

## Study-AI4GreenMat

Study on Artificial Intelligence for supporting Green materials development

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Digitale Technologien, Digitale Technologien, AI for Green 2023	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.03.2024	<b>Projektende</b>	28.02.2025
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	12 Monate
<b>Keywords</b>	Materials development; Artificial Intelligence; Sustainability; Legal boundary conditions;		

### Projektbeschreibung

Materialien spielen eine zentrale Rolle für den Grünen Wandel, weil deren Produktion und Bearbeitung für 50% der Treibhausgasemissionen verantwortlich sind, sie gleichzeitig aber den Schlüssel zu neuen, nachhaltigeren Technologien darstellen. Deshalb gibt es einerseits einen großen Bedarf, den ökologischen Fußabdruck der derzeit genutzten Materialien zu reduzieren, und andererseits neue Materialien zu entwickeln, um die Industrie nachhaltiger und effizienter zu machen. Gleichzeitig gilt es, die Anforderung von Industrie und Wirtschaft zu erfüllen. In diesem Kontext versprechen Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) die Optimierung und Analyse von Materialien erheblich zu verbessern. Um KI-Methoden gut zum Einsatz zu bringen, muss eine Reihe von Anforderungen erfüllt werden: Eine eingehende Auswertung und formelle Beschreibung der relevanten Probleme, Datenräumen mit kuratierten, maschinen-lesbaren Daten zu technischen und ökologischen Eigenschaften zum Trainieren der KI-Modelle sowie eine passende Infrastruktur, um die KI-Methoden laufen zu lassen. Zudem müssen die rechtlichen Rahmenbedingungen neu analysiert und bewertet werden, um Aspekte wie Zulassung von Methoden und Produkten, geistiges Eigentum und Nachvollziehbarkeit der Algorithmen zu garantieren. Im vorliegenden Projekt analysieren und evaluieren wir den Status Quo der Verwendung von KI für grüne Materialentwicklung und welche Materialien als vielversprechend für grüne Anwendungen gehandelt werden. Wir analysieren und bewerten die zu lösenden Probleme im Bereich der grünen Materialentwicklung zusammen mit den verfügbaren Datenräumen. Darauf aufbauend, identifizieren wir die wichtigsten KI-Methoden in diesem Rahmen, zusammen mit deren derzeitigen Status und den zukünftigen Bedürfnissen. Zudem bewerten wir das Potential für die Generalisierbarkeit dieser KI-Methoden für unterschiedliche Forschungsbereiche und die Übertragbarkeit der Methoden auf andere Bereiche wie Pharmazie, Chemie oder Lebensmittel. Parallel dazu untersuchen wir den materialbasierten ökologischen Fußabdruck der verschiedenen österreichischen Branchen wie Energie, Mobilität, Bauwirtschaft, Elektronik, Landwirtschaft und Medizintechnik. Wir verwenden alle Ergebnisse dieses Projektes, um daraus das Potential von KI-basierter grüner Materialentwicklung für die österreichische Industrie abzuleiten. Parallel dazu gehen wir darauf ein, welche rechtlichen Rahmenbedingungen bei der KI-basierten grünen Materialentwicklung zu berücksichtigen sind, und ob es Bedarf für die Änderungen der rechtlichen Rahmenbedingungen für den Einsatz neuartiger, KI-basierter Materialien gibt. Ziel dieser Arbeit ist es schließlich, die dringlichsten Forschungsfragen zu identifizieren. Dazu unterbreiten wir Vorschläge, welche Kompetenzen aufgebaut werden müssen, um im internationalen Vergleich wettbewerbsfähig zu sein, und welche Anforderungen an die Infrastruktur sich

daraus ableiten.

## **Abstract**

Materials play a crucial role for the Green Transition, since currently as the production and processing of materials is currently responsible for 50% of greenhouse gas emissions, while at the same time advanced materials are considered to be strong enablers for new and more sustainable technologies. Thus, there is a strong demand for reducing the ecological footprint of currently used materials, and for urgently developing new materials to make industries more sustainable and efficient, while still fulfilling their needs. In this context, artificial intelligence (AI) holds promise to greatly improve the optimization and analysis of materials and processes. In order for AI to take effect, a number of requirements need to be fulfilled: A proper evaluation and formal description of the problems to be solved, dataspace with curated and machine-readable data on technical and ecological properties to train the AI models, and a suitable infrastructure for running the AI methods. Moreover, legal boundary conditions need to be reassessed in terms of the approval of methods and products, of IPRs and of transparency and reproducibility of the AI algorithms. In this work, we will address the status quo for using AI for the green development of materials and evaluate which materials are considered to be most promising for green applications. We will assess the problems to be solved for green materials development and the available dataspace. Based on them, we will identify the best suitable AI methods for materials development, together with the current status and the future needs. Moreover, we will analyze the potential for generalizing the identified AI methods for different research areas and the transferability of the methods to other domains like chemistry, pharmaceuticals or food. In parallel, we will quantify the sector-specific materials-based ecological footprint of the industrial sectors in Austria, such as energy, mobility, construction, electronics, agriculture and medical technology. All obtained results will be used to infer the potential of AI-based green materials development in the Austrian industry. In parallel, we will assess which legal boundary conditions need to be considered for AI-based green materials development, and if there is a need for changing the legal boundary conditions for the application of new materials with the help of AI. As a result of our work, we will identify the most urgent research questions to be tackled and we will give suggestions regarding competences to be built up in Austria in order to get internationally competitive, together with the requirements in terms of infrastructure.

## **Projektpartner**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH