

# IMI

Integrated Materials Intelligence

|                                     |                                                                                                                                                                                                                                                            |                        |            |
|-------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b>     | KS 24/26, COMET - Zentren , COMET-Zentren 2025                                                                                                                                                                                                             | <b>Status</b>          | laufend    |
| <b>Projektstart</b>                 | 01.01.2027                                                                                                                                                                                                                                                 | <b>Projektende</b>     | 31.12.2030 |
| <b>Zeitraum</b>                     | 2027 - 2030                                                                                                                                                                                                                                                | <b>Projektlaufzeit</b> | 48 Monate  |
| <b>Barwert der Projektförderung</b> | € 8.000.000                                                                                                                                                                                                                                                |                        |            |
| <b>Keywords</b>                     | materials acceleration platforms, materials informatics, advanced multifunctional materials, sustainable materials processing and application, circular design, FAIR data, physics-informed AI-enhanced modeling, AI-enhanced experimental materials chara |                        |            |

## Projektbeschreibung

Ausgangssituation: Das bestehende COMET-Zentrum „Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering (IC-MPPE)“ hat eine Fülle neuer theoretischer Erkenntnisse und Methoden zu Materialcharakterisierung, physikalischer und numerischer Simulation entwickelt und erfolgreich auf die simultane Entwicklung von Werkstoffen, Prozessen und Produkten angewendet. Unterstützt durch Kooperationen mit internationalen Forschungsnetzwerken zur Entwicklung und Nutzung von Materialbeschleunigungsplattformen (MAPs) haben wir unsere eigene MAP, ALPmat, entwickelt, die bereits ihr enormes Potenzial zur Beschleunigung komplexer Material- und Prozessentwicklungsaufgaben unter Beweis gestellt hat.

Zu lösende Probleme: Der nächste Schritt besteht darin, MAPs in Richtung werkstofforientierter Innovation weiterzuentwickeln. Dazu gehört die Erweiterung der ALPmat-Plattform und die Entwicklung neuer Beschleunigungsplattformen für Materialverarbeitung (ALP4Process) und -verwendung (ALP4Product). Im COMET-Zentrum IMI sollen dahingehend neue Anwendungsbereiche erschlossen werden.

Zu den wichtigsten zu lösenden Problemen gehören (1) die Entwicklung innovativer Werkstoffe mit hochkomplexen Eigenschaftsprofilen, (2) die Entwicklung und Verarbeitung von Werkstoffen aus Sekundärrohstoffen mit variabler Zusammensetzung, (3) die Integration großer Mengen unterschiedlicher Daten aus verschiedensten Quellen, (4) die Entwicklung neuer Beschleunigungsplattformen (ALP4Process, ALP4Product) und (4) der Aufbau von Expertise zur Integration von MAPs in die digitalen Ökosysteme der Partner.

Motivation für die Umsetzung des COMET-Zentrums IMI: Österreich verfügt über einen starken Produktionssektor mit weltweit führenden Unternehmen in Bereichen wie Metallurgie, Maschinenbau, Mobilität, alternative Energien und Elektronik. Neue intelligente und nachhaltige Werkstoffe und Prozesstechnologien sind zur Verbesserung der Wettbewerbsfähigkeit dringend erforderlich.

Gesamtziele des COMET-Zentrums IMI: Das Hauptziel von IMI ist, Expertise für die Weiterentwicklung werkstoffbezogener Plattformen zu fördern, diese in größere digitale Ökosysteme zu integrieren und zur Realisierung materialbasierter Innovationen unter Berücksichtigung der Kreislaufwirtschaft zu nutzen. Dies erfordert (1) die Weiterentwicklung von MAPs

(ALPmat und die neuen Plattformen ALP4Process und ALP4Product), (2) die Integration von MAPs in die digitalen Ökosysteme der Partner, (3) die Entwicklung innovativer multifunktionaler Materialien für die Kreislaufwirtschaft, einschließlich Herstellungsprozesse und Anwendungen, (3) die Weiterentwicklung und Nutzung KI-unterstützter Methoden entlang des Wertschöpfungskreislaufs und (4) die Ausbildung junger WissenschaftlerInnen in computergestützten Methoden und digitalen Plattformen.

Herausforderungen: Die wichtigsten wissenschaftlichen und technologischen Herausforderungen bestehen in der Entwicklung neuer validierter Strukturen für (1) automatisierte Datenintegration nach den FAIR-Prinzipien (auffindbar, zugänglich, interoperabel, wiederverwendbar) aus verschiedenen Quellen (Experimente, Simulationen, Literatur) für die werkstoffbasierte Forschung entlang des Wertschöpfungskreislaufs, (2) weiteren Aufbau von Expertise in hochpräziser physikbasierter und KI-gestützter Modellierung, (3) Integration von Modellen und Daten über verschiedene Längenskalen und Bereiche der Physik und (4) Beschleunigung der Entwicklung neuer Werkstoffe, Prozesse und Anwendungen.

Hauptmerkmale des Programms: Das Forschungsprogramm konzentriert sich auf grundlegende experimentelle und Berechnungsmethoden und deren Integration in MAPs sowie auf die Nutzung dieser Plattformen zur Beschleunigung der Entwicklung entlang des Wertschöpfungskreislaufs.

