

## IC-MPPE

Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering

<b>Programm / Ausschreibung</b>	COMET, K2, 3. Ausschreibung 2020 - 2. Förderperiode	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.01.2022	<b>Projektende</b>	31.12.2026
<b>Zeitraum</b>	2022 - 2026	<b>Projektlaufzeit</b>	60 Monate
<b>Keywords</b>	Materials engineering, multiscale material modeling, simulation tools, design of structural and functional materials, utilization of secondary raw materials, materials for energy storage, process engineering, material integrated process simulation, n		

### Projektbeschreibung

Ziele:

Die Hauptziele des COMET-Zentrums für „Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering (IC-MPPE)“ sind:

- (1) Erreichen einer hohen internationalen Sichtbarkeit im Themenbereich "Integrated Computational Materials, Process and Products Engineering (IC-MPPE)".
- (2) Entwicklung von neuen Modellen, Simulationstools, Software, Arbeitsabläufen und technologischem Fachwissen und Förderung der Implementierung von IC-MPPE in der Industrie.
- (3) Nutzung von Expertise und Methoden für materialbasierte Innovationen sowie für ressourceneffiziente und umwelt- und klimafreundliche Lösungen entlang der Produktionskette.

Thematischer Fokus:

Das COMET-Zentrum konzentriert sich auf Entwicklung und Nutzung von Grundlagen, experimentellen Methoden, Simulationstools, Software und Arbeitsabläufen für IC-MPPE, insbesondere:

- Neue multiskalige Material-, Prozess- und Produktmodelle (physikbasiert, datengetrieben, hybrid, vorwärts, invers), Simulationstools, Software und Workflows.
- Neue Simulationstools zur Unterstützung der Digitalisierung der Wertschöpfungskette - digitale Modelle, Schatten und Zwillinge für Materialien, Prozesse und Produkte.
- Neue experimentelle Methoden zur Validierung von Materialmodellen, Simulationstools und Software sowie zur Bestimmung von Modellparametern.

Innovationspotential:

Das Innovationspotenzial umfasst materialbasierte Innovationen entlang der Produktionskette, z.B. neue Werkstoffe, Fertigungsverfahren und Produkte, aber auch neue Modelle, Simulationstools und Software für computergestützte Design- und Planungsprozesse sowie die Realisierung smarterer Prozesse und Produkte mit eingebetteter Intelligenz. Die Umsetzung

der Innovationen wird durch die kooperative Durchführung der Projekte primär mit österreichischen und europäischen Unternehmen sichergestellt, die in ihren Geschäftsfeldern oft international führend sind.

Geplante Änderungen in der thematischen Ausrichtung für Förderperiode 2 (FP2):

Folgende neue Schwerpunkte wurden in das Forschungsprogramm aufgenommen:

- Neue nachhaltige Materialien, Prozesse und Produkte - ressourcen- und CO<sub>2</sub>-sparende Herstellung und Anwendung, Verwendung sekundärer Rohstoffe, Vermeidung von Gefahrstoffen.
- Neue Materialentwicklungsplattform - Einsatz von künstlicher Intelligenz zur Integration von Daten aus physikalischer Modellierung, Experimenten und Literatur in einem Workflow.
- Neuer Fokus auf Daten aus Simulation und Experimenten - qualitätsgesicherte und etikettierte Speicherung in maschinenlesbarer Form zur automatisierten rechnerischen Nutzung.
- Neues Forschungsfeld für elektrische Energiespeichermaterialien.
- Neuer halbautomatischer Workflow zur Konstruktion hybrider semiparametrischer Modelle physikalischer Systeme - Kombination physikalisch basierter und datengetriebener Modelle.
- Neue Zustandsüberwachung und Steuerung von Fertigungsprozessen mittels hybrider Modelle, sowie Einbettung von Intelligenz in Komponenten

Struktur des Forschungsprogramms von IC-MPPE:

Die Aktivitäten erfolgen in vier eng miteinander verknüpften Forschungsbereichen (Areas):

Area 1: Grundlagen für integriertes computerunterstütztes Material, Prozess und Produkt Engineering

Area 2: Material Engineering

Area 3: Prozess Engineering

Area 4: Produkt Engineering

## **Abstract**

Goals:

The main goals of the COMET Center for “Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering (IC-MPPE)” are:

- (1) Achieve high international visibility in the field of Integrated Computational Materials, Process and Products Engineering (IC-MPPE).
- (2) Develop new models, simulation tools, software, workflows, and technological expertise for IC-MPPE, and promoting implementation of IC-MPPE in industrial practice.
- (3) Use the know-how and methods to realize material-based innovations as well as resource-efficient and environmentally and climate-friendly solutions along the production chain.

