



[T.T.-Prof. Dr. Pascal Friederich // Künstliche Intelligenz für die Materialwissenschaften (AiMat)]

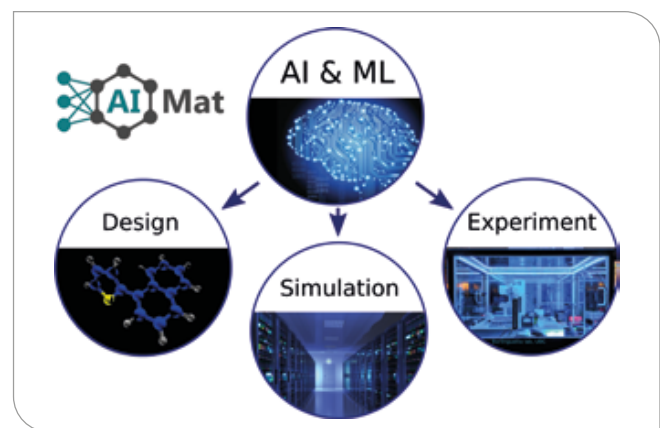
Nach seinem Studium der Physik am KIT promovierte Pascal Friederich 2016 am Institut für Nanotechnologie zum Thema Simulation und computergestütztes Design von Materialien für die organische Elektronik. Nach einem Aufenthalt als Gastwissenschaftler an der Georgia Tech Universität in Atlanta (USA) schloss sich Pascal Friederich 2018 als Marie-Sklodowska Curie Stipendiat der Gruppe von Alán Aspuru-Guzik an, wo er zuerst an der Harvard Universität in Cambridge (USA) und später dann an der Universität in Toronto (Kanada) an Methoden des virtuellen Hochdurchsatz-Screenings von Materialien und an der Entwicklung von Methoden des maschinellen Lernens fürs Design von Molekülen forschte.

2019 bekam Pascal Friederich einen Ruf als Tenure-Track Professor an der Fakultät für Informatik des KIT, wo er an der Entwicklung und Anwendung von Methoden des maschinellen Lernens für die Materialwissenschaften forschet. Ziel seiner interdisziplinären Forschung ist es, eine Brücke zwischen der methodenorientierten Forschung in der Informatik und der anwendungsorientierten Forschung in den Materialwissenschaften und der Chemie aufzubauen. Für seine Forschung wurde Pascal Friederich unter anderem mit dem Otto Haxel Preis sowie dem Heinz Maier-Leibnitz Preis der DFG 2022 ausgezeichnet.

// Einblicke in die Forschung

Einer der **Schlüsselfaktoren** zur Lösung der **größten Herausforderungen der Menschheit**, wie zum Beispiel der Bekämpfung des Klimawandels durch nachhaltige Formen der Energiegewinnung und -speicherung, oder auch der Entwicklung neuartiger medizinischer Therapien und Medikamente, ist die

Entwicklung neuer Materialien. Eine der großen Herausforderungen und gleichzeitig auch Chancen der Materialwissenschaften und der Chemie ist die schier unendliche Vielzahl möglicher denkbarer Materialien und Moleküle. Herkömmliche experimentelle und computergestützte Methoden zur Erkundung dieses sogenannten „chemischen Raums“ aller Materialien sind häufig aufwändig und teuer.



// Maschinelles Lernen für die Materialwissenschaften

Die Forschung der AiMat („AI for Materials Science“) Forschungsgruppe beschäftigt sich mit einer neuen Herangehensweise an die Herausforderungen der Materialentwicklung – der **Entwicklung und Anwendung von Methoden des maschinellen Lernens.** Daten-getriebene Methoden werden neben Experimenten, Theorie und

Simulationen bereits häufig als vierte Säule der Naturwissenschaften diskutiert. Sie ermöglichen nicht nur deutliche Geschwindigkeitsvorteile gegenüber konventionellen Methoden, sondern erlauben auch eine engere Verzahnung von Experiment, Theorie und Simulation. Das Vorhandensein eines wachsenden Datenschatzes über Materialien und ihre Eigenschaften ermöglicht den Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens zur Beschleunigung der Materialentwicklung.

Die AiMat Gruppe arbeitet in drei unterschiedlichen Bereichen der künstlichen Intelligenz und des maschinellen Lernens für die Materialwissenschaften:

- Ein Schwerpunkt der Gruppe ist die Entwicklung von maßgeschneiderten Regressionsmodellen, insbesondere **Graph neuronalen Netzen**, zur Vorhersage von Material- und Moleküleigenschaften. Desweiteren werden **generative Modelle** für **inverses Materialdesign** entwickelt und verwendet: Anstatt für gegebene Materialien die entsprechenden Eigenschaften vorauszusagen, können mit generativen Modellen für gewünschte Eigenschaften direkt mögliche Material- und Molekülkandidaten vorgeschlagen werden.
- Ein weiterer Schwerpunkt ist der Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens zur **Beschleunigung von Materialsimulationen**. Diese werden häufig als „computational microscope“ bezeichnet, da sie Einblick in die Struktur und Funktionalität von Materialien ermöglichen, der selbst mit hochaufgelösten Mikroskopieverfahren nicht erreicht werden kann. Hier tragen Methoden des maschinellen Lernens zu einer erheblichen Beschleunigung der Simulationen bei. Gekoppelt mit Methoden der Unsicherheitsquantifizierung und des aktiven Lernens wird die Erforschung bisher unbekannter Materialien bei gleichzeitig hoher Verlässlichkeit ermöglicht.
- Häufig ist die Materialentwicklung direkt auf Experimente angewiesen. Hier liegt die Herausforderung darin,

eine Vielzahl freier experimenteller Parameter simultan zu optimieren. Der dritte Schwerpunkt der AiMat Gruppe ist die Entwicklung von Algorithmen zur **autonomen Entscheidungsfindung in automatisierten Materialexperimenten**, insbesondere basierend auf Optimierung- und aktiven Lernverfahren. So können hochdimensionale experimentelle Parameterräume mithilfe von adaptiven Algorithmen erforscht werden. Gemeinsam mit experimentellen Kooperationspartnern arbeitet die AiMat Gruppe am Einsatz der neu entwickelten Methoden in einer Vielzahl relevanter Anwendungsgebiete.

// **Ausgewählte Publikationen 2022**

Friederich, P., Häse, F., Proppe, J. and Aspuru-Guzik, A., 2021. Machine-learned potentials for next-generation matter simulations. *Nature Materials*, 20(6), pp.750-761.

Reiser, P., Eberhard, A. and Friederich, P., 2021. Graph neural networks in TensorFlow-Keras with RaggedTensor representation (kgcnn). *Software Impacts*, 9, p.100095.

Luo, Y., Bag, S., Zaremba, O., Cierpka, A., Andreato, J., Wuttke, S., Friederich, P. and Tsotsalas, M., 2022. MOF Synthesis Prediction Enabled by Automatic Data Mining and Machine Learning. *Angewandte Chemie International Edition*, 61(19), p.e202200242.

Friederich, P., Krenn, M., Tamblyn, I. and Aspuru-Guzik, A., 2021. Scientific intuition inspired by machine learning-generated hypotheses. *Machine Learning: Science and Technology*, 2(2), p.025027.

// **Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter**

Verwaltungspersonal
Stephanie Wolf

Wissenschaftliches Personal

André Eberhard
Chen Zhou
Luca Torresi
Marlen Neubert
Dr. Navid Haghmoradi
Dr. Patrick Reiser
Dr. Payam Kalhor
Dr. Tobias Schlöder

// **Website**
aimat.science