Sachbericht zum Verwendungsnachweis

zum Teilvorhaben:	**Workflows und Plattformintegration**
im Verbundprojekt:	**Ontologie-basierte interoperable Workflows zur Erforschung und Optimierung von Stahlwerkstoffen für den Bauteileinsatz: Von der Blechhalbzeugherstellung zur Crashsicherheit (Stahl*Digital*)**
Zuwendungsempfänger:	**Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialen GmbH (vormals MPI für Eisenforschung GmbH)**
Förderkennzeichen:	**13XP5116A**
Laufzeit des Vorhabens:	**1.2. 2021 – 31. 5. 2024**
Berichtszeitraum:	**1.2. 2021 – 31. 5. 2024**

Teil I: Kurzbericht

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Es war das Ziel von Stahl*Digital*, Ontologie-basiert einen interoperablen Workflow mit zugehöriger Datenspeicherung in einem modularen Datenraum zu schaffen, den Mehrwert für den Anwendungsfall Karosseriebauteile zu demonstrieren und die Ergebnisse in die Plattform Material*Digital* zu integrieren. Die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes sollte für den mikrolegierten Stahl HX340LAD und den Dualphasenstahl HCT980X (DP1000) beispielhaft demonstriert werden und reicht von der Halbzeugherstellung, über die Bauteilherstellung (am Beispiel Umformen) bis zum Bauteileinsatz (am Beispiel Crashsicherheit).
Der Vorteil des in dem Projekt verfolgten Ontologie-basierten Ansatzes zur Behandlung der horizontalen und vertikalen Workflows liegt in der hohen Flexibilität mit der verschiedene Simulationstools, unterschiedliche Versuchstechniken und Kombinationen aus beiden verknüpft werden können. Durch den Einsatz von flexiblen Workflowumgebungen und die Integration der Projektergebnisse in die Plattform Material*Digital* sollte eine Interoperabilität und Wiederverwendbarkeit, aber auch eine Übertragbarkeit auf andere Materialsysteme sichergestellt werden. Dadurch wird die Materialforschung und -entwicklung, sowie die Herstellung und Verarbeitung von Materialien mit digitalen Methoden, Konzepten und Verfahren nachhaltig gestärkt.
Für die erforderliche Simulation der verschiedenen Zeit- und Längenskalen stehen eine Vielzahl von Simulationswerkzeugen zur Verfügung, deren Vorhersagekraft und Rechenzeit sich deutlich unterscheiden. Untersuchungen auf atomarer Ebene werden mit Dichtefunktionaltheorie (DFT) und Molekulardynamik (MD) Ansätzen durchgeführt. Diese Methoden sind auf kleine Strukturen und Zeitskalen beschränkt. Auf Mikrostrukturebene werden unterschiedliche Methoden Mechanismen abhängig angewendet: Zelluläre Automaten und Phasenfeldmethoden zur Beschreibung der Mikrostrukturevolution während der Wärmebehandlung und mikromechanische Ansätze zur Betrachtung des Verformungsverhalten. Bei der Betrachtung ganzer Bauteile wird üblicherweise die interne Mikrostruktur des Materials nicht mehr betrachtet und phänomenologische Ansätze zur Beschreibung eines homogenisierten Kontinuums werden eingesetzt.
Die durchgängige Simulation mithilfe von Multi-Physik-Frameworks wurde für verschiedene Fälle gezeigt. Aufgrund der Komplexität werden üblicherweise spezialisierte Anwendungen für die einzelnen Prozessschritte eingesetzt. Anwendungsfälle sind die Beschreibung eines Kaltwalzprozesses durch eine Kristallplastizitätssimulation gefolgt von einer Wärmebehandlung zur Rekristallisation, die durch einen zellulären Automaten simuliert wird und die Mikrostruktur-basierte Ermittlung der plastischen Anisotropie mit Hilfe der Kristallplastizität zur nachfolgenden Verwendung in einer makroskopischen Umformsimulation. Die Bewertung des Einsatzverhaltens eines Karosseriebauteils (hier Crashperformance) erfolgt ebenfalls auf makroskopischer Ebene. Die dazu verwendeten Simulationstools greifen auf Materialkarten zu, die das Verformungs- und Versagensverhalten der Werkstoffe in Abhängigkeit von Dehnrate und Mehrachsigkeit beschreiben. In den zur Kalibrierung der Berechnungsmodelle notwendigen globalen Fließ- und Versagenskurven sind die mikrostrukturellen Merkmale bislang nur indirekt enthalten.
Die Einbindung der Prozesskettensimulation in automatisierte Workflow-Systeme ist bisher kaum vorhanden. Am MPI-SusMat hat die weitreichende Erfahrung mit komplexen Simulationsprotokollen zur Entwicklung der Python basierten Arbeitsumgebung pyiron geführt, die 2018 als open-source Projekt (www.pyiron.org) der wissenschaftlichen Community in einer ersten Version vorgestellt und anschließend in die Konzeption der Plattform Material*Digital* integriert wurde. Diese stellt eine Entwicklungsumgebung (IDE – Integrated Development Environment) für die Schaffung, Bearbeitung und Konservierung dieser Simulationsprotokolle dar. Sie bietet nicht nur einen interaktiven Editor für Source-Codes, sondern auch gleichzeitig eine Verwaltung aller notwendigen Rechnungen und ein hierarchisches Daten-Management. Damit bietet sie die Voraussetzung, um auch in diesem Teilprojekt die Konzepte für die Prozesskettensimulation zunächst auszutesten und dann direkt auf die beiden Stahlsorten anzuwenden. Allerdings wurde pyiron zunächst für atomistische Simulationen entwickelt,

wohingegen in diesem Projekt im Wesentlichen Prozesse eine Rolle spielen, die eine Beschreibung auf der Meso- oder Kontinuumskala erfordern.

2. Ablauf des Vorhabens

Das Teilvorhaben verfolgte als Hauptziele, zum einen die Definition Ontologie-basierter Workflows für die Simulation der Stahlblechherstellung und Verarbeitung und zum anderen die Implementierung dieser Workflows in der Plattform Material*Digital*. Diese Ziele sollten in mehreren Teilschritten erreicht werden:

- Zunächst musste ein Ontologie-basiertes Workflowkonzept für Simulations- und Auswertetools geschaffen werden. Dafür wurde auf die Integrierte Entwicklungsumgebung pyiron der Plattform Material*Digital* zurückgegriffen.
- Danach war es notwendig, die Simulation- und Auswertetools kompatibel mit der Workflowumgebung zu gestalten. Diese Anpassung sollte zunächst hauptsächlich in SimPhoNy erfolgen, da dort Erfahrungen mit der Anknüpfung an Ontologien vorlagen und Workflows in pyiron bisher hauptsächlich mit atomistischen Tools abgebildet wurden.
- Anschließend sollte eine Kopplung von SimPhoNy und pyiron durch ein semantic-to-syntactic Interface erfolgen. Dieser Ansatz wurde im Projektverlauf nach der Erarbeitung eines ersten Prototyps zu Gunsten einer direkten semantischen Erweiterung von pyiron jedoch nicht weiterverfolgt.
- Ein wichtiges Arbeitsziel war danach die pyiron Integration der Simulationsmethoden auf der Kontinuumskala, die in diesem Projekt für die Simulation des Materialverhaltens entlang der Prozesskette wichtig sind.
- Das Ziel einer Einbindung der Softwaretools in die Plattform wurde auch durch die Bereitstellung von Conda-Paketen, durch Tests und durch eine zugehörige Dokumentation sichergestellt.
- Das MPI-SusMat hat weiterhin die Schaffung eines Ontologie-basierten Datenraums durch die Kombination eines Datenmanagementsystems (DSMS des Projetpartners Fraunhofer IWM) mit der der pyiron-Umgebung unterstützt.
- Zusätzlich sollte das MPI-SusMat die Crashversuche zur Beurteilung der Vorhersagegenauigkeit der gesamten Simulationskette koordinieren. Im Projektverlauf stellte sich jedoch heraus, dass auf Grund der Einfachheit der verwendeten Teilmodelle der Prozesssimulation keine quantitativ ausreichend genauen Ergebnisse zu erwarten waren und es wurde auf die Durchführung einer experimentellen Verifizierung verzichtet.

