

BMBF Verbundprojekt »Innovationsplattform Material Digital«

Informationsworkshop am 9.1.2020, Prof. Dr. Peter Gumbsch

GEFÖRDERT VOM



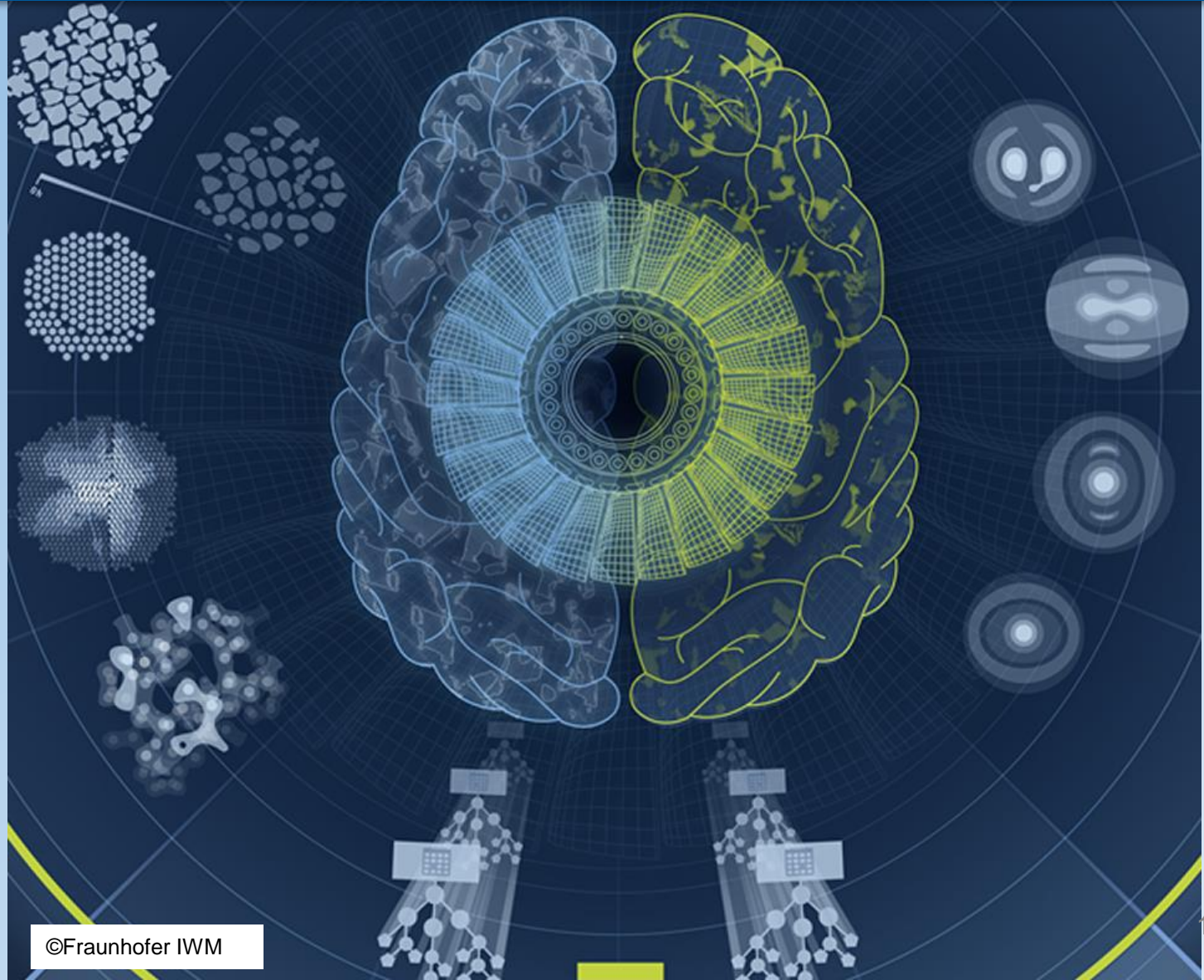
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR
EISENFORSCHUNG GMBH



MATERIALD1G1TAL



©Fraunhofer IWM

BMBF Verbundprojekt »Innovationsplattform Material Digital«

Informationsworkshop am 9.1.2020, Prof. Dr. Peter Gumbsch

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR
EISENFORSCHUNG GMBH



MATERIALDIGITAL



Prof. Dr. Peter Gumbsch,
Institutsleiter
Fraunhofer Institut für
Werkstoffmechanik,
Vorsitzender / Sprecher



Dr. Pedro D. Portella,
Leiter Abteilung
Werkstofftechnik
BAM Berlin,
Projektpartner



Prof. Dr. Christoph Eberl,
stellv. Institutsleiter
Fraunhofer Institut für
Werkstoffmechanik,
Projektpartner



Prof. Dr. Wolfgang Wenzel,
Lehrstuhl KIT Multiscale
Materials Modelling and
Virtual Design,
Projektpartner



Prof. Dr. Lutz Mädler,
Institutsleiter Leibniz-
Institut für werkstoff-
orientierte
Technologien,
Projektpartner



Prof. Dr. Jörg Neugebauer,
Institutsleiter Max-
Planck-Institut für
Eisenforschung

BMBF Verbundprojekt »Innovationsplattform Material Digital«

Informationsworkshop am 9.1.2020, Prof. Dr. Peter Gumbsch

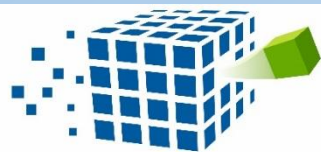
GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR
EISENFORSCHUNG GMBH



MATERIALDIGITAL



Prof. Dr. Peter Gumbsch,
Institutsleiter
Fraunhofer Institut für
Werkstoffmechanik,
Vorsitzender / Sprecher



Prof. Dr. Birgit Skrotzki,
Abteilung
Werkstofftechnik
BAM Berlin,
Projektpartnerin



Prof. Dr. Christoph Eberl,
stellv. Institutsleiter
Fraunhofer Institut für
Werkstoffmechanik,
Projektpartner



Prof. Dr. Wolfgang Wenzel,
Lehrstuhl KIT Multiscale
Materials Modelling and
Virtual Design,
Projektpartner



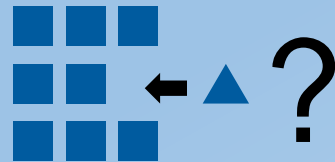
Prof. Dr. Lutz Mädler,
Institutsleiter Leibniz-
Institut für werkstoff-
orientierte
Technologien,
Projektpartner



Prof. Dr. Jörg Neugebauer,
Institutsleiter Max-
Planck-Institut für
Eisenforschung

Situation heute: Schlechter Datenzugang in Wissenschaft und Forschung führt zu Doppelarbeit und Mehraufwand

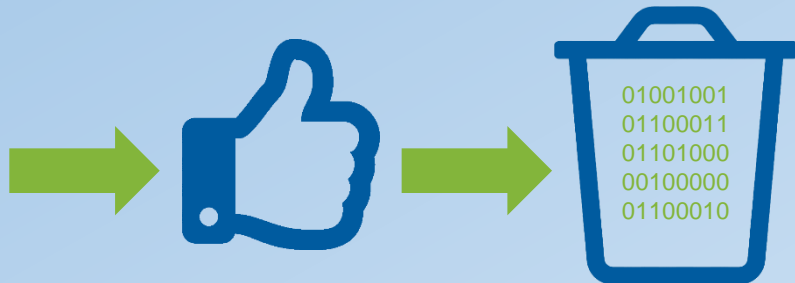
01001001 01100011 01101000 00100000 01100010
01101001 01101110 00100000 01100101 01101001
01101110 01101110 01100100 01100001 01110100
01100101 01101110 01100111 01100001 01110100
01111010 01100000 00100000 01100001 01101100
01101100 01101001 01100000 01101000 01100001
01101100 01111011 01101110 01101111
00100000 01100001 01101110 01101111
01100011 01101110 01101111
01101001 01101000 00000000
01110100 01100101 01101111
01110100 01111010 00100000
01101100 01101100 01101000
01100001 01101100 01101110



