

NEC Laboratories Europe GmbH

14.03.2024 - 09:00 Uhr

NEC Laboratories Europe bringt das Materialdesign mit KI-basierter MateriAI-Plattform voran

Heidelberg, Deutschland, 14. März 2024 (ots/PRNewswire) -

[NEC Laboratories Europe](#) und [NEC Laboratories America](#) haben mit MateriAI eine KI-basierte Plattform für Materialdesign entwickelt, die die Entwicklung neuer und umweltfreundlicher Materialien beschleunigt.

Der Prototyp der Plattform wurde ursprünglich entwickelt, um die größten Hürden bei der Entwicklung neuer synthetischer, organischer und biobasierter Polymere wie Gummi und Kunststoffe zu überwinden. Koichi Funaya, Chief Technology Architect bei NEC Laboratories Europe, erklärt dazu: „Um ein neues Material zu entwickeln, müssen sich Forschende zunächst durch die oft umfangreiche Menge an vorhandenen Informationen über verwandte Materialien arbeiten, um anschließend potenzielle neue Molekularstrukturen für die Entwicklung neuer Materialien in die engere Wahl zu ziehen. MateriAI transformiert diesen Prozess, indem es ihn erheblich beschleunigt, die Datenaggregation halbautomatisiert und gleichzeitig KI einsetzt, um neue Polymere für das Materialdesign vorzuschlagen.“

MateriAI verwendet ein speziell entwickeltes, polymerbasiertes Sprachmodell, um Informationen über Polymere zu erfassen, und wendet dann physikalisch informiertes maschinelles Lernen an, um deren Komplexität zu erfassen, einschließlich der Mikro- und Makrostrukturen der Polymere. Das Sprachmodell der Plattform wird auf eine große Anzahl von Quellen trainiert, um Materialwissen, kritische Designinformationen und Prozesse zu erfassen und zu verknüpfen und so die für das Design neuer Materialien verwendeten Informationen erheblich zu erweitern.

Standardmäßige analytische Berechnungsansätze reichen, selbst bei Verwendung von Hochleistungsrechnern, nicht aus, um die Komplexität von Biomaterialstrukturen zu bewältigen. Verbesserungen in der Art und Weise, wie MateriAI komplexe Informationen verarbeitet, ermöglichen es der Plattform jedoch, auf CPU- und GPU-basierten Computersystemen benutzt zu werden, die für Standard-Rechenlasten ausgelegt sind.

So führt Funaya aus: „Viele organische Polymere weisen lange, verschlungene Polymerketten auf, was die Berechnung ihrer potenziellen Interaktion mit anderen Polymeren erschwert. Zudem muss eine große Menge an weiteren Informationen zu den Herstellungsprozessen berücksichtigt werden. Bei der Entwicklung neuer Typen von Synthesekautschuk müssen beispielsweise die Beziehungen zwischen Polymerketten, Füllstoffen und Additiven in Kautschukmischungen sowie die Vernetzung von Kautschukmaterialien nachvollzogen werden.“

Auf der Grundlage seines Sprachmodells integriert MateriAI diese komplexen Ebenen und nutzt physikalisch informiertes maschinelles Lernen, um Einblicke in die Entwicklung neuer Materialien zu geben. Dieser Ansatz macht eine komplexe Pipeline zur Verarbeitung natürlicher Sprache überflüssig.

Über die intuitive Benutzeroberfläche der Plattform werden die mechanischen, thermischen und elektrischen Eigenschaften des Polymers eingegeben, das entwickelt werden soll, einschließlich der Bedingungen für die Herstellungsmethoden. Die in Frage kommenden Moleküle werden visuell dargestellt. Die Bedingungen lassen sich während des laufenden Betriebs aktualisieren. Änderungen an den Modellen werden in Echtzeit angezeigt.

Dr. Martin Renqiang Min, Abteilungsleiter Maschinelles Lernen bei NEC Laboratories America, sagt: „MateriAI lernt selbst mit kleinsten Datenmengen. Der Einsatz physikalisch-informierten maschinellen Lernens sagt die physikalischen Eigenschaften von Materialien präzise voraus. Die Plattform ermöglicht es Forschenden der Materialwissenschaft, sich auf die Materialentwicklung zu konzentrieren, indem ihnen durch Hintergrunduntersuchungen und Vorhersagen von Materialeigenschaften Arbeiten abgenommen werden.“

Dieser Ansatz stellt eine radikale Abkehr von bisherigen Rahmenbedingungen des Materialdesigns dar und ermöglicht so die Entwicklung von Materialien für Anwendungsfälle, für die ein großer Teil des vorhandenen Materialwissens unbekannt ist.

In den kommenden Monaten wird NEC Kunden auf dem Polymermarkt MateriAI testweise zur Verfügung stellen und die Anwendung der Plattform auf andere Branchen ausdehnen. Eine kommerzielle Einführung des Prototyps der Plattform ist innerhalb der nächsten 12 Monate geplant.

Photo - <https://mma.prnewswire.com/media/2358084/NEC.jpg>

View original content to download multimedia: <https://www.prnewswire.com/news-releases/nec-laboratories-europe-bringt-das-materialdesign-mit-ki-basierter-materi-ai-plattform-voran-302088475.html>

Pressekontakt:

Cameron O'Donohue,
cameron.odonohue@neclab.eu,
+49 6221 4342-251

Diese Meldung kann unter <https://www.presseportal.ch/de/pm/100080921/100916964> abgerufen werden.