

# Flüssig zu trocken: Wie KI Farbspektren voraussagt



Quelle: WULANING - stock.adobe.com, generiert mit KI

**FLÜSSIGFARBMESSUNG** // DIE FARBMESSUNG VON FLÜSSIGEN LACKEN BIETET DIE MÖGLICHKEIT EINER BESCHLEUNIGTEN REZEPTURENTWICKLUNG VON FARBEN. DIE ABWEICHUNG ZWISCHEN FLÜSSIG- UND TROCKENFARBTON STELLT JEDOCH SELTEN NUR EINE EINFACHE VERSCHIEBUNG BEISPIELSWEISE VON HELL ZU DUNKEL DAR. EINE KI-MODELLIERUNG KANN FÜR DIE KOMPLEXEN ZUSAMMENHÄNGE ZWISCHEN DEN FARBSPEKTREN TRAINIERT UND SO VORHERSAGEN FÜR NEUE FÄLLE GETROFFEN WERDEN.

Gaoyuan Zhang, Hochschule Niederrhein, Oliver Korten, Orontec, und Prof. Christian Schmitz, Hochschule Niederrhein

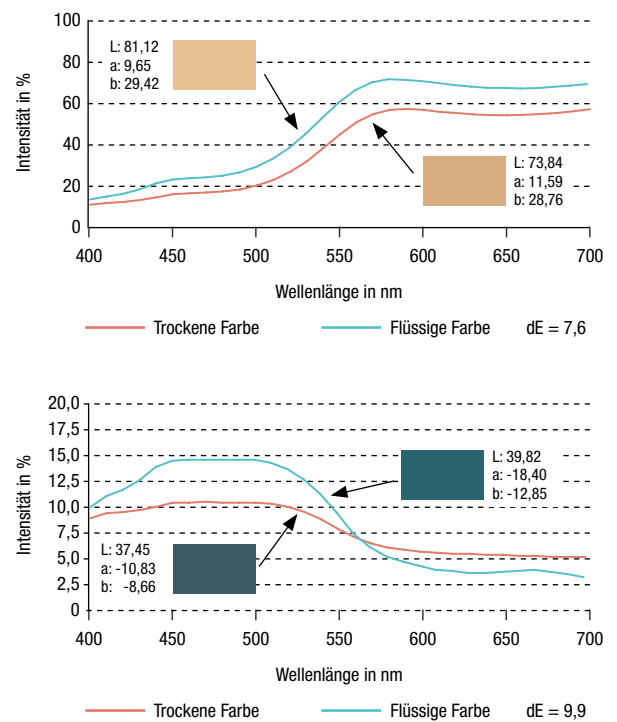
In der Beschichtungsindustrie ist die Farbtönnachstellung ein grundlegender Prozess, der traditionell im gehärteten Zustand des applizierten Lacks erfolgt. Das Nuancieren zur Produktkontrolle oder bei der Farbtonentwicklung ist somit ein zeit- und kostenintensiver Schritt, welcher durch die Farbmessung des flüssigen Materials deutlich beschleunigt werden kann. Dieser Ansatz bringt jedoch eine erhebliche Herausforderung mit sich: Die Farbe einer Beschichtung ändert sich während des Trocknens teils signifikant. Diese Transformation ist das Ergebnis eines komplexen Zusammenspiels chemischer und physikalischer Prozesse, wie etwa der Änderung des Brechungsindex und der Verlust von Liganden bei bestimmten Pigmenten [1]. Anhand von Reflektionsspektren verdeutlicht *Abb. 1* Unterschiede, welche durch das Trocknen auftreten können.

### Die Herausforderung der Farbvorsage

Da Farbdifferenzen ähnlicher Mischungen für die beiden Materialzustände gut korrelieren, ist der Einsatz der Flüssigfarbmessung bei der Qualitätssicherung einzelner Farbtöne unkompliziert, wenn der Bezug ebenfalls als Flüssigfarbmessung vorliegt. Mit dem ersten Produktionsbatch sind in der Regel Flüssig- und Trockenfarbton bekannt und der Zusammenhang direkt überprüfbar. Herausforderungen bestehen jedoch bei den Flüssig-zu-trocken-Farbunterschieden eines gesamten Mischlacksystems.

