



ICADA Naturkosmetik kompakt | 16.04.2025 11:30 Uhr – 12:15 Uhr | Online Vorhersage von Moleküleigenschaften mit maschinellem Lernen

Künstliche Intelligenz (KI) könnte die Produktentwicklung in der Kosmetikindustrie erleichtern, indem sie die Vorhersage von Moleküleigenschaften präzisiert und somit Entwicklungszeiten verkürzt.

In diesem Vortrag wurde erklärt, wie das Fraunhofer IVV mit Maschinellem Lernen (ML) innovative Lösungen entwickelt und welche Chancen und Herausforderungen diese Technologien mit sich bringen.

Formulierungsoptimierung

Durch die Nutzung von maschinellem Lernen kann das Fraunhofer IVV große Mengen historischer Formulierungsdaten analysieren, um Muster zu erkennen, die zu erfolgreichen kosmetischen Produkten führen. Algorithmen können Inhaltsstoffkombinationen vorschlagen, die Hautverträglichkeit, Duft oder Textur verbessern.

Sensorische Analyse

KI-Systeme verarbeiten umfangreiche sensorische Daten und entwickeln Modelle, die die Wahrnehmung von kosmetischen Produkten durch Konsumenten vorhersagen. Diese Technologie hilft dabei, sensorische Eigenschaften wie Duft, Farbe und Textur zu optimieren, um den Erwartungen der Verbraucher gerecht zu werden und Produkte besser auf Zielgruppen abzustimmen.

Nachhaltigkeit & Effizienz

Maschinelles Lernen wird in der Produktionsüberwachung eingesetzt, um Echtzeitdaten zu analysieren und Anomalien frühzeitig zu erkennen. Dies sichert die Konsistenz und Qualität der Produkte, reduziert Ausschuss und erhöht die Effizienz der Herstellung, was zu Kosteneinsparungen führt.

Herausforderungen

Die Nutzung von maschinellem Lernen in der kosmetischen Produktentwicklung erfordert hochwertige, umfassende Datensätze, deren Qualität und Vollständigkeit oft schwer zu gewährleisten sind, und die Ergebnisse sind für den Anwender nicht immer leicht nachvollziehbar.

Das Fraunhofer IVV vereint ein breites Spektrum an Fachwissen, das von Verarbeitungsmaschinen über Verpackung, Recycling und Umwelt bis hin zu verschiedenen Konsumgütern und deren Produktwirkung reicht. In der Abteilung Sensorische Analytik und Technologien wird umfassendes Fachwissen genutzt, um Produktwirkung zu digitalisieren und statistische Systeme für die Entscheidungsunterstützung zu entwickeln.

Kontaktieren Sie uns:

Dr. Andreas Grasskamp

Wissenschaftler
Sensorische Analytik & Technologien
Tel. +49 8161 491 162
andreas.grasskamp@ivv.fraunhofer.de
<https://www.ivv.fraunhofer.de/>



Relevante Veröffentlichungen:

Singh S, Schicker D, Haug H et al. (2024) Odor prediction of whiskies based on their molecular composition. *Commun Chem* 7:293. <https://doi.org/10.1038/s42004-024-01373-2>
Singh S, Zeh G, Freiherr J et al. (2024) Classification of substances by health hazard using deep neural networks and molecular electron densities. *J Cheminform* 16. <https://doi.org/10.1186/s13321-024-00835-y>
Grasskamp AT, Singh S, Haug H et al. (2023) Assisting the automated analysis of chemical-analytical measurements in spirits using validated algorithms and an intuitive user interface. *Journal of sensors and sensor systems* 12:93–101. <https://doi.org/10.5194/jsss-12-93-2023>
Haug H, Grasskamp AT, Singh S et al. (2023) Quick insights into whisky — investigating rapid and efficient methods for sensory evaluation and chemical analysis. *Analytical and bioanalytical chemistry* 415:6091–6106. <https://doi.org/10.1007/s00216-023-04883-5>
Schicker D, Singh S, Freiherr J et al. (2023) OWSum: algorithmic odor prediction and insight into structure-odor relationships. *J Cheminform* 15:51. <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00722-y>