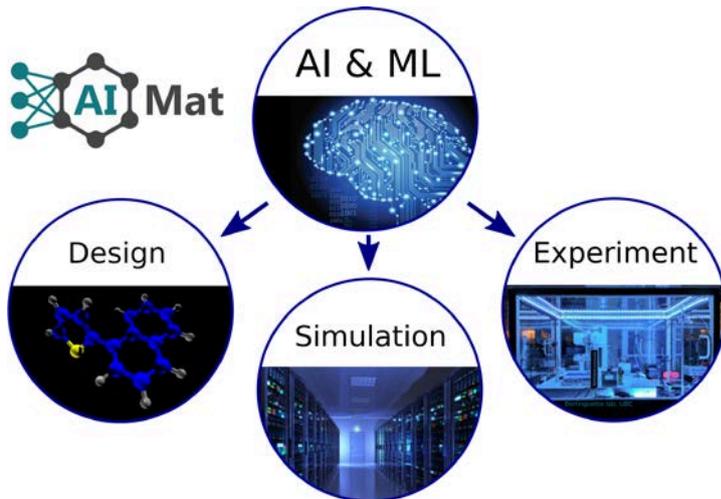


Einer der Schlüsselfaktoren zur Lösung der größten Herausforderungen der Menschheit, wie z. B. der Bekämpfung des Klimawandels durch nachhaltige Formen der Energiegewinnung und -speicherung oder auch der Entwicklung neuartiger medizinischer Therapien und Medikamente, ist die Entwicklung neuer Materialien. Eine der großen Herausforderungen und gleichzeitig auch Chancen der Materialwissenschaften und der Chemie ist die schier unendliche Vielzahl möglicher denkbarer Materialien und Moleküle. Herkömmliche experimentelle Methoden zur Erkundung dieses sogenannten „chemischen Raums“ aller Materialien sind häufig aufwendig und teuer. Computergestützte Berechnungen und Simulationsmethoden ermöglichen eine deutliche Beschleunigung der Materialentwicklung, benötigen aber oft große Rechenpower, insbesondere wenn Aussagen getroffen werden sollen, die von Materialeigenschaften auf vielen Größenordnungen abhängen, von der atomaren Skala bis hin zur Makroebene.

### **Maschinelles Lernen für die Materialwissenschaften**

Meine Forschung beschäftigt sich mit einer relativ neuen Herangehensweise an die Herausforderungen der Materialentwicklung – der Entwicklung und Anwendung von Methoden des maschinellen Lernens. Datengetriebene Methoden werden neben Experimenten, Theorie und Simulationen bereits häufig als vierte Säule der Naturwissenschaften diskutiert. Sie ermöglichen nicht nur deutliche Geschwindigkeitsvorteile gegenüber konventionellen Methoden, sondern erlauben auch eine engere Verzahnung von Experiment, Theorie und Simulation. Das Vorhandensein eines wachsenden Datenschatzes über Materialien und ihre Eigenschaften ermöglicht den Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens zur Beschleunigung der Materialentwicklung.



Die Forschungsgruppe „AiMat“ („AI for Materials Science“) arbeitet an drei Anwendungsbereichen von Methoden der künstlichen Intelligenz und des maschinellen Lernens: a) an der Vorhersage von Material- und Moleküleigenschaften und dem inversen Materialdesign zur schnellen Identifizierung von vielversprechenden Kandidaten für die weitere theoretische und experimentelle Untersuchung,

b) an der Entwicklung von Methoden des maschinellen Lernens zur Beschleunigung von Materialsimulationen auf atomarer Ebene und c) an autonomen Materialexperimenten, die mithilfe von Robotik und Algorithmen zur autonomen Entscheidungsfindung den experimentellen Materialentwicklungsprozess beschleunigen.

### Eigenschaftsvorhersage und inverses Design

Verlässliche und schnelle Methoden zur virtuellen Vorhersage von Material- und Moleküleigenschaften sind eine der wichtigsten Voraussetzungen zur Beschleunigung der Entwicklung neuer Materialien. Häufig stellen experimentelle Schritte zur Herstellung und Vermessung von Materialien die größte Herausforderung und ein entscheidendes Bottleneck im Entwicklungsprozess dar. Im Idealfall reduzieren akkurate, computergestützte Vorhersagen die Zahl notwendiger aufwendiger und teurer Experimente auf ein Minimum. Fortschritte in der Entwicklung großer Datenbanken mit Mess- und Simulationsdaten sind essenziell für das Training und den Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens. Sind diese einmal trainiert, können sie zur schnellen Evaluation großer Mengen hypothetischer Materialien und Moleküle eingesetzt werden, um vielversprechende Kandidaten zu identifizieren und für aufwendigere Simulationsmethoden oder für Experimente auszuwählen.

