StahlDigital:
Ontologie-basierter Datenraum und interoperable Workflows
Sachbericht zum Verwendungsnachweis, FKZ: 13XP5116C

Teil I: Kurzbericht

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

Ziel des Verbundprojektes StahlDigital war es, Ontologie-basiert einen interoperablen Workflow mit zugehöriger Datenspeicherung in einem modularen Datenraum zu schaffen und den Mehrwert für den Anwendungsfall Karosseriebauteile zu demonstrieren. Die Leistungsfähigkeit dieses Ansatzes sollte für den mikrolegierten Stahl HX340LAD und den Dualphasenstahl HCT980X (DP1000) beispielhaft demonstriert werden und von der Halbzeugherstellung, über die Bauteilherstellung (Umformen) bis zum Bauteileinsatz (Crashsicherheit) reichen. Im Teilvorhaben „Ontologie-basierter Datenraum und interoperable Workflows“ des Fraunhofer IWM ergaben sich daraus folgende Teilziele:

- Entwicklung einer Domänenontologie für Stahlblechwerkstoffe sowie deren zugehörige Versuche für die Werkstoffprüfung und Charakterisierung, die Halbzeugverarbeitung durch Umformen sowie die Beschreibung des Bauteils und der Bauteileigenschaften.
- Erstellung eines Ontologie-basierten Datenraums mit Anbindung an die Workflowmanagement-Software pyiron des Max-Planck-Instituts für Nachhaltige Materialien.
- Methodische und softwaretechnische Integration Ontologie-basierter Workflows durch die Open Simulation Plattform (entwickelt im EU-Projekt SimPhoNy) und pyiron.
- Integration von Versuchsdaten in den Ontologie-basierten Datenraum (vorhandene Daten aus öffentlichen Projekten sowie Daten aus Versuchen im Projekt).
- Demonstration der Leistungsfähigkeit am Beispiel einer Prozesskette der Stahlverarbeitung

Bezüglich des Stands der Technik zu Beginn des Forschungsvorhabens lässt sich zusammenfassend festhalten, dass im Kontext des Material-, Prozess- und Bauteildesigns zwar verschiedene Modellansätze zur Betrachtung aufeinanderfolgender Prozessschritte oder die simulative Einbeziehung von Effekten auf unterschiedlichen Skalen stichprobenartig demonstriert wurden. Jedoch fehlte diesen Arbeiten der Ansatz, die Kopplung von Experiment, Modellbildung und Simulation in einen flexiblen und erweiterbaren Rahmen mit Applikations-basierender Ausführumgebung einzubetten. Zudem werden aufgrund der Komplexität typischerweise nur spezialisierte Anwendungen für die Simulation einzelner Prozessschritte eingesetzt. Ebenso wenig kommen Ontologie-basierte automatisierbare Workflows zum Einsatz, sodass Fachwissen und händische Kopplungstechniken erforderlich sind. Die Einbindung der Prozesskettensimulation in automatisierte Workflowsysteme war kaum vorhanden. Auf der atomaren Skala gab es u.a. die vom Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialen entwickelte Software pyiron. Auf der Kontinuumsebene gab es die vom Fraunhofer IWM mit europäischen Partnern entwickelte Open Simulation Plattform SimPhoNy, welche Ontologie-basiert eine Vielzahl von Simulationstools auf unterschiedlichen Skalen koppeln kann, jedoch aufgrund der Variabilität sehr komplex ist. Ontologien, auf die im Bereich der Materialwissenschaften zurückgegriffen werden konnte, waren die EMMO (Elementary Multiperspective Material Ontology) und die PMDCO (Platform Material Digital Core Ontology). Seitens des Fraunhofer IWM gab es zahlreiche Vorarbeiten bezüglich der Simulation von Prozessketten bzw. einzelner Prozessschritte in der Stahlverarbeitung sowie in der Fertigung und im Einsatz von Stahlkomponenten. Dies galt ebenso für die Materialcharakterisierung und Durchführung mechanischer Versuche sowie deren Auswertung. Weiterhin gab es im Bereich Materialinformatik Vorarbeiten bzgl. des Datenmanagements und der Entwicklung von Ontologien.

2. Ablauf des Vorhabens

Während der Projektlaufzeit gab es keine grundlegenden Änderungen des Arbeitsplans; einzig wurden

Arbeiten für das SimPhoNy-Framework zugunsten der Integration von Konzepten des SimPhoNy-Frameworks in DSMS verschoben (siehe Abschnitt 3 in Teil III des Berichts). In der zweiten Projekthälfte wurde der Schwerpunkt der Arbeiten hinsichtlich besserer Usability der Workflows verschoben. U.a. die verbesserte Anbindung an den Datenraum unter Nutzung erweiterter Vokabulare bezüglich Top-Level Ontologien. Des Weiteren wurde aufgrund von Personalausfällen und allgemeinen Einschränkungen durch Corona eine zuwendungsneutrale Laufzeitverlängerung von vier Monaten beantragt.

3. Wesentliche Ergebnisse sowie ggfs. Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die wesentlichen Ergebnisse des Teilvorhabens sind wie folgt:

- Es wurde ein Datenraum-Management-System (Dataspace Management System, DSMS) entwickelt, mit welchem Ontologie-basierte Datenräume instanziiert werden können. Auf Basis des DSMS und eines umfangreichen im Projekt erstellten Glossars wurde ein Ontologie-basierter Datenraum für das Projekt StahlDigital erstellt und mit Daten befüllt auf Basis derer neues Wissen generiert wurde. Diese Datenprozessierungsworkflows wurden im StahlDigital Datenraum entsprechend der FAIR-Prinzipien (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) abgelegt. DSMS wurde dabei sukzessive auf die Belange der Domänenexperten angepasst, d.h. die Usability sowie die Funktionalität verbessert.
- Für die Integration von Daten in den Datenraum wurde das Tool Data2RDF entwickelt und veröffentlicht (https://pypi.org/project/data2rdf/). Mit Data2RDF können bspw. Excel-, JSON- und CSV-Files (Datenformate, wie sie typischerweise in mechanischen Versuchen anfallen) in das Research Description Framework (RDF) überführt werden, welches eine gängige Strukturierung von Daten mittels -Tripeln (Subjekt-Prädikat-Objekt) ermöglicht. Für die Interaktion mit dem Datenraum wurde ein Python-SDK entwickelt und veröffentlicht (https://pypi.org/project/dsms-sdk/). Mit dem SDK (Software Development Kit) wird es Benutzern ermöglicht, Daten in einer DSMS-Instanz einfach und sicher zu speichern, zu verknüpfen und darauf zuzugreifen.
- Es wurden insgesamt Daten von ca. 100 Versuchen zusammengetragen (am Fraunhofer IWM vorliegende Daten sowie neu in diesem Projekt durchgeführte Versuche) und im StahlDigital-Datenraum abgelegt. Dies beinhaltet: Zugversuche, Kerbzugversuche, Scherzugversuche, Bulge-Tests, Nakajima-Tests und Komponenten-Crashtests.
- Die grundsätzliche Funktionsfähigkeit des StahlDigital Datenraums wurde anhand typischer Datenprozessierungsworkflows demonstriert. Dabei handelt es sich bspw. um die Auswertung von Zugversuchsdaten, der Identifikation von Materialmodellparametern, der Erzeugung einer Material-Inputdatei (auch „Materialkarte“ genannt) für Simulationsdrittprogramme und schließlich die Durchführung einer numerischen Simulation. Des Weiteren wurde ein neues Konzept einer Materialkarte, der sogenannten Semantischen Materialkarte entwickelt. Diese ist eine semantische Repräsentation der Materialmodellparameter, welche typischerweise eine Materialkarte beinhaltet. Diese Repräsentation kann in jede beliebige syntaktischer Materialkarte bzw. Material-Inputdatei einer numerischen Simulation exportiert werden.
- In Zusammenarbeit mit dem Institut für Angewandte Informatik und dem Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien wurde die SteelProcess-Ontology entwickelt. Eine Domänenontologie, welche Vokabeln zur Beschreibung der oben genannten Versuche beinhaltet sowie allgemeine Begriffe und Begriffe zur Beschreibung von Simulationsmodellen.
- In Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien wurde die Anbindung der Workflowmanagement Software pyiron an den StahlDigital Datenraum etabliert. Ein Workflow, welcher die Ausführung des Simulationscodes DAMASK aus pyiron-Continuum mit Modellparametern aus dem StahlDigital Datenraum erlaubt, wurde demonstriert.
- Letztlich wurde zum Projektende ein interaktiver Workshop durchgeführt, in welchem die wesentlichen Entwicklungen von StahlDigital potenziellen Nutzerinnen und Nutzern aus Industrie und Forschung vorgestellt wurden.

Teil II: Eingehende Darstellung

1. Darstellung der Verwendung der Zuwendung sowie der erzielten Ergebnisse

Aufgrund des Bedarfs an immer nachhaltigeren und hochwertigeren (bzgl. der Leistungsfähigkeit des Materials) Stahlbauteilen sowie Veränderungen in der Stahlherstellung (CO2-reduzierte Herstellung, Recycling, etc.) steht die Stahlverarbeitung vor großen Herausforderungen. Die Grundidee von StahlDigital ist es die Stahlherstellung und -verarbeitung durch die Nutzbarmachung von Material- und Prozessdaten zu optimieren. Abbildung 1 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. Ziel von StahlDigital war es Informationen/ Daten zum Material und Prozess entlang dieser Prozesskette digital abzubilden, also eine digitale, Graphen-basierte Repräsentation von Bauteil, Material und Prozess zu erstellen. Informationen zusätzlich zu denen aus dem realen Prozess können dabei entlang der Prozesskette mittels numerischer Simulation virtuell erzeugt werden. Außerdem werden typischerweise experimentelle Messungen und Materialcharakterisierung entlang der Prozesskette durchgeführt, um weitere Informationen zu erhalten (die für die Bewertung des Materials und für die Modellierung in numerischen Simulationen benötigt werden). Entsprechend gibt es in der Stahlverarbeitung eine große Bandbreite an Daten, welche auf Basis der involvierten Prozesse und Materialien nachhaltig genutzt werden können, um diese beispielsweise weiteren Drittapplikationen zur Verfügung zu stellen, welche mittels maschinellem Lernen und künstlicher Intelligenz potentielle Handlungsempfehlungen anbieten können.

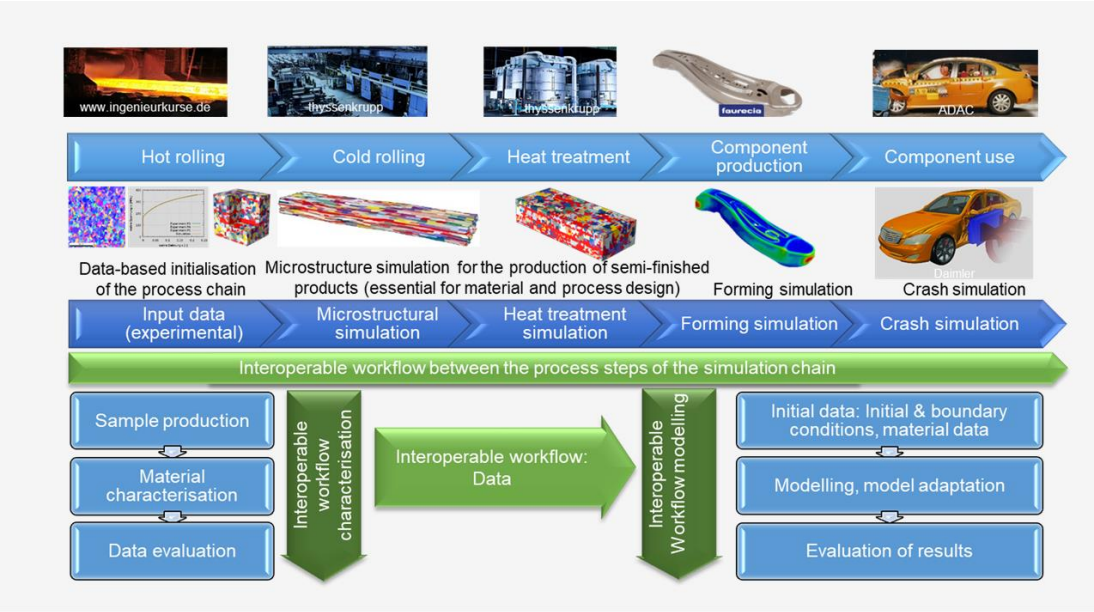

Abbildung 1: Typischer Prozesskette in der Stahlverarbeitung inklusive anfallender virtueller und experimenteller Daten

Diese ursprünglichen Material- und Prozessdaten sind allerdings sehr heterogen und folgen typischerweise nicht den FAIR Prinzipien der Datenhaltung (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable). In StahlDigital sollte diese Hürde mittels semantischer Technologien genommen werden. Durch die Entwicklung einer Domänenontologie zur einheitlichen Beschreibung der Material- und Prozessdaten sowie durch die Entwicklung eines Ontologie-basierten Datenraums sollten alle Material- und Prozessdaten einheitlich in einem Datenraum abgelegt und miteinander verknüpft werden sowie Workflows (bspw. experimentelle Workflows oder Workflows der Stahlverarbeitung) digital abgebildet werden. Im Folgenden werden die Ergebnisse von StahlDigital entsprechend der Arbeitspaket (AP) beschrieben. Zur Übersicht sind diese in Abbildung 2 zusammengefasst, inklusive Verwertung. Es

wurden drei Teilziele vorgegeben, welche nach 12, 24 und 30 Monaten erreicht sein sollten. Diese waren:

1. Digitaler Workflow: Es ist ein initialer Prototyp des digitalen Workflows verfügbar, mit dem mindestens eines der Anwendungsbeispiele abgebildet werden kann.
2. Domänenontologie: Die Domänenontologie ist in sinnhafter Detailtiefe erstellt und hat einen Entwicklungsstand erreicht, mit dem die verfügbaren Daten (Simulation und Experiment) und Workflows weitgehend beschrieben werden können.
3. Demonstrator: Der Demonstrator des digitalen Workflows ist für die in AP6 definierten Anwendungsfälle nutzbar und an mindestens einem Beispiel bereits demonstriert.

Zur Projekthalbzeit wurde zudem ein Meilenstein definiert, demzufolge der zu entwickelnde Ontologie-basierte Datenraum initialisiert und anwendungsspezifisch für die wesentlichen im Projekt erforderlichen Funktionen adaptiert sein muss.

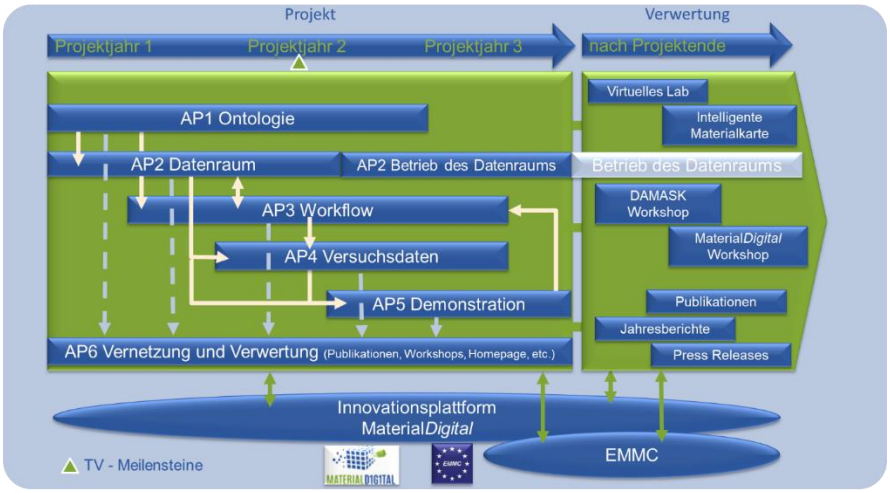

Abbildung 2: Arbeitspaket-Zusammenfassung von StahlDigital

<u>Arbeitspaket 1: Domänen-Ontologieentwicklung für die digitale Repräsentation des Use Cases (Material, Prozess u. Bauteil)</u>

In AP1 sollten relevante werkstoffmechanische und fertigungstechnische Begrifflichkeiten gesammelt und über eine Taxonomie in eine Domänen-Ontologie überführt werden. Dies sollte unter Einbeziehung und Weiterentwicklung bestehender Ontologien wie EMMO sowie in enger Abstimmung mit der Plattform MaterialDigital durchgeführt werden. Die Ziele von AP1 waren wie folgt:

1. Unterstützung des Projektpartners Institut für Angewandte Informatik für die kollaborative Ontologie-Entwicklungsumgebung.
2. Beitrag zur Domänenontologie des Gesamtvorhabens für die betrachtenden Materialien hochfester mikrolegierter Stahl (HX340LAD), höchstfester Dualphasenstahl (HCT980X/DP1000)), Fertigungsprozesse und Simulationsworkflows. Schwerpunkt: Material, Halbzeugverarbeitung, Umform- und Crashkennwerte sowie Bauteil und Bauteilverhalten.

Aufbauend auf der Vokabular-Pipeline des Instituts für Angewandte Informatik wurden Begrifflichkeiten für eine StahlDigital-Ontologie zusammengetragen. Hierbei wurde unterschieden zwischen Vokabeln, die der numerischen Simulation zugeordnet werden können (Simulationssoftware, Terme für Materialkarten für LS-Dyna, Abaqus und Damask, etc.), Vokabeln die für die Beschreibung experimenteller Workflows notwendig sind (Probentypen, Prüfmaschinen, Stahlsorten, Versuchstypen und zugehörige Vokabeln für Zugversuche, Scherzugversuche, Kerbzugversuche, Nakajima-Versuche, etc.) und allgemeine Klassen (Simulationssoftware spezifische, wie Job-Metadata, etc.). Ein besonderes Augenmerk stellt die Vorgehensweise bei der Sammlung von Termen für experimentelle Messungen dar. Um eine in der Breite akzeptierte Sammlung an Begrifflichkeiten zu erhalten, wurden die DIN-Normen der Versuchstypen zugrunde gelegt, für die in StahlDigital Versuchsergebnisse in den Datenraum eingepflegt wurden. D.h. entsprechend der Excel-Tabelle, abgebildet in Abbildung 3, wurden ein ontologisches Konzept definiert und folgende Informationen gesammelt: Englischer Term, Deutscher Term, Englische Beschreibung, Deutsche Beschreibung, Quellen für die Beschreibung und

Terme, Symbol (falls vorhanden), Einheit (falls sinnvoll). Zusätzlich wurden noch Informationen bzgl. Autor und Kurator des jeweiligen Terms notiert. Insgesamt wurden ca. 500 Vokabeln innerhalb von StahlDigital zusammengetragen (Stand 24.04.2024).

	A	B	C	D	E	F	
1	Ontological-Concept-Identifie	Term-English-Label	Term-German-Label	Concept-Source	Term-English-Label-Source	Term-German-Label-Source	Description-Eng
2	InnerDiameterDie	Diameter of the die (inner)	Matrizendurchmesser (innen	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Diameter of the
3	InnerDiameterBlankHolder	Diameter of the blank holder (in	Durchmesser des Niederhalt	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Diameter of the
4	RadiusDie	Radius of the die (inner)	Matrizenkantenradius (innen	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Radius of the di
5	InitialThickness	Initial thickness of the sheet	Ausgangsblechdicke	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Initial thickness
6	TestStandard	Test standard	Test Standard	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Authors	Test standard to
7	Laboratory	Laboratory	Prüflabor	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Laboratory that
8	Operator	Operator	Prüfer	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Authors	Person perform
9	Material	Material	Werkstoffbezeichnung	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Identification of
10	Grid	Grid	Gitter	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Type of grid use
11	CameraSystem	Camera System	Kamerasystem	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Type of camera
12	Software	Software	Software	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Software used f
13	PistonSpeed	Piston Speed	Kolbengeschwindigkeit	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Speed of the pis
14	EvaluationMethod	Evaluation method	Bewertungsverfahren	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Evaluation meth
15	Time	Time	Zeit	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	Recorded time c
16	RadiusCurvature	Radius of curvature	Krümmungsradius	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Radius of the cu
17	PressureChamber	Pressure in the Chamber	Druck im Werkzeug	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 12	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Pressure measre
18	BiaxialStress	Biaxial stress	Biaxiale Spannung	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	Biaxial stress rec
19	TrueThicknessStrain	True thickness strain	Umformgrad in Dickenrichtu	DIN EN ISO 16808:2022-08	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	DIN EN ISO 16808:2022-08, 4	True thickness s

Abbildung 3: Screenshot der StahlDigtial-Exceldatei zur Sammlung von Begrifflichkeiten zur Beschreibung experimenteller Messungen. Hier beispielhaft für die Bestimmung der biaxialen Spannung/Dehnung-Kurve durch einen hydraulischen Tiefungsversuch mit optischen Messsystemen anhand der DIN EN ISO 16808:2022-08.

StahlDigital verfolgte bei der Ontologieerstellung ein Bottom-Up-Prinzip, d.h. es werden Begrifflichkeiten von Domänenexperten gesammelt und definiert. Diese werden anschließend mit einer Middle-/Upper-Level Ontologie verbunden, um eine ganzheitliche Ontologie zu erstellen. Dies wurde in StahlDigital exemplarisch mittels der PMD Core Ontology und der EMMO durchgeführt. Durch den Bottom-Up-Ansatz ergab sich eine extensive Sammlung an Vokabeln, die vom Institut für Angewandte Informatik veröffentlich wurde und unter https://github.com/materialdigital/stahldigital-ontology-public erreichbar ist und dessen Dokumentation über einen permanenten Namespace von w3id unter https://w3id.org/steel/ProcessOntology verfügbar ist.

AP1 schloss mit der Erreichung von Teilziel 2 ab. Es ist allerdings anzumerken, dass im Zeitraum bis Projektende stetig weitere Begrifflichkeiten im StahlDigital-Vokabular aufgenommen wurden, um neue Use-Cases/ Workflows im Datenraum abbilden zu können.

Arbeitspaket 2: Ontologie-basierter Datenraum für Material-, Prozess- und Bauteildaten

AP2 sollte die Ontologie-basierte Speicherung von Material-, Prozess- und Bauteildaten in einem Datenraum ermöglichen. Dies betrafen den Aufbau, die Installation und Erweiterung eines Ontologie-basierten Datenraums sowie die Schaffung funktionaler Schnittstellen. Entsprechend war das Ziel von AP2, die informationstechnische Basis für die Ontologie-basierte Speicherung oben genannter Daten aus Theorie, Werkstoffuntersuchungen, realem Prozess und der Simulation zu erstellen (d.h. einen Ontologie-basierten Datenraum mit funktionale Anwendungsschnittstellen).

Innerhalb von StahlDigital wurde entsprechend ein Datenraum mit den in Abbildung 4 dargestellten Schnittstellen und Funktionalitäten erzeugt, aufbauend auf dem am Fraunhofer IWM entwickelten Dataspace Management Systems (DSMS). Eine initiale Version des Datenraums lag bereits früh im Projekt vor und erste digitale Workflows konnten damit abgebildet werden. Teilziel 1 und der Halbzeitmeilenstein wurden entsprechend erreicht. Die Funktionalität des StahlDigital-Datenraums wird nachfolgend beschrieben.

Als Grundlage für die Harmonisierung von Daten dienten das StahlDigital-Vokabular, welches in AP1 gesammelt wurde. Die Daten können mittels der Tools Data2RDF und Form2RDF in das für Wissengraphen gängige RDF-Format transformiert werden. Datensätze, die so im Datenraum abgelegt werden, wurde als Knowledge-Items bezeichnet, die speziell definierten global übergeordneten Wissensklassen, sogenannter Knowledge-Types, folgen. Diese Items können untereinander verlinkt werden und damit zur Repräsentation von Workflows oder Herstellungsprozessen dienen. Des Weiteren

können diese Items mittels einer nutzerfreundlichen Suchfunktion (als Alternative zu vergleichsweise komplexen SPARQL-Queries) im Datenraum wiedergefunden werden. Ebenso können diese exportiert werden, die darin gespeicherten Daten verarbeitet und als neues Wissen integriert und vernetzt werden (web-basiert oder skript-basiert mittels des entwickelten DSMS Software Development Kit – siehe: https://github.com/MI-FraunhoferIWM/dsms-python-sdk). Somit können komplexe experimentelle, simulative und kombinierte Workflows automatisiert erstellt werden. Dies wurde anhand mehrerer Use-Cases demonstriert, was in den nachfolgenden APs beschrieben wird.

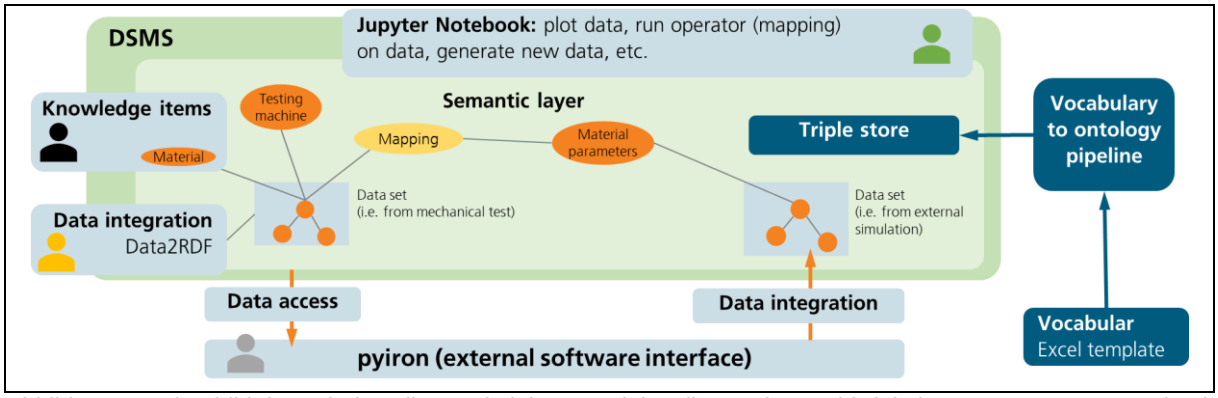

Abbildung 4: Schaubild der Schnittstellen und einigen Funktionalitäten des StahlDigital-Datenraums erzeugt durch das am Fraunhofer IWM entwickelte Dataspace Management System (DSMS)

Die Architektur des StahlDigital-Datenraums besteht aus containerisierten Modulen und ist in Abbildung 5 dargestellt. Diese besteht aus einer Weboberfläche, einer integrierten Jupyterhub Umgebung für Skript-basierte Bedienung, diversen relationalen Datenbanken und Graphdatenbanken, deren zugehörigen REST (Representational State Transfer) Services sowie einer Drittapplikationsschnittstelle , die es erlaubt, eigene Microapplikationen zu integrieren. Eine API erlaubt Zugriff auf verschiedene Services, bspw. für das Wissensmanagement, Vokabularmanagement und Nutzerauthentifizierung bzw. Nutzermanagement (mittels Keycloak). Für mehr Details zum DSMS wird auf https://arxiv.org/abs/2406.19509 verwiesen.

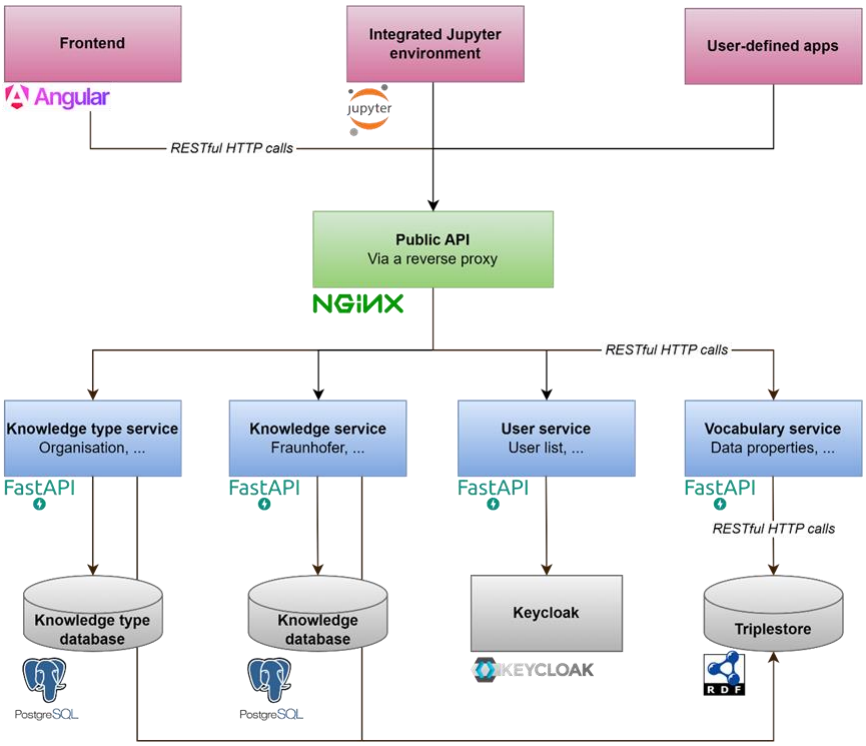

Abbildung 5: Micro-Service Architektur des StahlDigital-Datenraums auf Basis von DSMS, entsprechend https://arxiv.org/abs/2406.19509.

Der StahlDigital-Datenraum (wie auch jeder andere mit DSMS erzeugte Datenraum) beinhaltet die in Abbildung 6 dargestellten Grundfunktionalitäten. Diese sind:

1. Datenintegration: Flexible und einfach Integration (d.h. Harmonisierung) typischerweise heterogener Material- und Prozessdaten sowie Verlinkung dieser innerhalb des Datenraums
2. Datenexploration: Erkunden des Datenraums und der darin abgelegten Daten, inklusive deren Visualisierung
3. Generierung neuen Wissens: Auswertung von im Datenraum abgelegten Daten und Verarbeitung dieser, um neues Wissen zu erzeugen und im Datenraum vernetzt abzulegen.
4. Handlungsempfehlungen: Ableitung von Handlungsempfehlungen auf Basis des im Datenraum abgelegten Wissens, um die Entscheidungsfindung in Unternehmen objektiver zu gestalten. Dies kann zukünftig mittels künstlicher Intelligenz automatisiert werden.

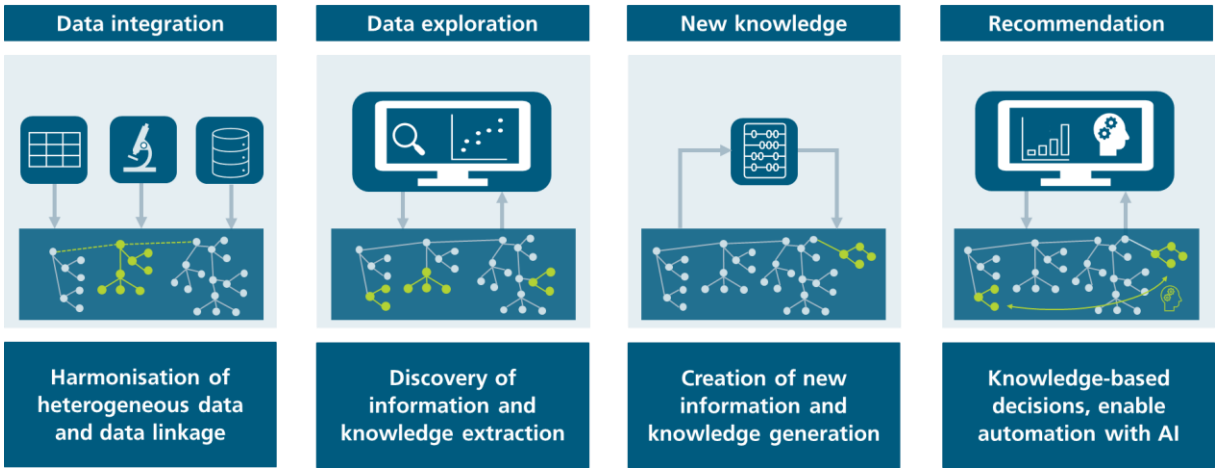

Abbildung 6: Grundfunktionalitäten eines Datenraums aufbauend auf dem DSMS

<u>Arbeitspaket 3: Interoperabler Workflow und agile Agenten zur Nutzung der Auswerte- und Simulationstools</u>

In AP3 sollte SimPhoNy als Ontologie-basiertes Framework für Festkörper-Kontinuumsmodelle und Versuchsworkflows verwendet und erweitert werden. SimPhoNy sollte in die Workflowumgebung von pyiron integriert werden und Schnittstellen für Softwarecode definiert werden. Die Ziele von AP3 waren entsprechend:

1. Interoperabilität von Softwareschnittstellen für Workflows und der Softwarekomponenten auf Basis einer Ontologie zu gewährleisten
2. Anpassung der Auswerte- und Simulationsmethoden an die Ontologie

Die SimPhoNy Open Simulation Platform ist ein Framework, das darauf abzielt, Interoperabilität zwischen Software wie Simulations-Engines, Datenbanken und Datenrepositorien zu erreichen, indem ein Wissensgraph als gemeinsame Sprache verwendet wird. Das Framework konzentriert sich generell auf den Bereich der Materialwissenschaften (siehe https://github.com/simphony/simphony-osp). Die grundlegenden Konzepte von SimPhoNy wurden in StahlDigital verwendet und flossen in der Entwicklung von DSMS und dessen Programmierschnittstellen mit ein (siehe Abschnitt 3 in Teil III des Berichts).

Innerhalb StahlDigital wurden unterschiedliche Workflows digitalisiert und dafür notwendige Tools entwickelt. Datenintegrationstools wurden bereits in AP2 beschrieben. Aufbauend auf integrierten Versuchsdaten wurde der in Abbildung 7 dargestellte Workflow zur automatisierten Auswertung (Identifikation von Material- und Materialmodellparametern) und zur automatisierten Erstellung von Materialkarten (für Abaqus und LS-Dyna) digital repräsentiert. Das App-Management basiert auf den gängigen Tools Argo, Kubernetes und Docker. Apps können automatisiert nach dem Upload bestimmter Daten gestartet werden und somit neues Wissen erstellen, abspeichern und mit bestehendem Wissen verlinken. In diesem Fall beinhaltet der Workflow das in StahlDigital entwickelte Konzept der semantischen Materialkarte. Eine semantische Repräsentation von Material- und

Materialmodellparameter (in diesem Fall die mechanischen Eigenschaften und einen Satz an Modellparametern für das Verfestigungsmodell nach Hockett-Sherby), welche für jede gängige Simulationssoftware exportiert werden kann.

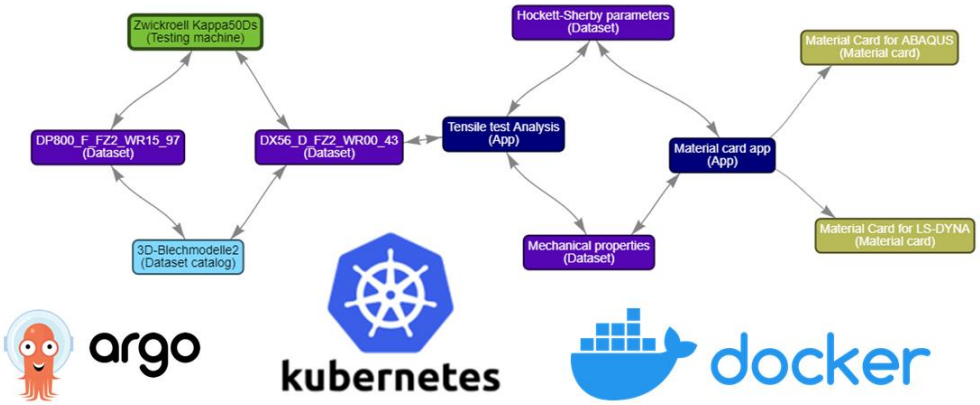

Abbildung 7: Interoperabler Workflow zur Parameteridentifikation auf Basis der semantischen Materialkarte

<u>Arbeitspaket 4: Integration von Versuchsdaten in den Datenraum</u>

In AP4 sollte der Datenbestand am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM bezüglich der für das Projekt relevanten Blechwerkstoffe digitalisiert werden sowie exemplarisch weitere Daten durch zusätzliche Experimente erzeugt werden, um Datenlücken zu schließen und die Versuchsworkflows und die Schnittstelle zwischen Versuch und Simulation zu testen. Ziel von AP4 war die:

1. Aufarbeitung vorhandener Versuchs- und Werkstoffdaten sowie Generierung ergänzender Versuchsdaten
2. Darstellung der experimentellen Abläufe
3. Bereitstellung von Daten für Initialisierung und Validierung der Simulationstools

Ziel war es, für die Umform- und Crashsimulation von Stahlblechwerkstoffen relevante Versuchsdaten in den StahlDigital-Datenraum semantisch zu integrieren. Für die Kalibrierung von Materialkarten waren dies Zugversuche, Kerbzugversuche, Scherzugversuche und Nakajima- und Bulge-Tests und für die Validierung von Materialkarten Komponenten-Crashtests (insgesamt ca. 100 Versuche). Für die beiden im Automobil-Leichtbau häufig verwendeten hochfesten Stahlblechwerkstoffe HX340LAD und HCT980X lag bereits ein umfangreicher Fundus an Versuchsdaten für quasistatische und crashartige Belastung sowohl als CSV als auch im Excel-Format am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM vor. Diese vorhandenen Daten einschließlich einzelner Daten für einen Tiefziehstahl DX56 wurden für die Integration in den Datenraum aufbereitet. Fehlende Daten für die Kalibrierung von Umformmaterialkarten, wie z.B. Bulge-Versuche, wurden aus vorhandenen Blechen des HX340LAD in diesem Projekt durchgeführt und ausgewertet. Die Versuchsdaten wurden im StahlDigital-Datenraum in einer Graph-Struktur abgelegt, siehe Abbildung 8. Der Ablauf der semantischen Integration der Versuchsdaten wird nachfolgend beschrieben.

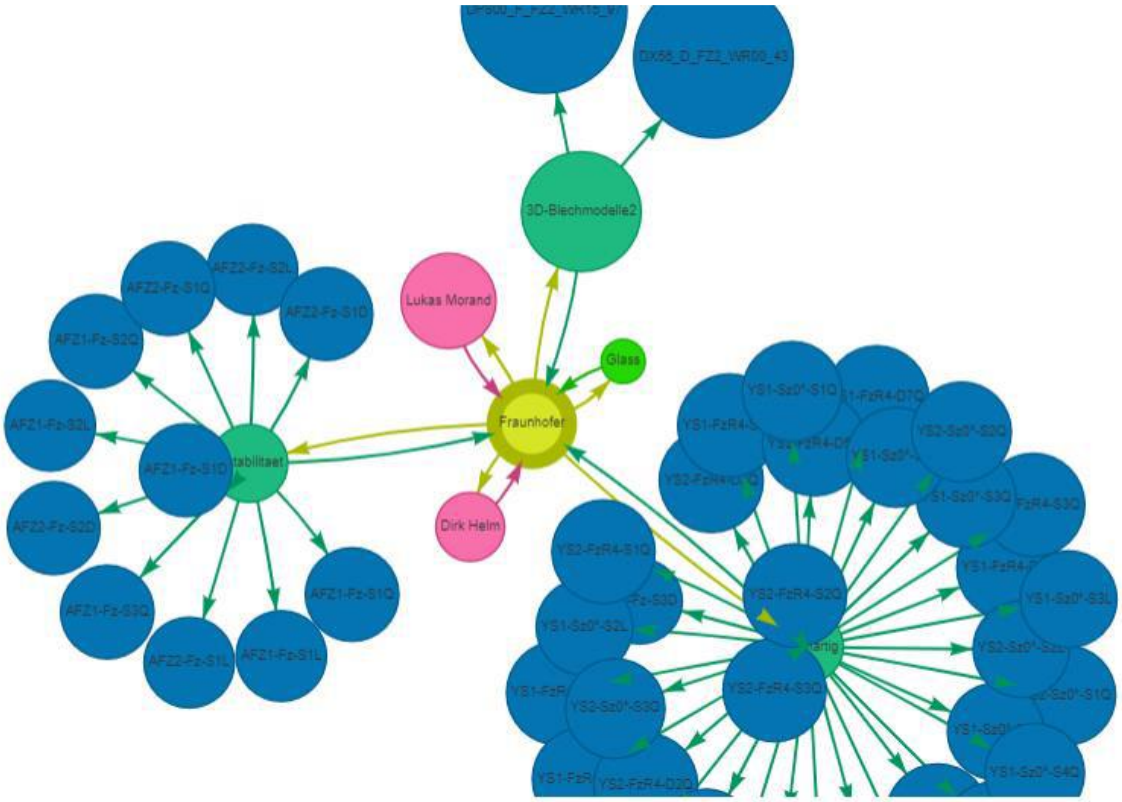

Abbildung 8: Graph-Ansicht einiger im StahlDigital-Datenraum integrierter Versuchsdaten (blau), geclustert in sogenannten Datensatz-Katalogen, bspw. für Versuchsreihen, (grün), die mit Fraunhofer (Datentyp Organisation) verbunden sind (gelb). Zusätzlich sind zwei Experten registriert und ebenfalls mit Fraunhofer verbunden (rosa).

Für die semantische Integration der Versuchsdaten in den StahlDigital-Datenraum wurde das Tool Data2RDF entwickelt. Die Funktionsweise von Data2RDF ist schematisch in Abbildung 9 dargestellt. Mit Data2RDF können unterschiedliche Daten (CSV, Excel, JSON) in das für Wissensgraphen gängige RDF-Format transformiert werden. Dafür wird lediglich ein Vokabular aus Begriffen benötigt, welche den in den Originaldatensätzen verwendeten Begrifflichkeiten entsprechen. Die entsprechenden Mappings der Begrifflichkeiten müssen für Data2RDF vorab spezifiziert werden (bspw. Probenbreite → https://w3id.org/steel/ProcessOntology/SpecimenWidth). Anschließend transformiert Data2RDF die Metadaten, wie Probenbreite, in RDF um und liest die Zeitreihen und Metadaten ein, um diese beispielsweise mittels des SDKs an das Backend der Plattform zu schicken.

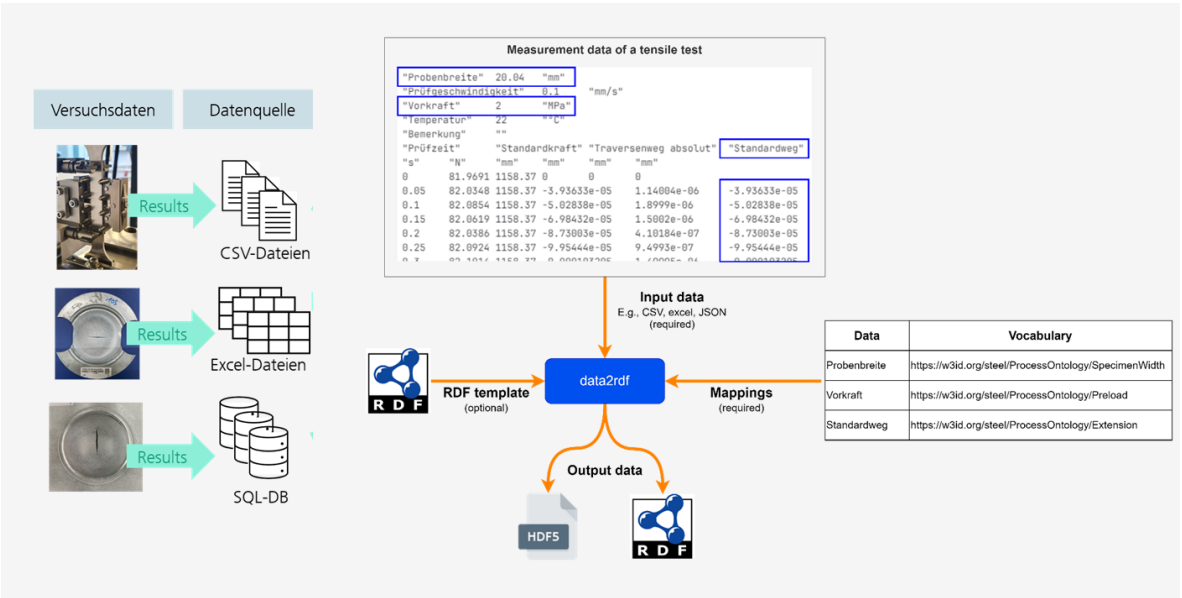

Abbildung 9: Funktionsweise der Datenintegration mittels des in StahlDigital entwickelten Tools Data2RDF

Die im StahlDigital-Datenraum semantisch integrierten Versuchsdaten können mittels der Weboberfläche nutzerfreundlich visualisiert werden. Mittels einer vereinfachten Suchfunktion (Abbildung 10, links) werden Daten im Datenraum auffindbar gemacht. In der Detailansicht eines Datensatzes können die Metadaten und Zeitreihendaten schnell visualisiert werden (Abbildung 10, rechts).

Abbildung 10: Auszug aus Versuchsdaten im Datenraum. Links: Ansicht der Suchfunktion der Weboberfläche des StahlDigital-Datenraums (hier wurde beispielhaft nach Scherzugversuchsdaten gesucht). Rechts: Visualisierung der Zeitreihendaten eines Scherzugversuchs in der Weboberfläche.

<u>Arbeitspaket 5: Demonstration und Einsatz der Leistungsfähigkeit der entwickelten Methodik und Softwaretools</u>

In AP5 sollten praxisrelevanten Beispiele für die Demonstration der entwickelten Methodik und Softwaretools ausgewählt werden. Anhand diesen sollte die Funktionalität und Leistungsfähigkeit demonstriert werden und Qualitätskriterien für die Validierung (z.B. Funktion, Genauigkeit, Zeitbedarf) spezifiziert werden. Ziel war es die verschiedenen Funktionalitäten anhand der nachfolgenden Beispiele zu demonstrieren:

1. Digitale Abbildung für Material, Prozess und Bauteil
2. Automatisierte Anpassung von Modellen und Modellvalidierung
3. Intelligentes Verknüpfen der Simulationstools
4. Werkstoffbasierte Produktenwicklung mit digitalen Methoden

Aufbauend auf dem in AP3 dargestellten Workflow zur Auswertung experimenteller Messungen und der automatisierten Erstellung von Materialkarten (Abbildung 7), wurden weitere Workflows abgebildet, um näher an die reale Anwendung zu gelangen. Diese waren u.a.:

1. Instituts-übergreifender Workflow mit Einsatz einer externen Software: Zusammen mit dem Projektpartner Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien wurde demonstriert, wie Materialparameter aus dem StahlDigital-Datenraum extrahiert und auf deren Basis numerische Simulationen mit externer Software durchgeführt werden kann. In diesem Fall wurden Parameter für die mechanischen Eigenschaften extrahiert und mittels pyiron eine Mikrostruktursimulation durchgeführt. Mit der entwickelten Technologie für den StahlDigital-Datenraum können daraus entstehende Simulationsergebnisse (neues Wissen) wieder im Datenraum abgelegt und mit den Ursprungsdaten verknüpft werden. Ergebnisse einer Simulation sind somit immer rückverfolgbar.
2. Workflow zur Analyse eines Umformprozesses, von der Probenregistrierung bis zur Simulation: Um eine Blechumformsimulation durchführen zu können, werden Informationen über die Anisotropie des Stahlbleches benötigt (zusätzlich zu den in Abbildung 7 dargestellten Materialparametern). Hierfür wurden Zugversuche von Proben aus unterschiedlichen Richtungen zur Blechwalzrichtung durchgeführt und im Datenraum abgelegt, siehe Abbildung 11 links. Diese Versuchsreihe wurde mit einer App zur Parameteridentifikation ausgewertet, welche zusätzliche Parameter für die Beschreibung der Anisotropie des Bleches auf Basis der Zugversuche bestimmt (R-Werte). Mit diesen wurde das Hill48 Fließortmodell angepasst und eine semantische Materialkarte für Umformsimulationen erstellt. Diese kann automatisiert als Materialkarte für LS-Dyna exportiert werden, siehe Abbildung 11 Mitte. Auf Basis dessen wurde eine Umformsimulation durchgeführt und die Ergebnisse wieder im Datenraum abgelegt und

entsprechend verlinkt, siehe Abbildung 11 rechts. Der komplette Workflow kann im StahlDigital-Datenraum automatisiert für weitere Versuchsreihen ausgeführt werden.

