

Körber-Preis für die Europäische Wissenschaft 1996

Computergesteuerte Gestaltung von Werkstoffen

Michael Ashby, Yves Bréchet, Michel Rappaz

Die moderne Materialforschung ist zukünftig auf die Hilfe von Computern angewiesen – bei der Auswahl geeigneter Werkstoffe und bei der Simulation ihrer Eigenschaften. Die Preisträger 1996 wollen diese Computerverfahren noch weiter verbessern.



Yves Bréchet
(Foto: Friedrun Reinhold)

Zwischen 50.000 und 80.000 Materialien gibt es auf der Welt, je nach Zählweise. Wohlgemerkt, Materialien, nicht chemische Substanzen: »Ein Material ist Materie mit einer Funktion«, erläutert Professor Yves Bréchet, der in diesem Jahr zusammen mit Professor Michael Ashby und Professor Michel Rappaz den Förderpreis der Körber-Stiftung in Höhe von 500.000 DM erhält. Ein gehöriges Arsenal von Stoffen also, das den Ingenieuren zur Verfügung steht und in sechs Klassen aufgeteilt wird: Metalle, Polymere (zu denen außer Kunststoffen auch natürliche Materialien wie Holz und Leder zählen), Elastomere, keramische Werkstoffe, Gläser und

Verbundmaterialien. Mit den Eigenschaften dieser Stoffe beschäftigt sich die Materialforschung. Eine unterschätzte Disziplin. Schon der Titel deutet darauf hin: Materialforschung, heißt es meistens, nicht Materialwissenschaft. Die Kollegen aus den theoretischen Disziplinen schauen gerne herab auf die Forscher, die sich mit tatsächlich existierenden Problemen die Hände schmutzig machen. »Im Land von Descartes, wo man sich der Illusion hingibt, man könne nur mit Hilfe der deduktiven Fähigkeiten des menschlichen Geistes und mit axiomatischen Methoden eine komplexe Realität verstehen, hat die Materialforschung einen schwierigen Stand«, seufzt Bréchet.

Der 35jährige Professor am Institut National Polytechnique (INP) im französischen Grenoble ist das Paradebeispiel für einen multidisziplinären Überflieger: Schon bei seinem Studium an der berühmten Pariser Ecole Polytechnique interessierte er sich sowohl für die abstrakte Wissenschaft als auch für die handfesten Anwendungen – er machte sein Diplom in Mathematik und Materialforschung, die nach seiner Auffassung die künstliche Trennung zwischen theoretischer und angewandter Forschung überwindet. »In der französischen Tradition muss man sich mit nutzlosen Dingen beschäftigen, um als Grundlagenforscher zu gelten«, beklagt er. In diese Tradition will er sich nicht stellen – eher schon in die der Renaissance, als die Verbindung von Theorie und Praxis noch die Normalität war. Gern führt er die Werkstoffkunde auf Galilei zurück, der schon im 17. Jahrhundert zwei Artikel über die Festigkeit von Stoffen veröffentlichte. Die Materialforschung vereint Kenntnisse aus sehr verschiedenen Forschungsrichtungen, sie ist von Natur aus interdisziplinär, erläutert Bréchet: »Für die Mechaniker sind wir Physiker, für die Chemiker sind wir Mechaniker, und für die Physiker sind wir Chemiker.« In früheren Jahrhunderten war der Umgang mit Werkstoffen eine Erfahrungssache, die von Generation zu Generation weitergegeben wurde. Erst seit den 1930er Jahren kann man von einer systematischen Materialforschung sprechen. Und bis in die 1960er Jahre hinein konnte man dabei »Material« praktisch mit »Metall« gleichsetzen. Erst danach wurde durch neue Kunststoffe und Verbundmaterialien die

Dominanz der Metalle gebrochen. Seitdem kann man von einer wirklich komparativen Wissenschaft sprechen – für denselben Zweck können sehr verschiedene Materialien geeignet sein. Die nächste Veränderung begann um 1985: Mit der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computer eröffnen sich auch der Materialforschung ganz neue Möglichkeiten. Allerdings können die Werkstoff-Forscher nicht einfach die Computerverfahren anderer Disziplinen übernehmen. Die Entwicklung eigener Methoden ist das Ziel des europaweiten Projektes, das mit den Mitteln der Körper-Stiftung gefördert wird. Hauptakteure sind neben Bréchet der englische Forscher Michael Ashby von der Universität Cambridge und Michel Rappaz von der Ecole Polytechnique Fédérale in Lausanne (EPFL).

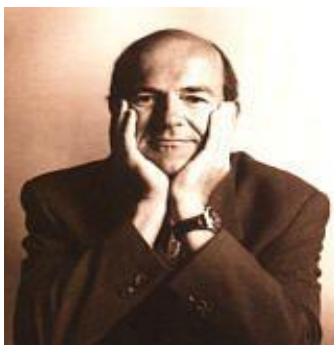
Chemikern stehen inzwischen eine Menge an Software-Tools zur Verfügung, um auf der Ebene von Atomen und Molekülen neue Stoffe zu »designen«. Auch auf der makroskopischen Ebene (also dem Bereich der Dinge, die wir mit bloßem Auge erkennen können) gibt es mannigfaltige Computerverfahren, die den Ingenieuren unter die Arme greifen, etwa CAD-Software.