Spezielle Algorithmen des maschinellen Lernens können sogar dazu verwendet werden, neue Materialien mit gewünschten Eigenschaften direkt zu entwerfen. Sogenannte generative Modelle werden verwendet, um die Fragestellung umzudrehen: Anstatt für gegebene Materialien und Moleküle die entsprechenden Eigenschaften vorauszusagen und somit neue Materialien zu suchen, können mit generativen Modellen für gewünschte Eigenschaften direkt mögliche Material- und Molekülkandidaten vorgeschlagen werden. Die Weiterentwicklung solcher inverser Methoden ist eine der zentralen Schwerpunkte der Forschungsgruppe „AiMat“.

## **Beschleunigung atomaufgelöster Simulationen**

Komplexe Materialeigenschaften lassen sich häufig nicht isoliert berechnen, sondern hängen von Wechselwirkungsprozessen in realistischen Materialsystemen auf großen Zeitskalen ab. Atomaufgelöste Simulationen werden häufig als „computational microscope“ bezeichnet, da sie einen Einblick in die Struktur und Funktionalität von Materialien auf Nanoebene ermöglichen, der selbst mit hochaufgelösten experimentellen Mikroskopieverfahren nicht erreicht wird. Mithilfe solcher Simulationen können wertvolle Informationen gewonnen werden, die für das Design neuer Materialien sowie für das grundlegende Verständnis der Materialeigenschaften essenziell sind.

Während verschiedene Materialklassen mit sehr effizienten klassischen Methoden simuliert werden können, benötigen komplexere Materialien aufwendige quantenmechanische Berechnungen. Dies limitiert die Möglichkeiten von atomaufgelösten Simulationen, da benötigte Systemgrößen und Simulationsdauern mit quantenmechanischen Simulationen häufig nicht erreicht werden können. In diesem Fall bieten Methoden des maschinellen Lernens die Möglichkeit einer erheblichen Beschleunigung von Simulationen, da sie von den Ergebnissen von quantenmechanischen Berechnungen lernen können, damit nach und nach genauer werden und somit eine teilweise bis vollständige Ersetzung der Quantenrechnungen ermöglichen. Gekoppelt mit Methoden des aktiven Lernens, bei denen die eingesetzten Methoden des maschinellen Lernens ihre eigene Unsicherheit bewerten und bei zu großer Unsicherheit neue Daten zum weiteren Training anfordern können, wird auch ein Einsatz auf bisher unbekannte Materialien bei gleichzeitig hoher Verlässlichkeit ermöglicht.

## **Autonome Materialeexperimente**

Für viele Anwendungsbereiche lassen sich relevante Materialeigenschaften weder simulieren, noch liegen ausreichende Datenmengen vor, um Vorhersagemodelle zu trainieren. In diesen Fällen ist die Materialentwicklung direkt auf Experimente angewiesen. Hier liegt die Herausforderung insbesondere darin, dass eine Vielzahl freier Parameter bei der Material- und Device-Herstellung simultan optimiert werden muss, um bestmögliche Ergebnisse zu erzielen. Die Erforschung solcher hochdimensionaler Parameterräume ist aufwendig und teuer.

Fortschritte auf dem Gebiet der Automatisierung von Materialexperimenten erlauben eine direkte Kopplung von Experimenten mit KI-Algorithmen zur Entscheidungsfindung. Ziel ist es, in einem iterativen Zusammenspiel aus experimentellen Messungen und dem Training von Entscheidungsmodellen den zugänglichen Parameterraum möglichst effizient nach optimalen Lösungen zu durchsuchen. Die KI-Modelle wählen hierzu in jedem Schritt genau das Experiment aus, das voraussichtlich zum höchsten Informationsgewinn führt. Die vorgeschlagenen

Experimente werden dann automatisiert durchgeführt, und die Ergebnisse werden ans Modell zurückgegeben, um dieses iterativ zu verbessern und so effizient Materialien und Anwendungen zu optimieren. Die Forschungsgruppe „AiMat“ arbeitet an der Verbesserung der KI-basierten Entscheidungsfindungs-Algorithmen, um diese gemeinsam mit experimentellen Kooperationspartnern für eine Vielzahl von relevanten Anwendungsgebieten benutzbar zu machen.