3. Wesentliche Ergebnisse sowie ggfs. Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die wichtigsten Ergebnisse des Teilprojektes liegen im Bereich der Workflows. Dies umfasst sowohl Workflows entlang der Simulationsskalen als auch Workflows entlang der Prozesskette (Abbildung 1). Die Integrierte Entwicklungsumgebung pyiron wurde während der Projektlaufzeit in wesentlichen Punkten weiterentwickelt und im Projekt auch als Workflow Managementtool genutzt. Die Integration des Simulationspaketes DAMASK (Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit) erfolgte in zwei Stufen: erst als Skript-Jobs und später als pyiron-Jobs. Damit sind DAMASK Simulationen jetzt voll in die pyiron Workflowumgebung eingebunden und es ist möglich Standardaufgaben wie die Modellerstellung, Materialdefinition oder Lastbeschreibung analog zu anderen pyiron-Workflows vorzunehmen. Diese Integration wurde sowohl an einen vertikalen (Atomistische Berechnung elastischer Eigenschaften und anschließende Verwendung in der Simulation eines Zugversuches) als auch an einem horizontalen Workflow (mehrstufiges Walzen) demonstriert. Verschiedene Workflows wurden im Workflowstore der Plattform Material*Digital* veröffentlicht. Weiterhin wurde zur Sicherstellung der Interoperabilität zwischen Auswerte- und Simulationstools eine semantische Repräsentation von pyiron Workflows erarbeitet.
Im Bereich der Ontologieentwicklung wurde unter Federführung des Projektpartners InfAI und in enger Zusammenarbeit mit dem Projektpartner Fraunhofer IWM eine Domänenontologie für Stahl und verbundene Prozesse entwickelt. Hierfür war die Domänenexpertise des MPI-SusMat wichtig. Die Anwendungsontologie ist mit der Core-Ontologie der Plattform Material*Digital* (PMDco 2.0) verknüpft.

Teil II: Eingehende Darstellung

1. Darstellung der Verwendung der Zuwendung sowie der erzielten Ergebnisse

Die Grundidee von StahlDigital ist es die Stahlherstellung und -verarbeitung durch die Nutzbarmachung von Material- und Prozessdaten zu optimieren. **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** zeigt eine typische Fertigungsprozesskette in der Stahlverarbeitung sowie anfallender Prozess- und Materialdaten, welche in StahlDigital als beispielhaft betrachtet wurde, bestehend aus Warmwalzen, Kaltwalzen, Wärmebehandeln und Umformen inkl. Anwendung.

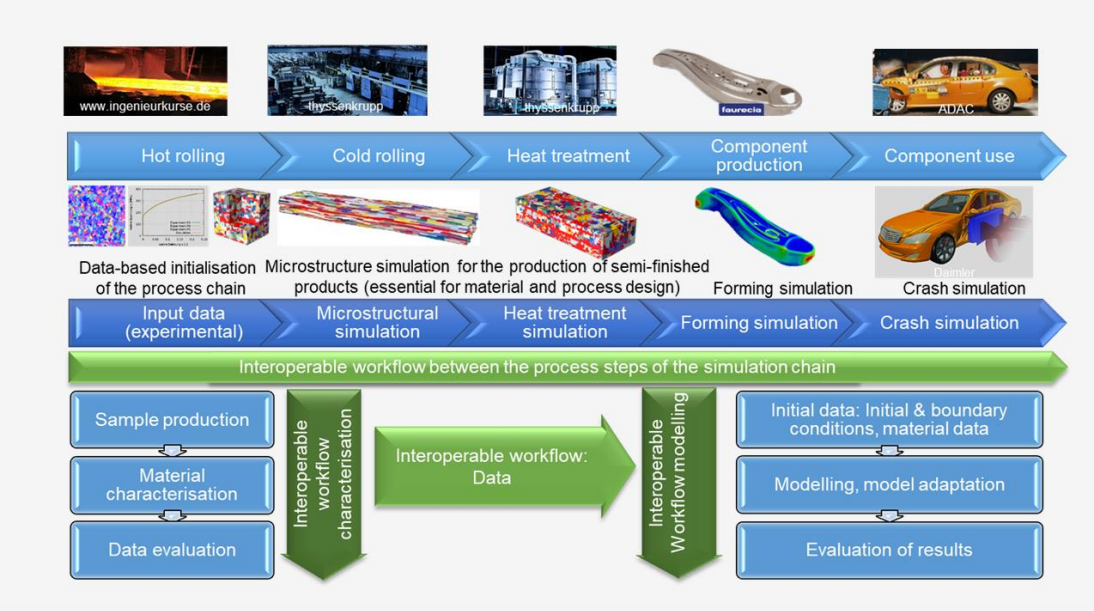

Abbildung 1: Typische Prozesskette in der Stahlverarbeitung inklusive anfallender virtueller und experimenteller Daten.

Das MPI-SusMat hat in diesem Teilprojekt schwerpunktmäßig die Entwicklung und Implementierung der Ontologie-basierten Workflows in pyiron sowie die Integration der Softwaretools in die Plattform Material*Digital* übernommen. Es hat aber auch bei der Schaffung eines Ontologie-basierten Datenraums, bei der Integration von Versuchsdaten und bei der Demonstration und Validierung der im Gesamtverbund entwickelten Methodik und Softwaretools mitgewirkt. Wie aus Abbildung 2 hervorgeht, handelt es sich insbesondere bei der Behandlung der Workflows um einen integralen Bestandteil des Verbundvorhabens. Auch bei der Verknüpfung von Ontologie, Tools und dem Datenraum spielte das MPI-SusMat eine wichtige Rolle.

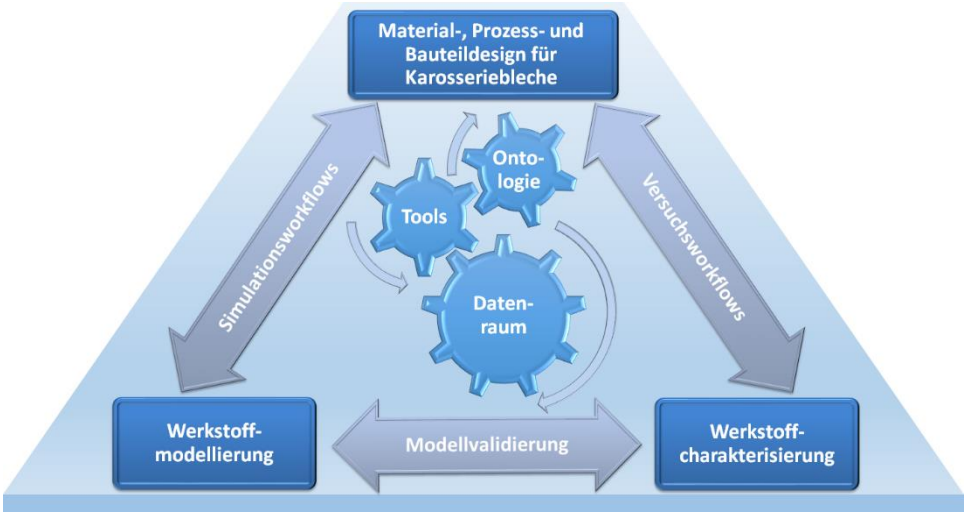

Abbildung 2: Verzahnung von Ontologie, interoperablen Tools und Datenraum als Treiber für das Material-, Prozess- und Bauteildesign für Karosseriebleche auf der Basis von Werkstoffmodellen und Werkstoffcharakterisierung.

AP1 Domänen-Ontologieentwicklung für die digitale Repräsentation des Use Cases (Material, Prozess u. Bauteil)

Es wurde unter Federführung des Projektpartners InfAI und in enger Zusammenarbeit mit dem Projektpartner Fraunhofer IWM eine Domänenontologie für Stahl und verbundende Prozesse entwickelt. Diese ist mit der Core-Ontologie der Plattform Material*Digital* (PMDco 2.0) verknüpft und umfasst mehr als 500 Konzepte und Klassen und mehr als 600 Eigenschaften die in ca. 900 Triples beschrieben sind.
Außerdem erarbeitete das MPI-SusMat zusammen mit dem Projektpartner InfAI eine pyiron-Workflow-Ontologie. Es gab dazu mehrere separate Treffen mit den Kollegen des HAP4 der Plattform Material*Digital*, um die Anbindung an die Mid-Level-Ontologie der PMD (PMDco 2.0) zu gewährleisten. Der grundlegende Arbeitsablauf sieht aus wie folgt: Die Metadaten der Workflowumgebung und des zugrunde liegenden Codes werden zunächst als CSV-Datei erstellt und in einen Triple Store übersetzt. Danach erfolgt die Anknüpfung an die PMDco in Form einer Anwendungsontologie. Anschließend wird ein pyiron-Job ausgeführt, um Simulationsdaten zu erzeugen. In einem Mapping-Prozess erfolgt dann die umfassende Darstellung des Workflows in der Ontologie. Abbildung 3 zeigt den Aufbau mit den Klassen, Objektbeziehungen und Dateneigenschaften für einen beispielhaften pyiron-Workflow, der zur Berechnung des Kompressionsmoduls verwendet wird (für die entsprechenden Notebooks siehe auch: https://git.material digital.de/stahldigital/simphony-osp-pyiron/tree/notebook_integration/Notebook).

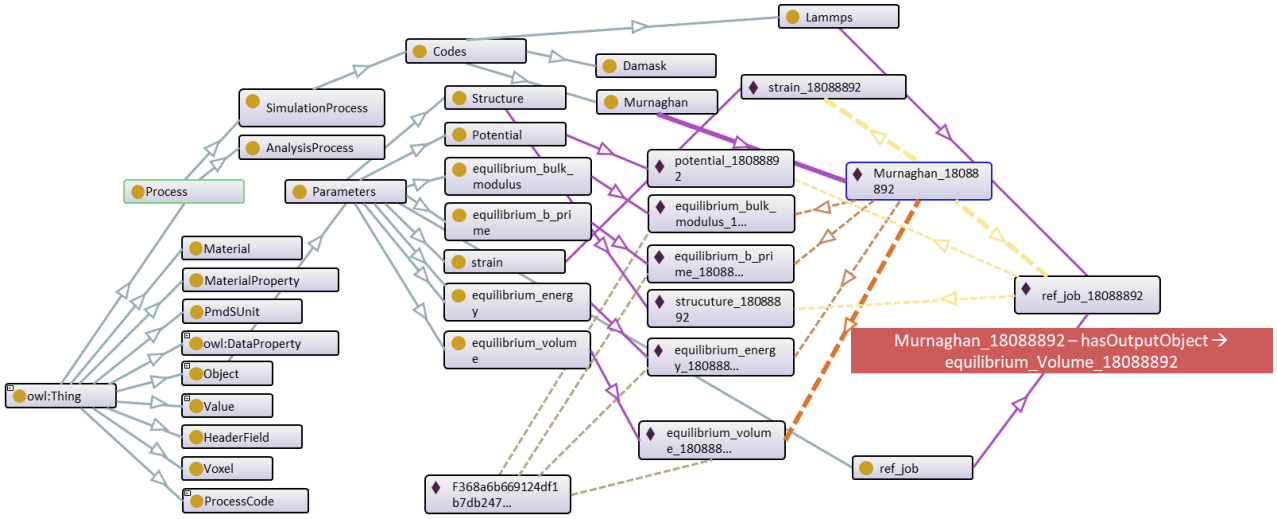

Abbildung 3: Veranschaulichung des Ontologie-Entwicklungsprozesses für einen pyiron Workflow, der über eine Anwendungs-Ontologie mit der PMDco verbunden ist.

AP2 Ontologie-basierter Datenraum für Material-, Prozess- und Bauteildaten

Am IWM wurde basierend auf dem bestehenden Data Space Management Systems (DSMS) ein Datenraum für Stahl*Digital* erstellt. Auf Grund offener Lizenzfragen, war es allerdings nicht möglich eine Instanz des Datenraumes auf der MPI-SusMat Hardware bereitzustellen.
Auf der MPI-SusMat Hardware wurde daher zunächst ein PMD Server (https://materialdigital.github.io/pmd-server/, https://github.com/ materialdigital/pmd-server) in Betrieb genommen, welcher auch nach Ablauf des Projektes Stahl*Digital* weiter betrieben wird (https://pmds.mpie.de).
Vom IWM wurde ein DSMS-SDK (https://github.com/MI-FraunhoferIWM/dsms-python-sdk) entwickelt, welches es ermöglicht über einfache Python Funktionen Daten aus dem DSMS abzurufen bzw. dort abzulegen. Dies wurde im Rahmend des Stahl*Digital* Workshops am Fraunhofer IWM im April 2024 im Zusammenhang mit den weiter unten vorgestellten Workflows demonstriert.

AP3 Interoperabler Workflow und agile Agenten zur Nutzung der Auswerte- und Simulationstools

Der Schwerpunkt der Arbeiten des MPI-SusMat in diesem Projekt lag im Bereich der Workflows. Dies umfasst sowohl Workflows entlang der Simulationsskalen als auch Workflows entlang der Prozesskette (vergleiche Bild 1.1 der Gesamtvorhabenbeschreibung). Grundvoraussetzung ist die Ertüchtigung der eingesetzten Simulationstools zur Ermöglichung einer Ontologie-basierten Workflow Beschreibung. Das MPI-SusMat ist Entwickler sowohl von dem Workflow-Tool pyiron als auch dem Multiphysik-Simulationstool DAMASK. Beiden Softwarepaketen kommt eine Schlüsselrolle sowohl im Projekt als auch der Plattform Material*Digital* zu.
Das Workflow-Tool pyiron wurde ursprünglich für Simulationen auf der atomistischen Skala entwickelt und später in modularer Art und Weise für andere Anwendungsbereiche erweitert (Abbildung 4).

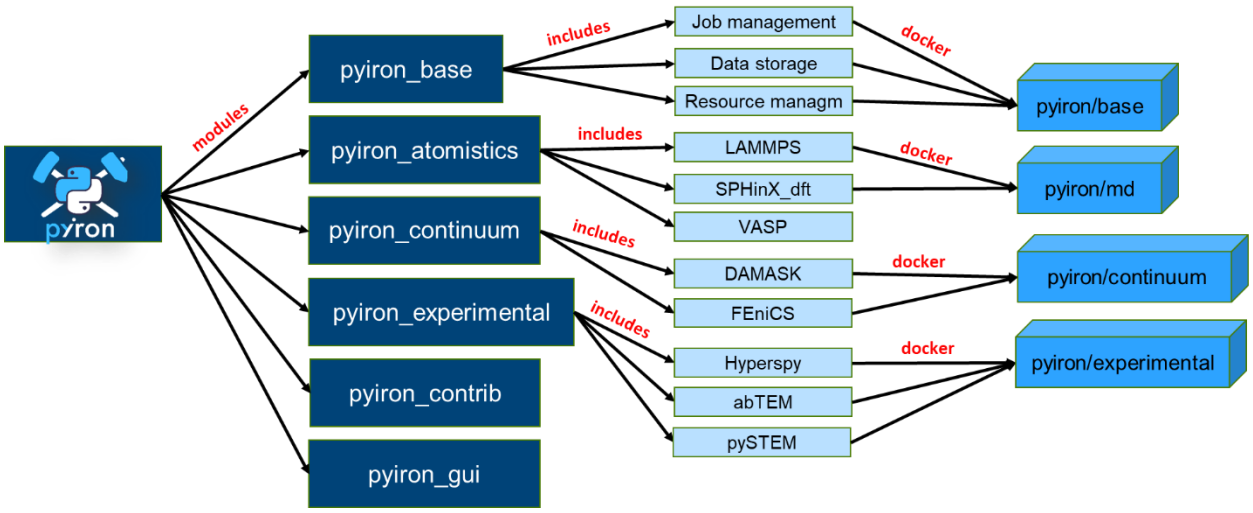

Abbildung 4: Modulare Struktur des Workflow-Tool pyiron.

DAMASK ist Teil von pyiron_continuum. In der Projektlaufzeit wurde DAMASK Version 3 entwickelt, die wesentliche Änderungen der Ein- und Ausgabe Formate mit sich brachte. pyiron_continuum wurde entsprechend angepasst und gleichzeitig wurde die Integration von einer zunächst Skript-basierten Integration auf eine Integration in Form von pyiron-Job Objekten umgestellt. Dabei war die Umstellung des DAMASK Pre- und Post-Processing von Shell-Skripten auf eine Python-Bibliothek extrem hilfreich. So ist es jetzt möglich DAMASK Jobs mit pyiron-Standardbefehlen zur Modellerstellung, Materialdefinition oder Lastbeschreibung zu erzeugen, was dem ungeübten Benutzer die Durchführung von DAMASK Simulationen ohne Spezialwissen erlaubt. Gleichzeitig besteht für Poweruser jedoch auch die Möglichkeit direkt auf die DAMASK Python-Bibliothek zuzugreifen, wodurch dem Experten alle Spezialfunktionen von DAMASK zur Verfügung stehen. Die Integration ist in Abbildung 5 schematisch dargestellt.

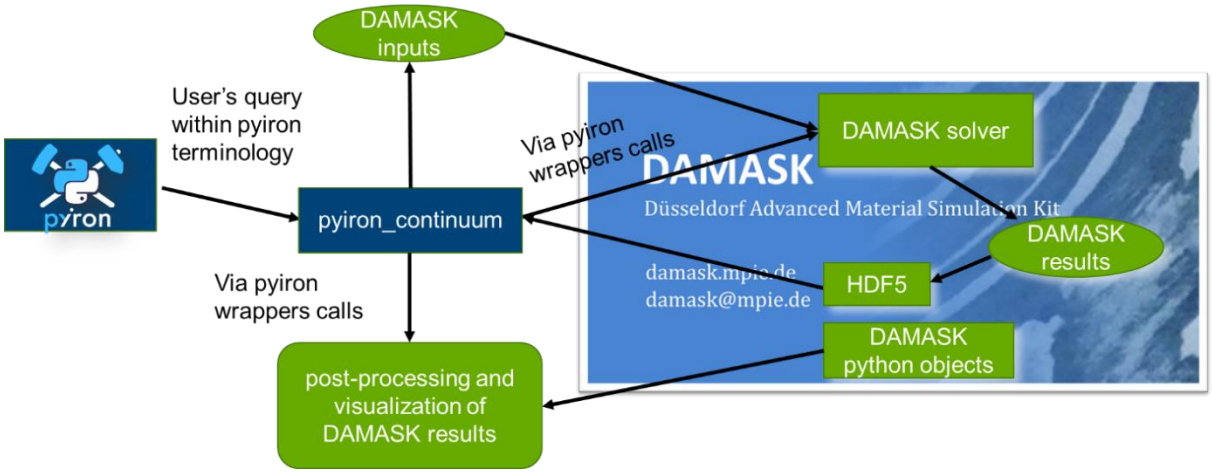

Abbildung 5: Schematische Visualisierung der pyiron-DAMASK Integration.

Erarbeitete Workflows

Auf Basis der pyiron-DAMASK Integration wurden verschiedene Workflows erarbeitet. Diese demonstrieren sowohl eine Integration über verschiedene Längenskalen (Kombination von LAMMPS und DAMASK) als auch eine Integration entlang der Prozesskette (Mehrstufiges Walzen und Wärmebehandlung) und werden im Folgenden näher vorgestellt.

Kombination von LAMMPS und DAMASK

Es wurde einen pyiron-Workflow erstellt, der ein spezielles Tool zur Erzeugung quasizufälliger Strukturen (SQS), ein atomistisches Simulationswerkzeug (LAMMPS) und ein Kontinuums-Simulationswerkzeug (DAMASK) kombiniert, um eine numerische Homogenisierung der mechanischen Eigenschaften von Stahl-Einkristallen durchzuführen. Während die elastischen Konstanten der reinen Materialien in der Literatur leicht verfügbar sind, gilt dies nicht für die Legierungen. Als Konzeptnachweis wurde unter Verwendung der für das Fe-Al-System verfügbaren interatomaren Potenziale mit LAMMPS Molekulardynamiksimulationen durchgeführt, um die elastischen Konstanten eines Fe-Einkristalls mit unterschiedlichen Aluminiumzusätzen zu bestimmen. Diese werden dann an DAMASK übergeben, das zur Berechnung der Spannungs-Dehnungs-Kurven eines Polykristalls für drei verschiedene Al-Konzentrationen verwendet wird (siehe Abbildung 6). Der Arbeitsablauf muss eine große Anzahl einzelner Simulationsaufträge ausführen. In diesem Fall übernimmt pyiron die vollständige Verteilung der einzelnen Jobs auf die Rechenknoten, das Sammeln der Ergebnisse und gleichzeitig die Aufzeichnung wichtiger Metadaten zu den Jobs in einer SQL-Datenbank.

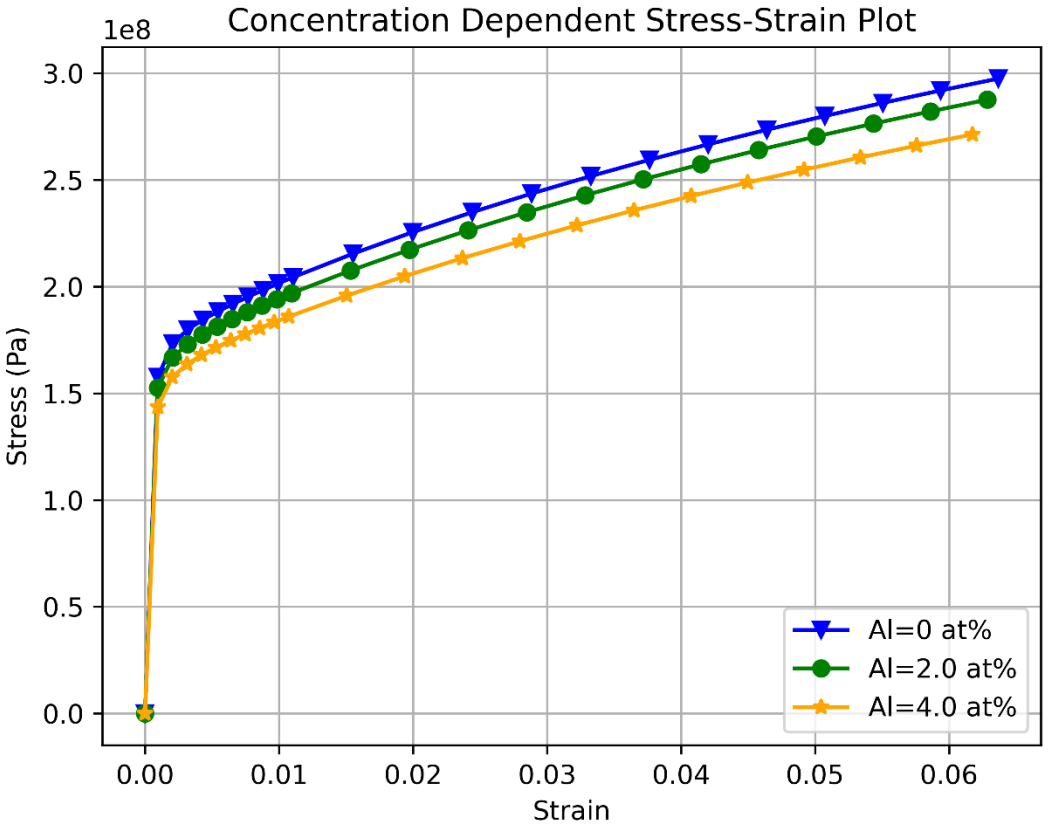

Abbildung 6: Spannung-Dehnungs-Kurven für Eisen mit verschiedenen Al-Konzentrationen. Es wurde nur die Änderung der elastischen Konstanten berücksichtigt, die plastischen Parameter wurden bewusst gleich gelassen.

Mehrstufige Walzsimulation mit DAMASK

Das pyiron-Kontinuum-Modul wurde erweitert, um die Simulation eines Walzprozesses mit mehreren Walzgerüsten zu erleichtern. Die pyiron-Klasse ROLLING ermöglicht die Definition eines einzelnen Walzstiches durch Angabe der Höhenabnahme und der Walzgeschwindigkeit (Abbildung 7). Die eigentliche Simulation basiert auf DAMASK-RVEs (Repräsentative Volumenelemente). Die

Walzverformung wird als ebene Dehnung angenähert und die entsprechende DAMASK-Lastdatei wird automatisch erstellt. Da die Gesamtverformung beim mehrstufigen Walzen sehr hoch werden kann, kann für jeden Walzschritt festgelegt werden, ob vor dem nächsten Walzschritt ein regelmäßiges Gitter wiederhergestellt werden soll, sogenanntes Regridding (regrid_flag). Auf diese Weise kann eine beliebige Anzahl von Walzschritten simuliert werden. Abbildung 8 zeigt das Beispiel eines vierstufigen Walzprozesses. Zur Veranschaulichung wird vor den Walzschritten 2 und 4 ein Regridding durchgeführt. Das Regridding erfolgt so, dass die Gitterauflösung in Richtung der kürzesten Dimension (hier z bzw. die Blechnormale) erhalten bleibt. Da sich hierdurch die Zahl der Gitterpunkte mit jedem Regridding erhöht, sollte es im Unterschied zum gezeigten Beispiel nur durchgeführt werden, wenn aus numerischer Sicht notwendig. Dies verringert auch den unvermeidbaren Genauigkeitsverlust, der bei jedem Regridding entsteht.

```
# Define parameters for first rolling
reduction_height = 0.05
reduction_speed = 5.0e-2
reduction_outputs = 250
regrid_flag = False
damask_exe = ''
```

```
# Run first rolling simulation
job_rolling.executeRolling(reduction_height,
                           reduction_speed,
                           reduction_outputs,
                           regrid_flag,
                           damask_exe
                           )
```

```
# Process the result after first rolling simulation
job_rolling.postProcess()
```

Abbildung 7: Codeausschnitt zur Definition eines Walzstiches in pyiron.

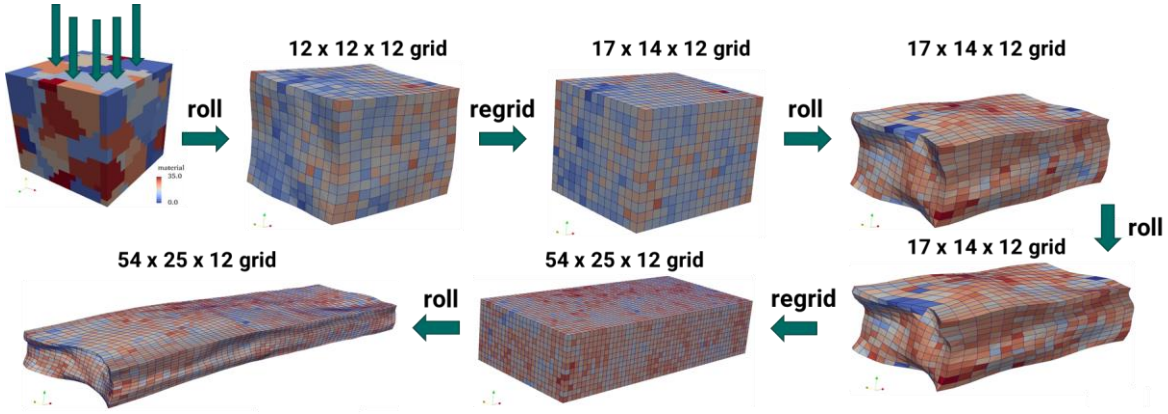

Abbildung 8: Einzelschritte des Workflows zur Simulation eines mehrstufigen Walzprozesses.

Simulation der Wärmebehandlung mit OpenPhase

Die Simulation einer abschließenden Wärmebehandlung zur Rekristallisation der gewalzten Mikrostruktur wird mit OpenPhase (academic) durchgeführt. Hierzu wurde pyiron um Funktionen für den Datentransfer von DAMASK nach OpenPhase erweitert. Da OpenPhase mit regelmäßigen Gittern arbeitet, besteht der erste Schritt in einem Regridding der aus der Walzsimulation erhaltenen endgültigen verformten Mikrostruktur (siehe Abbildung 9, oben links). Als Nächstes wird die OpenPhase-Konfiguration erstellt und eine bestimmte Anzahl von Keimen in den Bereichen mit der höchsten Verformung platziert. Da die Phasenfeldmethode diffuse Grenzflächen verwendet, werden die

Korngrenzen als abschließender Vorverarbeitungsschritt geglättet (siehe Abbildung 9 oben rechts). Schließlich startet pyiron die eigentliche OpenPhase-Simulation und die Keime wachsen auf Kosten der verformten Körner (siehe Abbildung 9 unten).

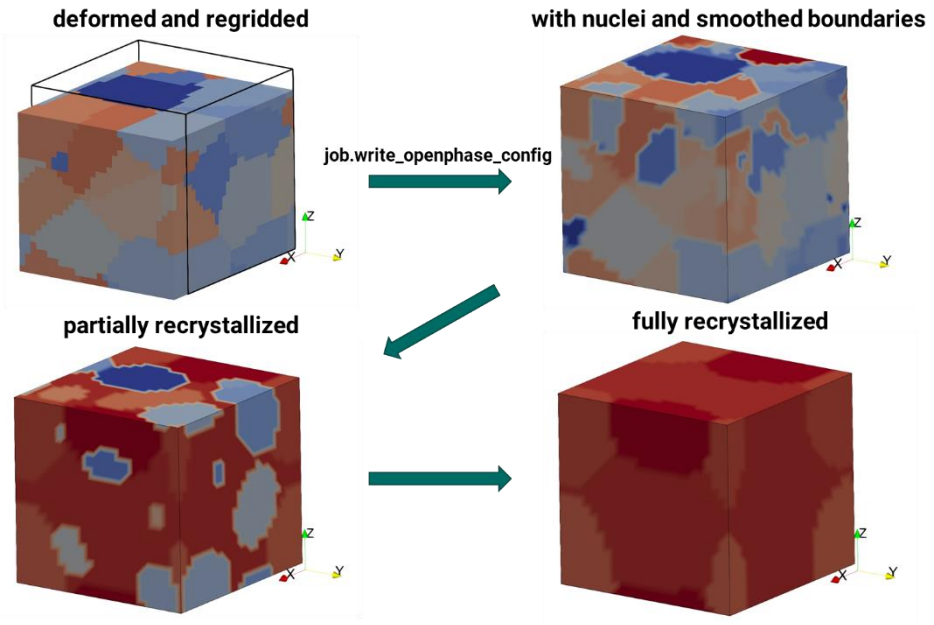

Abbildung 9: Einzelschritte des Workflows zur Simulation einer Wärmebehandlung.

Semantische Beschreibung kombinierter experimenteller und Simulations-Workflows

Die für den Stahlentwicklungsprozess erforderliche Kopplung zwischen verschiedenen Simulationstools und experimentellen Daten wird im Allgemeinen durch die Umwandlung der Ausgabe eines Werkzeugs erreicht, die dann als Eingabe für ein anderes Werkzeug dient. Mit Ontologie-basierten Konzepten kann die Kopplung zwischen verschiedenen Tools automatisiert werden. Die Idee besteht darin, Ontologien als Abstraktionsschicht zu verwenden, um Beziehungen zwischen Daten und Konzepten zu definieren, die für Arbeitsabläufe und Programmschnittstellen genutzt werden können (siehe Abbildung 10). Eine solche Abstraktion ermöglicht einen flexiblen Austausch verschiedener Tools, die innerhalb eines Arbeitsablaufs demselben Zweck dienen. Auf diese Weise können Arbeitsabläufe unabhängig von den zugrunde liegenden Simulations-/Experimentiertools definiert werden.

Um dieses Ziel zu erreichen, wurden in pyiron zwei verschiedene Ebenen eines Ontologie-basierten Ansatzes übernommen: (i) Extrahieren von Metadaten aus der pyiron-Simulation und Ableiten von Ontologiebeziehungen unter Verwendung der pyiron-Klassenhierarchie, (ii) automatische Generierung Ontologie-basierter Arbeitsabläufe. Dadurch wird auch die Kompatibilität mit DSMS-basierten Datenraumlösungen wie dem StahlDigital-Datenraum sichergestellt.

Für den ersten Ansatz wurde eine Metadatentabelle für die pyiron-Simulationsumgebung mit verschiedenen Abschnitten zu (i) Codes, (ii) den Eingabe- und Ausgabeparametern, (iii) den Referenzjobs und (iv) den physischen Einheiten erstellt. Die Metadatentabelle wird dann mithilfe von RDFlib in Klassen- und Unterklassenbeziehungen auf die PMDco abgebildet, wobei Codes zur PMDco-Klasse SimulationProcess und Parameter zu ValueObject hinzugefügt werden. Die Simulationsdaten aus der HDF5-Datei des fertigen pyiron-Workflows werden durch Ausführen eines pyironTable-Jobs extrahiert. Die pyiron-Job-Eingabe/Ausgabe wird mit Metadateninformationen verglichen und die in der Metadatentabelle definierten Daten werden in der Anwendungsontologie zugeordnet. Anschließend folgen wir den PMDco-Richtlinien, um korrekte Klassen-, Objekt-Eigenschafts- und Daten-Eigenschafts-Beziehungen abzuleiten.

Im zweiten Ansatz wird eine OWL-Datenbank für pyiron erstellt, die die Informationen über die erforderlichen Daten-Eigenschafts-Beziehungen enthält und über einen Django-pyiron-Ontologieserver zugänglich ist, wie in Abbildung 10 dargestellt. Basierend auf der erforderlichen physikalischen Ausgabegröße wird ein Ontologie-basierter pyiron-Workflow generiert. Mit pyiron kann dieser Workflow vollautomatisch ausgeführt werden, wodurch der Wert der erforderlichen physikalischen Größe als Ausgabe zurückgegeben wird. Aufgrund der semantischen Datenverwaltung auf Basis der entwickelten StahlDigital-Ontologie kann pyiron nahtlos auf Daten aus dem StahlDigital-Datenraum zugreifen und auf dieser Grundlage Simulationen durchführen (Abbildung 11). Darüber hinaus kann pyiron die Simulationsergebnisse in den Datenraum integrieren und mit den zuvor abgerufenen experimentellen Daten verknüpfen. Auf diese Weise werden vollständige experimentelle und Simulations-Workflows mit pyiron und DSMS dargestellt. Alle generierten Informationen können zurückverfolgt werden und werden konsistent gespeichert.