Materialforscher sind an einem Zwischenbereich interessiert, den Yves Bréchet die »mesoskopische« Ebene nennt – und dort existieren bis lang sehr wenige

Computermodelle. Es gibt kaum Materialien, bei denen man aus der atomaren Struktur direkt auf die physikalischen Eigenschaften schließen kann, und die sind nicht unbedingt die interessantesten. So sind etwa Stoffe, die ein perfektes Kristallgitter haben, sehr spröde. Plastizität entsteht erst, wenn es so genannte »Versetzungen« in der Kristallstruktur gibt – Stellen, an denen das Gitter unterbrochen ist. »Die meisten Eigenschaften von Materialien leiten sich aus Defekten her – genauso wie beim Menschen«, sagt Bréchet. Während die Elementarbausteine der Materie, Atome und Moleküle, sehr universell und eindeutig bestimmt sind, stellen sich die »Einheiten« auf der mesoskopischen Ebene sehr unterschiedlich dar: Je nach Material und Fragestellung können das Versetzungen sein, es kann sich aber auch um Körner in Metallen handeln, um Einschlüsse von anderen Stoffen oder um so genannte »Dendriten« – das sind verzweigte Strukturen, die bei der Erkaltung von flüssigem Metall entstehen. Michel Rappaz beschäftigt sich in Lausanne mit der Frage, wie sich diese Strukturbildung beeinflussen lässt, um optimale Werkstoffe zu erhalten.



Eine Superlegierung auf Nickelbasis unter dem Elektronenmikroskop.
(Foto: Friedrun Reinhold)



Michel Rappaz
(Foto: Friedrun Reinhold)

Rappaz zieht einen anschaulichen Vergleich, um seine Arbeit zu erklären: »Betrachten Sie zum Beispiel gefrorenes Wasser: Je nach den Umweltbedingungen erhält man klares Eis oder Schnee in vielfältigen Varianten.« Die sechseckige Struktur der Schneeflocken stammt dabei von der Kristallstruktur des Eises. Ganz ähnlich bilden sich auch in erkaltendem Metall verzweigte Strukturen. Meist wachsen sie vom gekühlten Rand der Gussform zur Mitte hin, oft bilden sich aber auch spontan im Innern der Form »Keime«, an denen ein solches Bäumchen zu wachsen beginnt. Wenn zwei dieser »Dendriten« aufeinandertreffen, bildet sich eine Korngrenze. Je nach technischen Anforderungen sind die Wünsche der Ingenieure

durchaus unterschiedlich: Für viele Anwendungen fordern sie eine möglichst kleine Korngröße, bei anderen geht es ihnen darum, dass das ganze Werkstück möglichst nur aus einem »Korn« besteht, um möglichst homogene Eigenschaften zu haben. Das ist etwa der Fall bei den Rotorblättern von Flugzeugmotoren oder Kraftwerksturbinen. Es geht Rappaz und seinen Kollegen also darum, das Wachstum der Metallbäumchen möglichst exakt zu simulieren. Das mathematische Werkzeug dafür sind sogenannte »Zellularautomaten« Dabei wird das Volumen der Gussform in winzige würfelförmige Zellen aufgeteilt, von denen jede einen bestimmten Zustand hat. Aus den bekannten physikalischen Gesetzen des Wärmeffusses kann man nun in diskreten Zeitschritten berechnen, wie sich der Zustand jeder Zelle von Generation zu Generation verändert, abhängig vom Zustand der Nachbarzellen. Der Vorteil dieser Methode: Man kann nicht nur die Struktur (und damit die Materialeigenschaften) bekannter Metall-Legierungen simulieren, sondern auch neue Kombinationen im Rechner ausprobieren. Und die Anwendungsmöglichkeiten beschränken sich nicht auf Metalle: Für einen Nahrungsmittelkonzern simuliert das Team um Michel Rappaz auch die Verfestigung von Kakaobutter.

Dass die Auswahl des richtigen Materials für ein bestimmtes Produkt ein Problem sein kann, ein mathematisches gar, leuchtet dem Laien vielleicht nicht sofort ein. Wenn man etwa die Gabel eines Rennrades konstruieren will, ist es klar, dass Materialien wie Glas, Styropor und Gummi gar nicht erst in Frage kommen. Aber sind Aluminium-Legierungen für den Zweck besser geeignet als Titanlegierungen? Was ist mit Kohlefaser-Verbundstoffen? Traditionell verlassen sich Ingenieure auf ihre Erfahrungen, aus den Tausenden von Alternativen die richtige auszuwählen. Das ist die falsche Methode, meint Michael Ashby, der Dritte im Bunde der Körber-Preisträger. Denn Menschen neigen zu

konservativem Denken (»das haben wir schon immer mit Aluminium gemacht, also nehmen wir wieder Aluminium«), und oft ist die optimale Lösung für ein Materialproblem eine sehr unkonventionelle. Um den Ingenieuren die Qual der Wahl zu erleichtern und die Prozedur auf eine objektivere Basis zu stellen, hat Ashby ein Verfahren entwickelt, das er unter dem Namen »Cambridge Materials Selector« (CMS) auch als kommerzielle Software vertreibt.

»Ein guter Designer sagt nicht: ‚Ich brauche ein Metall‘ oder ‚Ich brauche ein Polymer‘«, beschreibt Ashby das Problem. »Man sucht nicht nach einem Material, sondern nach einem Profil von Eigenschaften.« Im Falle der Fahrradgabel geht es zum Beispiel darum, ein Material zu finden, das bei möglichst geringem Gewicht möglichst stark ist – die Gabel soll halt nicht unter der Last des Fahrers einknicken. Bei Ashbys Verfahren werden nun alle Materialien in ein Koordinatensystem eingetragen, bei dem auf einer Achse das spezifische Gewicht und auf der anderen die Festigkeit aufgetragen werden. Nun ist es mathematisch recht einfach, die optimalen Materialklassen zu bestimmen – in diesem Fall ergeben sich vier Kandidaten: Eine Aluminium- und eine Titanlegierung, ein Spezialstahl sowie die meisten Kohlefaser-Verbundstoffe. Unter diesen kann man dann nach weiteren Kriterien selektieren: Für



Simulation der Kornstruktur in abgekühltem Metall (oben) und Querschnitt durch einen unter echten Bedingungen gegossenen Metallstab (unten).
(Foto: Friedrun Reinhold)

ein Hobbyrad wird man vielleicht den preiswerteren Stahl wählen, für ein Profi-Rennrad das Kohlefaser-Material.



Michael Ashby
(Foto: Friedrun Reinhold)

Mit dem Geld des Körber-Preises in Höhe von 500.000 DM wollen Yves Bréchet und Michael Ashby diese Computerverfahren noch weiter verbessern. Denn nicht immer ist die Auswahl so einfach wie beim Beispiel des Fahrrades. Sandwichstrukturen (wie sie zum Beispiel beim Bau von Skiern verwendet werden) bestehen aus drei Schichten, die Zahl der möglichen Material-Kombination ist auch für Fachleute kaum zu überblicken. An diesem Beispiel hat Bréchet bereits den Einsatz moderner Verfahren der Künstlichen Intelligenz (KI) erprobt. So ist Fuzzy Logic ein gutes Mittel, eine Auswahl zu treffen, wenn die Kriterien unscharf und vielleicht sogar widersprüchlich sind – eine Art Formalisierung von »gesundem Menschenverstand«. Die auf diese Weise ausgewählten Kandidaten hat Bréchet dann mit der Hilfe von so genannten genetischen Algorithmen optimiert: Mit den von der Natur erfundenen Mechanismen von Mutation, Rekombination und Selektion entwickeln sich in einer künstlichen Evolution die guten Lösungen weiter, während die schlechten aussterben. »Das Interessante an unseren Ergebnissen: Das Verfahren liefert einem all die bekannten Sandwich-Materialien für Skier, aber auch ein paar neue Lösungen, die vielleicht besser sind«, berichtet Bréchet.

In keinem der bisher existierenden Computermodelle wird die Dimension Zeit ausreichend berücksichtigt. Aber Materialien verändern sich: Es gibt Ermüdungserscheinungen, Abnutzung, Oxidation. Umweltauflagen verlangen die Möglichkeit von Recycling. Das Ziel von Bréchet und Ashby ist die Entwicklung integrierter Expertensysteme, bei denen solche Kriterien ebenso einfließen wie die unterschiedlichen Fertigungsprozesse eines Materials oder auch die mannigfaltigen Möglichkeiten, Materialien miteinander zu verbinden. Noch ist der Einsatz von Computermethoden in der Materialforschung unterentwickelt, verglichen mit anderen Disziplinen. Yves Bréchet ist entschlossen, das zu ändern, und fühlt sich dabei als Pionier: »Jetzt gibt es noch eine Menge Probleme zu lösen, und deshalb ist es interessant. In den nächsten zehn Jahren werden die wesentlichen Dinge auf diesem Gebiet entwickelt werden.« Und man kann ruhig unterstellen, dass der Name Yves Bréchet dabei eine wichtige Rolle spielen wird. Die Gefahr, dass er und seine Kollegen dabei zu reinen Computerfreaks werden, besteht allerdings nicht: »Es ist in der Materialforschung undenkbar, Modelle ohne den Hintergrund von Experimenten zu erstellen. Wenn man da einen Theoretiker alleine arbeiten lässt, wird er mit ziemlicher Sicherheit Unsinn produzieren.«

Kontakt
Körper-Stiftung
Körper-Preis
Kehrwieder 12
20457 Hamburg
Telefon +49 40 · 80 81 92 -181
E-Mail koerberprize@koerber-stiftung.de