

ETH zürich

Forschende haben eine künstliche Intelligenz so trainiert, dass sie die Struktur sogenannter Metamaterialien mit den gewünschten mechanischen Eigenschaften für verschiedene Anwendungsfälle entwerfen kann.

- ETH-Forschende haben mit Hilfe von künstlicher Intelligenz Metamaterialien entworfen, die ungewöhnliche oder außerordentliche Reaktionen auf komplexe Belastungen zeigen.
- Ihr neues KI-Tool entschlüsselt die wesentlichen Merkmale der Mikrostruktur eines Metamaterials und sagt sein Verformungsverhalten präzise voraus.
- Das Tool findet nicht nur optimale Mikrostrukturen, sondern umgeht auch zeitaufwändige technische Simulationen.



Konzeptualisierung eines Laufschuhs aus einem Metamaterial. KI-generiert mit DALL-E (Visualisierung: ETH Zürich)

Fahradhelme, die die Energie eines Aufpralls absorbieren, Laufschuhe, die jedem Schritt einen zusätzlichen Schub geben, oder Implantate, die die Eigenschaften von Knochen imitieren. Metamaterialien machen solche Anwendungen möglich. Ihre innere Struktur ist das Ergebnis eines sorgfältigen Designprozesses, wonach 3D-Drucker die generierten Strukturen mit optimierten Eigenschaften herstellen können. Forschende unter der Leitung von Dennis Kochmann, Professor für Mechanik und Materialforschung am Departement für Maschinenbau und Verfahrenstechnik der ETH Zürich, haben neuartige KI-Tools entwickelt. Diese umgehen den zeitaufwändigen und auf Intuition basierenden Designprozess von Metamaterialien und sagen stattdessen Strukturen mit außergewöhnlichen Eigenschaften schnell und automatisiert vorher. Ein Novum ist, dass diese Tools auch für große (sogenannte nichtlineare) Belastungen anwendbar sind, zum Beispiel wenn ein Helm bei einem Aufprall große Kräfte absorbiert.

Kochmanns Team gehört zu den Pionieren bei der Entwicklung kleiner zellulärer Strukturen (vergleichbar

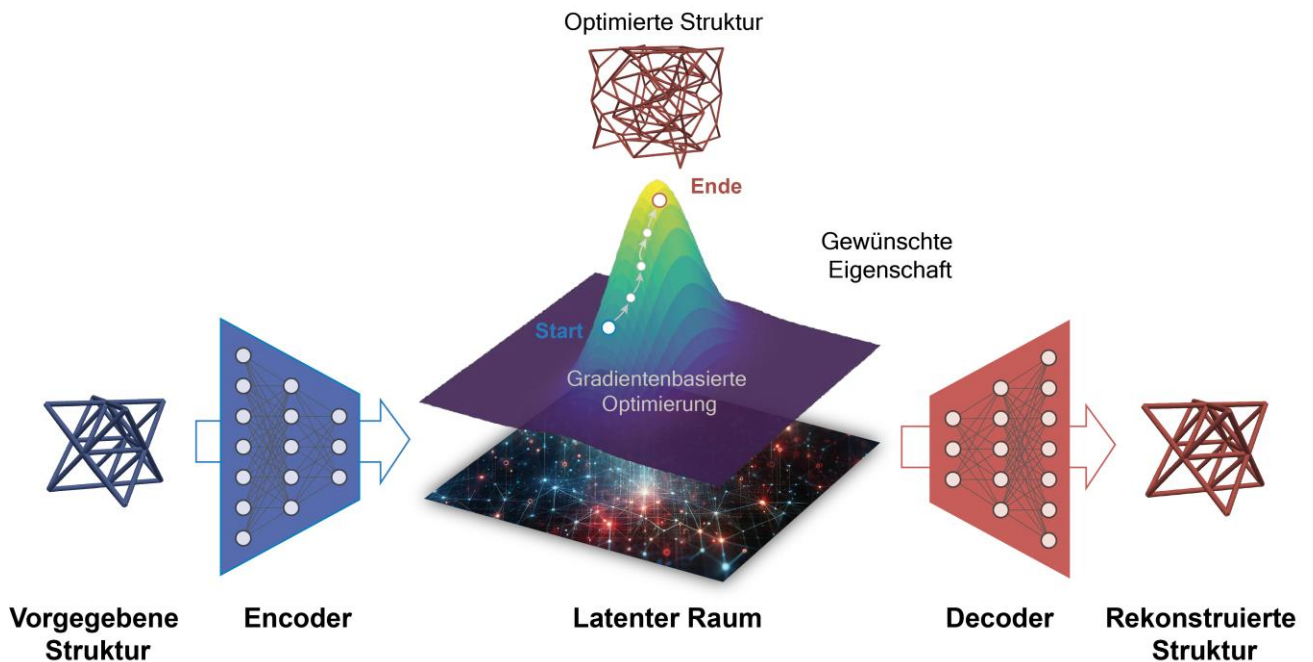
mit dem Gebäck in Fachwerkhäusern), um Metamaterialien mit besonderen Eigenschaften zu erschaffen. «Wir entwerfen zum Beispiel Metamaterialien, die sich wie Flüssigkeiten verhalten: schwer zu komprimieren, aber leicht zu verformen. Oder Metamaterialien, die in alle Richtungen schrumpfen, wenn sie in einer Richtung komprimiert werden», erklärt Kochmann.



