierung klimaschonender Kältetechniken, deren Bedarf sich im Zeichen des Klimawandels in den kommenden Jahren stark erhöhen wird. Ein wichtiges Anwendungsfeld ist hier die Hausgeräte-technik, wobei deutsche Hersteller mit der neuen Technologie einen deutlichen Wettbewerbsvorsprung erarbeiten könnten. Generell wird das im Projekt entwickelte Datensystem als Modell dienen, um auf Basis datengetriebener Optimierungsarbeiten schnell und flexibel mit alternativen Materialentwicklungen auf künftige Einschränkungen und Verfügbarkeiten von Rohstoffen reagieren zu können.

Projektdaten

Projekttitle	Digitalisierung einer Prozesskette zur Herstellung, Charakterisierung und prototypischen Anwendung magnetokalorischer Legierungen (DiProMag)
Koordinator	• Fachhochschule Bielefeld
Projektpartner	• Universität Bielefeld
Projektaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5120A-B

1.9 Digitalisierung smarter Materialien und ihrer Herstellungsprozesse

Worum geht es?

Werkstoffentwicklungen sind eine wesentliche Triebkraft für innovative Produkte. Technologische Fortschritte haben in den letzten Jahrzehnten zu einem Trend intelligenter Produkte geführt, bei denen mechanische Systeme mit Hilfe elektronischer Ansteuerung und Datenverarbeitung zu mechatronischen Systemen kombiniert werden. Eine zentrale Rolle spielen dabei die „smartten Materialien“. Diese besitzen die ausgeprägte Eigenschaft, auf externe Einflüsse (wie elektrische, magnetische und thermische Anregungen) z. B. durch Verformung zu reagieren. Im Verbundvorhaben werden exemplarisch die Materialklassen piezoelektrische Keramiken, thermische und magnetische Formgedächtniswerkstoffe sowie dielektrische Elastomere betrachtet. Aufgrund des komplexen und vom Herstellungsprozess abhängigen Materialverhaltens erfordert eine zielgerichtete Entwicklung smarter Materialien jedoch eine exakte Beschreibung der Eigenschaften sowie der dafür notwendigen Herstellungsprozesse. Das Verbundvorhaben fokussiert auf eine digitale Abbildung der Materialien und ihrer Herstellungsprozesse, womit eine beschleunigte Entwicklung von Werkstoffen und Prozesstechnologien im industriellen Maßstab ermöglicht werden soll, um im internationalen Wettbewerb Vorteile erlangen und Marktchancen wahrnehmen zu können.

Methodik und Tools

Im interdisziplinären Konsortium SmaDi, bestehend aus Forscherinnen und Forschern sich ergänzender Gebiete der Informatik, Material- und Ingenieurwissenschaft, werden erstmals übergreifend für verschiedene smarte Materialien effiziente Wege zum Zugriff und zur Analyse großer Datenmengen aus experimentellen Versuchen und Simulationen entwickelt. Daraus werden Ansätze zur Materialherstellung und -anwendung abgeleitet und ein anwendungsspezifischer Vergleich ermöglicht. Schwerpunkt ist einerseits die umfassende Modellierung und computerbasierte Beschreibung der betrachteten smarten Materialien. Andererseits wird ein informationstechnisches Abfragesystem etabliert, das mittels der vorhandenen Modelle und Daten abstrakte Anfragen zu den smarten Materialien beantwortet.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

Für den Datenzugriff wird ein eigenes OBDA-Softwaresystem (Ontologie-basierter Datenzugriff; engl.: ontology-based data access) entwickelt. Neben der reinen Datenabfrage soll auch ein Zugriff auf die Materialmodelle integriert werden, was zum OBDMA-Ansatz (Ontologie-basierter Daten- und Modellzugriff; engl.: ontology-based data and model access) führt. Als Basissystem für die Anfragetransformation dient das Open-Source-System ontop, das u. a. in Form eines Plugins im Protégé-Editor genutzt werden kann. Als Datenbanksystem wird die Open-Source-Lösung PostgreSQL eingesetzt, während als Kommunikationsschnittstelle SPARQL verwendet wird.

Abhängig von der Betrachtungsebene und der Modellgenauigkeit kommen unter anderem lineare und nichtlineare Material- und Hysterese modelle sowie kontinuumsphysikalische und konzentrierte Bauteilmodelle zum Einsatz, die in Workflows eingebunden werden. Neben numerischen Softwaretools, basierend auf der FEM wie z. B. Comsol und Ansys, werden skriptbasierte Lösungen, basierend auf der Programmiersprache wie C++, Python und Matlab, sowie das blockorientierte Softwaretool Matlab/Simulink für die Lösung der Modelle eingesetzt.

Anwendungspotenziale

Die im Konsortium SmaDi angestrebten Ergebnisse können künftig den Forschungsaufwand bei der Auswahl und Optimierung der Materialien erheblich reduzieren und zu passgenauen Produktentwicklungen führen, wovon vor allem Interessenten aus der Industrie und die im Markt involvierten KMU profitieren werden. Perspektivisch verringert dies die Markteintrittshürden für Anbieter von smarten Materialien und ermöglicht somit die Entwicklung, Etablierung und Verbreitung zukunftsweisender Produkte u. a. in den Bereichen Sensorik, Aktorik und für Generatoren. Auf der Grundlage des übergeordneten Ansatzes für smarte Materialien lassen sich die entwickelten informationstechnischen Lösungen außerdem auf andere Materialklassen übertragen und können in Zusammenarbeit mit der Innovationsplattform MaterialDigital für andere Verwertungszweige genutzt werden.

