

FORSCHUNG KOMPAKT

September 2018 || Seite 1 | 3

Maschinelles Lernen

MagnetPredictor: Magnetische Materialeigenschaften vorhersagen

Permanentmagnete für Elektroautos und Windräder enthalten bisher Seltenerdmetalle. Deren Anteil soll sinken, da es beim Abbau dieser wertvollen Ressourcen zu Gesundheits- und Umweltschädigungen kommt. Ein neues Machine-Learning-Tool hilft in der Magnetentwicklung, ferromagnetische Kristalleigenschaften neuer Materialzusammensetzungen einfach und schnell vorherzusagen.

Regenerativen Energietechnologien gehört die Zukunft. Sowohl für Elektroautos als auch für Windturbinen werden jedoch große und starke Permanentmagnete benötigt. Das Problem dabei: Die Hochleistungsmagnetwerkstoffe enthalten 12 bis 17 Prozent Seltenerdmetall-Elemente, insbesondere Neodym oder Samarium, aber auch Dysprosium oder Terbium. Diese stammen nahezu ausschließlich aus China. Zudem werden die Rohstoffe meist unter ungesunden Arbeitsbedingungen und schädlichen Umweltauswirkungen abgebaut. Materialwissenschaftlerinnen und -wissenschaftler forschen daher seit Jahren daran, Seltenerdmetalle in Materialien für Permanentmagnete zu ersetzen. Üblich ist dabei der »Trial and Error«-Weg: Welche elementaren Zusammensetzungen haben in der Vergangenheit gut funktioniert und könnten ähnlich gut funktionieren? Dies auszuprobieren, ist ein aufwändiges Unterfangen.

Computersimulationen legen die Basis

Forscherinnen und Forscher am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM in Freiburg eröffnen nun einen alternativen, effektiveren Weg: »Wir haben eine Hochdurchsatz-Computersimulationsmethodik entwickelt, mit der wir eine Vielzahl an Materialien systematisch und schnell überprüfen können: Eignen diese sich für Permanentmagnete oder nicht?«, erläutert Dr. Johannes Möller, Wissenschaftler des Geschäftsfeldes »Materialdesign« am Fraunhofer IWM. »Wir müssen nicht im Voraus überlegen, welcher Gehalt beispielsweise an Mangan, Kobalt oder Bor sinnvoll sein könnte, sondern lassen den Computer viele denkbare Varianten durchrechnen.« Durch diesen kombinatorischen Ansatz können vielversprechende Zusammensetzungen herausgefiltert werden, die eine solide theoretische Basis für gezielte experimentelle Untersuchungen bilden. Die Anzahl der benötigten Experimente kann dann im Vergleich zum herkömmlichen »Trial and Error« deutlich geringer gehalten werden. »Das geht prinzipiell nicht nur für magnetische, sondern auch für andere Materialeigenschaften«, betont Möller.

Kontakt

Janis Eitner | Fraunhofer-Gesellschaft, München | Kommunikation | Telefon +49 89 1205-1333 | presse@zv.fraunhofer.de

Katharina Hien | Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM | Telefon +49 761 5142-154 |

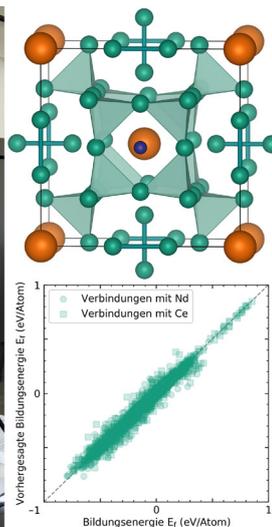
Wöhlerstraße 11 | 79108 Freiburg | www.iwm.fraunhofer.de | Katharina.Hien@iwm.fraunhofer.de

Die Informationen, die der Computer für die Simulation braucht, sind überschaubar: Die Kristallstruktur des Magnetmaterials sowie die enthaltenen chemischen Elemente. »Alles andere ergibt sich aus physikalischen Zusammenhängen«, konkretisiert Möller. Was die Kristallstruktur angeht, so setzen die Forschenden auf Kristallgitter, bei denen nur jedes 14. Atom ein Seltenerdmetallelement ist – was einem Anteil von nur 7 Prozent entspricht. Die Simulationsergebnisse hat das Team an bekannten Magnetmaterialien überprüft. Das Ergebnis: Die Simulation errechnet die Magnetisierung eines neuen Materials treffsicher. Eine hohe Magnetisierung macht aber noch keinen guten Permanentmagneten aus. Zusätzlich benötigt es hierfür die magnetische Anisotropie, die über die Anisotropiekonstante gemessen wird: Diese sagt aus, wie leicht oder schwer sich das Magnetmaterial durch ein angelegtes Magnetfeld umpolen lässt. »Die Vorhersage dieser Eigenschaft stellt eine große Herausforderung für die Computergestützte Werkstoffsimulation dar«, sagt Möller. Semiquantitative Aussagen gelingen in diesem Fall dennoch, das heißt: Die Computersimulation kann Werte für die Anisotropiekonstante zwar nicht quantitativ exakt, aber qualitativ systematisch vorhersagen. Das Ergebnis zeigt beispielsweise, dass das Material X sieben Mal stärkeren Magnetfeldern standhält als das Material Y.

Maschinelles Lernen füllt die Lücken

Mit diesen Magnetmaterialdaten geht das Team noch einen großen Schritt weiter. »Unser Screening liefert uns einige tausend oder zehntausend Ergebnisdaten. Die Anzahl aller möglichen elementaren Zusammensetzungen und Kombinationen geht allerdings in die Millionen oder gar Milliarden«, erläutert Möller. »Mit Methoden des Maschinellen Lernens füllen wir daher die Lücken zwischen den berechneten Daten.« Darüber hinaus ist es auch möglich, das Vorgehen rückwärts zur Materialoptimierung einzusetzen: Die Forscherinnen und Forscher geben die Mindestanforderungen an ein Wunschmaterial, etwa die Magnetisierung oder die Anisotropie, und die gewünschten chemischen Elemente vor, etwa »lieber preisgünstiges Kupfer als kritisches Kobalt«. Ein Optimierungsalgorithmus liefert dann die im Rahmen des aus den Materialdaten maschinell gelernten Materialmodells bestmögliche elementare Zusammensetzung des Materials.

Damit die Software leicht zu bedienen ist, hat das Team ein anwenderfreundliches Web-Tool entwickelt. Hier können die Zieleigenschaften und Grundmaterialien eingegeben werden. Heraus kommen Informationen zu den magnetischen Eigenschaften und den Rohstoffkosten. Die Implementierung des Optimierungsalgorithmus soll in Kürze folgen. Ein Demonstrator des Web-Tools »MagnetPredictor« ist unter der Adresse <http://s.fhg.de/mp> zugänglich.



FORSCHUNG KOMPAKT
September 2018 || Seite 3 | 3

Mithilfe des Tools »MagnetPredictor« können magnetische Materialeigenschaften von Kombinationen aus Seltenerdeelementen, Übergangsmetallen und anderen Elementen vorhergesagt werden.

© Fraunhofer IWM | Bild in Farbe und Druckqualität: www.fraunhofer.de/presse.

Die **Fraunhofer-Gesellschaft** ist die führende Organisation für angewandte Forschung in Europa. Unter ihrem Dach arbeiten 72 Institute und Forschungseinrichtungen an Standorten in ganz Deutschland. Mehr als 25 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter erzielen das jährliche Forschungsvolumen von 2,3 Milliarden Euro. Davon fallen knapp 2 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Rund 70 Prozent dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und innovativen Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Zugang zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen.