

## MaLTe

Maschine Learning-unterstützte Materialsimulation unter Berücksichtigung der Textur

<b>Programm / Ausschreibung</b>	FORPA, Dissertaionen 2024, Industrienahe Dissertationen 2025	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.03.2025	<b>Projektende</b>	29.02.2028
<b>Zeitraum</b>	2025 - 2028	<b>Projektaufzeit</b>	36 Monate
<b>Keywords</b>	Materialsimulation; Textur; Machine Learning; VPSC-Modell (visco-plastic self-consistent)		

### Projektbeschreibung

Das Projekt MaLTe will die Problemstellung der aufwendigen Simulation von Materialtexturen vereinfachen, um eine optimierte Materialsimulation einer größeren Bandbreite von Anwendern in der metallverarbeitenden Industrie zur Verfügung zu stellen.

Die bisher am LKR gemachten Vorarbeiten hinsichtlich Texturauswertung und Simulation bieten den optimalen Ausgangspunkt, um die noch ungelösten Probleme der heutigen Mikrostrukturmodellierung zu lösen. Dem massiven Bedarf an Rechenleistung sowie der aufwändigen Mikrostrukturcharakterisierung und Modellimplementierung wird in diesem Projekt mit einem mesoskopischen Ansatz (VPSC-Modell) und Machine-Learning- (ML-)unterstützter Parameterfindung begegnet. Mit korrekten Fitting-Parametern wird durch die Simulation mit VPSC eine Verbindung zwischen den Eingabewerten der Mesoskala und einer Materialbeschreibung auf der Nanoskala hergestellt. Es kann also nicht nur eine Prozess-/Bauteilsimulation durchgeführt, sondern gleichzeitig auch zusätzliche Erkenntnisse über inhärentes Materialverhalten gewonnen werden.

Aufgrund der ungenügenden Bewertungsmöglichkeiten und des großen Aufwands (Zeit, Rechenleistung) wird bisher die Texturentwicklung bei der Parameterfindung weitgehend vernachlässigt und erst im Nachgang evaluiert. Allerdings ist die Einbeziehung der Textur in die Fitting-Parameter von entscheidender Bedeutung, um das Materialverhalten auf atomarer Skala korrekt zu beschreiben. In dem vorliegenden Projekt wird daher eine automatisierte Parameterfindung entwickelt, welche die Texturentwicklung als essenziellen Teil berücksichtigt.

Das Ziel im Projekt MaLTe ist es, jeweils ein ML-Modell für ausgewählte Metalle, i.e. Al (fcc), Mg (hcp), Ti (hcp+bcc), zu erstellen. Diese Modelle erlauben dann eine schnelle und akkurate Parameterfindung für Legierungen mit dem entsprechenden Hauptelement.

Um die erforderlichen Programmier- und Analysetätigkeiten durchzuführen, besitzt der Dissertant DI Alois Ott durch sein Studium der technischen Mathematik, die Ausbildung in Mechatronik sowie seine bisherigen Tätigkeiten am LKR die besten Voraussetzungen. Sein materialkundliches Wissen hat der hochmotivierte Dissertant in der LKR-Prüfstelle bereits gründlich erweitert.

Die Projektergebnisse ermöglichen erstmalig die Verfügbarkeit von Textursimulationen auf Bauteilniveau. Dadurch entsteht ein Mehrwert für die österreichischen metallverarbeitenden Betriebe durch ein verbessertes Verständnis von

Materialverhalten (z.B. Recyclinglegierungen), von metallurgischen Prozessabläufen (z.B. Walz- und Tiefziehprozessen) oder auch zur genaueren Bauteilauslegung.

## **Abstract**

The MaLTE project aims to simplify the problem of the complex simulation of material textures in order to make an optimized simulation method available to a wider range of users in the metalworking industry.

The preliminary work carried out so far at the LKR with regard to texture evaluation and simulation offers the ideal starting point for solving the still unsolved problems of today's microstructure modeling. The massive demand for computing power as well as the complex microstructure characterization and model implementation is met in this project with a mesoscopic approach (VPSC model) and machine learning (ML)-assisted parameter determination.

With correct fitting parameters, the simulation with VPSC establishes a connection between the input values of the mesoscale and a material description on the nanoscale. This means that not only can a process/component simulation be carried out, but additional knowledge about inherent material behavior can also be gained at the same time.

Due to the insufficient evaluation possibilities and the great effort involved (time, computing power), texture development has so far been largely neglected in parameter determination and only evaluated afterwards. However, the inclusion of texture in the fitting parameters is of crucial importance in order to correctly describe the material behavior on an atomic scale. In this project, an automated parameter determination is therefore being developed, which takes texture development into account as an essential part.

The aim of the MaLTE project is to create an ML model for selected metals, i.e. Al (fcc), Mg (hcp), Ti (hcp+bcc). These models then allow fast and accurate parameter determination for alloys with the corresponding main element.

PhD student DI Alois Ott has the best qualifications to carry out the necessary programming and analysis activities thanks to his studies in technical mathematics, his training in mechatronics and his previous work at the LKR. The highly motivated doctoral student has already thoroughly expanded his knowledge of materials science at the LKR test center.

The project results make it possible for the first time to have texture simulations at component level. This creates added value for Austrian metalworking companies through an improved understanding of material behavior (e.g. recycling alloys), metallurgical process sequences (e.g. rolling and deep-drawing processes) or for more precise component design.

## **Projektpartner**

- LKR Leichtmetallkompetenzzentrum Ranshofen GmbH