

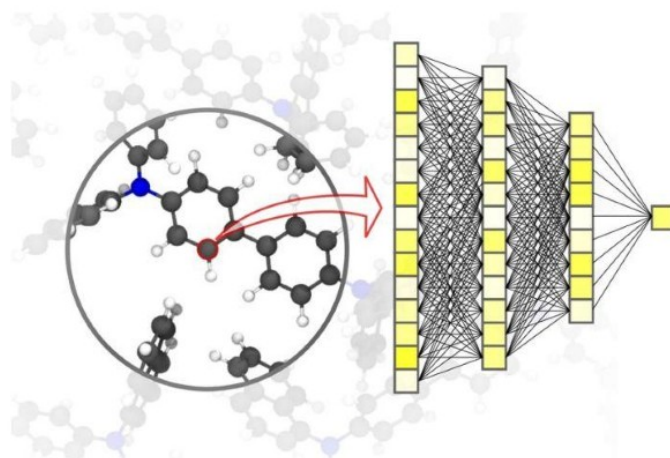
08.07.2021 | Materialentwicklung | Im Fokus | Onlineartikel

Wie Künstliche Intelligenz die Materialentwicklung beschleunigt

Autor: Dieter Beste

5 Min. Lesedauer

Maschinelles Lernen, wird es künftig ermöglichen, komplexe Materialsysteme rein virtuell zu entwickeln, sind Werkstoffwissenschaftler überzeugt. Und KI hilft, Werkstoffe auf atomarer Ebene besser zu verstehen und zu optimieren.



Neuronale Netze ermöglichen präzise Materialsimulationen – bis hinunter auf die Ebene einzelner Atome.

© Pascal Friederich, KIT

Digitalisierung und Virtualisierung geben inzwischen auch in der Materialwissenschaft den Ton an. Schnelle und zugleich genaue Simulationsmethoden sind dabei das A und O: "In den letzten Jahrzehnten hat sich die Materialforschung hin zu einem rationelleren Design entwickelt", konstatieren Yuan Cheng, Tian Wang und Gang Zhang in ihrem Vorwort zu "Artificial Intelligence for Materials Science". Mit den großen Datenmengen, die durch Theorie und in Experimenten generiert werden, sei es in den letzten Jahren gelungen, maschinelle Lernansätze in der Materialforschung zu verfolgen und einige Herausforderungen auf dem Weg zum rationellen Materialdesign zu lösen, so die Herausgeber. Sie verweisen auf die im Weiteren beschriebenen Erfolge des Maschinellen Lernens wie etwa die beschleunigte Entdeckung von thermoelektrischen

Materialien, Hochentropie-Legierungen oder der schnelle Einblick in Perowskit-Materialien.

In der Zeitschrift "Nature Materials" geben Pascal Friederich vom Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Jonny Proppe von der Universität Göttingen sowie Florian Häse und Alán Aspuru-Guzik von der University of Toronto einen aktuellen Überblick über die grundlegenden Prinzipien des für Materialsimulationen eingesetzten Maschinellen Lernens, den dafür zugrunde liegenden Datenerfassungsprozess und aktive Lernverfahren. Die Wahl der Simulationsmethoden in der rechnergestützten Materialwissenschaft werde durch einen grundlegenden Konflikt bestimmt, ist Ausgangspunkt der Wissenschaftler: es gelte einerseits, große Zeit- und Längenskalen mit einem erschwinglichen Rechenaufwand zu überbrücken, wobei andererseits für die Untersuchung komplexer Phänomene auf großen Skalen schnelle und dennoch genaue Berechnungsmethoden erforderlich seien. Darum führe am Maschinellen Lernen, das es erlaube, "die Genauigkeit quantenmechanischer Berechnungen bei wesentlich geringeren Rechenkosten zu erreichen", kein Weg vorbei.

Algorithmen für Maschinelles Lernen ermöglichen Künstlicher Intelligenz (KI), die eingegebenen Daten nicht nur zu verarbeiten, sondern in großen Datensätzen Muster und Korrelationen zu finden, daraus zu lernen und selbstständig Vorhersagen und Entscheidungen zu treffen. Bei Materialsimulationen komme es darauf an, eine hohe Präzision über verschiedene Zeit- und Größenskalen – vom Atom bis zum Werkstoff – zu erreichen und zugleich die Rechenkosten zu begrenzen, betont Erstautor Pascal Friederich, Professor am KIT und dort Leiter der Forschungsgruppe AiMat – Artificial Intelligence for Materials Sciences am Institut für Theoretische Informatik (ITI): "Gegenüber herkömmlichen Simulationsmethoden, die auf klassischen oder quantenmechanischen Rechnungen basieren, lässt sich mit speziell auf Materialsimulationen zugeschnittenen neuronalen Netzen ein deutlicher Geschwindigkeitsvorteil erreichen."

KI analysiert komplexe Materialien

Wie groß das Potenzial von KI-Anwendungen in der Materialforschung ist, verdeutlicht ein Erfolg am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE). Dort gelang es jüngst, mechanisches Verhalten anhand eines tiefenneuronalen Netzes vorherzusagen. Das ist zunächst nicht ungewöhnlich, denn längst existiert eine riesige Sammlung von numerischen Werkzeugen und Methoden, um die komplexen Gleichungen computergestützt zu lösen und korrekte Antworten zu verschiedenen mechanischen Problemen vorherzusagen. Aber, heißt es in einer Mitteilung des MPIE, das direkte Lösen dieser Gleichungen brauche Zeit und werde umso schwieriger, je komplexer das System sei. Deswegen sehen sich Forscher oft dazu gezwungen, Näherungen zu verwenden, anstatt alle Variablen des Systems zu berücksichtigen.

Am MPIE gelang nun ein großer Schritt in Richtung genauer und schneller Vorhersagen der Mechanik komplexer Materialien: Die Wissenschaftler nutzten zusammen mit Spezialisten des auf KI spezialisierten Unternehmens DeepMetis, tiefe neuronale Netze,

um lokale Spannungen in komplexen Materialien zu berechnen – und das bis zu 8300-mal schneller als ein Standard-Rechensystem, ein sogenannter Solver, es leisten könnte, berichten sie voller Stolz in der Zeitschrift "npj Computational Materials".