Projektdaten

Projekttitle	Digitalisierung smarter Materialien und ihrer Herstellungsprozesse (SmaDi)
Koordinator	• TU Berlin – Fachgebiet Elektromechanische Konstruktionen
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Universität zu Lübeck – Institut für Informationssysteme • TU Ilmenau – Fachgebiet Mechatronik • TU Chemnitz – Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaft • Fraunhofer-Institut für Werkzeugmaschinen und Umformtechnik (IWU) • Fraunhofer-Institut für Angewandte Polymerforschung (IAP) • Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS)
Projektaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5124A-E

1.10 Besser und effizienter produzieren durch digitale Kautschukverarbeitung

Worum geht es?

In der klassischen Kautschukverarbeitung ist auch zu Zeiten von Industrie 4.0 der Einsatz handwerklichen Personals weiterhin hoch. Dieser Wirtschaftszweig weist somit ein hohes Potenzial bezüglich einer Automatisierung von Arbeitsabläufen auf. Als Beispielprozess aus der Gummiindustrie ist die Verarbeitung von Kautschukmischungen mittels Extrusion gewählt worden. Die Prozesskette, beginnend bei den Rohstoffen und endend beim fertigen Gummibauteil, unterteilt sich in viele Teilschritte. Wesentlich sind neben der Auswahl der Rohstoffe die Prozessschritte Mischen – Walzen – Formgeben – Vulkanisieren sowie die anschließende Qualitätskontrolle am Endprodukt. Entlang der einzelnen Schritte werden viele Daten erhoben, zum Beispiel direkte Maschineneinstellungen wie Drehzahl, Schnecken- und Zylindertemperatur oder indirekte Maschinendaten wie Kautschuktemperatur, Druck und Leistung. Oft ist die Qualität des Endproduktes jedoch stark von den Erfahrungswerten der langjährigen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus den unterschiedlichsten Disziplinen abhängig. Insbesondere beim Einsatz von Naturkautschuk, einem nachwachsenden und häufig nicht spezifizierten Rohstoff, kommt es oft zu Schwankungen in der Verarbeitung. Im Forschungsprojekt DIGITRUBBER sollen das Wissen und die Erfahrung der Mitarbeite-

rinnen und Mitarbeiter genutzt werden, um vorhandene und experimentell zu bestimmende Prozessdaten zu sammeln, auszuwerten und anschließend zu digitalisieren. Um eine Verknüpfung all dieser Daten aus den unterschiedlichsten Disziplinen von Prozesstechnik, Logistik, Chemie, Physik und Mathematik (Simulation) zu vereinen, werden die bestehenden Sprachgebräuche jeder einzelnen Disziplin in eine gemeinsame einheitliche Sprache überführt. Ziel ist es, über die Echtzeit-Vernetzung aller beteiligten Maschinen näher am Qualitäts optimum zu produzieren.

Methodik und Tools

Im Projekt wird eine computergestützte Verknüpfung der Produktionsprozesse Mischen – Walzen – Extrudieren der Kautschukverarbeitung aufgebaut. Die vor, während und nach dem Prozess aufgenommenen Daten werden genutzt, um über geeignete regelungs-technische Algorithmen materialabhängige Verarbeitungsfenster zu identifizieren. Grundvoraussetzungen sind hierbei die zu entwickelnden Online-Messmethoden zur Beurteilung der Material- und Formteilqualität vor, während und nach der Extrusion sowie die Entwicklung eines digitalen Abbilds des Prozesses. DIGITRUBBER verknüpft über Data-Mining und Machine-Learning-Ansätze eine gemeinsame Be-trachtung simulierter und experimenteller Daten und die Auswertung durch den Produktionsprozess gene-rierter Daten. Relevante Parameter der Materialien und Prozesse werden über verschiedene Messsysteme erfasst und digitalisiert, um die Reproduzierbarkeit des Produktionsprozesses sicherzustellen.

