KI-gestütztes Spark Plasma Sintering zur Gefügeoptimierung von Keramiken

Mahima Haque[1], Abdullah Jabr[1], Martin Müller[2,3] , Peter Supancic[1], Raul Bermejo[1]

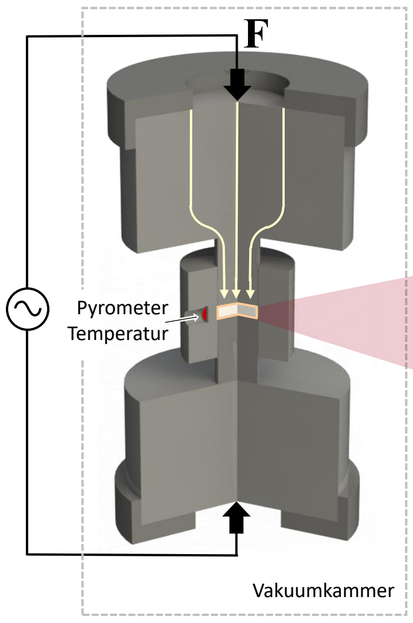
[1] Lehrstuhl für Struktur- und Funktionskeramik, Technical University of Leoben, Franz Josef-Strasse 18, 8700 Leoben, Österreich

[2] Lehrstuhl für Experimentelle Methodik der Werkstoffwissenschaften, Universität des Saarlandes, Campus D3.3, 66123 Saarbrücken, Deutschland

[3] Material Engineering Center Saarland, Campus D3.3, 66123 Saarbrücken, Deutschland

Motivation

Klassische Konfiguration

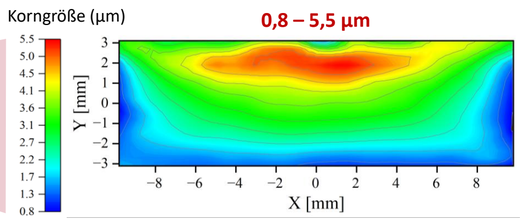


A Konventionelles Sintern
erfordert lange Sinterzeiten, die sich **über mehrere Tage** erstrecken können.

B Spark Plasma Sintern (SPS)
ermöglicht Sinterzeiten in **<10 min** durch das Anlegen eines Gleichstroms.

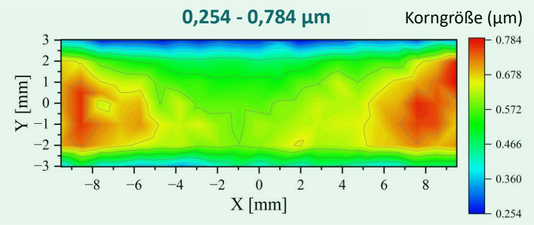
Herausforderung in SPS: Durch hohe Aufheizraten und lokale Erwärmung:

Starke Temperaturgradienten
→ Mikrostrukturelle Inhomogenität



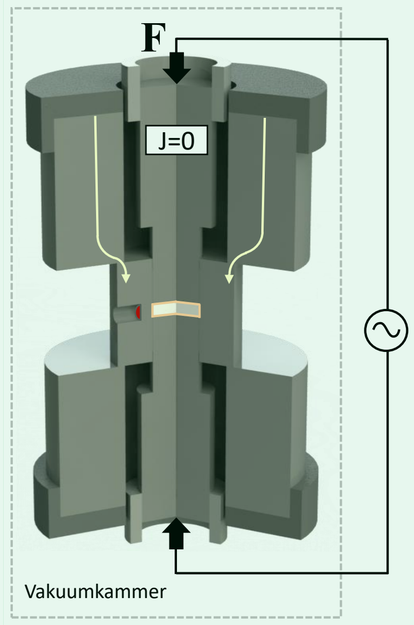
Komplexe Wechselwirkung der Sinterparameter
→ Erschwerte Mikrostruktursteuerung

Gezielter Stromfluss durch Optimierung der SPS-Konfiguration



Maschine Learning zur Modellierung der komplexen Zusammenhänge zwischen Sinterparametern und Mikrostruktur

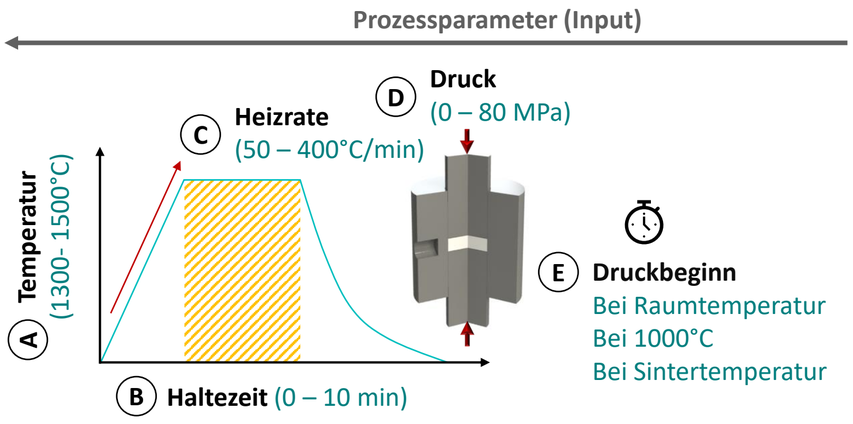
Neue Konfiguration



Methodik – Aufbau des Machine Learning Modells

I. Vom Domänenwissen zum Versuchsraum

Identifizierung der für die Mikrostruktur relevanten Sinterparameter und mikrostruktureller Zielgrößen. Definierung eines Designraums mit physikalisch sinnvollen Minimal- und Maximalwerten.



Mikrostrukturelle Eigenschaften:
- ☆ Korngröße
- ☆ Porosität

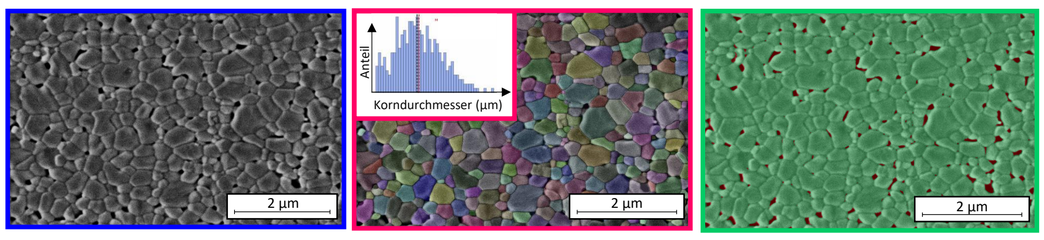
Erstellung eines Versuchsplans (DoE) mittels **Sobol-Sampling** zur gleichmäßigen Abdeckung des Parameterraums.
26 Experimente zur systematischen Untersuchung des Parameterraums.

II. Datenanalyse: Von der Aufnahme zur Korrelation

Zuverlässige Mikrostrukturquantifizierung ist die Basis für ein gutes Modell. Messunsicherheiten fließen direkt in die Modellbildung ein.

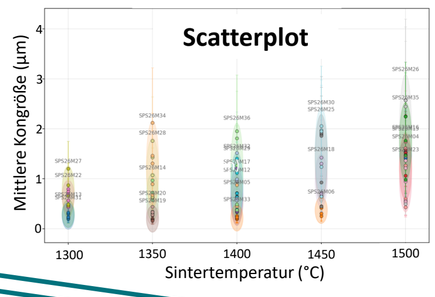
Erfassung der Mikrostruktur: Bildbasierte Quantifizierung mit KI

Korngrößenquantifizierung: Universelle Software des MECS zur automatisierten Korngrößenbestimmung.
Porositätsquantifizierung: Trainable Weka Segmentation mit iterativem Training zur automatisierten Segmentierung.