Die spektrale Modellierung des gesamten Farbraums, beispielsweise der darstellbaren Farbtöne eines Mischlacksystems, erfordert die Vorhersage nichtlinearer Eigenschaften [2]. Der Vergleich der beiden Farbtöne in *Abb. 1* offenbart markante spektrale Verschiebungen zwischen der Messung im flüssigen und im getrockneten Zustand, die maßgeblich vom Farbort und der verwendeten Farbrezeptur abhängen. Die Aufgabenstellung, diese Verschiebungen vorherzusagen, ist deutlich herausfordernder. Ihre Lösung bietet vor allem Vorteile für die Farbtonentwicklung. Durch den Entwicklungsprozess in der flüssigen Phase kann die notwendige Dauer pro Tönschritt von wenigen Stunden auf einige Minuten reduziert werden. Auch Aufgaben im Zusammenhang mit einem Rohstoffaustausch oder der Qualifizierung neuer Rohstoffe können erheblich beschleunigt werden. In unserer vorherigen Veröffentlichung [3] wurde gezeigt, dass sich die  $L^*a^*b^*$ -Werte (DIN 990) der getrockneten Proben auf Grundlage der Rezepturen der Farbmischungen in Kombination mit den Farbwerten der Flüssigfarbmessung durch KI-Modelle vorhersagen lassen. Aufgrund der inhärenten Komplexität des Farbsehens reicht das Mapping der  $L^*a^*b^*$ -Farbkoordinaten nicht aus, um alle Aspekte der Farbwahrnehmung, insbesondere unter unterschiedlichen Lichtverhältnissen, zu erfassen. Beispielsweise können Metamerie-Effekte so nicht grundsätzlich berücksichtigt werden. Metamerie liegt vor, wenn zwei Farben identische Farbwerte bei einer Lichtart haben, sich jedoch in ihren spektralen Verteilungen unterscheiden [4]. Hier soll eine Methode vorgestellt werden, die informationsreichere Farbspektren als Datenquelle nutzt, um z. B. auch Metamerie-Risiken berücksichtigen zu können, und auf diese Weise verlässlichere Vorhersagen trifft. Das verwendete neuronale Netz U-Net [5] ist ein Deep-Learning-Verfahren aus der Bildverarbeitung, das sich jedoch auch für Vektordarstellungen wie Spektraldaten eignet [6]. Um robuste Vorhersagen in diesem Anwendungsfall zu gewährleisten, muss die Netzwerkarchitektur durch Multiscaling-Techniken [7] und Attention-Units [8] gezielt optimiert werden. Multiscaling ermöglicht die gleichberechtigte Erfassung von kleinen und großen Features, z. B. der hohen Banden bei 450 bis 500 nm und kleinerer Banden zwischen 650 bis 700 nm in *Abb. 1* (unten). Attention-Units reduzieren den Einfluss durch Rauschen und Hintergrundinformationen in den Daten (für detaillierte Erläuterungen siehe [5–8]).

*Abb. 2* illustriert den Aufbau und die Funktion des U-Nets für die Modellierung des spektralen Mappings zwischen der Farbe im flüssigen und trockenen Zustand des Lackes. Das neuronale Netz weist eine symmetrische



**Abb. 1 // Vergleich der Farbwerte und Spektren von Orange (oben) und Cyan (unten) als Varianten einer Farbmischung sowohl im flüssigen als auch im getrockneten Zustand. Die spektrale Verschiebung ist wellenlängenabhängig und weist auf den Einfluss des Farbortes hin.**

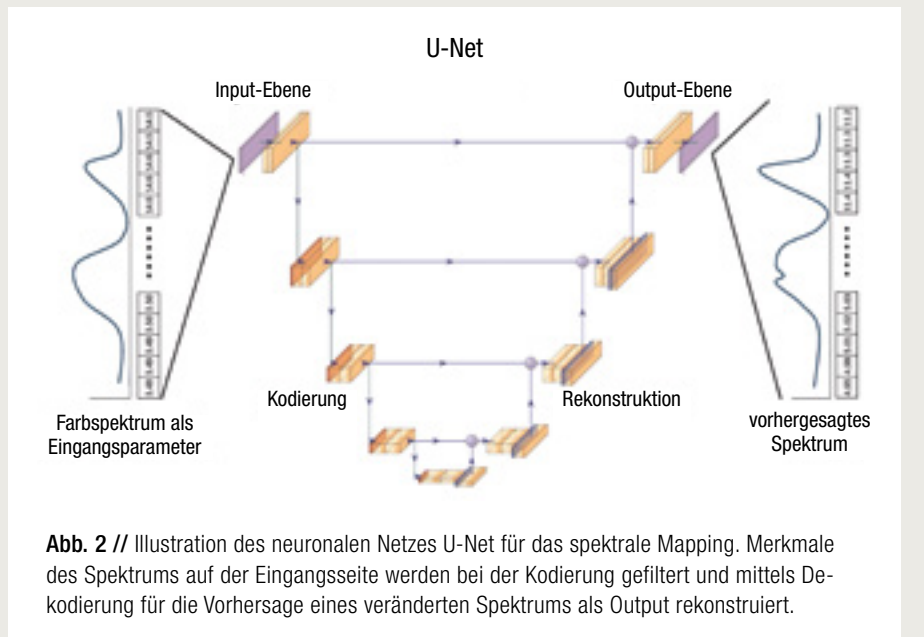
Struktur auf, wobei Eingangsparameter auf der Input-Ebene als Zahlenwerte beispielsweise des Trockenfarbspektrums (links) auf die des Flüssigspektrums als Output (rechts) abgebildet werden. Beide Spektren sind gleich groß, wobei sich Merkmale oder Strukturen zwischen beiden Ebenen unterscheiden. Ein U-Net wird mit Daten, also bekannten Beziehun-

### Ergebnisse auf einen Blick

- Mithilfe der Flüssigfarbmessung lassen sich Lack-Farbtöne rascher überprüfen – ohne Härtung und Trocknung der Beschichtungen.
- Unterschiede zwischen den Spektren der Flüssig- und der Trockenfarbmessung können durch Verfahren vorhergesagt werden, die aus der KI-Bilderkennung stammen.
- Die Implementierung in eine App ermöglicht das spektrale Mapping von trocken-zu-flüssig und umgekehrt für den gesamten erzielbaren Farbgamut eines Mischlack- oder Pastensystems.
- Trocken-zu-flüssig-Farb- und -Spektrenvorhersagen erlauben, die Farbtonentwicklung in den Flüssigfarbraum zu verlagern.

**Tab. 1 //** Vergleich der Prognosequalität für die Spektrenvorhersage des U-Net und nach Optimierung der Modellarchitektur für das Spektrum der trockenen Farbe als Input und Vorhersage der Flüssig-Farbe.

Vorhersage	Modellarchitektur	Prognosequalität für alle Proben (SSIM <sub>gesamt</sub> ) mit Standardabweichung (s)		ungenauere Vorhersage einer Einzelprobe
		SSIM <sub>gesamt</sub>	s	SSIM <sub>worst</sub>
Trockenfarbe durch Flüssigspektrum	1D U-Net nicht optimiert	0,934	0,096	0,635
	1D U-Net mit Multiscale- und Attention Unit	0,989	0,020	0,922
Flüssigfarbe durch Trockenspektrum	1D U-Net nicht optimiert	0,814	0,275	0,000
	1D U-Net mit Multiscale- und Attention Unit	0,969	0,054	0,754



**Abb. 2 //** Illustration des neuronalen Netzes U-Net für das spektrale Mapping. Merkmale des Spektrums auf der Eingangsseite werden bei der Kodierung gefiltert und mittels Dekodierung für die Vorhersage eines veränderten Spektrums als Output rekonstruiert.



**Abb. 3 //** Farbkarten der getrockneten Proben des Datensatzes. Analog wurden die Farben des flüssigen Lackes mit dem „LCM Mono“ gemessen. Mischungen aus fünf wasserbasierten Farbkonzentraten Schwarz, Weiß, Blau, Gelb und Rot („ProMix Aqua“, MIPA).

gen zwischen den Flüssig- und Trockenspektren trainiert, wobei bei der Kodierung (Encoder) die Informationen auf relevante Merkmale verdichtet und diese für das veränderte vorhergesagte Spektrum bei der Dekodierung (Decoder) rekonstruiert werden. Globale Kontexte bleiben zwischen den Spektren erhalten, es kann jedoch die Verschiebung zwischen den beiden Materialzuständen dargestellt werden.

#### Datensatz zur Trocken-zu-flüssig-Farbvorhersage

Der Datensatz in Abb. 3 wurde mittels Mischungen aus fünf wasserbasierten Farbkonzentraten (Schwarz, Weiß, Blau, Gelb und Rot) erstellt. Die Spektren für alle 264 Proben wurden mithilfe zweier Messmethoden erfasst: der Flüssigfarbmessung (Q-Chain LCM Mo-

no, Orontec) und der Messung der getrockneten Lackproben (X-Rite 962). Zudem wurden die Rezepturen zur Zusammensetzung der Farbkonzentrate dokumentiert. Ursprünglich wurden Methoden der sequentiellen Versuchsplanung genutzt [9], um die Komplexität der Modelle iterativ zu erweitern. Da dem Algorithmus keine Beschränkung bzgl. der Rezepturauswahl neuer Proben vorgegeben wurden, enthält der Datensatz eine Reihe dunkler und unbunter Proben, welche nicht branchenüblich sind. Weitere Details zur Herstellung der Prüflinge sowie zu den Messungen unter Einsatz von Hochdurchsatz-Automatisierung sind in der früheren Publikation [3] beschrieben.