- Wachsende Datensilos in Fachabteilungen und an Lehrstühlen ohne Zugänglichkeit und Standardisierung

- Hypothesengetriebenes Arbeiten nutzt Daten zur Beantwortung von Fragestellungen ohne Berücksichtigung derer Nachnutzung

H0:
H1:
H2:



- Macht der wissenschaftlichen Fachverlage verhindert barrierefreien Informationszugang

- Komplexe Erkenntnis wird kognitiv erzeugt, seriell kodiert und daraufhin wieder kognitiv dekodiert



Situation heute: Stetige Triebkräfte für Veränderungen im produzierenden Gewerbe in Deutschland

• Finanziell

- Materialkosten heben >50% der Umsätze auf (Personalkosten <20%)*
- Materialeffizienz mit 10-fach höherem EBIT-Einfluss als Energieeffizienz; 30-fach höher als Logistikeffizienz*

*destatis (2017)

• Strategisch

- Ressourcenreiche Länder nutzen Rohstoffe strategisch oder gründen Kartelle (z.B. Kupfer, seltene Erden, Öl)
- Neue Herausforderungen: Klimawandel, Ressourcenknappheit, Bevölkerungswachstum

• Technologisch

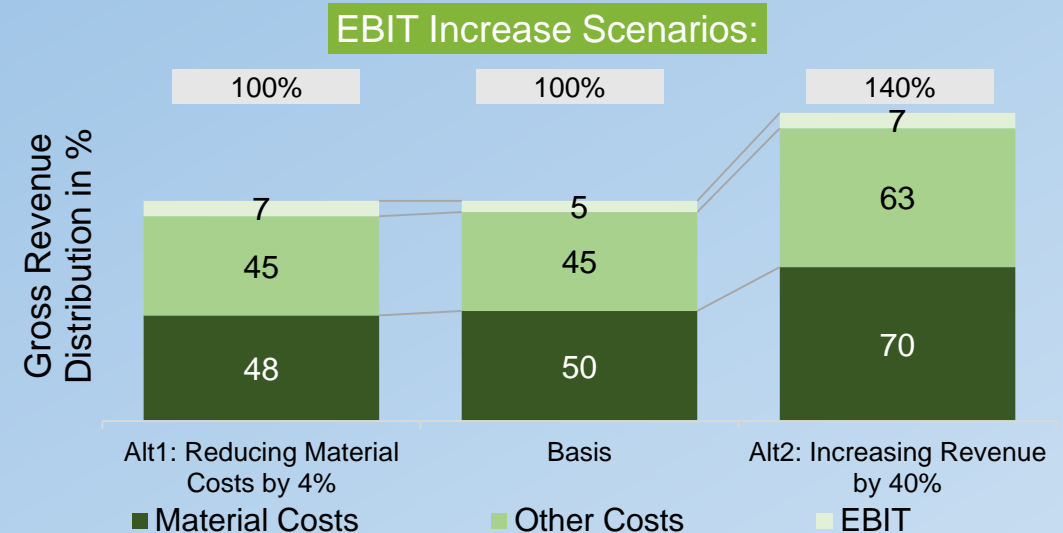


Bild bei Veröffentlichung entfernt

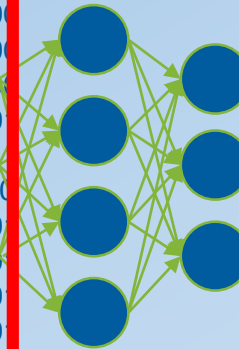
Situation heute: Stetige Triebkräfte für Veränderungen im produzierenden Gewerbe in Deutschland

• Finanziell

• Strategisch

• Technologisch

- Wachsende Datenmengen in Silos ohne Gewährleistung von Interoperabilität
- Technologischer Fortschritt ermöglicht neue Analysemethoden und Herangehensweisen.



Schnelligkeit, Flexibilität und Anpassungsfähigkeit in der Produktentwicklung basieren auf der Fähigkeit neue Materialien und neue Lösungen mit Materialien zu entwickeln.

Der Schlüssel zum Wettbewerb von Morgen.

Ein Werkstoffdatenraum ist die zentrale Antwort auf die Herausforderungen der Zukunft im Bereich der Werkstofftechnik

Ein Werkstoffdatenraum...

...muss so strukturiert sein, dass Informationen auffindbar und zugänglich sind.

Accessibility



...muss so systematisiert sein, dass sich inhärente Zusammenhänge abbilden lassen.

Systematization



...muss anpassungsfähig genug sein, um neue Erkenntnisse zu integrieren.

Adaptability



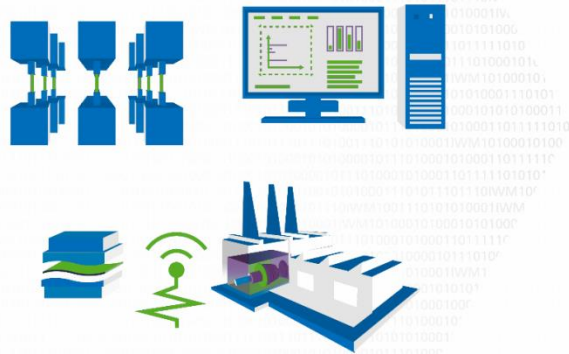
...muss Verlässlichkeit, Sicherheit, Exklusivität, Schützbarkeit und Fälschungssicherheit der Daten garantieren.

Sovereignty



Ziel ist eine breit zugängliche und systematisch nutzbare digitale Infrastruktur

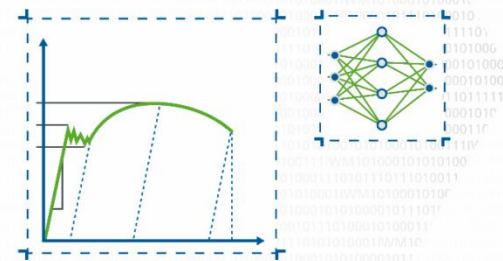
► Erzeugung von Materialdaten



► Speicherung von Materialdaten



► Datenverarbeitung, Modellentwicklung



► Datenanalysen, Datenbewertung



©Fraunhofer IWM

Ziel ist eine breit zugängliche und systematisch nutzbare digitale Infrastruktur – traditioneller Informationsgewinn, neuartige Verwertung

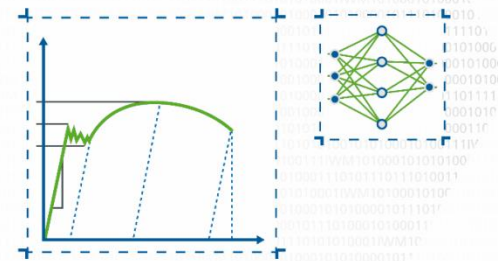
► Erzeugung von Materialdaten



► Speicherung von Materialdaten



► Datenverarbeitung, Modellentwicklung



► Datenanalysen, Datenbewertung



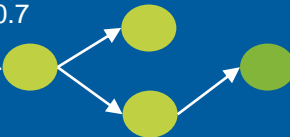
©Fraunhofer IWM

Forschung



Daten und Erkenntnisse

Sample	Value
mn1	34
Jt3	98
zh90	75.3
mn2	30.7
...	...