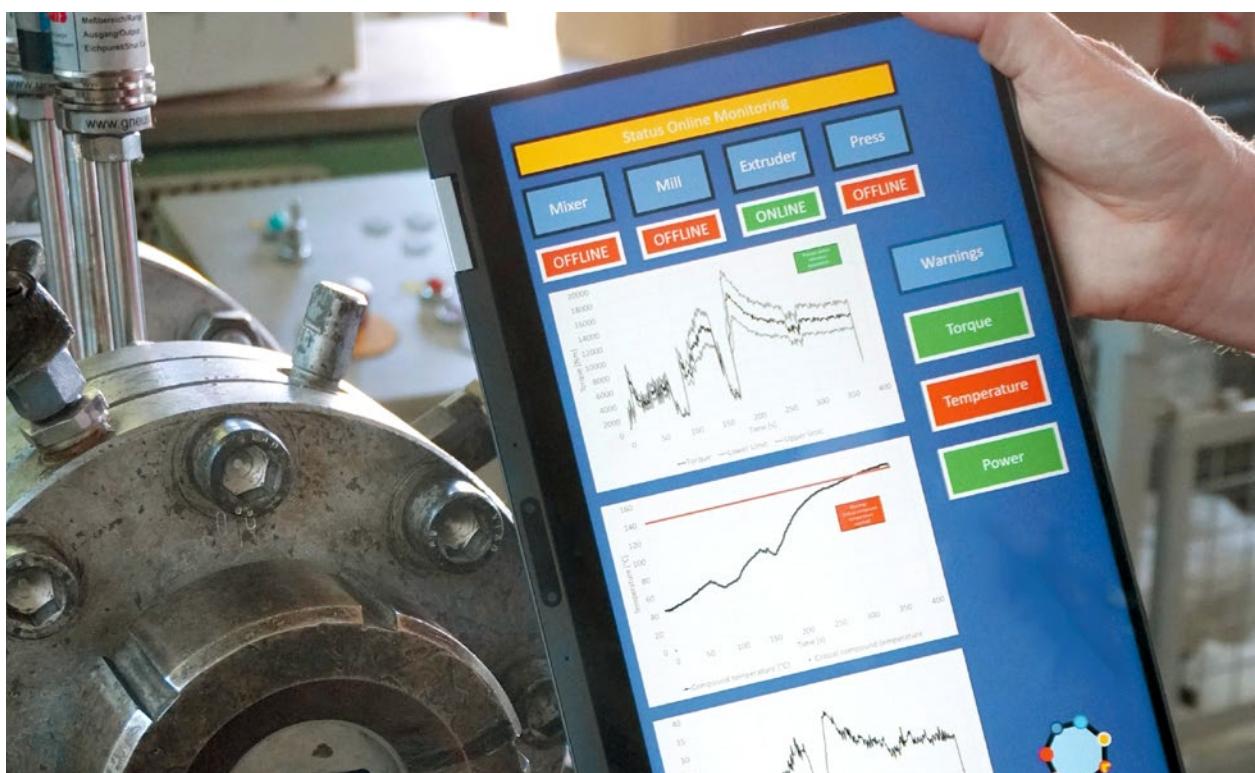
Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

DIGITRUBBER umfasst die Simulation der thermischen, chemischen und mechanischen Eigenschaften von Elastomeren. Das Projekt beinhaltet die Entwicklung neuartiger Gleichungssysteme zur separaten Modellierung der Vulkanisationszwischenprodukte und der Vernetzungsstruktur. Verfahren zur Parameteranpassung geeigneter Vernetzungskinetikmodelle und realistischer hyperelastischer Materialmodelle für ungefüllte und gefüllte Elastomere sollen in MATLAB untersucht werden, um das nichtlineare Verhalten von Elastomeren zu modellieren. Eine Finite-Elemente-Implementierung der thermisch-chemisch-mechanischen Theorie des Vulkanisationsprozess in technischen Elastomeren unter Berücksichtigung der Vernetzungsdichte, einschließlich der Nachvernetzung, ist in kommerziellen Finite-Elemente-Softwareprodukten aktuell nicht verfügbar. Viele Modelle in der Literatur vernachlässigen zudem die Temperaturabhängigkeit, konkurrierende Nebenreaktionen, Reversion usw. Daher soll in diesem Projekt ein innovatives User-Defined-Element-Skript (UEL) in FORTRAN als Subroutine für die kommerzielle Finite-Elemente-Software SIMULIA Abaqus entwi-

ckelt werden, um den Multiphysik-Vulkanisationsprozess in Elastomeren zu simulieren. Die Evaluation von geeigneten Data-Mining- und KI-Algorithmen erfolgt in Python und MATLAB.

Anwendungspotenziale

Die Digitalisierung der Prozesskette der Kautschukverarbeitung hat das Potenzial, den Verarbeitungsprozess und die Qualität von Kautschukfertigteilen zu optimieren und damit erhebliche Kosten durch verringerten Einsatz von Arbeitskraft und Material einzusparen. Neben dem Einsparpotenzial hinsichtlich Ausschussmengen/Fehlchargen an Kautschukmischungen wird sich eine Verringerung des handwerklichen Aufwands bei der Kautschukproduktion ergeben. Sobald eine funktionsfähige Datenbank mit entsprechender Ontologie im Rahmen der Plattform MaterialDigital bereitsteht, ist eine hohe Akzeptanz in der kautschukverarbeitenden Industrie zu erwarten. Prinzipiell besteht nach der Etablierung des Datensystems die Möglichkeit zur Erweiterung auf weitere Prozesse wie Spritzguss und Heizpressen sowie auch auf 2-Komponenten-Fertigung wie Gummi/Metall bzw. Gummi/Thermoplast.



Durch Digitalisierung werden der Verarbeitungsprozess und die Qualität von Kautschukfertigteilen optimiert.

„Die Zusammenarbeit der Einzelprojekte innerhalb der PMD ermöglicht die Entwicklung einer Kernontologie, die Standards und Richtlinien zusammenführt und ein nahtloses Zusammenspiel der materialspezifischen Teiontologien gewährleistet. Die angestrebte Bereitstellung entwickelter Lösungen wird zum Aufbau einer übergreifenden Materialdatenbank beitragen, mit deren Hilfe Datenmengen besser strukturiert, maschinenlesbar und somit für die breite Fachcommunity besser verfügbar gemacht werden.“

Prof. Dr. Ulrich Giese (Deutsches Institut für Kautschuktechnologie e. V.)

