

## Digitalisierung

# Kreativ per Mausklick

Im Juni kam in Brasilien das erste Parfüm auf den Markt, das vollständig von einer Künstlichen Intelligenz entwickelt wurde. Das Computersystem kombinierte Inhaltsstoffe in einer Art, an die ein Mensch zuvor nicht gedacht hatte.



Parfümeur David Apel von Symrise stellt ein Parfüm zusammen. Der Bildschirm zeigt den Vorschlag der Künstlichen Intelligenz Philyra.  
Foto: IBM Research

Die Künstliche Intelligenz (KI) für Parfüm heißt Philyra und entstand in einer Kooperation zwischen IBM Research und dem Duftstoffhersteller Symrise.<sup>1)</sup> Das System ist ein Netzwerk aus künstlichen Neuronen, erschaffen, um große Mengen Daten zu speichern, zu verarbeiten und neu zu kombinieren. Es hat weder Bewusstsein noch Geschlecht, kann nicht riechen. Aber die KI kennt die Zusammensetzung von fast 1,7 Millionen Parfüms und weiß, in welchem Land, bei welcher Altersgruppe und bei welchem Geschlecht sich ein Duft besonders gut verkauft hat. Vor allem spuckt sie auf Knopfdruck neue Kreationen aus.

### Die Bibliothek der Düfte

„Ich habe Philyra trainiert, und jetzt trainiert sie mich“, sagt David Apel, Parfümeur bei Symrise in New York mit mehr als 39 Jahren Berufserfahrung. „Sie zeigt mir Formulierungen, auf die ich selbst nie gekommen wäre.“ Wie alle Experten sei er bei seiner kreativen Arbeit durch sein Wissen eingeschränkt, sagt er. „Ich bevorzuge bestimmte Inhaltsstoffe und strebe eine bestimmte Art von Duft an, den ich machen will.“ Philyra geht unvoreingenommen ans Werk.

Eine Duftformel sei ein präzises Rezept mit Mengenangaben im ppm- oder Zehntel-ppm-Bereich, sagt Apel, der während seiner Aus-

bildung auch Chemie studiert hat. Etwa 1300 Ausgangsstoffe, Duftbausteine genannt, stehen einem Parfümeur zur Verfügung.

Die Parfüm-Ausgangsmaterialien sind teils synthetische Duftstoffe wie Citronellol, Cumarin und Linalylacetat, teils Extrakte aus zum Beispiel Blüten, Früchten, Moosen und Gewürzen. Ein Parfümeur kombiniert mehrere Inhaltsstoffe, verändert die Konzentrationen und passt die Formel zusammen mit seinen Labormitarbeitern so lange an, bis ein neuer und gefälliger Duft herauskommt.

Durch maschinelles Lernen hat die KI – basierend auf einer Datenbank von knapp 1,7 Mio. Parfümformeln aus dem Symrise-Archiv –

herausgefunden, wie sich die Inhaltsstoffe kombinieren lassen. Joana Maria, Wissenschaftlerin bei IBM Research und an Philyras Entwicklung beteiligt, sagt: „Sie hat gelernt, was sich gut womit verträgt, welcher Inhaltsstoff sich durch welchen ersetzen lässt und welche Kombinationen besser in den USA oder in Asien ankommen.“

Stellt man Philyra eine Aufgabe – zum Beispiel: „Entwickle ein fruchtiges Parfüm für junge Frauen in Deutschland“ –, spuckt sie zwölf Zusammensetzungen für Parfüms aus, die ihrer Ansicht nach passend sind und die es auf dem Markt bisher nicht gibt. Ein Parfümeur wie Apel kann diese Mischungen anschließend verfeinern oder verwerfen.

Für Achim Daub, Vorstand Scent & Care bei Symrise, ist der KI-Einsatz die zweite Revolution im Parfümgeschäft; die erste war das Aufkommen synthetischer Duftstoffe. Dass Philyra nicht riechen kann, sei kein Hindernis, sagt er. „Der Parfümeur, der mich damals anlernte, sagte mir: ‚Ich weiß, wie ein Parfüm riecht, wenn ich die Zusammensetzung sehe.‘ Genau das macht Philyra auch.“

## Tag der Verliebten

Die brasilianische Kosmetikfirma O Boticário brachte zum Dia dos Namorados, dem brasilianischen Valentinstag am 12. Juni, ein Parfüm auf den Markt, das Symrise mit Philyra entwickelt hatte. O Boticário hatte bei Symrise drei Versionen des Parfüms in Auftrag gegeben: eine komplett von der KI entwickelte, eine zweite, bei der der Parfümeur Anpassungen vornahm, und eine dritte, bei der der Vorschlag der KI dem Parfümeur nur als Anregung diente. Eine Jury bei O Boticário wählte den Duft aus, der am besten gefiel, ohne zu wissen, welche Version welche war. „Die überwältigende Mehrheit entschied sich dabei für das zu

100 Prozent KI-gemachte Parfüm“, berichtet Achim Daub.

Apel kennt Ausgangsmaterialien in Wachs-, Harz- oder Kristallform, die sich nicht ohne weiteres lösen. Aber noch nie habe Philyra eine Formel vorgeschlagen, mit der Substanzen ausfallen. Sie hat das Prinzip der Löslichkeit offensichtlich begriffen, indem sie die bereits bestehenden Formeln miteinander verglich.

Eine Sache muss Philyra allerdings noch lernen: „Es gibt Inhaltsstoffe, die in Kombination mit bestimmten anderen Inhaltsstoffen zu Farbveränderungen oder zum Ausbleichen führen“, erklärt Apel. „Und bisher haben wir Philyra nicht darauf trainiert, Parfüms im Hinblick auf ihre Haltbarkeit zu entwerfen.“ Das ist womöglich ein Ziel für die Zukunft.

## Für Wurst und MOFs

Künstliche Intelligenz, die basierend auf einer Datenbank neue Kombinationen vorschlägt, hilft nicht nur im Parfümgeschäft. Der US-Gewürzhersteller McCormick beispielsweise entwickelt mit einer KI von IBM Aromen und Geschmacksrichtungen. Auf diesen Arbeiten basiert McCormicks neue Produktfamilie namens „One“ zum Würzen von Hähnchen, Schweinefilet und Wurst.<sup>2)</sup>

Künstliche Intelligenz ist dabei, auch die Materialwissenschaften umzukrempeln. Egal ob Supraleiter, metallorganische Gerüstverbindungen (metal-organic frameworks, MOFs) oder Ferromagnetika – statt per Glückstreffer auf neue Materialien zu stoßen und dann ihre Eigenschaften im Labor zu messen, können Forscher mit Methoden des maschinellen Lernens Kandidatenbibliotheken entwerfen lassen.

Sogar missglückte Experimente fließen in solche Datenbanken ein, berichteten im Jahr 2016 US-Forscher vom Haverford College in der Zeitschrift *Nature*.<sup>3)</sup> Sie hatten

eine KI entwickelt, die hydrothermale Synthesen für anorganisch-organische Hybridmaterialien vorschlägt, etwa für metallorganische MOFs und für halogenkohlenwasserstoffhaltige Perowskite.

Aus den Tausenden von Vorschlägen für neue Materialien, die eine solche KI liefert, wählen Wissenschaftler dann die aus, die realistisch sind und für die Anwendung angemessen. Praktischerweise sagt das System die Eigenschaften der Verbindungen mit voraus, etwa ob sie Leiter sind oder Isolatoren, magnetisch oder nicht.

Mehrere Datenbanken solcher potenzieller Materialien, entworfen von KI, sind öffentlich zugänglich und nutzbar, etwa Materials Cloud.<sup>4)</sup> Die vermutlich größte ist Aflowlib: Sie umfasst angeblich mehr als 2,8 Mio. berechneten Eigenschaften.<sup>5)</sup> <<

Die promovierte Chemikerin **Brigitte Osterath** arbeitet als Wissenschaftsjournalistin in Bonn.

- 1) R. Goodwin, J. Maria, P. Das, R. Horesh, R. Segal, J. Fu, C. Harris, AI for Fragrance Design, NIPS 2017
- 2) <https://newsroom.ibm.com/2019-02-04-McCormick-Company-and-IBM-Announce-Collaboration-Pioneering-the-Use-of-Artificial-Intelligence-in-Flavor-and-Food-Product-Development>
- 3) P. Raccuglia, K. C. Elbert, P. D. F. Adler et al, *Nature* 2016, 533, 73
- 4) [www.materialsclooud.org](http://www.materialsclooud.org)
- 5) <http://aflowlib.org/>

## AUF EINEN BLICK

Ein neuronales Netzwerk speichert, verarbeitet und kombiniert große Datenmengen.

Mit Beispieldaten zur Zusammensetzung von Parfüms und deren Verkaufsstatistiken entstand ein System, das neue Duftrezepte berechnet.

Ähnliche Systeme, Künstliche Intelligenz genannt, haben zudem Datenbanken entwickelt, die öffentlich zugänglich sind und beispielsweise neue Materialien enthalten.