Während sich Materialeigenschaften relativ leicht anhand einer Struktur vorhersagen lassen, ist es deutlich schwieriger, Mikrostrukturen für gewünschte Eigenschaften zu finden (inverses Design). (Illustration: ETH Zürich / Dennis Kochmann)

Effiziente, optimale Materialgestaltung

Die Gestaltungsmöglichkeiten scheinen endlos. Das volle Potenzial von Metamaterialien hat die Wissenschaft allerdings noch lange nicht ausgeschöpft, da der Designprozess oft auf Erfahrung und Trial- and-Error beruht. Zudem können kleine Anpassungen in der Struktur zu großen Veränderungen der Eigenschaften führen.



Die Struktur eines Metamaterials wird in einem abstrakten Raum kodiert. Durch Optimierung wird der Entwurf gem. gewünschten Eigenschaften verbessert. Ein Decoder setzt das neue Design in eine reale Fachwerkstruktur um. (Illustration: ETH Zürich / Li Zheng)

In ihrer jüngsten Arbeit erkundeten die ETH-Forschenden mithilfe von KI systematisch die zahlreichen De-

signs und mechanischen Eigenschaften von zwei Metamaterialarten. Ihre Berechnungstools können auf Knopfdruck optimale Strukturen für gewünschte Verformungen vorhersagen. Hierzu verwendeten die Forschenden große Datensätze des Verformungsverhaltens realer Strukturen. Mit diesen trainierten sie ein KI-Modell, das die Daten nicht nur reproduziert, sondern auch neue Strukturen generieren und optimieren kann. Durch den Einsatz einer Methode, die als «Variational Autoencoder» bekannt ist, lernt die KI die wesentlichen Merkmale einer Struktur aus der großen Menge an Designparametern und wie sie zu bestimmten Eigenschaften führen. Sie nutzt anschließend dieses Wissen, um einen Metamaterial-Entwurf zu erstellen, sobald die Forschenden die gewünschten Eigenschaften und Anforderungen angeben.