Projektdaten

Projekttitle	Digitale Kautschukverarbeitung am Beispiel Extrusion (DIGITRUBBER)
Koordinator	• Deutsches Institut für Kautschuktechnologie e. V.
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Technische Informationsbibliothek (TIB) • Jade Hochschule Wilhelmshaven/Oldenburg/Elsfleth – Standort Oldenburg – Institut für Angewandte Photogrammetrie und Geoinformatik • Institut für Nanophotonik Göttingen e. V. • Hochschule Hannover – Fakultät IV – Wirtschaft und Informatik • Leibniz Universität Hannover – Fakultät für Maschinenbau – Institut für Transport- und Automatisierungstechnik • Leibniz Universität Hannover – Fakultät für Maschinenbau – Institut für Mess- und Regelungstechnik
Projektaufzeit	01.04.2021 – 31.03.2024
Förderkennzeichen	13XP5126A-G

1.11 Verlängerung der Lebensdauer von Windkraftanlagen mittels digitaler Zwillinge

Worum geht es?

Faserverstärkte Kunststoffe (FVK), wie glas- und kohlenstofffaserverstärkte Kunststoffe, verfügen über ein enormes Leichtbaupotenzial und finden zunehmend Anwendung im Mobilitäts- und Energiesektor, beispielsweise zum Bau von tragenden Strukturen in Windkraftanlagen. Wechselnde mechanische Lasten können in diesen Strukturen, wie z. B. Rotorblättern, zu einer allmählichen Veränderung des Materials – der sogenannten Ermüdung – führen und die Funktionsfähigkeit der Anlagen gefährden. Nach dem Boom der letzten Jahrzehnte im Bereich Windenergie werden in Deutschland zurzeit nur noch wenige Kapazitäten neu installiert. Gleichzeitig erreichen mehr und mehr Anlagen das Ende ihrer Lebensdauer. In der

näheren Zukunft muss aus diesem Grund entschieden werden, ob ein wesentlicher Teil der bestehenden Anlagen weiterbetrieben werden kann oder vom Netz genommen werden muss. Das Forschungsvorhaben SensoTwin verfolgt das Ziel, die Untersuchung des Ermüdungsverhaltens von FVK voranzutreiben und dabei virtuell Fertigungsdefekte und Streuungen der Materialeigenschaften zu berücksichtigen, um eine zuverlässige digitale Prognose der Dauerfestigkeit von Faserverbundwerkstoffen zu erzielen.

Methodik und Tools

Der Forschungsansatz des Projektes ist es, Schädigungseffekte, die während der Verarbeitungs- und Herstellprozesse von FVK-Bauteilen auftreten, messtechnisch und simulativ zu erfassen und sie mit experimentellen und realen am Bauteil gemessenen Daten abzugleichen. Basis hierfür ist die Entwicklung einer Ontologie zur digitalen Verarbeitung relevanter Material- und Prozessdaten und darauf aufbauend

eine Software-App zur Berechnung der Betriebsfestigkeit von FVK, mit der Materialstrukturen und -eigenschaften auf verschiedenen Skalenebenen und Lebensabschnitten genauer beschrieben und vorhergesagt werden können. Der Fokus der Untersuchungen liegt auf dem für die Fertigung von Rotorblättern für Windkraftanlagen gängigsten Fertigungsprozess, der Vakuuminfusion von trockenen Faserhalbzeug-Gelegen mit anschließender Härtung. Die Simulationsaktivitäten adressieren vor allem die Erfassung der Faserorientierungsverteilung aus einer Drapier-simulation, die Analyse der Eigenspannungen aus einer Aushärtesimulation sowie die Betrachtung des Ermüdungsverhaltens in einer Struktursimulation. Durch den Einsatz faseroptischer Sensoren an einem Demonstratorbauteil kann das Ermüdungsverhalten im zyklischen Betrieb bis zum Versagen gemessen und mit dem digitalen Modell verglichen werden. Mit dem im Projekt entwickelten digitalen Zwilling wird es möglich, die Einflüsse aus dem Herstellprozess, wie Defekte, Eigenspannungen, Faserorientierungsverteilungen, Porositäten oder Faservolumengehältsgradi-enten, zu bewerten und mit realen Belastungsdaten zu koppeln.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- Prozesssimulation (Finite-Elemente-Methode) mit Abaqus FEA und COMPRO
- Multiskalen-Struktursimulation (Finite-Elemente-Methode) mit Abaqus FEA
- Ontologieentwicklung mit Protégé und WebVOWL
- Ontologieimplementierung mit Jupyter Notebook, Pyiron und Git

Anwendungspotenziale

Die im Projekt entwickelten digitalen Werkzeuge sollen einen Beitrag leisten, um die Rezertifizierung bestehender Windkraftanlagen zu verbessern und Altanlagen über die bei Inbetriebnahme berechnete Lebensdauer hinaus zu betreiben. Die Einbindung von mehreren Industrieparten aus den Bereichen der Herstellung und Zertifizierung von Windanlagen begünstigt die praktische Verwertung der Ergebnisse. Darüber hinaus werden die Arbeiten zur Entwicklung einer strukturierten Materialontologie und eines generischen Softwaretools zur Betriebsfestigkeitsrechnung von FVK auch anderen Branchen, die FVK nutzen, zugutekommen. Sicherheitsmargen und überdimensionierte Bauteilauslegungen aufgrund von Toleranzen bezüglich der Material- sowie Fertigungsqualität können so reduziert und dadurch die Wirtschaftlichkeit des Einsatzes faserverstärkter Kunststoffe weiter verbessert werden.

