

BMBF-Verbundprojekt DiProMag

Digitalisierung einer Prozesskette zur Herstellung,
Charakterisierung und prototypischen Anwendung
magnetokalorischer Legierungen



Ansprechpartner

Dr. Basil Ell & Moritz Blum

{bell, mblum}@techfak.uni-bielefeld.de



Kann ein Vektorraum materialwissenschaftliches Wissen enthalten?



Word embeddings:

Für jedes Wort wird ein Vektor gelernt, sodass Worten, die in Texten in ähnlicher Nachbarschaft vorkommen, ähnliche Vektoren zugeordnet werden.

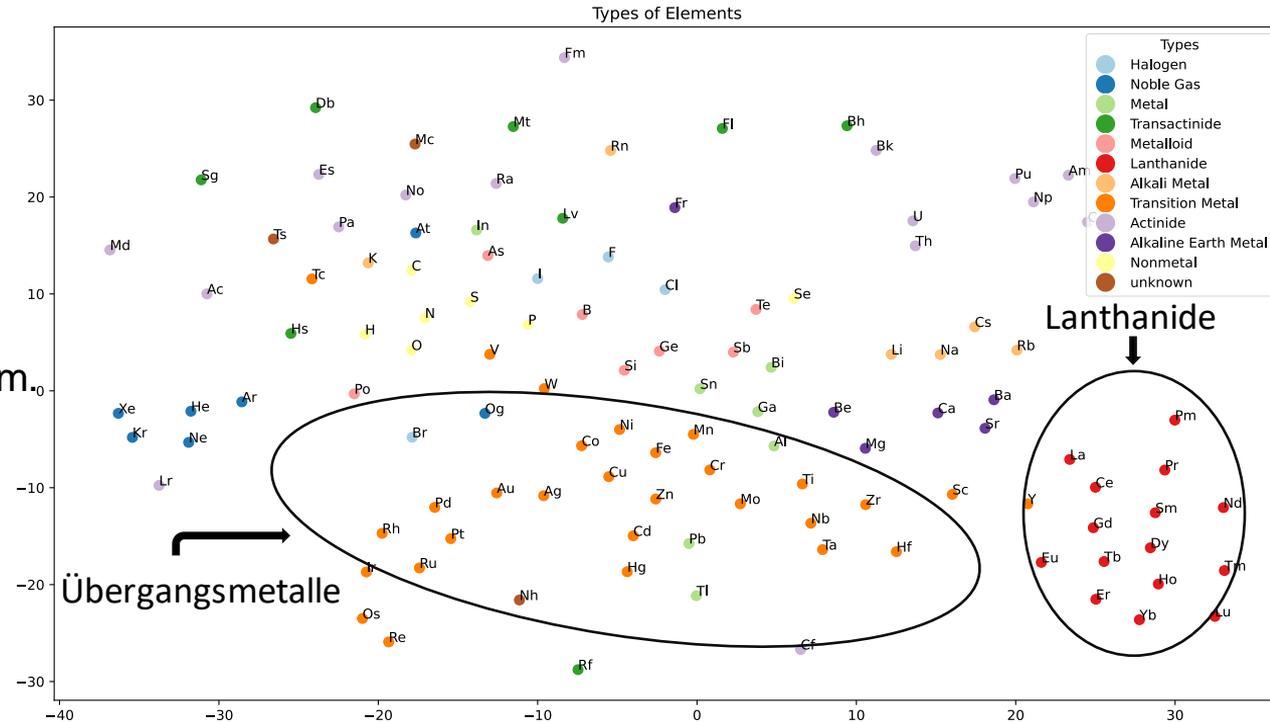
Ansatz:

Training mit materialwissenschaftlichen Texten.

Beobachtung:

Chemische Elemente mit ähnlichen Eigenschaften sind Nachbarn im Vektorraum. Dieser spiegelt somit chemische Eigenschaften wider.

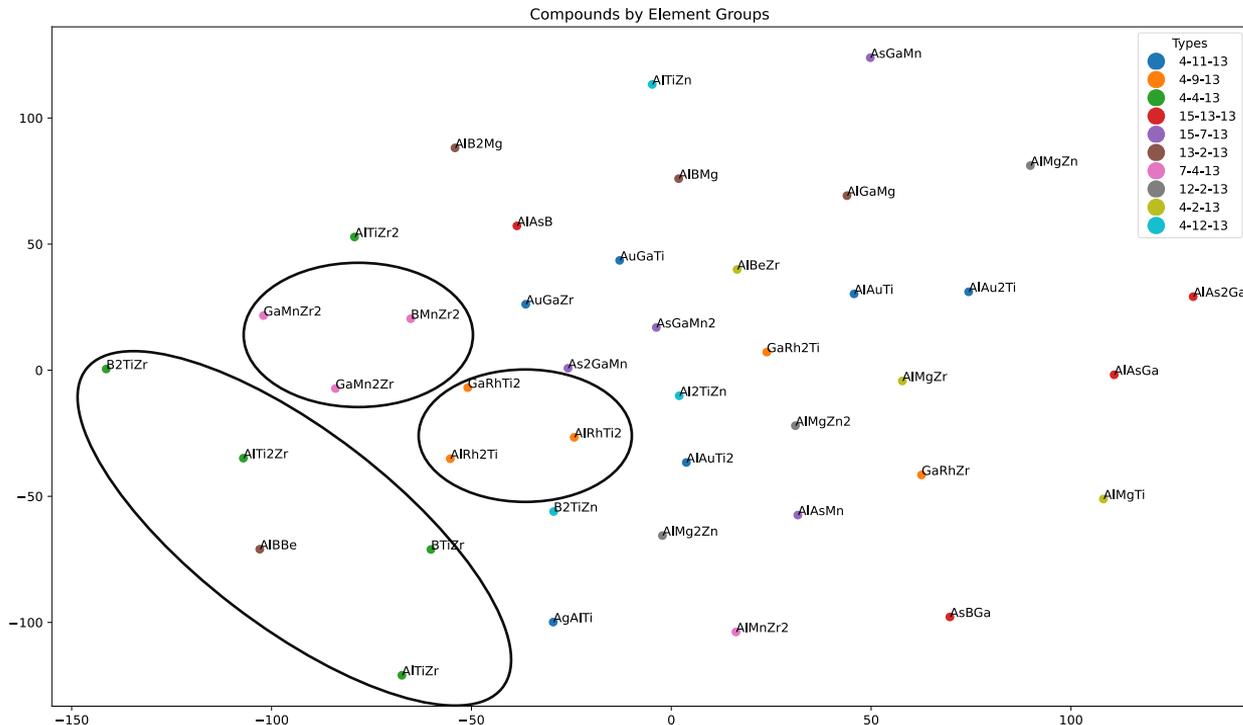
Funktioniert das auch mit komplexeren Strukturen?



Spiegeln sich auch Eigenschaften komplexer Strukturen im Vektorraum wider?



Beobachtung: Die Eigenschaften von Heusler-Verbindungen spiegeln sich wider – Verbindungen mit ähnlichen physikalischen Eigenschaften sind Nachbarn im Vektorraum.

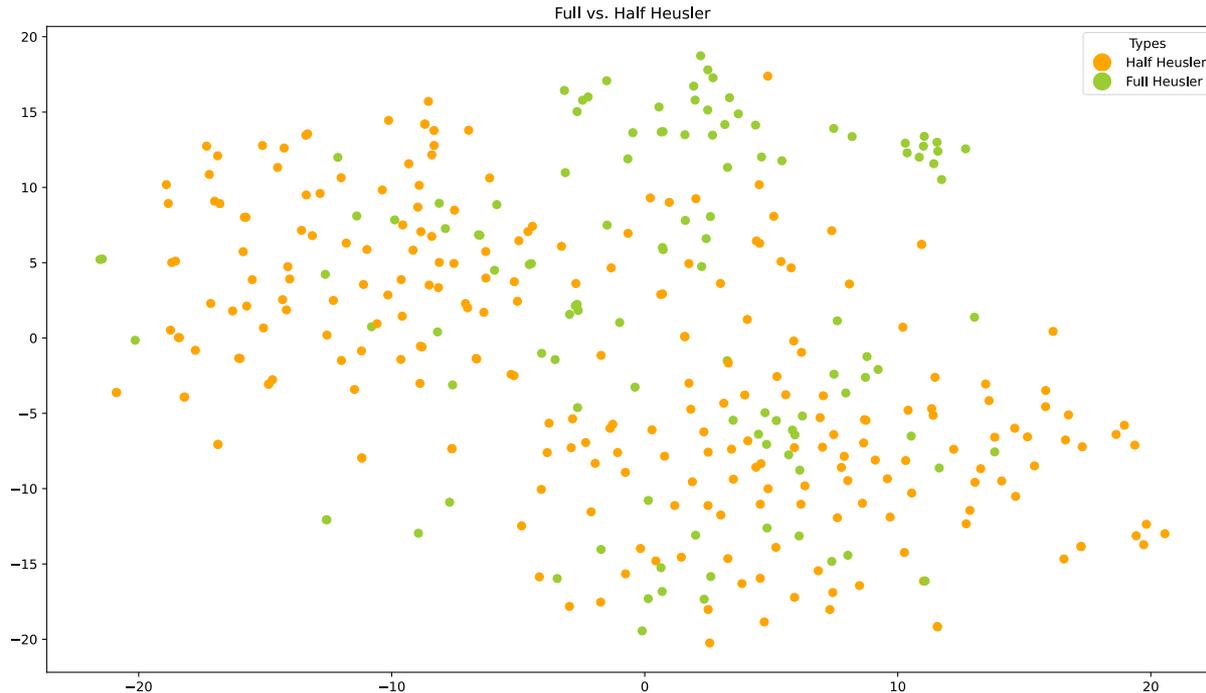


← Verbindungen, deren Ordnungsgruppenzusammensetzung identisch sind, besitzen ähnliche physikalische Eigenschaften.

Spiegeln sich auch Eigenschaften komplexer Strukturen im Vektorraum wider?



Beobachtung: Die Eigenschaften von Heusler-Verbindungen spiegeln sich im Vektorraum wider – Halb-Heusler und Voll-Heusler bilden deutliche Cluster.



Demonstrator zur Exploration des Vektorraumes,
trainiert mit materialwissenschaftlichen Texten:



<http://www.dipromag.de/demonstrator-achema/>