

## 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>	abgeschlossen
<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, dataspaces 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 dataspaces. Based on them, 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, pharmaceutics or food. In parallel, we will quantify the sector-specific materials-based ecological footprint of the industrial sectors in Austria, such us 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.

## Endberichtkurzfassung

Das F&E Dienstleistungsprojekt Study-AI4GreenMat befasste sich mit der Erhebung des Status-Quo und des Potentials der Verwendung von Artificial Intelligence (AI) für die Entwicklung von grünen Materialien im Sinne von Materialien, die einen Beitrag zur Bewältigung der ökologischen Herausforderungen leisten. Dafür wurde in einem multidisziplinären Ansatz die Expertise des Materials Center Leoben im Bereich der Materialentwicklung und digitalen Materialforschung mit Expertise aus dem Bereich AI (Know-Center Research GmbH), Nachhaltigkeit (Universität für Bodenkultur, Wien) und Recht (Team von Mitarbeiter:innen des Instituts für Innovation und Digitalisierung im Recht der Universität Wien) verbunden.

Der methodische Zugang umfasste eine umfangreiche Recherche in Literatur- und Forschungsdatenbanken, eine Analyse der Klimawirksamkeit der Materialien und Branchen in Österreich, eine juristische Studie und vor allem auch die Erhebung der Situation in der industriellen und wissenschaftlichen Praxis. Dazu wurden im Anschluss an eine breit angelegte Online-Umfrage ein eintägiger Fokusgruppenworkshop, ein halbtägiges Expert:innen-Fachgespräch zum Thema Nachhaltigkeit und weiterführende Interviews zur Behandlung der daraus resultierenden Detailfragen durchgeführt. Insgesamt wurden damit Schlüssel-Expert:innen aus insgesamt 29 führenden österreichischen, europäischen und US-amerikanischen Organisationen aus den Bereichen Materialforschung, Materialentwicklung, AI und Nachhaltigkeit aktiv in die Studie eingebunden. Die

Analyse der Klimawirksamkeit der Materialien und Branchen in Österreich erfolgte durch eine Kombination von Materialflussanalyse und Lebenszyklusanalyse für die wichtigsten Materialklassen. Bei der juristischen Studie schließlich wurden Regelungen zu AI auf nationaler und EU-Ebene berücksichtigt, rechtliche Rahmenbedingungen zum Datenschutz für die Trainingsdaten für AI, sowie die rechtliche Lage in Bezug auf geistiges Eigentum bei der Verwendung von AI für die Materialentwicklung.

Die Ergebnisse der Studie beziehen sich auf alle relevanten Bereiche: Im Bereich des Einsatzes von AI für die Materialentwicklung werden die wichtigsten AI-Methoden und -Modellen beschrieben, die bereits für die Materialentwicklung eingesetzt werden, und aktuelle Trends analysiert. Dann wird das Potential von beschleunigter Entwicklung grüner Materialien nach Branchen und Materialklassen untersucht, wobei die Ergebnisse von Literaturrecherche und den verschiedenen Erhebungsmethoden mit der Analyse des österreichischen Materialfußabdrucks und der Klimawirkung kombiniert werden. Im Bereich der wichtigsten Anwendungsfälle wird aufgezeigt, wie die Verwendung von AI bei der Materialentwicklung einen Beitrag zur Bewältigung der ökologischen Herausforderungen leisten kann. Diese Anwendungsfälle werden in die Bereiche Materialentwicklung, Prozessoptimierung und direkte Berücksichtigung umweltspezifischer Daten beim Entwicklungsprozess gegliedert. Schließlich werden die relevanten rechtlichen Rahmenbedingungen für die Verwendung von AI für die Entwicklung grüner Materialentwicklung dargelegt. Dazu gehören die Regelungen für AI auf nationaler (österreichischer) und EU-Ebene (insbesondere der AI-Act), der Rechtsrahmen für den Datenschutz bei den Trainingsdaten (z.B. Datenschutzgrundverordnung, ePrivacy-Richtlinie, Data Governance Act) sowie rechtliche Regelungen in Bezug auf geistiges Eigentum, die im Zusammenhang mit der Verwendung von AI relevant sind.

Im letzten Teil der Studie werden Schlussfolgerungen gezogen und der Entwicklungsbedarf aufgezeigt, um die internationale Wettbewerbsfähigkeit Österreichs im Bereich der AI-getriebenen Entwicklung grüner Materialien zu stärken und weiter auszubauen. Dabei werden die wichtigsten Entwicklungen im Bereich der AI-Methoden behandelt, die vielversprechendsten Branchen und Materialklassen, der rechtliche Rahmen, die Infrastruktur, die dringlichsten Forschungsfragen und die nötigen Kompetenzen. Das führt abschließend zu folgenden Empfehlungen:

Förderung multidisziplinärer Projekte unter Einbindung von Materialforschung, AI, Data Sciences und Nachhaltigkeit.

Ausbau der Stellung Österreichs und internationale Vernetzung bei der AI-basierten Entwicklung von grünen Schlüsselmaterialien.

Unterstützung des Aufbaus von Materials Acceleration Platforms und Self-Driving Labs.

Weiterer Ausbau bestehender Stärkefelder und weitere Integration von AI im Bereich Materialsimulation.

Schaffung der passenden Rahmenbedingungen in Bezug auf Hardware-Infrastruktur, Forschungsdatenmanagement und kontrollierte Umgebungen für das Entwickeln, Testen und Validieren von AI-Systemen (AI sandboxes).

## Projektpartner

- Materials Center Leoben Forschung GmbH