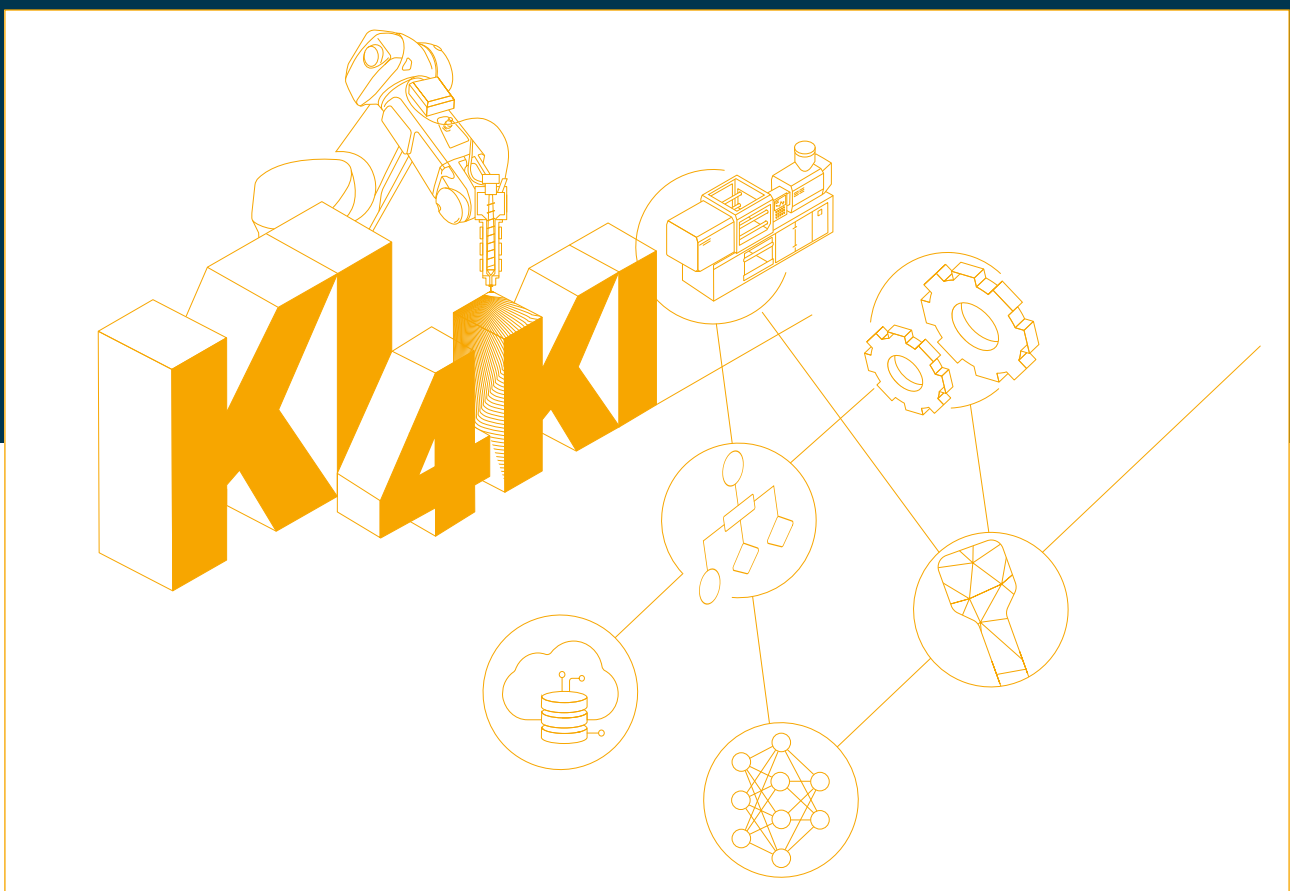


KI-basierte Rezepturenentwicklung

Rezepturen für beliebige Lastenhefte

Schnelle, zielgerichtete Rezepturenentwicklung für Kunststoff-compounds mit KI. Dieses Whitepaper zeigt, wie hybride Modelle aus Erfahrungswissen, klassischen Mischungsregeln und Machine-Learning Ansätzen komplexe Zusammenhänge zwischen Rezeptur und Eigenschaften zuverlässig und prozessgerecht abbilden. Anhand eines praxisnahen Use-Cases wird demonstriert, wie sich alternative Rezepturen effizient identifizieren, laborseitig validieren und direkt im Spritzgießprozess einsetzen lassen ohne Anpassung der Maschineneinstellungen im Prozess vornehmen zu müssen.