Projektdaten

Projekttitle	Sensorintegrierter Digital Twin für Hochleistungs-Faserverbundanwendungen (SensoTwin)
Koordinator	• Technische Universität München
Projektpartner	• Technische Hochschule Deggendorf
Projektaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5121A-B





1.12 Betondesign digital: Potenziale für das Bauwesen

Worum geht es?

Beton ist weltweit einer der wichtigsten Konstruktionswerkstoffe und zeichnet sich durch eine enorme Anpassungsfähigkeit an sich verändernde Anforderungen aus. Damit verbunden ist eine hohe und kontinuierlich zunehmende Komplexität hinsichtlich der Ausgangsstoffe, Rezepturen und des Herstellungsprozesses. Bisher sind die Daten zu Einzelaspekten dieser komplexen Kette fragmentiert bei den jeweiligen Akteuren gespeichert, so dass eine Zusammenführung über den kompletten Herstellungsprozess selten möglich ist. Somit setzt eine Ausschöpfung des technischen und umweltbezogenen Potenzials der Betonbauweise höchste Expertise bei den Einzelakteuren der Bauindustrie voraus. Der derzeit unbefriedigende Transfer von neuen Erkenntnissen aus der Forschung und Erfahrungen aus erfolgreichen Spezialanwendungen in die breite Praxis wirkt sich hierbei nachteilig aus. Das Verbundprojekt „LeBeDigital“ stellt sich die herausfordernde Aufgabe, ein allgemein verfügbares und auf den Prozess der Betonherstellung maßgeschneidertes Daten- und Wissensmanage-

ment auf Basis allgemeingültiger Ontologien und Workflows zu entwickeln. Dabei liegt der Fokus auf dem Herstellungsprozess unter den gut steuerbaren Bedingungen in der Fertigteilindustrie. Ziel ist es, skalierbar übergreifend die für die Betonherstellung relevanten experimentellen und simulierten Materialdaten wissensbasiert zu verknüpfen, zu validieren und für zukünftige Anwendungen in der Fertigteilproduktion nutzbar zu machen.

Methodik und Tools

Das Projekt zielt zunächst auf die experimentelle Beschreibung von Prozessen bei der Betonherstellung, wie Mischen, Hydratation und Lagerung, mit Hilfe einer Ontologie. Diese bildet die Klammer, um bereits existierende erfahrungs- und datenbasierte Modelle sowie experimentelle Datensätze in einem Workflow zu integrieren, der es ermöglicht, aus Messdaten zusätzliche, abgeleitete Größen zu bestimmen. Weiterhin werden Module zur Simulation von Beton auf Makro-, Meso- und Mikroskala weiterentwickelt und Schnittstellen definiert, um einzelne spezifische Softwareimplementierungen austauschbar und das Tool damit universell nutzbar zu machen. Ein zentraler Aspekt ist dabei die Entwicklung eines Konzepts zur Speicherung experimenteller wie

auch simulierter Daten inklusive der Metadaten, die innerhalb des Betonherstellungsprozesses von den Ausgangsstoffen bis zum Bauteil in einer Datenbank gespeichert und abrufbar sind.

Eingesetzte Simulationsmodelle und Softwaretools

- FEM-Modelle zur Simulation der mechanischen Verformungen (Schwinden, thermische Ausdehnung, Kriechen, Schädigung) sowie Temperatur (unter Berücksichtigung der Hydratation) (Software FEniCS)
- Zementhydratation (CEMHYD3D)
- Stochastische Modellkalibrierung (pyro, nestle, dynesty, emcee, all integrated in prob_taralli)

Anwendungspotenziale

Die Entwicklung einer wissensbasierten Datenbank, die hochwertige Erfahrungs- und Forschungsdaten für die Allgemeinheit dauerhaft nutzbar und öffentlich zugänglich macht, bietet Potenziale für einen Perspektivwechsel im Bauwesen von einer regulatorisch vorgegebenen Betonherstellung zum wissensbasierten, performanceorientierten Materialdesign. Beispiele für nutzbringende Anwendungen in der Industrie sind die Auswertung von Daten mit Hilfe maschineller Lernverfahren als Grundlage für numerische Simulationen zur Materialoptimierung oder die Steuerung und Automatisierung der Produktion von Betonfertigteilen. Dies verspricht Fortschritte für alle Aspekte des Lebenszyklus von Betonbauteilen und einen Innovationsschub durch eine gezieltere, leistungs- und ressourcenbezogene Steuerung der Betoneigenschaften. Dadurch wird nicht nur ein wichtiger Beitrag für mehr Nachhaltigkeit und Ressourceneffizienz im Bauwesen geleistet, sondern auch die Wettbewerbsfähigkeit der deutschen Bauindustrie gesteigert. Durch die Einbindung von mehreren Industrieparten aus verschiedenen Anwendungsbereichen von Beton wird ein unmittelbarer Transfer der Projektergebnisse in die Praxis unterstützt.

Projektdaten

Projekttitle	Lebenszyklus von Beton – Ontologie-Entwicklung für die Prozesskette der Betonherstellung (LeBeDigital)
Koordinator	<ul style="list-style-type: none"> • Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)
Projektpartner	<ul style="list-style-type: none"> • Technische Universität München – Professur für Kontinuumsmechanik • Karlsruher Institut für Technologie (KIT) – Institut für Massivbau und Baustofftechnologie
Projektaufzeit	01.02.2021 – 31.01.2024
Förderkennzeichen	13XP5125A-C

1.13 Vorhersage der Qualitätseigenschaften von Lithium-Ionen-Batterien durch maschinelles Lernen

Worum geht es?

Wiederaufladbare Batterien sind eine Schlüsseltechnologie des 21. Jahrhunderts und für die deutsche Wirtschaft von großer strategischer Bedeutung. Mit Blick auf die Elektromobilität und viele weitere Lebensbereiche gewinnt die Speicherung elektrischer Energie eine besondere Bedeutung. Vor diesem Hintergrund ist es notwendig und erklärtes Ziel in der Hightech-Strategie 2025 der Bundesregierung, dass Deutschland die industrielle Herstellung von Batteriezellen entlang der Wertschöpfungsstufen beherrscht. Die Produktion von Batteriezellen ist eine Abfolge von komplexen Einzelprozessen, an denen verschiedene Industriebranchen beteiligt sind, so etwa die chemische Industrie sowie der Anlagen- und Maschinenbau. Angestrebt wird eine hohe Leistungsfähigkeit und Qualität der Batteriezellen bei niedrigen Kosten. Allerdings gibt es derzeit noch Lücken bei der detaillierten wissenschaftlichen Beschreibung der komplexen Zellproduktionsprozesse, da nicht jede Forschungseinrichtung alle Aspekte auf den unterschiedlichen Größenskalen und bei dem komplexen Wechselspiel der Materialien untereinander alleine abschließend bearbeiten kann.

Traditionell basieren Batterie- und Elektrodenmaterialien auf historisch gewachsenen Rezepturen und empirisch bewährten Prozessen, deren Eigenschaften bei jedem Entwicklungsschritt durch aufwändige Serienversuche ermittelt werden müssen. Die dabei gewonnenen heterogenen Daten lassen sich bisher nur schwer mit Daten aus Herstellungsprozess und Systemcharakterisierung verknüpfen. Das erschwert es, die Eigenschaften etablierter Batteriematerialien zu verbessern und neue Batteriematerialien seriös zu erproben und zu vergleichen.

Ziel des Vorhabens ist es daher, eine Plattform für Daten zu Batteriematerialien zu etablieren, die Vorhersagen zu Qualität und Performanz durch Maschinellenlernen und Korrelationsanalysen ermöglicht. Ein etabliertes und ein innovatives neues Elektrodenmaterial werden im Projekt vom Rohstoff bis zur Zelle charakterisiert, optimiert und verglichen. Der Komplexität der Wissensdomäne von Batterien und ihren heterogenen Materialien wird durch einen Wissensgraphen Rechnung getragen, in dem die Komponenten auf verschiedenen Skalen ontologisch modelliert sind. So können Materialdaten und -wissen logisch miteinander verknüpft und abgefragt werden.



Methodik und Tools

Die Grundlage für das Projekt bildet die Entwicklung von Ontologien, die einerseits das System Batterie hinsichtlich Datenarten, Messmethoden, Auswertung und Zuordnung zu unterschiedlichen Aspekten und andererseits auch die relevanten Materialkomponenten wie Aktivmaterial, Leitadditive, Binder und Elektrolyt eindeutig beschreiben und logisch miteinander verknüpfen. Es wird ein digitales System als Grundlage für „digitale Zwillinge“ von Batterien entwickelt, das durch bereits vorhandene und neu erzeugte Daten und Metadaten befüllt wird. Die Daten lassen sich durch moderne Algorithmen der Korrelationsanalyse und des maschinellen Lernens auswerten, um daraus konkrete Verbesserungspotenziale für die Batteriefertigung abzuleiten. Ebenfalls können Vorhersagen zur Qualität von Batteriezellen getroffen werden auf Basis vorliegender Material- und Prozessdaten. Das Datensystem wird exemplarisch angewendet zur Prüfung der Leistungsfähigkeit innovativer Elektrodenmaterialien auf Basis von Lithiummanganoxid (LMO) und Lithiumtitanoxid (LTO) sowie zur Erhöhung der Schnellladefähigkeit des etablierten Systems Nickel-Mangan-Kobaltoxid (NMC).

Projektdaten

Projekttitle	Digitale Plattform für Batteriematerialdaten, -wissen und deren Verknüpfung (DigiBatMat)
Koordinator	• Leibniz-Institut für neue Materialien gGmbH
Projektpartner	• Hochschule Aalen – Institut für Materialforschung • TU Braunschweig, Battery LabFactory Braunschweig – Institut für Partikeltechnik • AWS-Institut für digitale Produkte und Prozesse gGmbH • Karlsruher Institut für Technologie – Institut für Angewandte Informatik und Formale Beschreibungsverfahren
Projektaufzeit	01.03.2021 – 29.02.2024
Förderkennzeichen	03XP0367A-E

Anwendungspotenziale

Die im Vorhaben entwickelten Applikationen lassen sich komfortabel und zuverlässig einsetzen, um Vorhersagen zu Qualität und Materialverhalten in Batterien zu treffen und Korrelationen zu identifizieren, die Potenziale beispielsweise für verbesserte Materialien, Elektroden oder Prozessparameter bieten. Das Vorhaben DigiBatMat gliedert sich damit nahtlos in das vorhandene Dachkonzept „Forschungsfabrik Batterie“ zur Stärkung der gesamten Wertschöpfungskette Batterie ein und erweitert zusätzlich die Innovationsplattform MaterialDigital im Hinblick auf Batteriematerialien und -systeme.