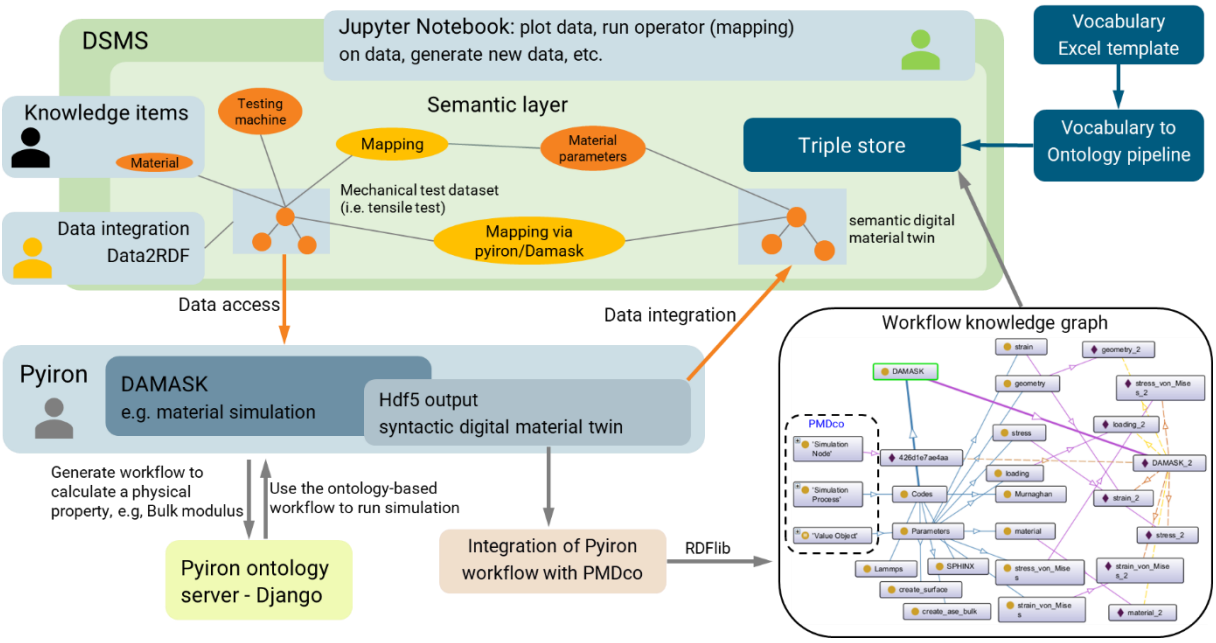

Abbildung 10: Schematische Übersicht der Struktur des Projektes mit den wichtigsten Schnittstellen.

```
# Now we will connect to dsms
dsms = DSMS(host_url="https://stahldigital.materials-data.space",
            username=username,
            password=password)
```

```
# Search for our data item using unique KItem UUID
# input_kitem_id = 'ff8ee824-cef6-465c-84af-4d332e73ac64' # dsms KItem UUID for our dataset
input_kitem_id = '1ba3712b-68f2-4f2f-89d9-e0b3e4823d48' # New KItem
item = dsms[input_kitem_id]
```

```
# Run the functions defined above to get experimental elasticity and plasticity data from dsms
elasticity_data = get_elasticity_data_from_dsms(item)
plasticity_data = get_plasticity_data_from_dsms(item)
```

Abbildung 11: Codeauschnitt zum Abruf von Materialdaten aus dem DSMS.

AP4 Integration von Versuchsdaten in den Datenraum

Im Berichtszeitraum wurden keine Versuchsdaten des MPI-SusMat in den Datenraum integriert, da sich gezeigt hat, dass die aktuell verfügbaren Modelle aus materialwissenschaftlicher Sicht zu einfach sind, um die finalen Materialeigenschaften vorherzusagen. Die geplante Durchführung von Crashversuchen zur Validierung erscheint daher nicht sinnvoll. Soweit sinnvoll wird alternativ auf am Fraunhofer IWM vorhandene Daten zurückgegriffen.
Im Rahmen der erstellten Demonstratoren für die Workflows wurden jedoch mit Hilfe des vom Projektpartner Fraunhofer IWM entwickelten DSMS-SDKs Daten aus dem Datenraum abgerufen (Abbildung 11) und Ergebnisse in demselben abgelegt.

AP5 Demonstration und Einsatz der Leistungsfähigkeit der entwickelten Methodik und Softwaretools

Der unter AP3 beschriebene Workflow zum mehrstufigen Walzen wurde bei verschiedenen Gelegenheiten zur Demonstration der Leistungsfähigkeit der entwickelten Methodik eingesetzt. So wurden auf den jährlichen Vollversammlungen der Plattform Material*Digital* verschiedene Entwicklungsstufen vorgeführt. Der vollständige Workflow diente schließlich als ein zentraler Demonstrator beim abschließenden Industrieworkshop des Projektes Stahl*Digital* am Fraunhofer IWM.

AP6 Vernetzung mit der Plattform Material*Digital* und Verwertung

Die Plattformeinbindung war der zweite Arbeitsschwerpunkt des MPI-SusMat. Bei allen Veranstaltungen, die von der PMD mit den Projekten organisiert wurden, war das Projekt Stahl*Digital* vertreten. Insbesondere war Stahl*Digital* auf den jährlichen Vollversammlungen eines der Projekte, die einen Demonstrator in unterschiedlichen Entwicklungsstufen präsentiert haben. Ebenso wurden die wichtigsten Ergebnisse des Projekts auf der MSE 2022 und 2024 sowie der FEMS EuroMat 2023 in mehreren Vorträgen in Symposien vorgestellt, die von der PMD organisiert wurde. Dazu gehört ein Vortrag von T. Hickel zu „Integration of multiscale workflows into the pyiron IDE“, der explizit die Entwicklungen beim Teilprojekt MPI-SusMat in Stahl*Digital* und insbesondere die Integration von DAMASK in pyiron (siehe Abbildung 5) adressiert hat.
Stahl*Digital* war in Person von T. Hickel auch direkt in der Plattform Material*Digital* vertreten. Dadurch ist eine Anbindung des Projektes an das Kernteam der Plattform gewährleistet. Darüber hinaus nahm Herr Hickel regelmäßig an den Treffen des Workflow-Teams der Plattform teil. Es wurde dafür gesorgt, dass in diesem Treffen regelmäßig über das Projekt Stahl*Digital* und die Fortschritte berichtet wurde und eine User Story zur Diskussion gestellt wurde. Herr Ahmed Aslam, ein Mitarbeiter von Stahl*Digital*, sorgte für die Vertretung des Projekts bei den Ontologie-Meetings der Plattform. Außerdem haben Herr Kirill Bulert und Lars-Peter Meyer (beide InfAI) das Projekt im Ontologie-Playground vertreten.
Weiterhin wurde eine Untergruppe der PMD-Workflowgruppe gebildet, die sich den speziellen Fragen der Schnittstelle zwischen Ontologie und Workflow gewidmet hat. Diese traf sich meist wöchentlich und wurde von Ahmed Aslam geleitet. Das Schaffen derartiger Schnittstellen ist ein zentrales Anliegen der PMD als Ganzes, die dafür drei verschiedene Varianten definiert und in mehreren Präsentationen vorgestellt hat. Die Variante, bei der eine semantische Beschreibung von pyiron Workflows in einer PMDco-konsistenten Form durchgeführt wird, wurde hauptsächlich in dieser Arbeitsgruppe und durch entscheidende Beiträge von Stahl*Digital* vorangebracht. In neueren Entwicklungen am MPI-SusMat wurde eine Workflow-Klasse innerhalb von pyiron definiert, für die eine ontologische Typisierung vorgesehen ist und in verschiedenen Szenarien bereits demonstriert werden konnte. Für Details dazu wird auf den Zwischenbericht des MPI-SusMat im Projekt Plattform Material*Digital* verwiesen. Von den MPI-SusMat Kollegen innerhalb von Stahl*Digital* wurde auf die Anschlussfähigkeit dieser Entwicklungen für das Projekt gesorgt.
Einige der oben beschriebenen Workflows wurden bereits während der Projektlaufzeit im PMD Workflowstore (https://workflows.material-digital.de/) der MaterialDigital Community zur Verfügung