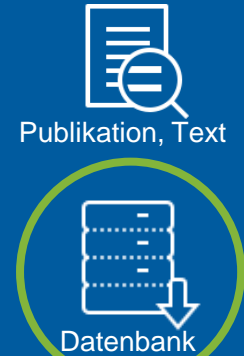


Auswertung

Sample	Value
mn1	34
mn2	30.7
...	...
mean	32
Corr	0.63
Sig (p)	0.08



Verwertung



Ziel ist eine breit zugängliche und systematisch nutzbare digitale Infrastruktur – dezentrale Speicherung mit zentralem Mapping

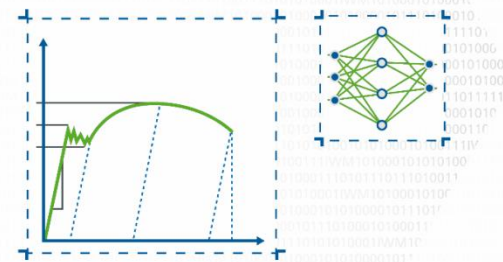
► Erzeugung von Materialdaten



► Speicherung von Materialdaten



► Datenverarbeitung, Modellentwicklung



► Datenanalysen, Datenbewertung



©Fraunhofer IWM

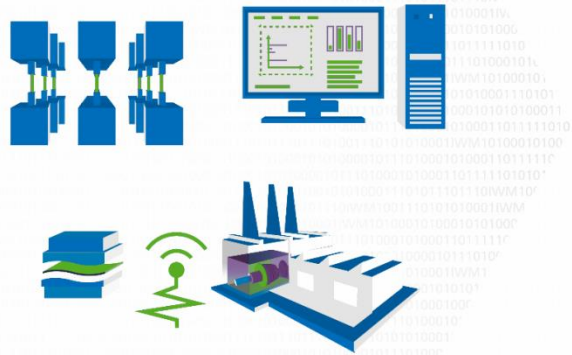


- Unbedingte Datensouveränität durch dezentrale Speicherung
- Standardisierte Protokolle regeln Maß an Zugangsberechtigungen
- Einheitliches Framework ermöglicht Querying, Mapping, sowie Zusammenführen ausgewerteter Metadaten

Dezentraler Werkstoffdatenraum stets löchrig, unvollständig, doch wachsend!

Ziel ist eine breit zugängliche und systematisch nutzbare digitale Infrastruktur – breite Datenlage führt zu robusten Vorhersagen

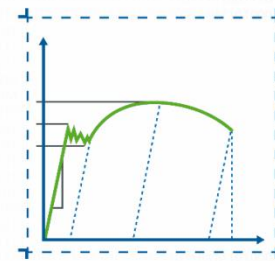
► Erzeugung von Materialdaten



► Speicherung von Materialdaten



► Datenverarbeitung, Modellentwicklung



► Datenanalysen, Datenbewertung



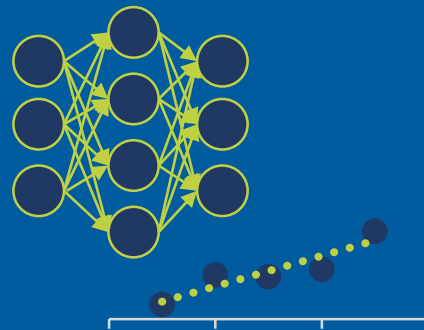
©Fraunhofer IWM

Analyse dezentraler Daten

Sample	Value
mn1	34
mn2	98
mn3	75.3
mn4	?
mn5	100
...	...



Statistische Modellierung

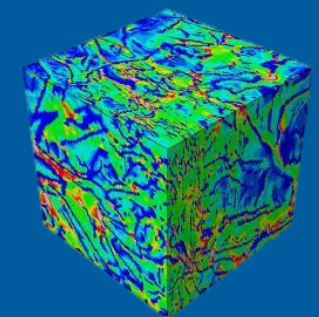


Schätzung unbekannter Werte

Sample	Value
mn1	34
mn2	98
mn3	75.3
mn4	80.7
mn5	100
...	...



Simulation



Die Plattform MaterialDigital ist der erste vernetzte Schritt zur Erstellung eines angepassten Werkstoffdatenraums

Innovations-Plattform MaterialDigital

Ontologieentwicklung ✓

Entwicklung IT-Infrastruktur – Software & Hardware ✓

Vernetzung und Verbreitung ✓

Implementierung von Use Cases / ersten inhaltlichen Ansätzen ✓

Plattformmanagement ✓



Die breiten Netzwerke aus Industrie, Universitäten und Forschung der beteiligten Institute und Organisationen liefern das notwendige Know-How für die Grundsteinlegung.

Innovationsplattform MaterialDigital - Kontakt



Sie wollen von Anfang an dabei sein? Nehmen Sie Kontakt auf oder registrieren Sie sich online um auf dem Laufenden zu bleiben



www.materialdigital.de

Dr. Heike Fliegl
Karlsruher Institut für Technologie
Tel.: +49 (0)721 608 28950
E-Mail: info@material-digital.de



Gemeinsame Strategie zur Ontologieentwicklung für die Plattform MaterialDigital

Überlegungen zur Entwicklung einer Ontologie für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik im Rahmen der **BMBF Ausschreibung MaterialDigital**; Prof. Dr. Peter Gumbsch; Markus Niebel, Informationsworkshop, Berlin, 9.1.2020



Ausgangspunkt sind die Ansprüche der BMBF Ausschreibung

”

Es soll die **Basis für eine gemeinsame Sprache („Material-Ontologien“)** geschaffen werden, ebenso wie standardisierte Schnittstellen, die einen reibungslosen Austausch von Daten und Begrifflichkeiten, aber auch von digitalen Methoden untereinander ermöglichen.

“

” **Entwicklung einer konkreten Ontologie für eine Materialklasse:** “

” Über den Spezialfall eines Materials hinaus abstrahierend sollen in der Ontologie alle relevanten Eigenschaften und Prozesse in Bezug auf eine Materialklasse erfasst und abgebildet werden. “

” Zusätzlich sollen in enger Abstimmung Software-Tools erstellt werden, um mit der Ontologie arbeiten zu können. “

” Und schließlich soll ein Kuratierungskonzept erarbeitet und demonstriert werden, um die Ontologie langfristig anpassen sowie in einen größeren Kontext einbetten und gleichzeitig kompatibel zu anderen Materialklassen halten zu können. “

” Es wird erwartet, dass die Ontologie im Rahmen des Vorhabens am praktischen Beispiel angewendet, d. h. mit realen Daten der zugrunde liegenden Materialklasse verknüpft wird. Die semantische Abfrage von Materialinformationen auf Basis der Ontologie soll demonstriert werden. “

Ausgangspunkt sind die Ansprüche der BMBF Ausschreibung

Ontologie als gemeinsame Sprache

Entwicklung einer konkreten Ontologie für eine Materialklasse:

Repräsentation relevanter Eigenschaften und Prozesse

Software zur Nutzung und Fortentwicklung

Kuratierung und Kompatibilität

Verknüpfung von Daten und Ontologie; semantische Abfrage von Eigenschaften



Die Plattform MaterialDigital (PMD) ist kein Datenrepositorium, sondern eine **einheitliche, integrative Schnittstelle für Wissensmanagement.**

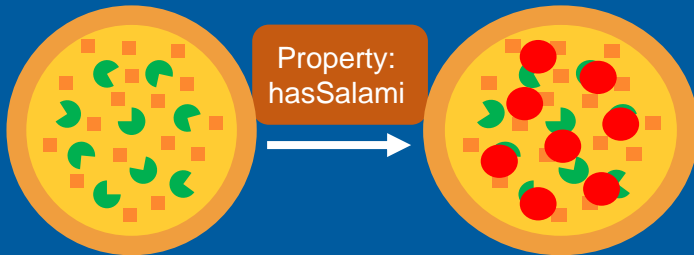
Die Ontologie soll unsere **gemeinsame Sprache** sein, um diese Schnittstelle definieren zu können.

- 1 Was ist eine Ontologie und was soll sie bringen?
- 2 Was sind die Ansprüche an die PMD Ontologieentwicklung?
- 3 Wie kann eine Anwendungsontologie praktisch aussehen?

Was ist eine Ontologie und was soll sie bringen?

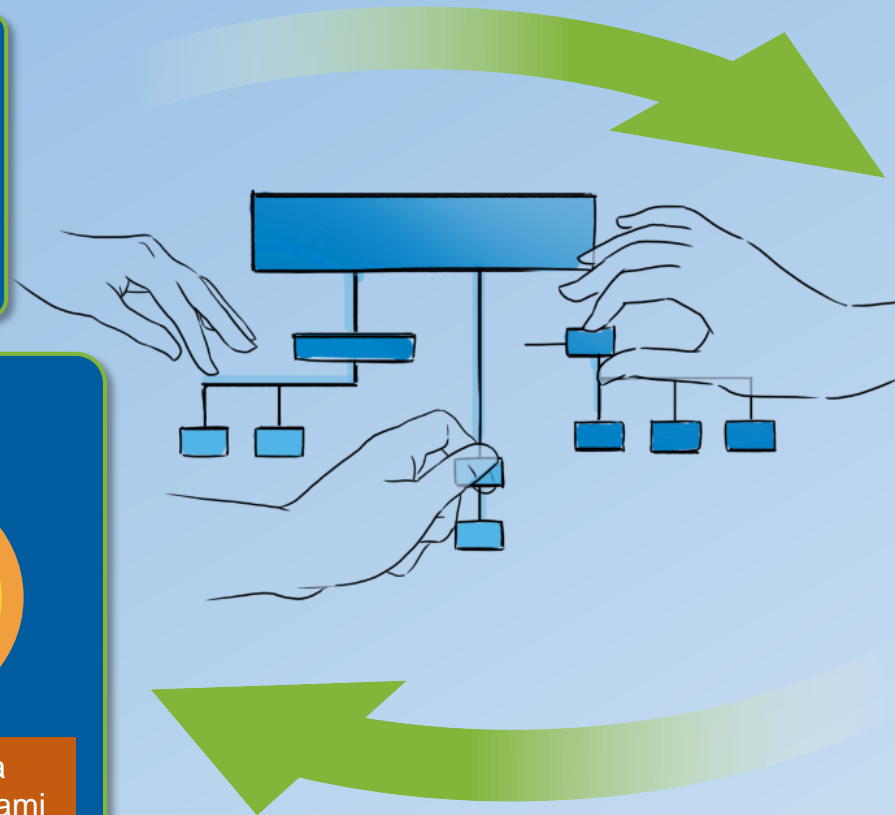
Eine Ontologie ist eine **explizite, formelle Spezifizierung einer geteilten Konzeptualisierung** (Gruber, 1993).

Eine Pizzaontologie:



Class: vegetarianPizza
Inst: Pizza Margherita

Class: meatPizza
Instance: Pizza Salami



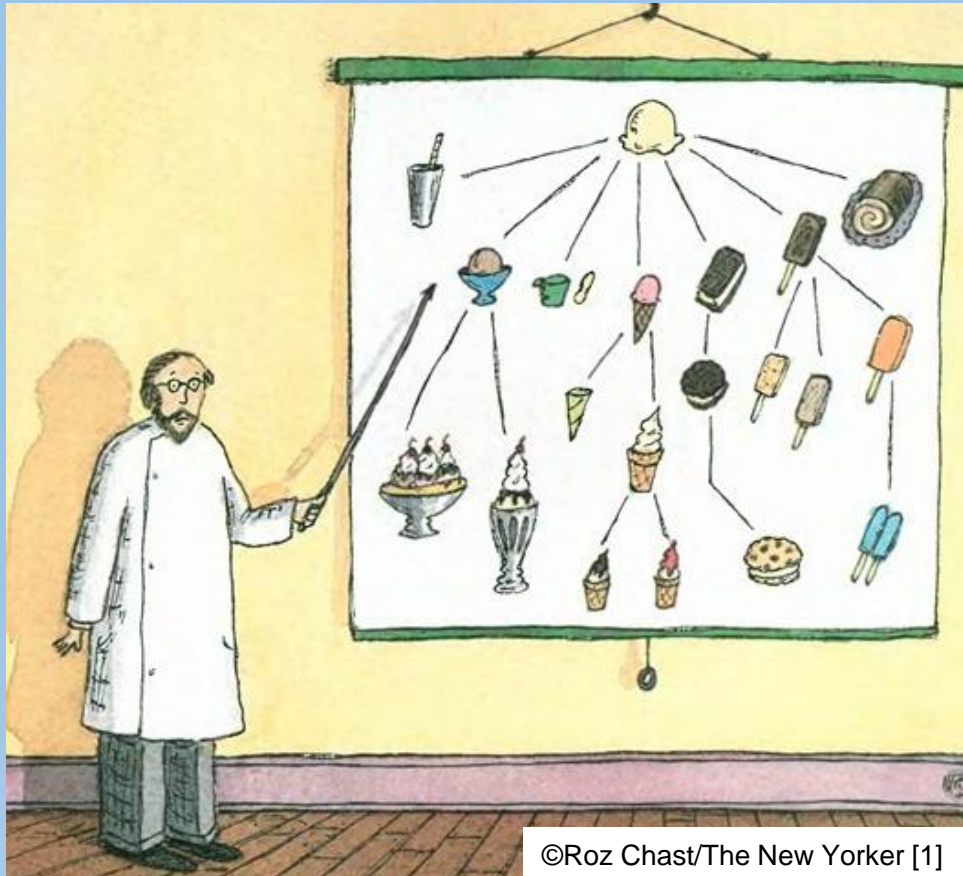
Die Ontologie drückt **Relationen von Konzepten explizit** aus. Sie ermöglicht uns damit u.a.

- Standardisierung/ Vereinheitlichung
 - Inferenzen
 - Konsistenzprüfung
 - Automatisiertes Abfragen
- ...bezüglich des darin repräsentierten Wissens.

Zur weiteren Recherche:

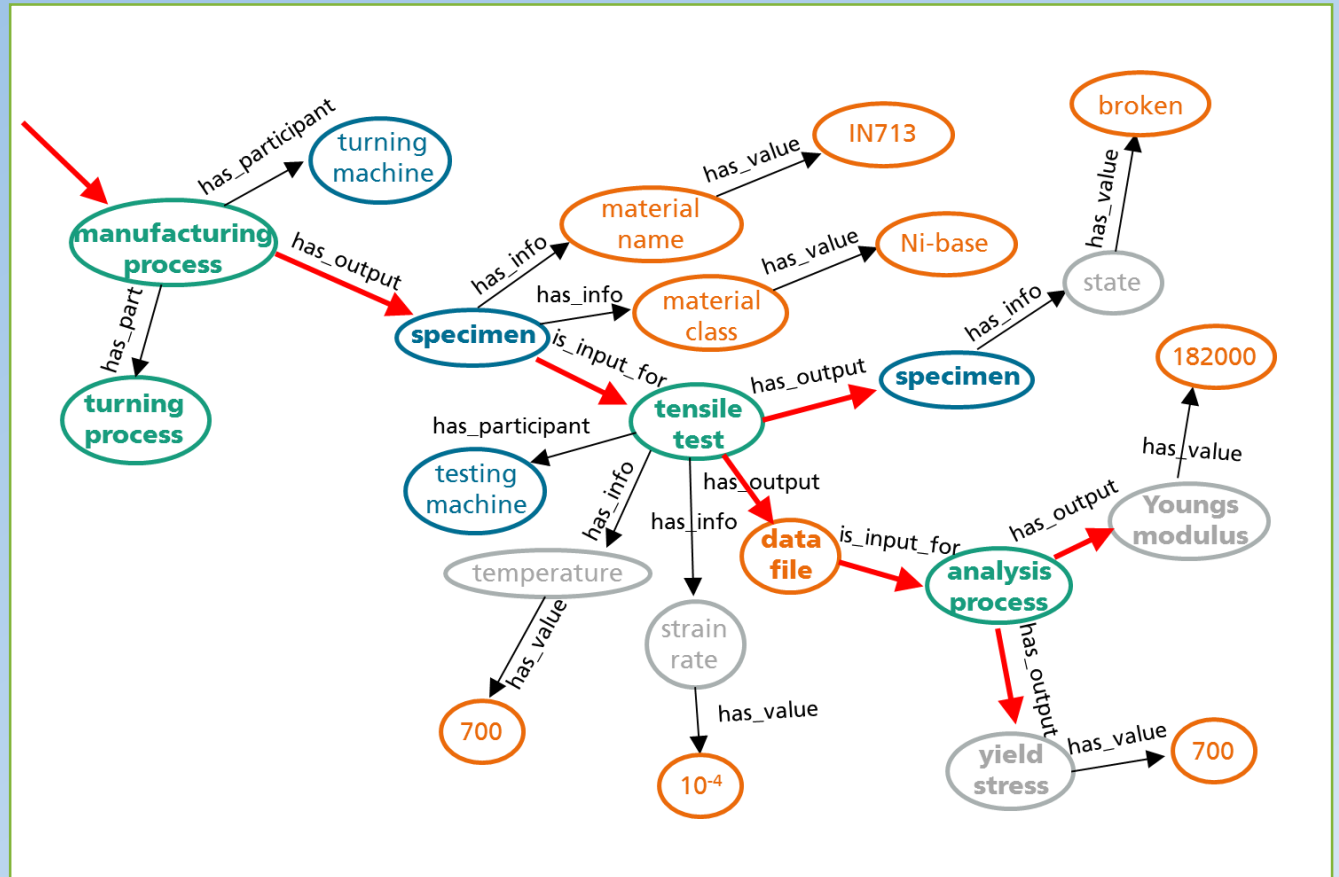
- Vortrag Prof. Harald Sack am Fraunhofer IWM am 21.10.2019: <https://t.co/EDalCnho3y>
- Noy & McGuinness, 2001: Ontology development 101: A guide to creating your first ontology. [Link](#)

Was ist eine Ontologie und was soll sie bringen?



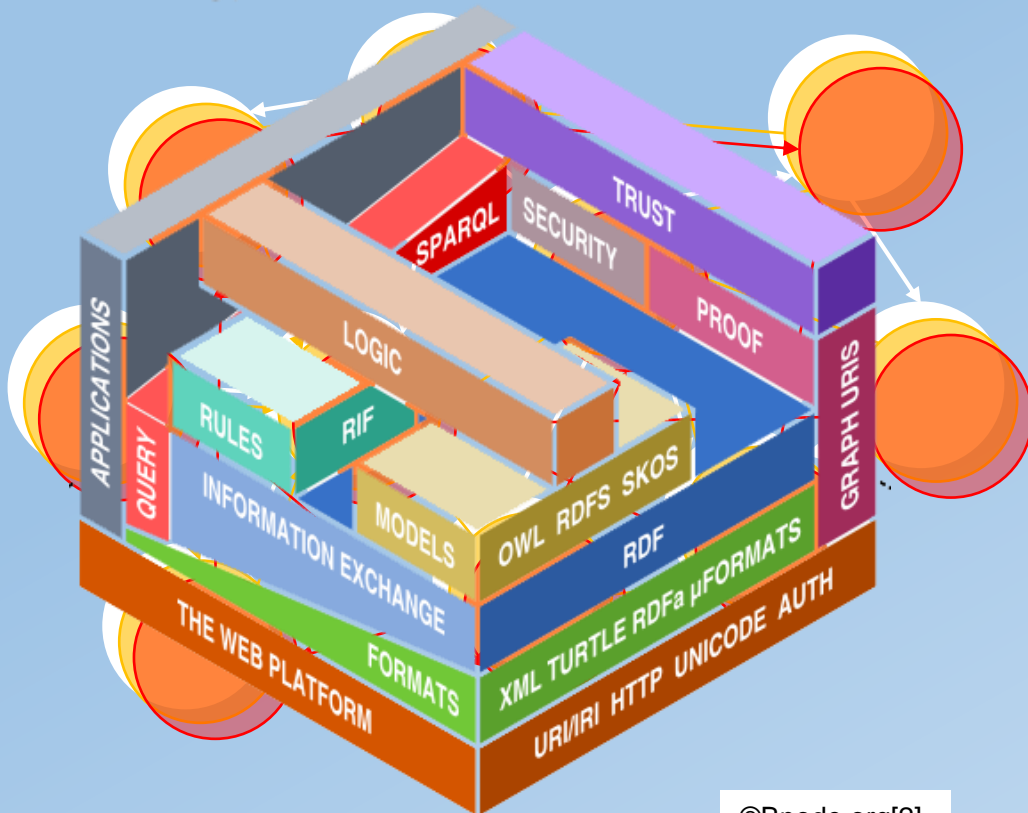
©Roz Chast/The New Yorker [1]

Noch keine Ontologie:
Taxonomie (mit „is_a“-Vertiefungen)



Noch keine Ontologie:
Workflow/Prozessbeschreibung

Was ist eine Ontologie und was soll sie bringen?



©Bnode.org[2]

Zur weiteren Recherche:

- The Semantic Web Stack, [Link](#)
- Web Ontology Language (OWL), [Link](#)
- Ressources Description Framework (RDF), [Link](#)

- Die Ontologie berücksichtigt eine **inhärente Logik** der Informationen.
- Die **explizite Nachvollziehbarkeit** der Logik steht im Mittelpunkt.
- Die Ontologie ist dann ausreichend, wenn sie im Stande ist, die **reale Logik des Beobachtungsgegenstands hinreichend abzubilden**. Fertig ist sie nie.
- Die Ontologie ermöglicht die Strukturierung von Datensätzen **in Form eines Wissensgraphen**.
- Die Ontologieentwicklung bedient sich der Werkzeuge des Semantic Web Stack

Was ist eine Ontologie und was soll sie bringen?



„Von Grund auf“ werden Ontologien in Zukunft von Experten gebaut werden müssen. Domänenexperten müssen befähigt werden ihr Fachwissen Informationswissenschaftlern zu übermitteln.

©Bnode.org[2]

Zur weiteren Recherche:

- The Semantic Web Stack, [Link](#)
- Web Ontology Language (OWL), [Link](#)
- Ressources Description Framework (RDF), [Link](#)

- Die Ontologie berücksichtigt eine **inhärente Logik** der Informationen.

- Die **explizite Nachvollziehbarkeit** der Logik steht im

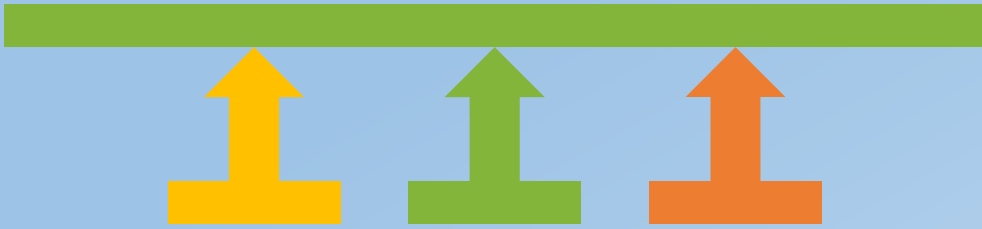
und, wenn sie im Stande des Gegenstands hinreichend abzubilden. Fertig ist sie nie.

- Die Ontologie ermöglicht die Strukturierung von Datensätzen **in Form eines Wissensgraphen**.

