

## A3Red

Accelerated design of Advanced Alloys with Reduced critical raw materials content

<b>Programm / Ausschreibung</b>	KS 24/26, KS 24/26, COMET-Module 2024	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.01.2026	<b>Projektende</b>	31.12.2029
<b>Zeitraum</b>	2026 - 2029	<b>Projektlaufzeit</b>	48 Monate
<b>Keywords</b>	AI-supported accelerated materials design, structural and functional advanced materials, utilization of secondary raw materials, reduction of critical raw materials, interoperable modular research platform		

### Projektbeschreibung

Ziel des COMET-Moduls A3Red ist die Entwicklung einer interoperablen modularen Forschungsplattform für KI-gestütztes beschleunigtes Design von Hochleistungslegierungen mit radikal reduziertem Gehalt an kritischen Rohstoffen.

Hochleistungswerkstoffe und damit verbundene Prozesse machen etwa 20% der europäischen und österreichischen Industrie aus, sind aber entscheidend von kritischen Rohstoffen abhängig. Zur Erhöhung der Widerstandsfähigkeit und Nachhaltigkeit der Produktion ist eine radikale und rasche Umstellung auf den Einsatz sekundärer und unkritischer Rohstoffe erforderlich. Dies erfordert neue Strategien für die Entwicklung von Werkstofffamilien mit stark veränderten chemischen Zusammensetzungen sowie für den Umgang mit erhöhten Gehalten an Begleitelementen, wie sie durch Sekundärrohstoffe eingebracht werden. Die derzeitigen Entwicklungsprozesse sind dafür zu langsam und ineffizient, da die numerischen und experimentellen Entwicklungswerkzeuge unzureichend abgestimmt sind, die Zusammenführung von Daten aus verschiedensten Quellen in maschinenlesbaren Datenbanken fehlt und die Möglichkeiten moderner KI-gestützter Datenanalytik bei der Entscheidungsfindung außer Acht gelassen werden.

Um das MCL mit dem COMET-Kompetenzzentrum für integrierte rechnergestützte Material-, Prozess- und Produktentwicklung (IC-MPPE) für die Bewältigung dieser Herausforderungen zu positionieren, soll im COMET-Modul A3Red eine interoperable modulare Forschungsplattform für KI-gestütztes beschleunigtes Design von Hochleistungslegierungen mit radikal reduziertem Gehalt an kritischen Rohstoffen entwickelt werden. A3Red konzentriert sich auf Aluminiumlegierungen für hochfeste Leichtbauanwendungen und hochleitfähige elektrische Überlandleitungen, hochfeste temperaturbeständige oxiddispersionsverfestigte Stähle und seltenerdfreie Magnetwerkstoffe. Vor allem aber dient die zu entwickelnde Methodik als Grundlage für die künftige Anwendung auf jede Art von Werkstoff und Verarbeitung und kann sogar auf die Produktentwicklung ausgedehnt werden.

Folgende Hauptschwerpunkte werden in A3Red behandelt:

- Iterative Zyklen zur beschleunigten Werkstoffentwicklung, welche maschinelles Lernen mit physikalisch basierten

Werkstoffgesetzen über mehrere Längenskalen mittels modularer hybrider Modellierungsansätze kombinieren.

- KI-basierte Überbrückung von Längenskalen von der atomaren bis zur Kontinuumsebene zur Identifikation komplexer Prozess-Mikrostruktur-Eigenschafts-Beziehungen, welche die mechanischen, elektrischen und magnetischen Eigenschaften von Hochleistungswerkstoffen bestimmen.

- Innovative Ansätze für Rapid Prototyping und KI-gestützte zerstörungsfreie Mikrostrukturcharakterisierung.

- Integration in die interoperable modulare Forschungsplattform für KI-gestütztes beschleunigtes Design von Hochleistungslegierungen und exemplarische Anwendung auf die drei obgenannten Legierungsgruppen.

Die Forschungsarbeiten werden von einem komplementären, handverlesenen Konsortium durchgeführt, das sich auf wissenschaftliche Exzellenz und industrielles Know-how auf internationaler Ebene stützt, um bahnbrechende Innovationen für Hochleistungslegierungen zu ermöglichen.

A3Red wird unser Wissen über zirkuläre und nachhaltige Hochleistungslegierungen weit über den derzeitigen Stand der Technik hinaus erweitern und den Übergang zu einer verantwortungsvollen Zukunft mit KI-gestützter nachhaltiger Materialentwicklung am MCL und seinen Partnern beschleunigen.

## **Abstract**

The objective of the COMET Module A3Red is to develop an interoperable modular research platform for AI (artificial intelligence)-supported Accelerated design of Advanced high-performance Alloys with radically Reduced critical raw materials (CRM) content.

Advanced materials and associated processes make up around 20% of European and Austrian industry, but depend crucially on critical raw materials. For a resilient and sustainable industry, a radical and rapid switch to the use of secondary and non-critical raw materials is required. This requires leaving the well-trodden paths of materials engineering and developing new strategies for alloying, in particular new material families with greatly modified chemical compositions, as well as for handling of increased contents of accompanying elements introduced by secondary raw materials. Current classical material development processes are too slow and inefficient to meet this demand, as they are fragmented into individual simulation and characterization tools, machine-readable databases combining data from all available sources are missing, and the possibilities of modern AI-supported data analytics are disregarded in the decision-making process.

To position the MCL and its COMET Center for Integrated Computational Materials, Process and Product Engineering (IC-MPPE) at a pivotal point for overcoming these challenges, the COMET Module A3Red will develop an interoperable modular research platform for AI-supported accelerated design of high-performance materials with low or even zero CRM content. A3Red focuses on advanced aluminum alloys for high-strength structural applications and high-conductivity electrical overland power lines, high-strength temperature-resistant oxide dispersion strengthened (ODS) steels, and functional magnetic materials free of rare earth elements. Most notably, the methodology to be developed serves as foundation for future application to any type of material and processing, and may even be extended to product engineering.

The following main features are planned to achieve the goals of A3Red:

- Accelerated Materials Design Loops for metallic alloys with drastically reduced or zero CRM content combining data-driven machine learning approaches with multi-scale physical relations via modular hybrid modeling workflows.

- AI-based bridging of scales, from atomic to continuum, to tackle complex process-microstructure-property relations controlling mechanical, electrical, and magnetic properties in high-performance materials.
- Innovative approaches for fast prototyping, processing, and AI-supported non-destructive microstructure characterization.
- Integration into the interoperable modular research platform for AI-supported accelerated materials design and demonstration for the three prototypical alloy groups.

The research work is carried by a complementary, hand-picked consortium that draws on scientific excellence and industrial expertise at an international level to enable breakthrough discoveries and innovations for advanced alloys.

A3Red will expand our knowledge of circular and sustainable high-performance alloys far beyond the current state of the art and accelerate the transition to a responsible future with AI-supported sustainable material development at MCL and its partners.

### **Projektkoordinator**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH

### **Projektpartner**

- AMAG rolling GmbH
- MAGNA Auteca GmbH
- Österreichische Akademie der Wissenschaften
- MatCalc Engineering GmbH
- Academy of Sciences of the Czech Republic Institute of Physics of Materials (IPM)
- Universität für Weiterbildung Krems
- Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien Gesellschaft mit beschränkter Haftung
- Montanuniversität Leoben
- Miba Sinter Austria GmbH
- Technische Universität Wien
- Lumpi-Berndorf Draht- und Seilwerk GmbH
- voestalpine BÖHLER Bleche GmbH & Co KG
- TREIBACHER INDUSTRIE AG
- Pankl Racing Systems AG
- FH OÖ Forschungs & Entwicklungs GmbH