KI4KI – AI for the Plastics Industry

Abstract

Die Entwicklung leistungsfähiger Kunststoffcompounds erfordert präzise Vorhersagen der Materialeigenschaften auf Basis variabler Rezepturen. Ein hybrider Modellierungsansatz kombiniert etablierte Mischungsregeln mit Methoden des maschinellen Lernens, um sowohl mechanische als auch rheologische Eigenschaften zuverlässig zu prognostizieren. Vor der Optimierung wird geprüft, ob das Zielcompound mit den gewählten Komponenten und deren Anteilsspannen überhaupt darstellbar ist. Danach ermöglichen genetische Algorithmen die gezielte Rezepturanpassung. Drei entwickelte Rezepturen wurden experimentell validiert und im Spritzgießprozess erfolgreich verarbeitet. Das Vorgehen erlaubt eine effiziente, praxisnahe Rezepturentwicklung.

Problemstellung

Die Entwicklung neuer Kunststoffrezepturen sowie die Optimierung bestehender Compounds stellt eine anspruchsvolle Aufgabe dar, die mit zahlreichen Herausforderungen verbunden ist. Moderne Kunststoffcompounds müssen ein breites Spektrum an Anforderungen gleichzeitig erfüllen. Hierunter fallen beispielsweise Lastenhefte mit zahlreichen mechanischen und rheologischen Anforderungen bis hin zu spezifischen Kriterien wie Farb- und UV-Stabilität.

Um diese vielfältigen Ziele zu erreichen, werden unterschiedliche Polymere, Füllstoffe und Additive kombiniert. Dabei wirken diese Komponenten nicht nur isoliert auf einzelne Eigenschaften, sondern treten häufig in komplexe Wechselwirkungen zueinander, was eine präzise Vorhersage ihrer Effekte erheblich erschwert. In der industriellen Praxis erfolgt die Entwicklung neuer Rezepturen oftmals über iterative Versuchsreihen. Dieses Vorgehen ist jedoch sowohl zeit- als auch kostenintensiv und häufig stark abhängig von dem Erfahrungs-

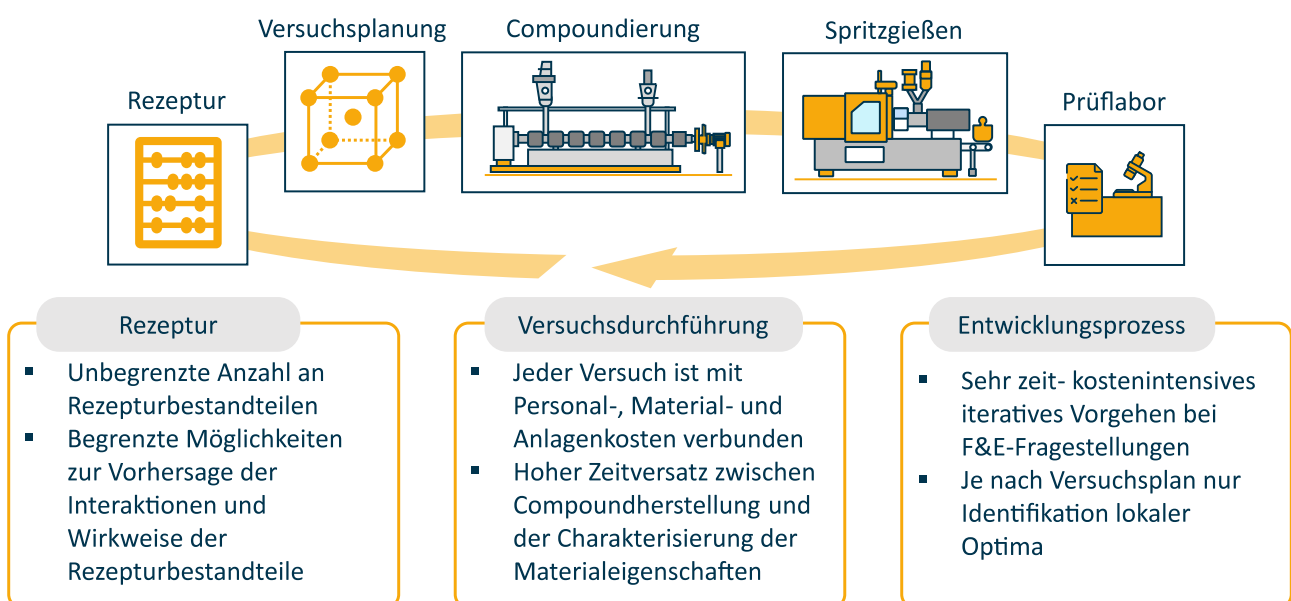


Abb. 1: Bei der Entwicklung neuer Rezepturen für Kunststoffcompounds gilt es eine Reihe an Herausforderungen zu bewältigen. Zum einen ist die Auswahl der Rezepturkomponenten nahezu endlos und deren Wechselwirkungen sind teilweise schwer vorherzusehen. Zeit- und kostenintensive praktische Versuche in mehreren Iterationsschleifen stellen hierüber hinaus eine weitere Schwierigkeit dar.

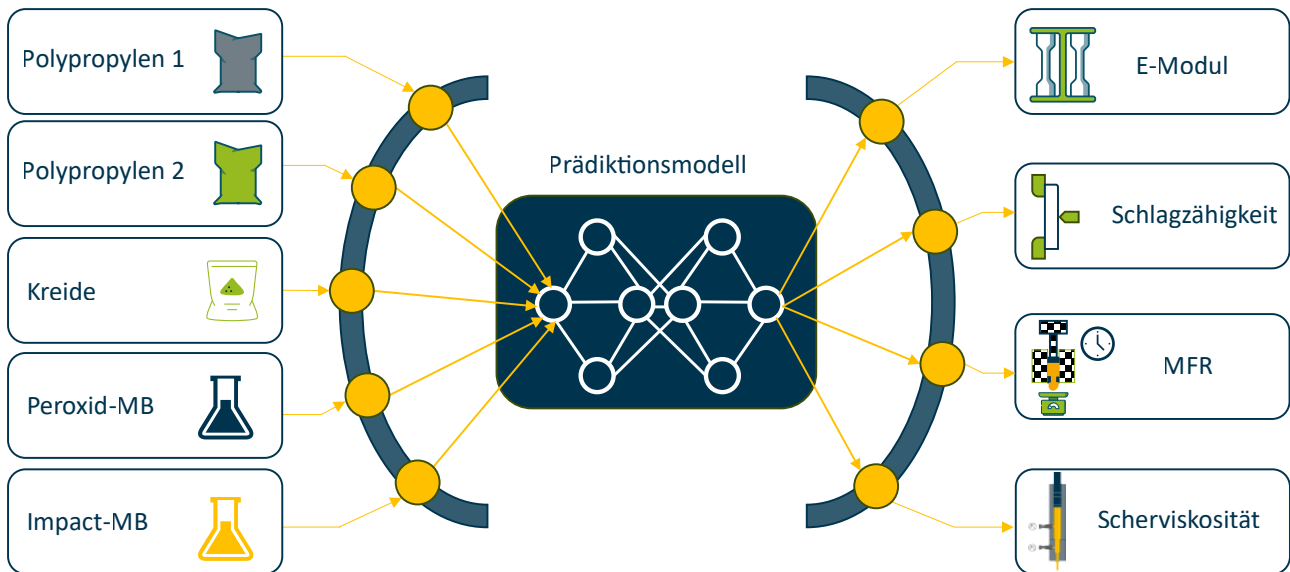


Abb. 2: Am IKV wurde eine innovative Modellierungsmethodik entwickelt, bei der klassisches Erfahrungswissen und etablierte Mischregeln mit KI-Modellen kombiniert werden. Für ein Fallbeispiel einer Polypropylen-Rezeptur können damit die mechanischen und rheologischen Eigenschaften der Compounds präzise vorhergesagt werden.

wissen der entsprechenden Mitarbeiter. Darüber hinaus ergibt sich bei dem in Zukunft stetig steigenden Einsatz von Rezyklaten mit schwankenden Eigenschaftsprofilen die Schwierigkeit, bestehende Rezepturen kurzfristig zu adaptieren, um für die nachfolgenden Verarbeitungsprozesse oder die Endanwendung gleichbleibende Eigenschaften gewährleisten zu können. Hierfür ist eine systematische und effiziente Herangehensweise an die Rezepturentwicklung entscheidend, um schnell reagieren zu können und marktfähige Kunststoffcompounds herzustellen.

Modellbasierte Vorhersage der Compouneigenschaften

Um neue Compounds zielgerichtet entwickeln zu können, ist zunächst ein belastbares Vorhersagemodell erforderlich. Dieses muss ausgehend von beliebigen Variationen der Rezepturbestandteile die resultierenden Eigenschaften präzise prognostizieren. Im Rahmen des vom BMFTR geförderten Projekts „KIOptiPack“ wurde ein neuartiger Modellierungsansatz für die Vorhersage der Eigenschaften

von Polypropylen-Compounds entwickelt. Dabei werden verschiedene Polypropylentypen, Kreide als mineralischer Füllstoff sowie Additive, beispielsweise Peroxid zur Anpassung der Fließfähigkeit oder Kerbschlagmodifikatoren zur gezielten Erhöhung der Zähigkeit, als Rezepturkomponenten betrachtet. Mithilfe des neuartigen Modellierungsansatzes lassen sich sowohl mechanische Eigenschaften wie E-Modul und Schlagzähigkeit als auch rheologische Kennwerte wie der MFR-Wert und die Scherviskositätskurve vorhersagen. Der zugrunde liegende Modellierungsansatz kombiniert am IKV entwickelte hybride Modelle, die etablierte Mischungsregeln mit maschinellen Lernmethoden (ML) verknüpfen. Dadurch lassen sich sowohl lineare als auch komplexe, nichtlineare Zusammenhänge zwischen Rezeptur und Zielgröße abbilden. Ein wesentlicher Vorteil dieses Ansatzes liegt in seiner hohen Flexibilität. Die Modelle können unkompliziert um zusätzliche Rezepturbestandteile oder Zielgrößen erweitert werden. Dadurch ist eine schnelle Anpassung an neue Markt- und Kundenanforderungen möglich und die Entwicklung maßgeschneiderter Compounds wird erheblich beschleunigt.

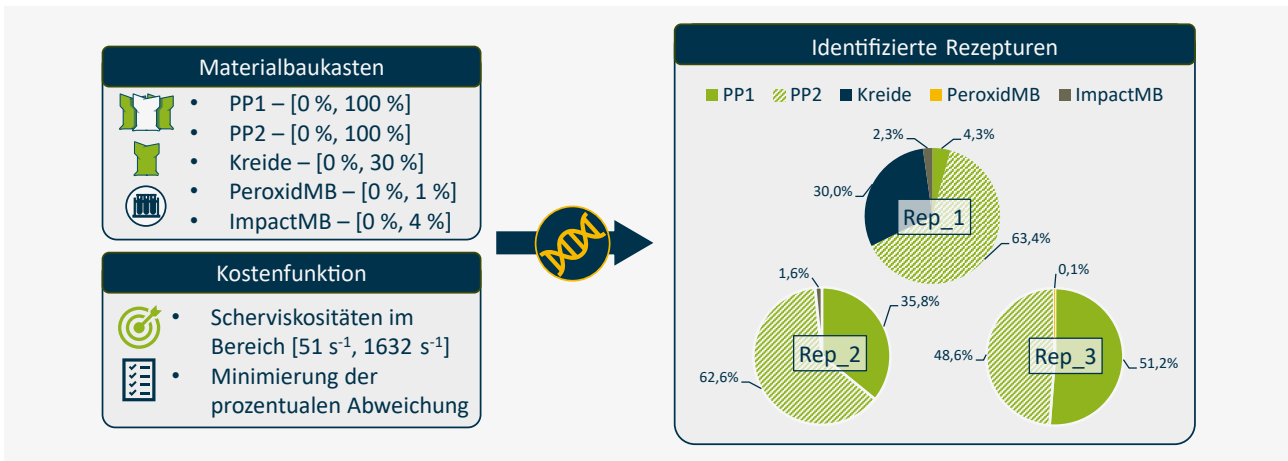


Abb. 3: Für den Use-Case am IKV mit der charakterisierten Scherviskositätskurve des Referenzmaterials wurden mithilfe von genetischen Algorithmen drei unterschiedliche Rezepturen identifiziert, die gemäß Vorhersagemodell dieselbe Viskosität aufweisen.

Use Case am IKV

Mithilfe der entwickelten Modelle zur Vorhersage der Compouneigenschaften können im nächsten Schritt nun praxisnah neue Rezepturen abgeleitet werden. Als praxisnaher Use-Case für diesen Ansatz wird ein kommerziell verfügbares PP-Compound mit Kerbschlagmodifikation und Talkum als Füllstoff als Referenz nachgestellt. Als Zielgröße für die Nachbildung dient hierbei die Scherviskositätskurve bei $230 \text{ }^\circ\text{C}$, die im Hochdruckkapillarrheometer gemessen wird. Bevor alternative Rezepturen abgeleitet werden können, muss zunächst sichergestellt werden, dass das Zielcompound grundsätzlich mit den einzelnen Rezepturbestandteilen und deren Maximal- und Minimalanteilen abgebildet werden kann, da andernfalls zwar theoretisch valide Rezepturen gefunden werden können, die aber in der Praxis nicht compounding werden können. Für die Scherviskositätskurve des Referenzmaterials besteht diese Gefahr jedoch nicht, da mit den für das Vorhersagemodell hergestellten und charakterisierten Rezepturen sowohl höhere als auch niedrigere Viskositäten erzielt werden konnten.

Zur Identifikation neuer Rezepturen werden genetische Algorithmen eingesetzt, die gekoppelt mit dem Vorhersagemodell iterativ Rezepturvorschläge

erzeugen und deren Eignung über eine Kostenfunktion bewerten. Im dargestellten Use-Case wird dabei gezielt die relative Abweichung der mit dem Modell vorhergesagten Scherviskosität zur Referenz minimiert. Das Verfahren erlaubt es jedoch ebenso, zusätzliche Zielgrößen wie eine Kostenminimierung der Rezepturbestandteile oder eine möglichst geringe Anzahl eingesetzter Rezepturkomponenten in die Optimierung einzubeziehen. So werden drei teils grundlegend unterschiedliche Rezepturen identifiziert, die das gewünschte Eigenschaftsprofil erfüllen. Diese Rezepturen werden anschließend auf einer Doppelschneckenextrusionsanlage hergestellt und im Folgenden validiert.

Praxisvalidierung der neuen Rezepturen im Spritzgießen

Nach der Herstellung der drei Compounds mit den zuvor identifizierten Rezepturen erfolgt zunächst ihre Charakterisierung im Labor. Unter identischen Prüfbedingungen werden die Scherviskositäten im Hochdruckkapillarrheometer gemessen. Die ermittelten Abweichungen gegenüber der Zielrezeptur betragen dabei im Mittel $5,05 \%$, $7,78 \%$ und $1,32 \%$. Da diese Werte im Bereich der Messunsicherheit des Verfahrens liegen, kann insbesondere für

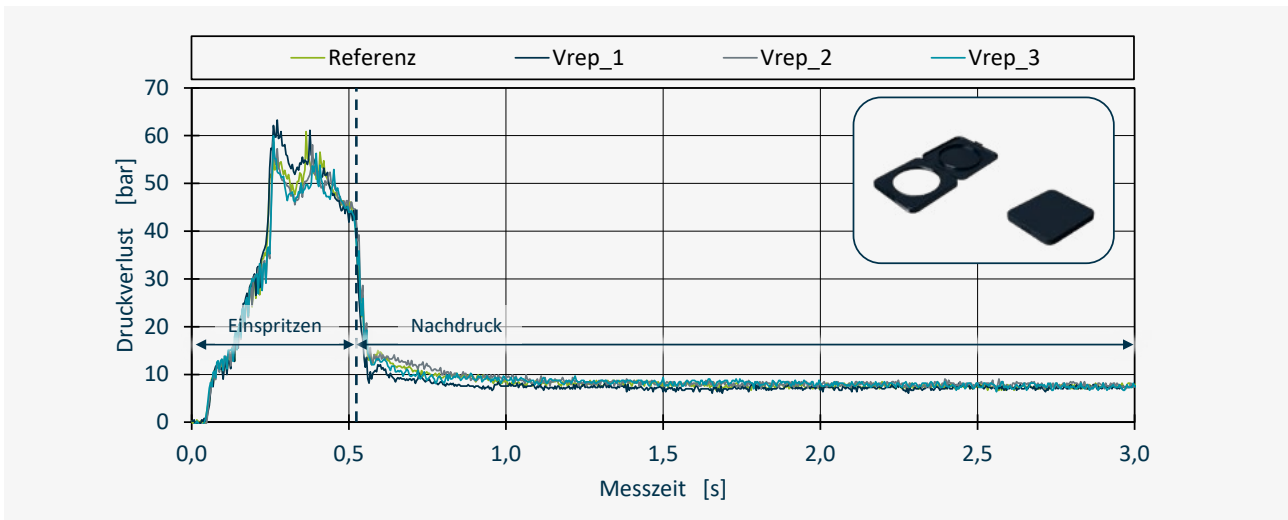


Abb. 4: Anhand der im Heißkanal aufgezeichneten Druckverluste für das Referenzmaterial und die nachgestellten Rezepturen ist ersichtlich, dass die nachgestellten Rezepturen qualitativ denselben Druckverlauf aufweisen. Hervorzuheben ist hierbei vor allem, dass keinerlei Anpassung der Maschineneinstellung notwendig ist, um kontinuierlich Formteile mit gleichbleibender Qualität herzustellen.

die Rezeptur mit nur 1,32 % Abweichung die hohe Prognosegüte und Praxistauglichkeit des entwickelten KI-gestützten Ansatzes belegt werden. Im Anschluss an die Laboruntersuchungen werden die nachgestellten Rezepturen abschließend im realen Prozess validiert. Dazu wird auf einer Arburg All-rounder 520 A zunächst der Spritzgießprozess mit dem Referenzmaterial optimiert, um dünnwandige Deckel mit Filmscharnier, wie sie beispielsweise für Joghurtbecher verwendet werden, in hoher Qualität herzustellen. Über Drucksensoren im Heißkanal wird dabei die Druckdifferenz im Werkzeug erfasst. Nach der optimierten Prozesseinstellung werden die drei neu entwickelten Compounds ohne jegliche Anpassung der Maschineneinstellungen sukzessive nacheinander verarbeitet. Die dabei aufgezeichneten Druckkurven zeigen, dass alle drei Rezepturen vergleichbare Füll- und Nachdruckverläufe wie das Referenzmaterial aufweisen. Zudem werden die Formteile vollständig ausgeformt und weisen keine Defekte oder unvollständige Formfüllung auf. Damit ist die entwickelte Methodik zur KI-gestützten Rezepturentwicklung sowohl im Labor als auch im realen Fertigungsprozess erfolgreich verifiziert und eröffnet neue Möglichkeiten

für eine schnelle, zielgerichtete Entwicklung und Anpassung von Kunststoffcompounds.

Zusammenfassung

Die Rezepturentwicklung kann durch den gezielten Einsatz von KI-Methodiken beschleunigt werden und vielfältige Randbedingungen wie beispielsweise gleichzeitige Minimierung von Kosten sowie Erzielung definierter Compouneigenschaften lassen sich realisieren.

Im dargestellten Anwendungsbeispiel können für ein vorgegebenes und hinsichtlich der Scherviskosität charakterisiertes Compound drei neue Rezepturen identifiziert und hergestellt werden, die sowohl in der Labormessung als auch in der praktischen Validierung für ein anwendungsnahes Szenario im Spritzgießen in der Lage sind das Ausgangsmaterial zu replizieren.

Neben diesem Anwendungsbeispiel für die Viskosität ist die dargestellte Methodik für beliebige Randbedingungen und eine Vielzahl an Compouneigenschaften anwendbar. Speziell für den Anwendungsfall im Bereich PP können beispielsweise auch die mechanischen Eigenschaften in der Rezepturentwicklung berücksichtigt werden.

KI4KI-Projekt

Das IKV verfügt über langjährige Erfahrung in der Anwendung von Methoden der Künstlichen Intelligenz und Digitalisierung in der Kunststofftechnik und untersucht, wie diese gezielt eingesetzt werden können, um der Kunststoffindustrie nachhaltige Wettbewerbsvorteile zu erschließen. Die aktuelle Whitepaper-Serie gibt Einblicke in laufende Forschungsprojekte und zeigt praxisnahe Ansätze für Unternehmen.

Das Projekt KI4KI – Künstliche Intelligenz für die Kunststoffindustrie verstehen und nutzen greift dieses Potenzial systematisch auf. Im Fokus steht der Einsatz moderner KI-Methoden – wie etwa in-vertierbarer neuronaler Netze – zur datenbasierten Auswahl und Optimierung von Prozessparametern in kunststofftechnischen Anwendungen. Ziel des Projekts „KI4KI - Künstliche Intelligenz für die Kunststoffindustrie verstehen und nutzen“ ist es, Unternehmen aus der Kunststoffindustrie systematisch in die Lage zu versetzen, Potenziale der Digitalisierung und Künstlichen Intelligenz (KI) zu erkennen, systematisch zu bewerten und gezielt

für ihre Produktentwicklungs- und Produktionsprozesse nutzbar zu machen. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf der KI-gestützten Optimierung des Produktentwicklungsprozesses, zum Beispiel durch virtuelle Auslegung, simulationsbasierte Methoden und datengetriebene Erweiterungen. Letztere ermöglichen es, klassische Simulationsansätze durch lernfähige Modelle anzureichern, Unsicherheiten zu reduzieren und Vorhersagen unter realen Betriebsbedingungen zu verbessern. Ebenso im Fokus steht die Effizienzsteigerung und Qualitätsverbesserung in der Produktion, unter anderem durch prädiktive Wartung, automatisierte Qualitätsüberwachung oder datenbasiertes Prozessmonitoring. Ergänzend werden Querschnittsthemen wie Datenmanagement, regulatorische Anforderungen, Datensouveränität und ethische Aspekte adressiert. Damit unterstützt das Projekt nicht nur die kurzfristige Anwendung von KI-Methoden, sondern auch die strategische Positionierung der beteiligten Unternehmen im digitalen Transformationsprozess.

Bedarfs- & Marktanalyse



1

- Status- und Bedarfsanalyse über Interviews
- Interdisziplinäre Netzwerkbildung – 4 Präsenztreffen

KICK-OFF
ENDE 2025

Verstehen



2

- 7 Expertentalks
- Dokumentation mit praxisnahem Grundlagenwissen

Den Einsatz von KI ganzheitlich denken – Nutzen Sie KI als Wachstumstreiber Ihrer Wertschöpfung

Wir betrachten alle Schlüsselbereiche der KI-Anwendungen
in der Kunststoffproduktwertschöpfungskette



Schnellere Time-2-Market-Zeiten

KI-gestützte
Produktauslegung mittels
datengetriebenem
Anforderungsmanagement
sowie Simulationen +
Optimierungen



Material- und Energie- verbrauchsreduktion

Integrative Material- und
Prozessentwicklung sowie
deren Energieoptimierung
mittels KI



Fachkräftemangel und Wissensverlust

KI-Chatbots und
Expertensystem zum
Wissensmanagement



Hohe Prüfkosten & lange Testphasen

Virtuelle Versuchsplanung
und digitale Zwillinge



Lieferengpässe und volatile Bedarfe

Assistierende
Prognosemodelle für
Lieferketten und Nachfrage
der Kunden



Mangelhafte Produktqualität & Ausschussreduktion

KI-basierte
Qualitätsüberwachung &
Anomaliedetektion sowie
Simulationen +
Optimierungen



Ineffizientes Recyclingstrategien

KI-gestützte
Sortieralgorithmen und
aktive Prozesssteuerung zur
Rezyklatverarbeitung



Stillstände und hohe Wartungskosten

Prädiktive Wartung mittels
maschinellen Lernens

Ermöglichen



3

- 3 interaktive Workshops zur KI-Implentierung
- Potenzialübersicht mit Kompetenzkarten & Technologiematrizen

Anwenden



4

- Individuelle bilaterale Beratung
- 3 konkrete Technologie-demonstration

ABSCHLUSS
ENDE 2026

Ihr Experte für Künstliche Intelligenz und Digitalisierung



Lukas Seifert

Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Rezeptentwicklung/ Soft-Sensorik

+49 241 80-28354
ki4ki@ikv.rwth-aachen.de



Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV)
in Industrie und Handwerk an der RWTH Aachen
Seffenter Weg 201 | 52074 Aachen