Thematic focus:

The COMET Center focuses on the development and utilization of fundamentals, experimental methods, simulation tools, software and workflows necessary for IC-MPPE, this includes:

- New multi-scale material, process, and product models (physics-based, data-driven, hybrid, forward, inverse), simulation tools, software, and workflows.
- New simulation tools to support the digitalization of the value chain - digital models, shadows and twins for materials,

processes and products.

- New experimental methods to validate material models, simulation tools and software, and to determine model parameters.

Innovation potential:

The innovation potential includes material-based innovations along the production chain, such as new materials, new manufacturing processes and new products, but also new models, simulation tools and software for computer-aided design and planning processes, as well as the realization of smart processes and products with embedded intelligence. The implementation of the innovations in practice is ensured by the cooperative execution of the projects primarily with Austrian and European companies, which are often international leaders in their business fields.

Planned changes in the thematic focus in Funding Period 2 (FP2)

The following new priorities have been added to the research program:

- New sustainable materials, processes and products – resource- and CO2 saving production and use, using secondary raw materials, avoiding critical raw materials and hazardous materials.
- New material development platform - using artificial intelligence methodologies to integrate data from physical modeling, experiments, and literature in one workflow.
- New focus on data from simulation and experiments - quality-assured and labeled storage in machine-readable form for automated computational use.
- New research field for electrical energy storage materials.
- New semi-automated workflow for the construction of hybrid semi-parametric models of physical systems – combining physics-based and data driven models.
- New condition monitoring and control of manufacturing processes using hybrid models, as well as and embedding intelligence in components

Structure in the research program of IC-MPPE:

The activities are carried out in four closely interlinked research areas:

Area 1: Fundamentals for Integrated Computational Materials, Process und Product Engineering

Area 2: Material Engineering

Area 3: Process Engineering

Area 4: Product Engineering

## **Projektkoordinator**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH

## **Projektpartner**

- voestalpine Rail Technology GmbH
- Stahl Judenburg GmbH
- voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH & Co KG
- Deutsche Bahn Aktiengesellschaft
- University of Sheffield

- Hüttenwerke Krupp Mannesmann Gesellschaft mit beschränkter Haftung
- Robert Bosch GmbH
- Gdansk University
- ÖBB-Technische Services-Gesellschaft mbH
- Norwegian University of Science and Technology (NTNU)
- Dr. Jürgen Cito
- NKE Austria GmbH
- Infineon Technologies Austria AG
- Österreichische Akademie der Wissenschaften
- ÖBB-Personenverkehr Aktiengesellschaft
- AMAG rolling GmbH
- CERATIZIT Austria Gesellschaft m.b.H.
- Montanuniversität Leoben
- Technische Universität Wien
- Linz Center of Mechatronics GmbH
- MAGMA Gießereitechnologie Gesellschaft für Gießerei- Simulations- und Regeltechnik mbH
- The University of British Columbia
- Technische Universität München Lehrstuhl für Umformtechnik und Gießereiwesen
- SISSA mathLab Research
- DB Regio Aktiengesellschaft
- Universität Heidelberg Institute of Computer Engineering (ZITI)
- VSParticle B.V.
- Technische Universität Graz
- Stadler Rheintal AG
- Gutehoffnungshütte Radsatz GmbH
- Primetals Technologies Austria GmbH
- ÖBB-Infrastruktur Aktiengesellschaft
- Academy of Sciences of the Czech Republic Institute of Physics of Materials (IPM)
- Siemens Mobility Austria GmbH
- voestalpine Giesserei Linz GmbH
- International Zinc Association - IZA
- voestalpine Tubulars GmbH & Co KG
- DB Systemtechnik GmbH
- Ghent University
- University of Maribor Univerza v Mariboru
- voestalpine Stahl GmbH
- Know Center Research GmbH
- CERATIZIT S.à.r.l.
- Scuola Universitaria Superiore Sant'Anna The BioRobotics Institute
- LINMAG GmbH
- ALSTOM Transport Deutschland GmbH

- DB Fernverkehr Aktiengesellschaft
- AT & S Austria Technologie & Systemtechnik Aktiengesellschaft
- voestalpine Railway Systems GmbH
- FH JOANNEUM Gesellschaft mbH
- Schweizerische Bundesbahnen SBB