Bausteine zusammensetzen

Li Zheng, eine Doktorandin in Kochmanns Gruppe, trainierte ein KI-Modell auf Basis eines Datensatzes von einer Million Strukturen und ihrer simulierten Verformung. «Stellen Sie sich eine riesige Kiste mit Legosteinen vor – man kann sie auf unzählige Arten anordnen und lernt mit der Zeit Designprinzipien. Ähnlich geht unsere KI vor, allerdings wesentlich effizienter. Sie setzt die Bausteine von Metamaterialien zusammen, um ihnen eine bestimmte Weichheit oder Härte zu verleihen», sagt Zheng. Im Gegensatz zu früheren Ansätzen, bei denen Forschende einen Katalog von Bausteinen als Grundlage für das Design verwendeten, können sie



mit der neuen KI-Methode Bausteine fast beliebig hinzufügen, entfernen oder verschieben. Zusammen mit Sid Kumar, Assistenzprofessor an der TU Delft und ehemaliges Mitglied von Kochmanns Team, zeigten sie in einer kürzlich veröffentlichten Studie, dass das KI-Modell über das hinausgehen kann, wofür es trainiert wurde, und Strukturen vorhersagen kann, die leistungsfähiger sind als alles bisher Generierte.

Die Videodiffusion wandelt iterativ reines Rauschen in aussagekräftige Daten um, wie z. B. Pixel, die die Verformung und die innere Spannung eines Metamaterials darstellen. (Video: ETH Zürich / Jan-Hendrik Bastek)

Von Videos lernen

Jan-Hendrik Bastek, der ebenfalls Doktorand in Kochmanns Gruppe ist, verfolgte einen anderen Ansatz, um ähnliches zu erreichen. Er verwendete eine Methode, die Videodiffusion heißt und auch bei der KI-basierten Videogenerierung benutzt wird: Tippt man «ein Elefant fliegt über Zürich» ein, generiert die KI ein realistisches Video des Tieres, das über der Fraumünsterkirche kreist. Bastek trainierte sein KI-System mit 50'000 Videosequenzen von sich verformenden 3D-druckbaren Metamaterial-Strukturen. «Ich kann der KI die ge-

wünschte Verformung vorgeben und sie produziert ein Video der optimalen Materialstruktur sowie deren vollständige Verformungsreaktion», erklärt Bastek. Bisherige Ansätze haben sich meist darauf beschränkt, ein einziges Bild der optimalen Struktur vorherzusagen. Durch die Nutzung von Videos des gesamten Verformungsprozesses, erhöht sich die Genauigkeit deutlich in solch komplexen Szenarien.

Große Vorteile für Fahrradhelme und Schuhsohlen

Die ETH-Wissenschaftler:innen haben ihre KI-Tools Forschenden auf dem Gebiet der Metamaterialien frei zur Verfügung gestellt. Somit werden sie hoffentlich zum Entwurf vieler neuer und ungewöhnlicher Materialien führen. Die Tools eröffnen neue Wege für die Entwicklung von Schutzausrüstungen wie Fahrradhelmen und für weitere Anwendungen von Metamaterialien von der Medizintechnik bis hin zu weichen Robotern. Sogar Schuhsohlen können so gestaltet werden, dass sie beim Laufen Stöße besser absorbieren oder beim Auftreten einen Schub nach vorne geben. Wird die KI die manuelle Entwicklung von Materialien vollständig ersetzen? «Nein», lacht Kochmann. «Gut eingesetzt kann KI ein hocheffizienter und fleißiger Helfer sein, aber man muss ihr die richtigen Anweisungen geben und sie richtig trainieren – und das erfordert wissenschaftliche Grundlagen und ingenieurwissenschaftliches Knowhow.»

Literaturhinweise

Bastek JH, Kochmann DM: Inverse design of nonlinear mechanical metamaterials via video denoising diffusion models. Nature Machine Intelligence 2023, doi: [externe Seite10.1038/s42256-023-00762-xcall_made](#)

Zheng L, Karapiperis K, Kumar S, Kochmann DM: Unifying the design space and optimizing linear and nonlinear truss metamaterials by generative modeling. Nature Communications 2023, 14: 7563, doi: [externe Seite10.1038/s41467-023-42068-xcall_made](#)

Quelle: ETH Zürich