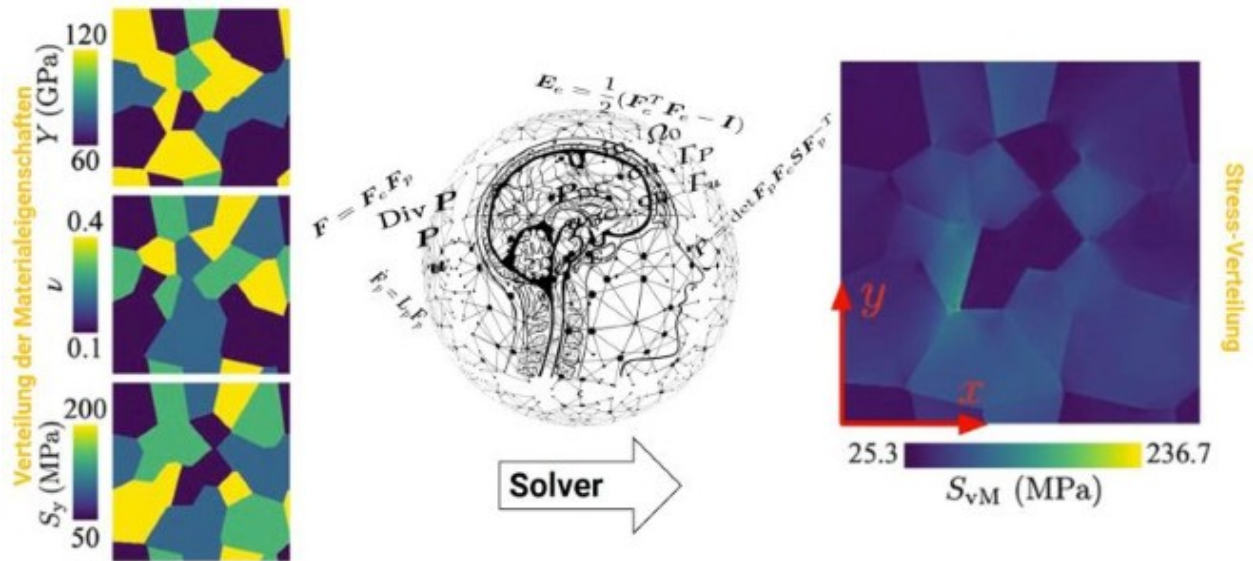
Lösungen in Mikrosekunden

"Unsere Arbeit zeigt, wie all diese Berechnungen durch Maschinelles Lernen ersetzt werden können. Anstatt die Gleichungen direkt zu lösen, haben wir ein neuronales Netzwerk entwickelt, das die Physik erlernen und korrekte Antworten auf komplexe und nichtlineare Fragen der Mechanik vorhersagen kann, indem es sich einfach einen großen Datensatz ansieht", sagt Jaber Rezaei Mianroodi, Leiter der MPIE-Gruppe "Computational Sustainable Metallurgy" und Erstautor der Veröffentlichung. Nachdem das neuronale Netz mit vorberechneten korrekten physikalischen Reaktionen trainiert wurde, war es in der Lage, Lösungen für Probleme und Konfigurationen vorherzusagen, denen es während des Trainings nie begegnet ist. Ähnlich wie ein Ingenieur, der ein Gespür für komplexe mechanische Probleme durch viel Erfahrung entwickelt und in der Lage sei, innerhalb von Sekunden fundierte Vermutungen anzustellen, lerne das Netzwerk die zugrunde liegende Physik und sage Lösungen in Mikrosekunden vorher. Dabei seien die Vorhersagen des Netzwerks trotz der Komplexität des Systems um Größenordnungen schneller als derjenigen herkömmlicher Solver. Und im Vergleich zu konventionellen Solvern – Wilhelm Rust erklärt in "Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnungen mit ANSYS Workbench" den konventionellen Solver-Einsatz unter anderem am Beispiel des Kriechens – entfalle bei der Lösung nichtlinearer Probleme beim trainierten maschinellen Solver auch der Zwang zum iterativen Vorgehen nach dem Prinzip Versuch und Irrtum.

"Diese Methode kann die herkömmlichen Solver ersetzen und verbessert unser Verständnis von Multiskalen- und Multiphysik-Problemen. Unser Solver verbraucht um Größenordnungen weniger Rechenzeit, was neue Möglichkeiten für innovative Materialmodelle eröffnet. Die Einbeziehung unserer maschinellen Lerntechnik wird uns dabei helfen, die Modelle aussagekräftiger und realistischer zu machen, da sie die Optimierung noch komplizierterer Systeme ermöglicht", fasst Nima Siboni, Experte für künstliche Intelligenz bei DeepMetis und Alumni des MPIE, die Ergebnisse der Forschungszusammenarbeit zusammen.

Noch mehr Tempo mit hybriden Methoden

Um die Möglichkeiten der Materialsimulationen zukünftig noch zu erweitern, schlagen die Autoren um Pascal Friederich in Nature Materials vor, hybride Methoden zu entwickeln: So könnten Verfahren des Maschinellen Lernens (ML) und der Molekularen Mechanik (MM) miteinander verbunden werden. MM-Simulationen bedienen sich sogenannter Kraftfelder, um die auf jedes einzelne Teilchen wirkenden Kräfte zu berechnen und damit Bewegungsabläufe vorherzusagen. Die Ähnlichkeit der ML- und MM-Potenziale erlaube eine enge Integration mit variablen Übergangsbereichen. Solche hybriden Methoden könnten künftig beispielsweise die Simulation großer Biomoleküle oder enzymatischer Reaktion noch einmal deutlich beschleunigen.



Anhand vieler vorberechneter korrekter Antworten lernt das neuronale Netz die versteckten Beziehungen zwischen den eingegebenen Daten und den Ergebnissen der Simulationen. © J. R. Mianroodi, MPIE

Firmeneintrag (ANZEIGE)

Soudal NV

[Firmendetails sehen](#)

Produktnews von Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH (Webinare) (ANZEIGE)

ATZ-Webinar Aufzeichnung: Akustische virtuelle Produktentwicklung in der Automobilindustrie

Worum geht es in dem Webinar? Die Referenten von COMSOL zeigen, welche Vorteile und Chancen die akustische virtuelle Produktentwicklung mithilfe von digitalen Referenzen/Zwillingen bietet, wie Sie Simulation nachhaltig einsetzen, wie Sie bereits...

[Webinar Aufzeichnung ansehen.](#)

Whitepaper von ASIS GmbH (ANZEIGE)

Automatisches Finish

Nach der Lackierung (Decklack oder KTL) entstehen zum Beispiel durch Staubeinschlüsse sichtbare Defekte im Lack. Diese mussten bislang in Handarbeit energie- und kostenintensiv entfernt werden. ASIS bietet mit dem automatischen Finish eine...

[Jetzt gratis downloaden!](#)

Wie sich mit informellem Lernen die digitale Revolution im Maschinenbau meistern lässt

Um im Maschinenbau die Wettbewerbsfähigkeit zu erhalten, ist die Ausstattung der Belegschaft mit Wissen & Können oberster Punkt auf jeder To-do-Liste im Management. Wie können Sie sicherstellen, dass Ihre Mitarbeitenden stets die...
Jetzt gratis downloaden!