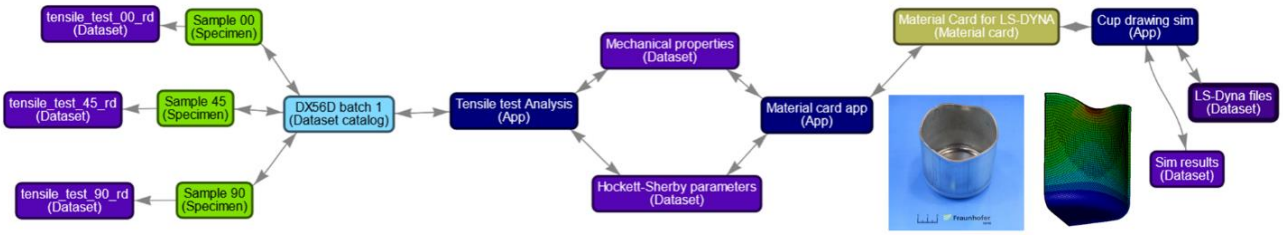

Abbildung 11: Komplexerer Workflow von der Registrierung von Proben bis zur Simulation eines Umformversuchs

3. Repräsentation einer komplexen Prozesskette der Stahlverarbeitung bestehend aus Warm- und Kaltwalzen, Wärmebehandeln und Umformen: Abschließend wurde eine typische Prozesskette der Stahlblechverarbeitung exemplarisch im Datenraum abgebildet. Ein Schema der Prozesskette inklusive Probenentnahme und Versuchsdurchführung ist in Abbildung 12 dargestellt sowie der im StahlDigital-Datenraum abgebildeten digitalen Repräsentation in Abbildung 13. Die Informationen, welche entlang der Prozesskette abgelegt werden, bestehen aus Prozessdaten, Materialdaten (Materialzustände) und Halbzeug-/Bauteildaten. Die in Abbildung 13 visualisierten und verlinkten Datensätze/ Informationen entsprechen: Halbzeuge bzw. Bauteile (braun), Prozesse (dunkelgrün), Proben für Zugversuche (hellgrün), einen Datensatz-Katalog für die Zusammenfassung der Versuchsreihe (hellblau) und die aus der Versuchsreihe entstehenden Zugversuchs-Messdaten (lila). Die Daten können als digitale Zwillinge des realen Materials, der Prozesse und der Halbzeuge bzw. Bauteile verstanden werden.

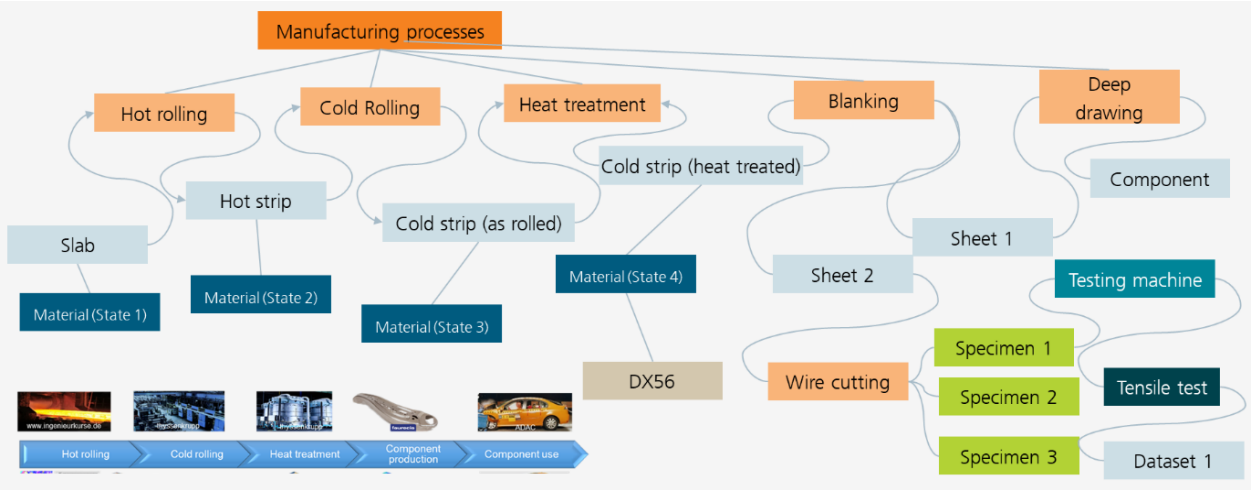

Abbildung 12: Schema einer digitalen Repräsentation der Prozesskette Warmwalzen-Kaltwalzen-Wärmebehandeln-Umformen, wie sie im StahlDigital-Datenraum abgebildet wurde.

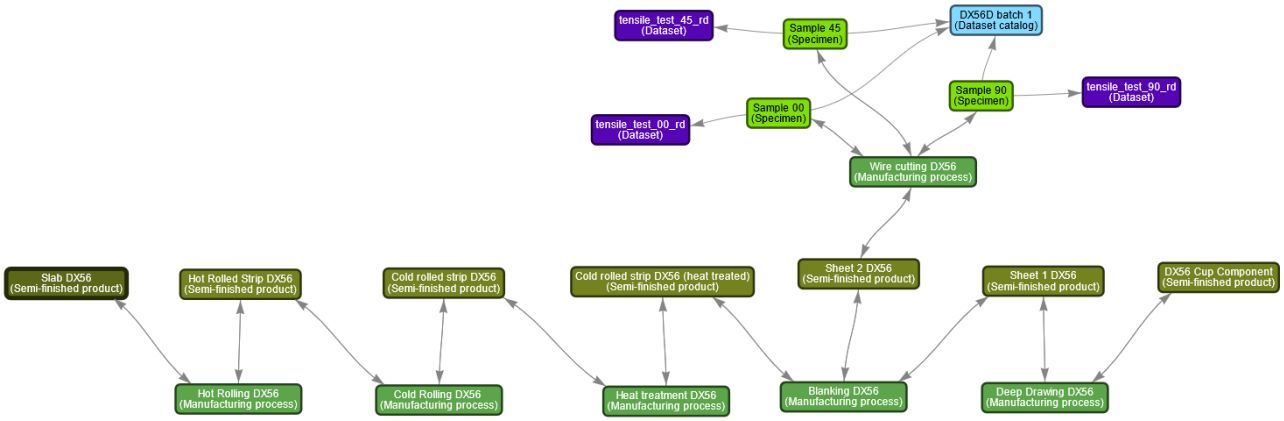

Abbildung 13: Digitale Repräsentation (Wissensgraph) der in

Mit den oben beschriebenen digitalen Workflows wurde die in Teilziel 3 angestrebte Demonstration des StahlDigital-Datenraums erreicht.