REM-Bilder | Korngrößequantifizierung mittels MECS-Software | Porositätsquantifizierung mittels Fiji/ImageJ

Mittels KI ist die Mikrostrukturquantifizierung
- ✓ deutlich schneller
- ✓ objektiver
- ✓ zuverlässiger



Explorative Datenanalyse: Wegweiser für die Modellbildung

Gewinnung eines ersten Datenverständnisses, Identifikation von Mustern und Zusammenhängen, Erkennen von Auffälligkeiten und Ausreißern.

III. Aufbau des Modells

1. **Input-Variablen**
5 Sinterparameter + X-, Y-Koordinaten der REM-Bilder pro Probe

2. **Surrogatmodell-Konfiguration**
Matern-Kernel (ARD)
- **Gaussian Process Regressor**: Log-transformierte Korngröße
- **Gaussian Process Klassifikator**: Porosität: binär (dicht/porös)

3. **Leave-One-Sample-Out (LOSO) Cross-Validation**
26 Proben × 5 Positionen = 130 Datenpunkte, probenweise gruppiert.

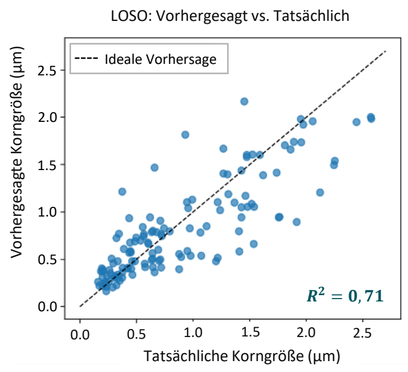
Modell: Training in Blau, Validierung in Rot

4. **Constrained Bayesian Optimization**
Akquisitionsfunktion: Expected Improvement (EI), **Ziel:** Minimierung der Homogenitätsmetrik
Nebenbedingung: Wahrscheinlichkeit für Porosität = 0
Exploitation – Vielversprechende Parameterbereiche, geringer Modellunsicherheit, hohe Wahrscheinlichkeit für Porosität = 0
Exploration – Unbekannte Parameterbereiche, hoher Modellunsicherheit, geringe Wahrscheinlichkeit für Porosität = 0

5. **Modell Validierung**
$R^2, RMSE, MAE,$ Confusion Matrix

IV. Ergebnisse

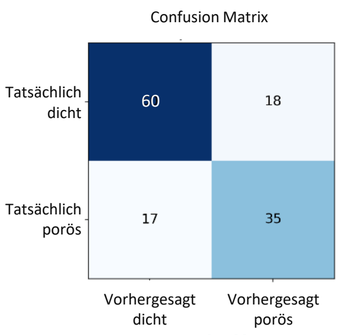
Gaussian Process Regressor



$R^2 = 0,71$ → zufriedenstellende Vorhersagegüte, etwas mehr Streuung bei größeren Korngrößen.

Weitere Datenpunkte aus Exploration & Exploitation können das Modell künftig verbessern.

Gaussian Process Klassifikator



Genauigkeit = 0,73;
ROC-AUC = 0,74
(95/130 korrekt klassifiziert)

Korrekte Klassifikation:
77 % der dichten und 67 % der porösen Proben.

Die GP-Modelle zeigen auf Basis von **26 Ausgangsproben** bereits relevante Zusammenhänge zwischen Prozessparametern und Materialeigenschaften.

Ausblick und nächste Schritte

- ☐ Experimentelle Umsetzung der vorgeschlagenen Exploitation- und Exploration-Kandidaten.
- ☐ Bewertung der Modellentwicklung durch iterative Rückführung der Ergebnisse in das Trainingsdatenset.
- ☐ Übertragung des Ansatzes auf keramische Werkstoffsysteme mit unterschiedlichen Mikrostrukturen

Kontakt

Move mountains