Projektübersicht

Projekt	Materialklasse	Fertigungsprozesse	Ontologie-entwicklung
DigiBatMat	Batteriematerialien	Batterieelektroden- und Zellfertigung	•
DIGITRUBBER	Kautschuk	Kautschukverarbeitung • Mischen • Walzen • Extrudieren	•
DiProMag	Magnetokalorische Materialien (Heusler-Legierungen)	Bulkmaterial, ultradünne Filme, 3D-Druck	•
DiStAl	Aluminiumlegierungen	3D-Druck (selektives Laserschmelzen)	•
GlasDigital	Glaswerkstoffe	Robotergestütztes Glasschmelzen, Inline-Sensorik	•
iBain	Bainitische Stähle	Isotherme Wärmebehandlung	•
KNOW-NOW	Technische Keramiken	Keramische Multilayertechnologie • Pulverentwicklung • Foliengießen • Grünbearbeitung/Metallisieren/Laminieren • (Co-)Sinterung	•
KupferDigital	Kupferwerkstoffe	Strangguss Recycling Erzgewinnung Legierungsentwicklung Materialcharakterisierung	•
LeBeDigital	Beton (zementgebundene Baustoffe)	Betonherstellung • Mischen • Betonieren • Erhärtungsprozess • Festbetoneigenschaften	•
ODE_AM	Nichtrostende Stahlwerkstoffe	3D-Druck • Laserstrahlschmelzen • Extrusion • Auftragsschweißen	•
StahlDigital	Stahlbleche	Kaltwalzen Wärmebehandlung Umformen	•
SensoTwin	Faserverstärkte Kunststoffe	Vakuuminfusion Härtung Drapieren Online-Sensorik	•
SmaDi	Thermische und magnetische Formgedächtniswerkstoffe (SMA und MSM), piezoelektrische Keramiken (PC), dielektrische Elastomere (DE)	SMA: Schmelzmetallurgie; Halbzeugumformung MSM: Schmelzmetallurgie; Orientierung Einkristall PC: Polungsvorgang DE: Polymerprozessierung; Beschichtung; Laminierung	•

Digitale Methoden				Anwendungen	Branchen	Seite
Maschinelles Lernen/ Künstliche Intelligenz	Multiskalen- modellierung	Virtuelle Prognose (Ermüdung/ Schädigung)	Virtuelles Material- design			
•				<ul style="list-style-type: none"> Lithium-Ionen-Batterien Elektrodenentwicklung und -fertigung 	<ul style="list-style-type: none"> Elektromobilität Elektronik Energiespeicherung 	28–29
•	•			<ul style="list-style-type: none"> Kautschukhalbzeuge Kautschukfertigteile 	<ul style="list-style-type: none"> Kautschuk Automobil Mobilität Industrie 	22–24
•	•		•	<ul style="list-style-type: none"> Magnetokalorische Kühlaggregate 	<ul style="list-style-type: none"> Kühlprozesse in Industrie- und Consumeranwendungen 	19–20
	•		•	<ul style="list-style-type: none"> Additive Fertigung Leichtbau Industrie 4.0 	<ul style="list-style-type: none"> Metall Energie Mobilität Maschinenbau 	11–12
•	•		•	<ul style="list-style-type: none"> Glasig-kristalline Funktionswerkstoffe Glasfaserverbunde Displays 	<ul style="list-style-type: none"> Optik Informationstechnik Mikroelektronik/-mechanik 	15–16
•	•	•		<ul style="list-style-type: none"> Hochfeste Stähle Leichtbau 	<ul style="list-style-type: none"> Automobil Maschinenbau Industrie 	10–11
	•			<ul style="list-style-type: none"> Schaltungsträger/ elektronische Bauteile Passive Multilagen-Bauelemente Festoxidbrennstoffzellen 	<ul style="list-style-type: none"> Telekommunikation Automobil Energie Mikroelektronik 	17–18
	•	•	•	<ul style="list-style-type: none"> Draht/Kabel-Produkte Kontaktierung und Steckverbinder Industrie 4.0 Strukturwerkstoffe 	<ul style="list-style-type: none"> Metall/Recycling Elektronik Energie Mobilität 	6–7
•	•	•	•	<ul style="list-style-type: none"> Mischungsdesign Fertigteilproduktion Innovative Betone Eigenschaftsprognose 	<ul style="list-style-type: none"> Baustoffindustrie Bauindustrie Maschinenbau 	26–27
	•	•		<ul style="list-style-type: none"> Additive Fertigung Leichtbau Industrie 4.0 	<ul style="list-style-type: none"> Automobil Maschinenbau Industrie 	13–14
	•	•		<ul style="list-style-type: none"> Optimierte Stahlbleche Crashsicherheit 	<ul style="list-style-type: none"> Automobil Industrie 	7–9
	•	•		<ul style="list-style-type: none"> Leichtbau Virtuelle Lebensdauerprognose 	<ul style="list-style-type: none"> Windkraft Leichtbau 	24–25
•	•	•	•	<ul style="list-style-type: none"> Sensoren Aktoren Generatoren Smarte Systeme 	<ul style="list-style-type: none"> Maschinenbau und Fahrzeugtechnik Consumeranwendungen Medizin-/Präzisionstechnik Luft- und Raumfahrt 	21–22

2 Glossar und Abkürzungen

Additive Fertigung/3D-Druck: dreidimensionale Formgebung bzw. Fertigung durch Hinzufügen von Materialsträngen oder -schichten im Gegensatz zu subtraktiven Verfahren wie Fräsen, Bohren, Schleifen oder Umformverfahren wie Schmieden, Walzen, Extrudieren. Zeichnet sich u. a. durch hohe Materialausbeute, Einzelstücktauglichkeit sowie höhere gestalterische Freiheit aus.