<u>Arbeitspaket 6: Vernetzung mit der Plattform MaterialDigital und Verwertung</u>
Unter aktiver Zusammenarbeit und Vernetzung mit der Plattform MaterialDigital und Integration der Projektergebnisse war es das Ziel in AP6 die folgenden Ergebnisse in die Plattform MaterialDigital zu integrieren:

- Softwaretools insbesondere für Versuchs- und Simulationsdatenintegration
- entwickelter Ontologie-Werkzeugkasten und dazugehöriger Pipelines
- Ontologie-basierte interoperable Workflows von der Blechhalbzeugherstellung über die Bauteilherstellung zur Bauteileigenschaft

Die entwickelten Softwaretools zur Datenintegration und die StahlDigital-Ontologie wurden im Laufe des Projekts veröffentlicht. Die erstellten interoperablen Workflows sind über den StahlDigital-Datenraum (https://stahldigital.materials-data.space/) nach Abstimmung mit dem Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM zugänglich.

Für eine Auflistung aller Veröffentlichungen sowie Verwertungs- und Vernetzungsaktivitäten, siehe Abschnitt 7 in diesem Teil des Berichts.

3. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Siehe Abschnitt 4 in Teil III des Berichts.

4. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Alle oben beschriebenen, durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung der Ziele des Vorhabens und der Ziele des Verbundprojekts notwendig und angemessen.

5. Voraussichtlicher Nutzen und Fortschreibung des Verwertungsplans

Das übergeordnete Projektziel liegt im Kern der strategischen Interessen des Fraunhofer-Instituts für Werkstoffmechanik IWM. Die Verwertung von Forschungsergebnissen in Wirtschaft und Industrie ist ein zentraler Auftrag von Fraunhofer und spielt eine wichtige Rolle im Innovationsprozess. Die erzielten Ergebnisse werden in Anschlussprojekte sowohl auf nationaler als auch auf europäischer Ebene einfließen (KupferDigital 2, DiMAT, AID4GREENEST), um dem fortlaufenden Erkenntnisgewinn gerecht zu werden. Hierüber werden industrienahe Forschungsdienstleistungen im Bereich der Materialforschung langfristig garantiert und nicht nur der Forschungsstandort Deutschland, sondern ebenfalls der nationale und europäische Industriestandort gestärkt. Die Forschungsergebnisse dienen

als Basis für künftige Industrieaufträge. Die Industriepaten des Projektes und der im Projekt durchgeführte Workshop sowie die interne Vernetzung mit der Anwendungsdomäne haben bereits dazu beigetragen, dass die im Projekt entwickelten Ontologie-basierten interoperablen Workflows für das Material-, Prozess- und Bauteildesign industriell einsetzbar sind.

Die Ontologie-basierten interoperablen Workflows werden weiterentwickelt, sodass sie im Material-, Prozess- und Bauteildesign vielfältig anwendbar sind. Dies beinhaltet unter anderem die Anwendung auf das Virtuelles Labor, bspw. als Cloud-Plattform, sowie das Konzept der semantischen Materialkarte (ggfs. Weiterentwicklung zur intelligenten Materialkarte). Das virtuelle Labor als Cloud-Plattform wird der Industrie den Einstieg in die virtuelle Bestimmung von Materialeigenschaften und Materialkennwerten signifikant erleichtern. Die damit verbundene Kosteneinsparung und die Verbesserung bei der Kalibrierung von Werkstoffmodellen für nachfolgende Prozess- und Bauteilsimulationen wird die Verwertung beschleunigen. Die semantische Materialkarte eröffnet in ähnlicher Form einen industriellen Nutzen in Bezug auf Kosten und Qualität. Bspw. durch die Integration von Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen in Materialkarten, sodass im Designprozess leicht Variantenrechnungen durchgeführt werden können, ohne dass zusätzliche Werkstoffcharakterisierungen erforderlich sind.

Durch die Verbreitung der Ergebnisse bislang (siehe Abschnitt 7 in diesem Berichtsteil) und in Zukunft soll das Interesse der Industrie weiter geweckt werden. Die in StahlDigital entwickelten Tools sind größtenteils öffentlich zugänglich, bspw. Data2RDF und das DSMS-SDK. Damit ist die Weiterentwicklung in der Community bzw. die kommerzielle Nutzung von weiterentwickelten Tools mit entsprechendem Support und Wartung möglich. Zugriff auf den Erkenntnisgewinn erfolgt für die Industrie über Auftragsforschung bzw. Einbindung in entsprechende gemeinsame Forschungsprojekte oder – falls möglich – über die Vergabe von Lizenzen. Der Code für DSMS ist nicht Quelloffen. Geeignete Verwertungspfade werden aktuell evaluiert.

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

Das Forschungsvorhaben ist an der Plattform MaterialDigital angesiedelt. Entsprechend gibt es dort komplementäre Anknüpfungspunkte, unter anderem mit dem ebenfalls am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM bearbeiteten Projekten KupferDigital und iBAIN. Veröffentlichungen mit demselben Fokus wie die Ergebnisse des Projekts StahlDigital sind jedoch keine bekannt.

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

Veröffentlichungen in Fachzeitschriften:

- Yoav Nahshon*, Lukas Morand, Matthias Büschelberger, Dirk Helm*, Kiran Kumaraswamy, Paul Zierep, Matthias Weber, Pablo de Andrés. Semantic orchestration and exploitation of material data: A dataspace solution demonstrated on steel and copper applications, angenommen in Advanced Engineering Materials, 2024 (Preprint online https://arxiv.org/abs/2406.19509)
- Franz Roters*, Ahmed Aslam, Yang Bai, Matthias Büschelberger, Kirill Bulert, Alexander Butz, Tilmann Hickel, Tushar Jogi, Silke Klitschke, Michael Martin, Lars-Peter Meyer, Lukas Morand, Yoav Nahshon, Ujjal Saikia, Norman Spangenberg, Andreas Trondl, Alexander Wessel, Paul Zierep, Dirk Helm, StahlDigital: Ontology-based workflows for the steel industry, eingereicht in Advanced Engineering Materials, 2024

Konferenzbeiträge:

- 16th International Workshop on Ontology Matching, virtuelle Konferenz 2021: Paul Zierep, Dirk Helm, Concept for metadata and time series data integration based on a material science application ontology (http://disi.unitn.it/~pavel/om2021/papers/om2021_poster3.pdf)

- Materials Science and Engineering Congress, Darmstadt 2022: Paul Zierep, Dirk Helm, Andreas Trondl, Integration of heterogeneous data via semantic transformation into data spaces – a material science use case
- ACHEMA 2022 und 2024: Vorstellung des Projekts StahlDigital am BMBF-Stand
- Vollversammlung der Plattform MaterialDigital 2022, Vorstellung von StahlDigital zusammen mit den Projektpartnern Institut für Angewandte Informatik und Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien sowie eigener Demonstrator „Kopplung von Ontologie und experimentellen Daten“
- Vollversammlung der Plattform MaterialDigital 2023, Vorstellung von StahlDigital zusammen mit den Projektpartnern Institut für Angewandte Informatik und Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien sowie eigener Demonstrator „Semantische Materialkarte“
- Ontology-Playground der Plattform MaterialDigital 2024, Vorstellung der Ergebnisse aus StahlDigital, Vortrag zusammen mit dem Institut für Angewandte Informatik
- Materials Science and Engineering Congress, Darmstadt 2024: Matthias Büschelberger, Yoav Nahshon, Lukas Morand, Alexander Wessel, Dirk Helm, The Dataspace Management System (DSMS): An end-user application for FAIR data handling and data enrichment in material science

Code-Veröffentlichungen:

- Python-Paket “DSMS-SDK” https://pypi.org/project/dsms-sdk/
- Python-Paket “Data2RDF” https://pypi.org/project/data2rdf/
- Web-Frontend des Ontologie-basierten StahlDigital-Datenraums https://stahldigital.materials-data.space/
- Publizierte StahlDigital-Ontologie (in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern Institut für Angewandte Informatik und Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien) 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.

Video-Veröffentlichung

- Erstellung eines StahlDigital-Videos seitens des Fraunhofer-Instituts für Werkstoffmechanik, welches im Nachgang über Online-Medien (bspw. LinkedIn, Youtube, Fraunhofer IWM-Webpage) veröffentlich und beworben werden soll.