Die Forschungsaktivitäten gliedern sich in folgende drei Bereiche:

Area 1: Innovative Werkstoffe für die Kreislaufwirtschaft

Area 2: Innovative Herstellungsprozesse

Area 3: Anwendung innovativer Werkstoffe

## **Abstract**

Initial situation: The existing COMET Center “Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering (IC-MPPE)” has developed a wealth of new theoretical expertise, novel material characterization and physical simulation techniques, as well as new numerical simulation methods, and has successfully applied these to simultaneous, multi-method development of materials, processes and products. Supported by new collaborations with international research networks for the development and use of materials acceleration platforms (MAPs), we have developed our own MAP, ALPmat, which has already demonstrated its enormous potential for accelerating complex material and process development tasks

Problems to solve: The next necessary step is to expand our expertise to further develop MAPs for application towards materials-driven innovations. This includes expanding our own ALPmat platform and setting up new acceleration platforms for materials processing (ALP4Process) and materials use (ALP4Product). At our COMET Center IMI, various use cases need to be investigated to open up new applications and obtain feedback for improving the user interfaces.

The most important problems to be solved include (1) the development of new innovative materials with highly complex property profiles (that fulfil multiple property targets), (2) the design and processing of materials from secondary sources with relatively variable compositions, (3) the integration of large amounts of diverse data from a variety of different sources, (4) the set-up of new acceleration platforms (ALP4Process, ALP4Product), and (4) the development of expertise in integrating MAPs into the digital ecosystem of the partners.

Motivation to carry out the COMET Center IMI: Austria has a strong production sector with world leading companies in areas such as metallurgical, chemical and mechanical engineering, mobility, supply, alternative energy, and electronics industry. New intelligent and sustainable materials and process technologies are urgently needed to improve competitiveness.

Overall goals of the COMET Center IMI: Main objective of IMI is to advance expertise for the further development of material related platforms, integrate them into larger digital ecosystems, and use them to realize materials-based innovations including circular technologies and solutions. This requires (1) further development of MAPs (expanding ALPmat and new

platforms ALP4Process and ALP4Product), (2) integration of MAPs into digital ecosystems of partners, (3) circular design of advanced multifunctional materials, including their manufacturing processes and applications, (3) further development and use of artificial intelligence (AI)-supported methods along the value circle, and (4) training young scientists in computer-aided techniques and digital platforms.

Scientific-technological challenges: The most important scientific and technological challenges are to develop new validated frameworks for (1) automated FAIR data integration (findable, accessible, interoperable, reusable) from various sources (experiments, simulations, literature) for materials-based research along the value circle, (2) improving expertise in high-fidelity physics-based and AI-enhanced modeling, (3) integrating models and data across different scales and areas of physics, and (4) accelerating the development of new materials, processes and applications.

Main features of the research program: The research program focuses on fundamental, experimental and simulation methods, computational tools and their integration into MAPs, as well as on the use of these platforms to accelerate development along the value circle.

The activities are structured in the following three Research Areas:

Area 1: Circular Advanced Materials

Area 2: Advanced Manufacturing Processes

Area 3: Advanced Materials Application

## **Projektkoordinator**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH

## **Projektpartner**

- Academy of Sciences of the Czech Republic Institute of Physics of Materials (IPM)
- AMAG rolling GmbH
- ams-OSRAM AG
- ANDRITZ Metals France SAS
- AT & S Austria Technologie & Systemtechnik Aktiengesellschaft
- Berndorf Band GmbH
- CERATIZIT Austria Gesellschaft m.b.H.
- Deutsch-Französisches Forschungsinstitut Saint-Louis (ISL)
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
- eologix sensor technology flexco
- Hilti Aktiengesellschaft
- Infineon Technologies Austria AG
- Interdisciplinary Transformation University
- International Zinc Association - IZA
- Karlsruher Institut für Technologie Institut für Nanotechnologie (INT)
- Kennametal Shared Services GmbH
- KTH Royal Institute of Technology Department of Materials Science and Engineering
- Linköping University Department of Computer and Information Science (IDA)
- Linsinger Maschinenbau Gesellschaft m.b.H.
- Montanuniversität Leoben - Lehrstuhl für Umformtechnik

- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Cyber Physical Systems
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Gießereikunde
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Informationstechnologie
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Materialphysik
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Mechanik
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Metallkunde
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Nichteisenmetallurgie
- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Physikalische Chemie
- Sandvik Aktiebolag
- Siemens Mobility Austria GmbH
- SIJ ACRONI podjetje za proizvodnjo jekla in jeklenih izdelkov d.o.o.
- Silicon Austria Labs GmbH
- Software Competence Center Hagenberg GmbH
- Technische Universität Graz Institut für Betriebsfestigkeit und Schienenfahrzeugtechnik
- Technische Universität Graz Institut für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik
- Technische Universität Graz Institut für Grundlagen und Theorie der Elektrotechnik
- Technische Universität München Lehrstuhl für Umformtechnik und Gießereiwesen
- Technische Universität Wien
- The University of British Columbia Department of Materials Engineering
- University of Manchester Faculty of Science and Engineering
- University of Sheffield Department of Mechanical Engineering
- University of Warwick WMG
- UPC Universitat Politècnica de Catalunya - BarcelonaTech CIEFMA - Center for Research in Structural Integrity, Reliability and Micromechanics of Materials
- Verein zur Förderung der Elektronenmikroskopie und Feinstrukturforschung
- voestalpine BÖHLER Aerospace GmbH & Co KG
- voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH & Co KG
- voestalpine Rail Technology GmbH
- voestalpine Railway Systems GmbH
- voestalpine Stahl GmbH
- Österreichische Akademie der Wissenschaften Erich Schmid Institut für Materialwissenschaft (ESI)