gestellt (Abbildung 12). Für weitere Workflows ist dies im Anschluss an das Projekt noch vorgesehen.

Abbildung 12: Der LAMMPS-DAMASK Workflow im PMD Workflowstore.

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Der mit Abstand größte Ausgabeposten waren die Personalkosten (466248,57 €). Auf Grund der umfangreichen zu leistenden Programmierarbeiten sowie der Tatsache, dass die Konsortiumsleitung beim MPI-SusMat lag ist der Personalaufwand vollständig gerechtfertigt. Die beantragte Workstation wurde für die Einrichtung eines PMD-Servers genutzt (9689,40 €), der auch nach Projektende vom MPI-SusMat auf eigene Kosten weiterbetrieben wird. Da aus den in Teil II Abschnitt 1 dargelegten Gründen auf die Durchführung von Crashversuchen verzichtet wurde, wurden die mit Sperrvermerk genehmigten Mittel (1030,00 €) nicht in Anspruch genommen.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Alle durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung des Vorhabenzieles, Ontologie-basierte interoperable Workflows zu schaffen notwendig. Auch wenn keine vollständige Abbildung des gesamten Herstellungsprozesses erreicht wurde, wurden Konzepte für Teilprozesse entwickelt, die auf weitere Prozessschritte erweitert werden können.

4. Voraussichtlicher Nutzen und Fortschreibung des Verwertungsplans

Die entwickelte Software steht zur freien Nutzung in verschiedenen online-Repositorien zur Verfügung. Beim Industrieworkshop wurde bereits von mehreren Industrieteilnehmern entsprechendes Interesse geäußert.

Auf Basis der Ergebnisse von Stahl*Digital* wurden im Rahmen von Material*Digital* bereits weitere Forschungsanträge gestellt (Runde 2: StahlDigital2 nicht genehmigt; Runde 3: AnProMat genehmigt). Weitere Anträge sind geplant, wenn entsprechende Ausschreibungen veröffentlicht werden.

Die Softwarepakete pyiron und DAMASK werden am MPI-SusMat stetig weiterentwickelt, so dass auch in Zukunft aktuelle Entwicklungen im Bereich der Ontologie-basierten Workflows unmittelbar aufgegriffen werden und so der Material Community zugänglich gemacht werden.

Der am MPI-SusMat eingerichtete PMD-Server wird auch nach Ende der Projektlaufzeit weiterbetrieben und steht damit der Material*Digital* Community als Teil des PMD-Netzwerkes zur Verfügung.

5. Darstellung des während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Es sind keine gleichartigen Forschungen oder Veröffentlichungen zum Thema Ontologie-basierte interoperable Workflows bekannt.

6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses nach Nr. 5 der NABF/NKBF

Veröffentlicht:

keine

Geplant:

Roters, F.; Aslam, A.; Bai, Y.; Büschelberger, M.; Bulert, K.; Butz, A.; Hickel, T.; Jogi, T.; Klitschke, S.; Martin, M.; Meyer, L.-P.; Morand, L.; Nahshon, Y.; Radtke, N.; Saikia, U.; Trondl, A.; Wessel, A.; Zierep, P.; Helm, D.:
StahlDigital: Ontology-based workflows for the steel industry
Advanced Engineering Materials (2024) eingereicht

Konferenzbeiträge:

Hickel, T., Waseda, O.; Huber, L.; Menon, S.; Janssen, J.; Drautz, R.; Neugebauer, J.:
Integration of multiscale workflows into the pyiron IDE
FEMS Euromat 2023

Aslam, A.; Siemer, N.; von Hartrott, P.; Hassani, M.; Hickel, T.; Neugebauer, J.:
Semantic representation of workflows performed with the integrated development environment pyiron
MSE 2022

Hickel, T.; Hassani, M.; Huber, L.; Janssen, J.; Neugebauer, J.:
Integration of continuum-scale workflows into the pyiron IDE
MSE 2022

Hickel, T.:
Workflow management in Advanced Materials Science
Bielefelder Tag der Materialforschung, 27 Sept. 2022

Hickel, T.; Aslam, A.; Bai, Y.; Janssen, J.; Menon, S.; Neugebauer, J.; Roters, F.; Saikia, U.; Waseda, O.:
Interoperable workflows combining software tools along the process chain of materials
MSE 2024

Ontologie-basierte interoperable Workflows zur Entwicklung und Optimierung von Stahlwerkstoffen für den Bauteileinsatz
ACHEMA 2022 und 2024: Vorstellung des Projekts StahlDigital am BMBF-Stand

Vorstellung von StahlDigital zusammen mit den Projektpartnern InfAI und Fraunhofer IWM
Vollversammlung der Plattform MaterialDigital 2022
Vollversammlung der Plattform MaterialDigital 2023
Vollversammlung der Plattform MaterialDigital 2024 (Poster)

Webseiten:

StahlDigital-Ontologie zusammen mit den Projektpartnern InfAI und Fraunhofer IWM
https://materialdigital.github.io/stahldigital-ontology-public/ProcessOntology/

Workshop:

Am 25. April 2024 wurde ein Industrie-Workshop am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik zusammen mit den Projektpartnern Institut für Angewandte Informatik und Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien durchgeführt. Der Workshop hatte den Titel **„StahlDigital trifft Industrie: Daten- und Workflowmanagement für die Datenveredelung, Datennutzung und Wissensgenerierung für die Metallverarbeitung und den Bauteileinsatz“** mit dem Ziel Industrie-Teilnehmern die Arbeit mit Datenmanagement-Systemen nahezubringen, indem diese den Umgang mit in StahlDigital entwickelten Tools selbst ausprobieren. Am Ende des Workshops sollten die Teilnehmer verstehen, wie und unter welchen Voraussetzungen die Ressource Werkstoff- und Prozessdaten in Metallverarbeitungsprozessen und im Bauteileinsatz durch ein modernes Datenmanagement-System effizient erschlossen und verwertet werden kann.