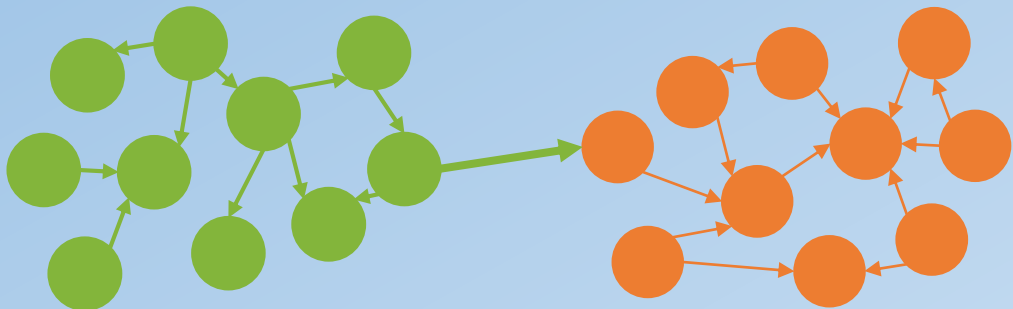
- Die Ontologieentwicklung bedient sich der Werkzeuge des Semantic Web Stack

Was sind die Ansprüche an die PMD Ontologieentwicklung?

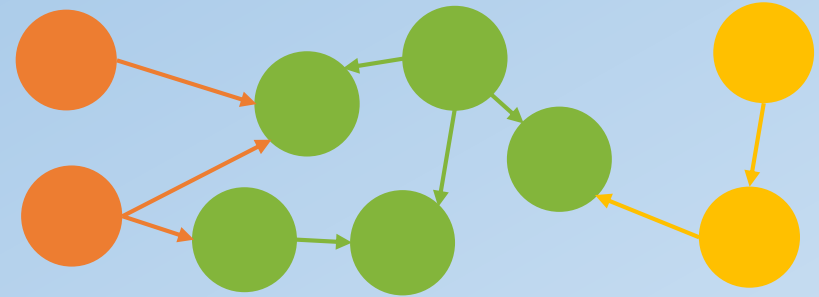
- Bottom-Up Prozess: Domänenexperten definieren ihre Ontologie.



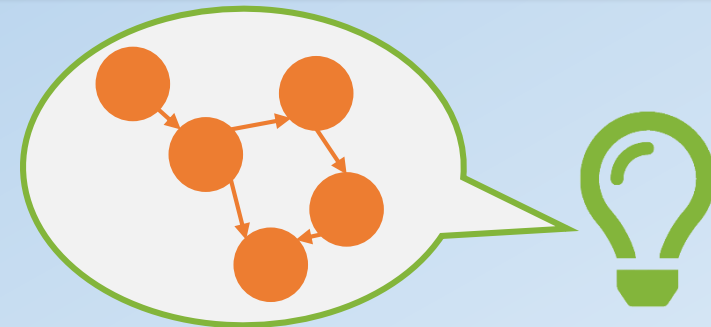
- Organisches Wachstum innerhalb der Domänen, erst langfristig Integration.



- Stete Möglichkeit der Erweiterung und Adaptivität. Ontologie ist niemals „fertig“.



- Praktischer Anwendungsnutzen steht im Vordergrund. Standardisierung ist nur einer davon.

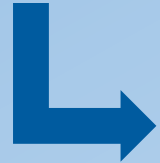


Was sind die Ansprüche an die PMD Ontologieentwicklung?

- Um zu wissen was man machen muss, muss man zunächst wissen, was man hat.



- Man muss Ontologie noch nicht verstanden haben, um die Daten für sie zu erheben.



- Ontologien bedürfen einer strukturierter Metadatenbeschreibung → Linked Data

Metadaten

Autor:	<input type="text"/>
Process Step:	<input type="text"/>
Object Characteristics:	<input type="text"/>
Material Characteristics:	<input type="text"/>
Station Characteristics:	<input type="text"/>



- Befüllen einer Metadatendatei: Die vollständige Historie aller Verarbeitungsschritte repräsentiert den Materialzustand in Gänze.



Leibniz-Institut für
Werkstofforientierte
Technologien

Was sind die Ansprüche an die PMD Ontologieentwicklung?

Repräsentation und Austausch verfügbarer Metadaten

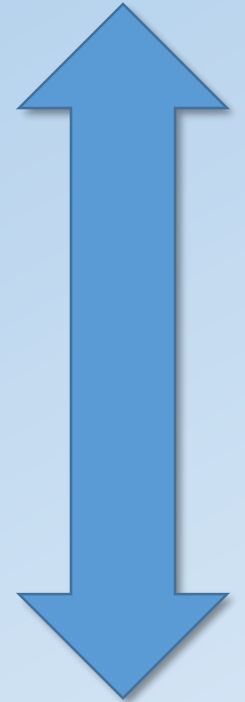
Automatische Erstellung via Webformular

Upload einer manuell kuratierten Datei

Erstellung und Transfer via standardisiertem API

Einheitliches
Austausch-
format

Manuell, wenig
IT Erfahrung



automatisiert, IT
Erfahrung notwendig



Leibniz-Institut für
Werkstofforientierte
Technologien

Wie kann eine Anwendungsontologie praktisch aussehen?

In Zusammenarbeit
mit



Das müssen wir gemeinsam erst herausfinden!

Beispiel am Fraunhofer IWM

Beschreibung multidimensionaler Wechselwirkungen eines Zugversuch-Workflows

Ansprüche:

- Kein Expertenwissen zum Verständnis des Workflows notwendig.
- Berücksichtigung des multiskaligen Materialcharakters (Mehrwert Materialwissenschaft!) und Nutzung des darüber vorhandenen Lehrbuchwissens.
- Berücksichtigung der multidimensionalen Abhängigkeitsbeziehungen.
- Darstellung von Ursache-Wirkungs-Beziehungen.

Wie kann eine Anwendungsentologie praktisch aussehen?

Genutzte Vereinfachungen:

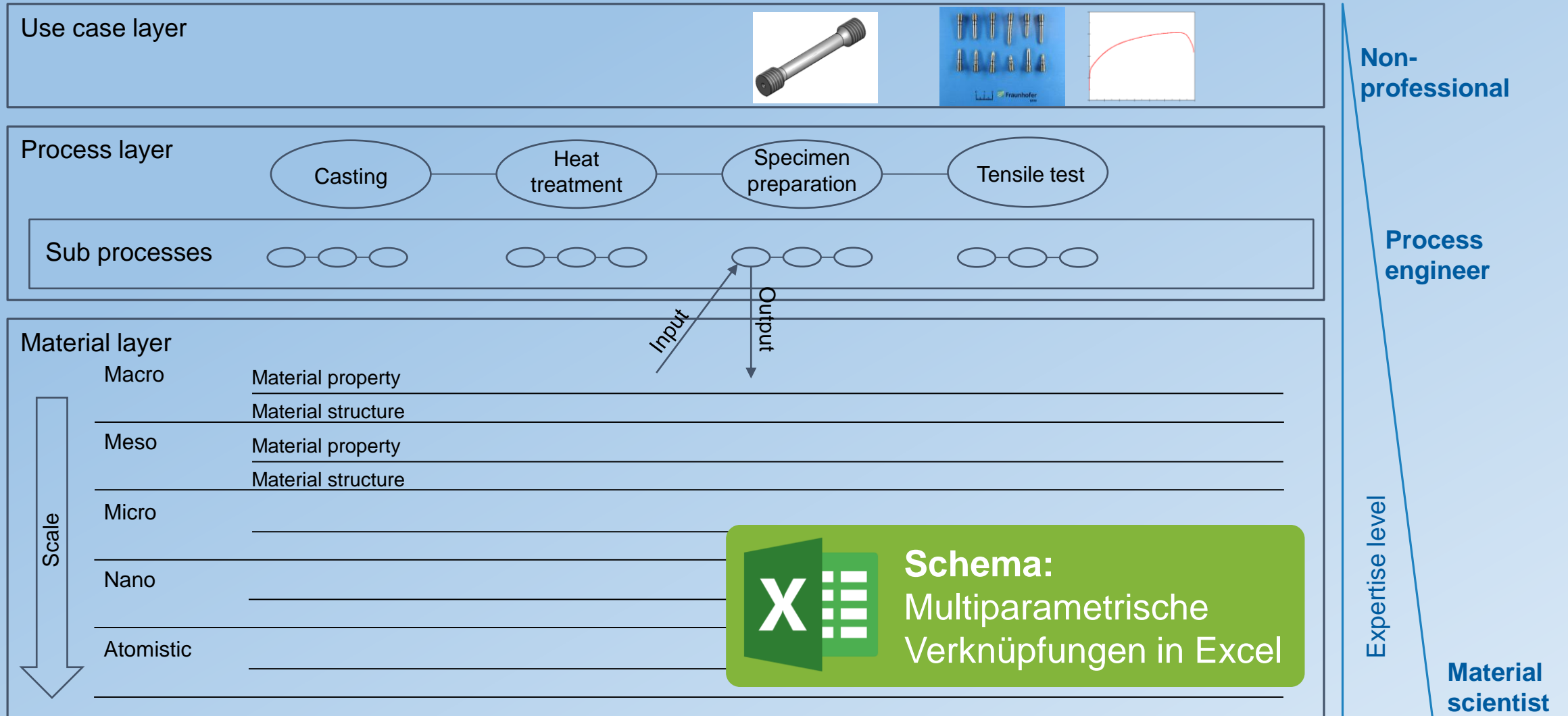
- „Zeit“ diskret statt kontinuierlich: Workflowschritte als Zeitschritte.
- Komplexe Modelle (z.B. Ofenverhalten) werden zunächst nur als allgemeine Prozessparameter berücksichtigt.
- Das Ausmaß von formellen Verhaltenszusammenhängen wird vernachlässigt. Fokus darauf, dass ein Zusammenhang besteht: $y = f(x, z)$ wird zu $x, z \rightarrow y$
- Ex ante: Annahme der Eigenschaften des Ausgangsmaterials.

Ziel: Ursache-Wirkungs-Ketten nachvollziehen können.

$$X \rightarrow Y, Y \rightarrow Z \Rightarrow X \rightarrow Z$$

Bild bei Veröffentlichung entfernt

Wie kann eine Anwendungsentologie praktisch aussehen?



Wie kann eine Anwendungsontologie praktisch aussehen?

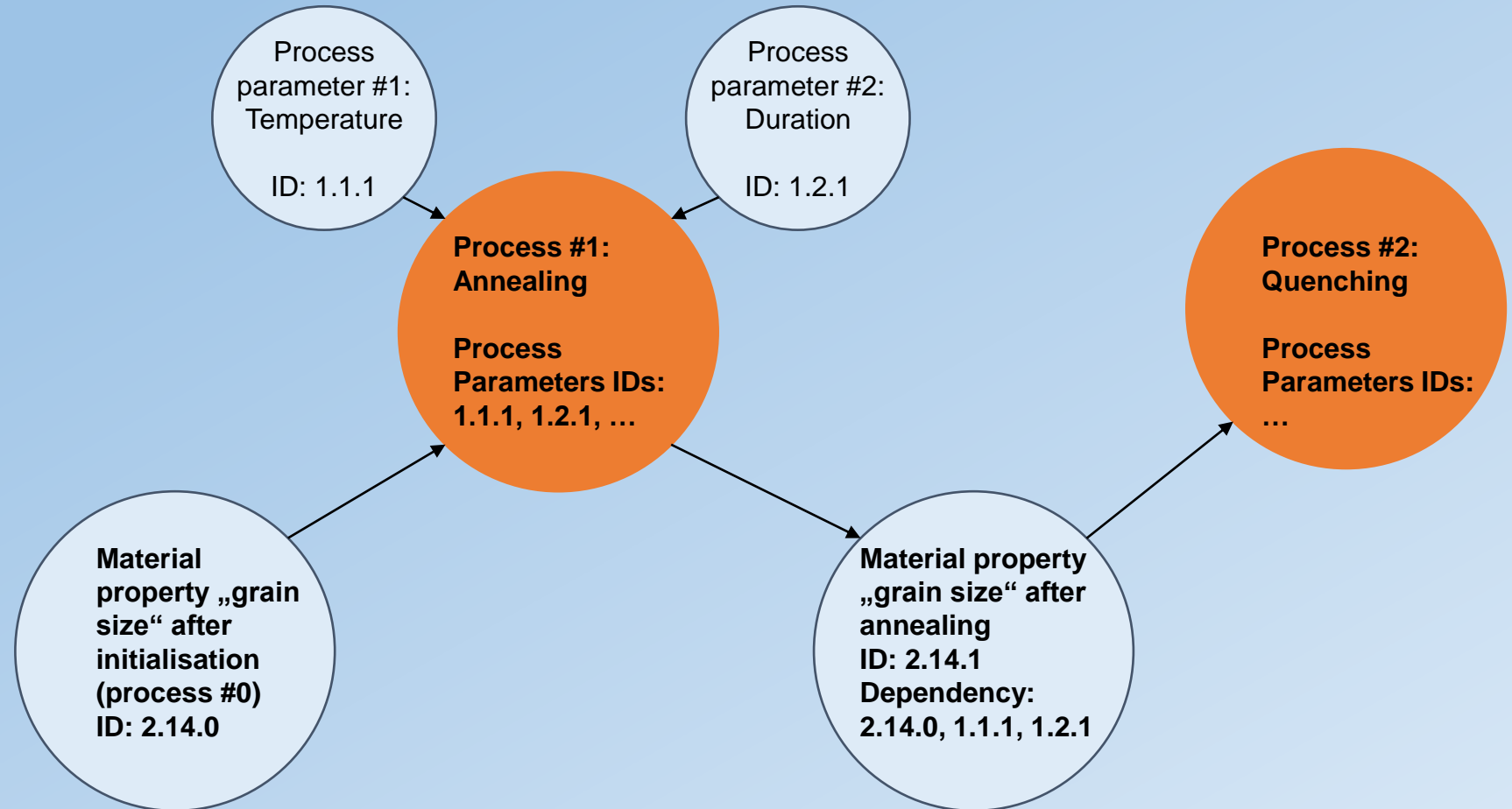
Beispiel:

Einflussstruktur einer Wärmebehandlung

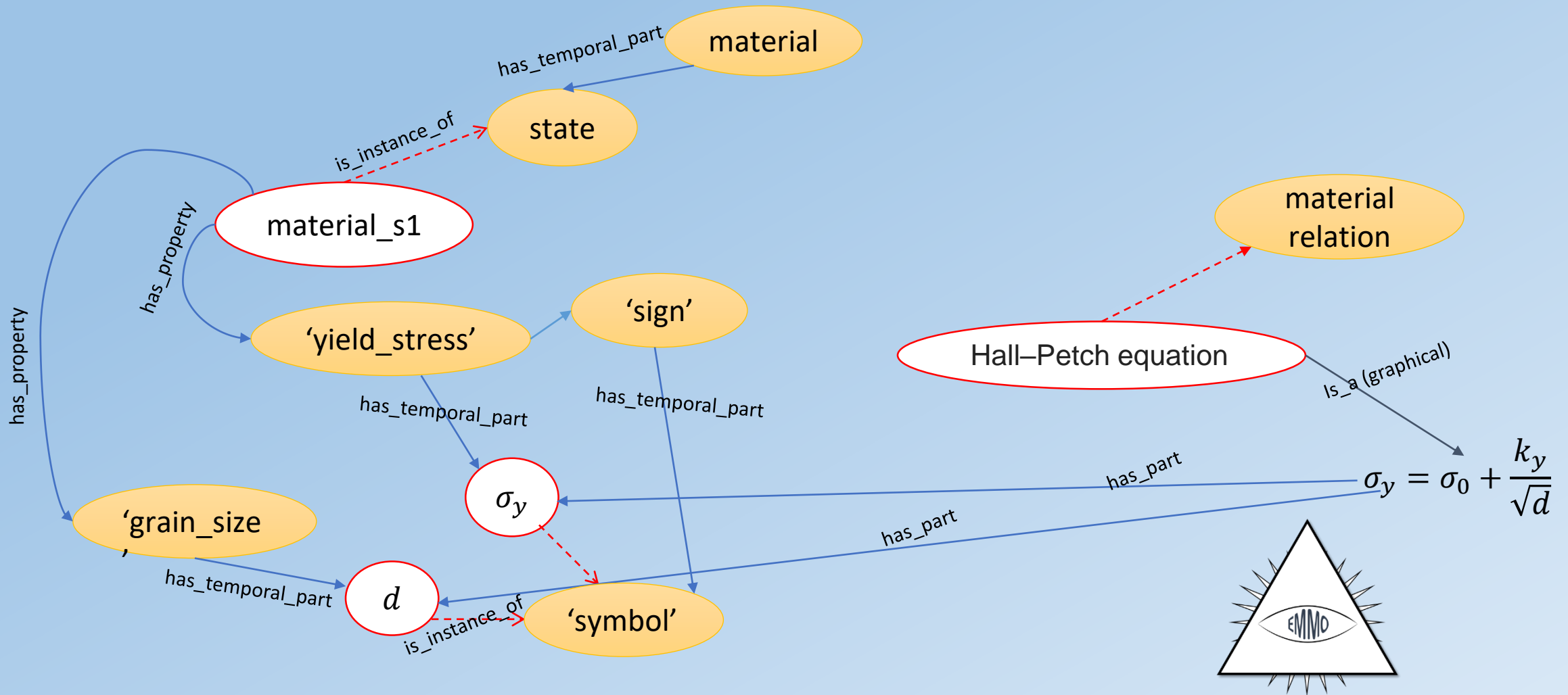
Was in eine Ontologie noch rein muss:

Weitere Aspekte:

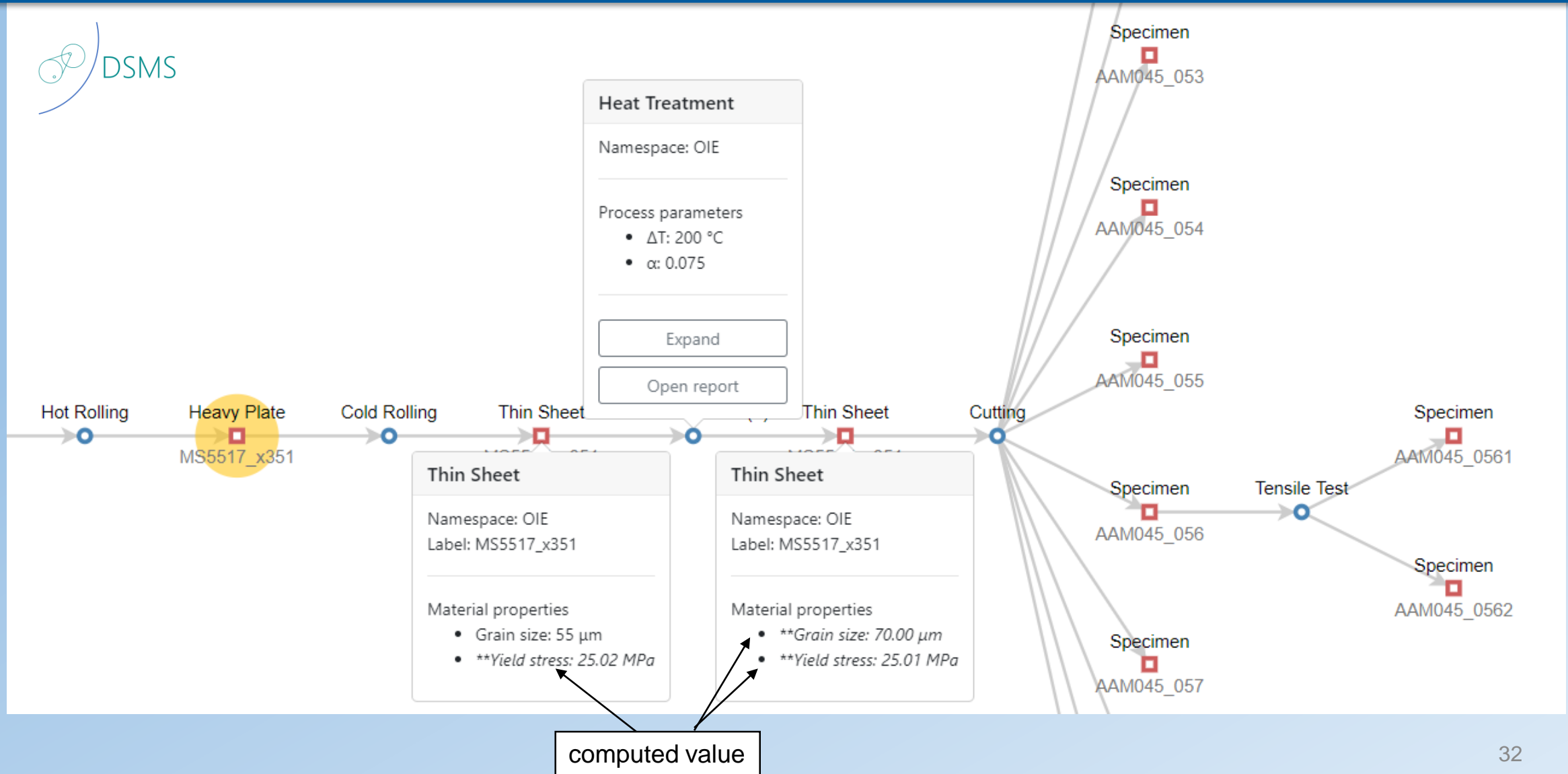
- Lehrbuchformeln implementieren.
- Einheiten berücksichtigen.
- Detailtiefe erweitern
- ...



Backup: Zukunftsausblick: Ausbau des Wissensgraphen und Anschluss an die European Materials Modelling Ontology (EMMO)



Backup: Zukunftsausblick: Unmittelbare Simulationsberechnungen anhand der unterliegenden Ontologie



Backup: Zukünftige Zusammenarbeit und Beiträge

Plattform:

- Bereitstellung einer Beispielontologie zur nachvollziehbaren Darstellung der Erwartungen an die Lösungen.
- Entwicklung und Bereitstellung einer Kollaborationsumgebung zur Ontologieentwicklung.
- Ansprüche an eine Ontologie beispielhaft definieren.
- Ansprüche an Metadaten und Linked Data initial definieren

Zuwendungsempfänger:

- Entwicklung der Ontologie für die eigenen Anwendungsfälle sowie
- deren Integration innerhalb der erzeugten Umgebung und Anforderungen.
- Möglichkeit der Anwendung vorhandener Ontologieansätze überprüfen.
- Mapping gewährleisten, das die eigenen Datenbezeichnungen anhand der Ontologie zugänglich macht
- Metadatensemantik nutzen und ergänzen

Externe Quellen

- [1] *Scientist* (Ice Cream) 1986; Cover illustration for The New Yorker, August 4, 1986; Watercolor and ink on paper; Courtesy of Roz Chast and Danese/Corey, New York. Link: <https://www.nrm.org/2015/03/roz-chast-cartoon-memoirs/>
- [2] The Semantic Web - Not a piece of cake..., Benjamin Nowack. Link: <http://bnode.org/blog/2009/07/08/the-semantic-web-not-a-piece-of-cake>