Datenraum: multidimensionale, einheitlich strukturierte Ablagemöglichkeit für (Material-)Daten und Metadaten, um vorhandene Datensätze auffindbar, verfügbar, lesbar und nutzbar zu machen.

DEM: Diskrete-Elemente-Methode (Computersimulation).

Digitaler (Material-)Zwilling: virtuelles Abbild eines realen Materials inklusive aller seiner Eigenschaften, seiner Zusammensetzung und seiner (Verarbeitungs-) Historie.

(Digitaler) Workflow: eindeutige Beschreibung einer Abfolge von Schritten digitaler Datenverarbeitung, so dass diese von Dritten auf eigenen Computersystemen mit eigenen Daten nachvollzogen und wiederholt werden können.

FAIR: Prinzip der Vorhaltung von Daten: findable (auffindbar), accessible (zugänglich), interoperable (mit gängigen Verarbeitungsformen kompatibel), reusable (wiederverwendbar).

FEM: Finite-Elemente-Methode (Computersimulation).

KI (Künstliche Intelligenz): Teilgebiet der Informatik mit der Zielsetzung, Maschinen logisches Denken, Lernen, Planen und Kreativität zu ermöglichen. Betrifft wissensbasierte (Experten-)Systeme oder solche zur Mustererkennung, häufig basierend auf neuronalen Netzen oder maschinellem Lernen.

Maschinelles Lernen: Methode zum automatisierten „Lernen“ von Gesetzmäßigkeiten durch eigenständige Mustererkennung zur späteren Vorhersage ähnlicher Problemstellungen für eine Maschine.

Mikrostruktur oder Gefüge: Aufbau und Ordnung der Bestandteile von Werkstoffen auf sichtbarer und mikroskopischer Ebene.

Neuronales Netz: KI-Methode für maschinelles Lernen. Knotenpunkte (Neuronen) repräsentieren eine mathematische Formel, die einen Input zu einem spezifischen Output verarbeiten. Durch das Zusammenwirken einer Vielzahl verbundener Neuronen können aus großen Datenmengen Muster erkannt werden, z. B. bei der Bilderkennung.

Ontologie: sprachlich gefasste und formal geordnete Darstellungen einer Menge von Begriffen und der zwischen ihnen bestehenden Beziehungen. Ontologien bilden die Grundlage für die digitale Erfassung und Verknüpfung von Prozessschritten und Materialeigenschaften.

OWL: Web Ontology Language (maschinenlesbare Sprache für die Entwicklung und Veröffentlichung von Ontologien).

PMD: Plattform MaterialDigital.

Python: moderne, offene Programmiersprache.

RDF: Resource Description Framework (Datensystem, um logische Aussagen über beliebige Dinge zu formulieren, z. B. zur Beschreibung von Metadaten).

Skalenübergreifende Simulation: Berücksichtigung unterschiedlicher Zeit- und Längenskalen in Bezug auf die betrachteten Materialien und sie betreffende Effekte.

Weitere Begriffe und Abkürzungen unter:
materialdigital.de/glossar/

Impressum

Herausgeber

Bundesministerium
für Bildung und Forschung (BMBF)
Referat Werkstoffinnovationen, Batterie; Hereon, KIT
53170 Bonn

Diese Publikation wird als Fachinformation des Bundesministeriums für Bildung und Forschung kostenlos herausgegeben.
Sie ist nicht zum Verkauf bestimmt und darf nicht zur Wahlwerbung politischer Parteien oder Gruppen eingesetzt werden.

Bestellungen

schriftlich an
Publikationsversand der Bundesregierung
Postfach 48 10 09
18132 Rostock
E-Mail: publikationen@bundesregierung.de
Internet: bmbf.de
oder per
Tel.: 030 18 272 272 1
Fax: 030 18 10 272 272 1

Stand

Februar 2022

Text

BMBF
VDI Technologiezentrum GmbH

Gestaltung

familie redlich AG – Agentur für Marken und Kommunikation
KOMPAKTMEDIEN – Agentur für Kommunikation GmbH

Druck

BMBF

Bildnachweise

Titel: Adobe Stock/BGStwock72
U2: Bundesregierung/Guido Bergmann
S. 2: Adobe Stock/sittinan
S. 5: Stock-Mueller
S. 7: Adobe Stock/industrieblick
S. 9: Fraunhofer IWM Freiburg
S. 11: Adobe Stock/phomlamaiphoto
S. 12: Adobe Stock/monamakela.com
S. 13: Universität Weimar
S. 14: Adobe Stock/Pixel_B
S. 15: Fraunhofer ISC Würzburg
S. 17: Fraunhofer IKTS
S. 18: Adobe Stock/xiaoliangge
S. 19: Adobe Stock/helenedevun
S. 23: Deutsches Institut für Kautschuktechnologie e.V.
S. 25: Adobe Stock/zentilia
S. 26: Adobe Stock/Aikon
S. 28: Adobe Stock/xiaoliangge