In der vorherigen Studie diente der aus den Lab-Werten der Flüssig- und Trockenmessung berechnete Gesamtfarbabstand  $\Delta E_{90}$  zur Bewertung der Güte des Modells. Diese Bewertungsgrundlage auf Basis der Farabweichung zwischen Modell und tatsächlicher Beobachtung ist konform zur praktischen Anwendung. Für die Güte der spektralen Vorhersage müssen andere Evaluationsmetriken herangezogen werden. In diesem Ansatz wurde die 1D Structure Similarity Measure [10] (1D-SSIM) als Verlustfunktion verwendet. Diese Metrik berücksichtigt strukturelle Informationen und erfasst insbesondere auch Nachbarschaftsverhältnisse innerhalb der Farbspektren. Die beiden Spektren werden überlappend segmentweise verglichen, wobei der Wert  $SSIM = 0$  keine strukturelle Ähnlichkeit und  $SSIM = 1$  eine perfekte Übereinstimmung bedeutet. Die Vorhersagegüte des Modells wurde mit 24 Testdaten über SSIM ermittelt, wobei auch der Mittelwert aller Prüfwerte ( $SSIM_{gesamt}$ ) und die Standardabweichung (s) berechnet wurden.

#### Fallstudie: Implementierung für Farbmischungen

Für das Modelltraining der Spektrenvorhersage wurden ausschließlich Spektren der Flüssig- und Trockenfarbmessung aus den 264 Datensätzen verwendet. Eine Integration der Rezepturdaten als Eingangsdaten wäre durch Anpassung der Modellarchitektur möglich, wurde in dieser Studie jedoch nicht berücksichtigt. Prinzipiell kann das Modell in beide Richtungen

trainiert werden, das bedeutet entweder eine Vorhersage des Flüssig-Spektrums auf Basis der Messung im getrockneten Zustand oder umgekehrt. Die Modellgenauigkeit in Tab. 1 zeigt, dass die Modellgüte durchaus von der Richtung für die Vorhersage beeinflusst wird. Die Vorhersage der Flüssigfarbspektren ist für dieses Beispiel ungenauer. Für das Anwendungsbeispiel einer Farbtonentwicklung wurde die Vorhersage der Flüssigspektren gewählt. Als Bewertungskriterium für die Vorhersagbarkeit (Prognosequalität) dient der SSIM-Mittelwert für alle Proben der Testdaten, welche durch zufällige Teilung des gesamten Datensatzes ausgewählt wurden. Für eine Bewertung zum Leistungsvermögen des U-Net und vor allem für die Auswirkung der bereits beschriebenen Optimierungen des Verfahrens werden vor al-

lem auch Spektren mit niedrigem SSIM, also einer starken Abweichung, berücksichtigt. Das U-Net ohne Optimierung mittels Multiscaling und Attention-Units zeigt eine Vorhersagegenauigkeit des Modells mit einem mittleren  $SSIM_{gesamt} > 0,8$  bzw. bei Trocken- zu Flüssig-spektrum nochmals deutlich verbessert. Für die Analyse der Modellgenauigkeit ist ebenfalls die Abweichung der Einzelproben relevant. Die Standardabweichung und die ungenaueste Vorhersage ( $SSIM_{worst}$ ) liefern für diesen Zweck zusätzliche Informationen zur Modellgüte. Im Vergleich zum optimierten U-Net ist die Standardabweichung stets höher und  $SSIM_{worst}$  deutlich niedriger. Ein großer Teil der Einzelspektren wird somit mit unzureichender Genauigkeit vorhergesagt. Bei Betrachtung der Spektren fallen Ursachen

für die Abweichungen auf. Die KI fügt Artefakte in Form zusätzlicher Banden bzw. Rauschen zu, oder es fehlen Feinstrukturen der weniger intensive Banden (Abb. 4). Ein hohes Maß solcher Fehler der modellierten Spektren tritt bei einer Vorhersage der Flüssigspektren auf, womit die schlechtere Performance erklärt werden kann. Schlechte Vorhersagen kommen vor allem bei dunklen unbunten Farbtönen vor. Die ungenaueste Vorhersage für die Trocken-zu-flüssig-Vorhersage bildet mit  $SSIM = 0,0$  in keiner Weise das Originalspektrum ab. Eine deutliche Verbesserung kann durch Optimierung des U-Nets mittels oben beschriebener Maßnahmen erzielt werden.  $SSIM_{gesamt}$  ist  $> 0,9$  mit wesentlich geringerer Standardabweichung. Es existieren somit weit weniger Ausreißer nach unten für eine schlechte Vorhersage. Die Grün-

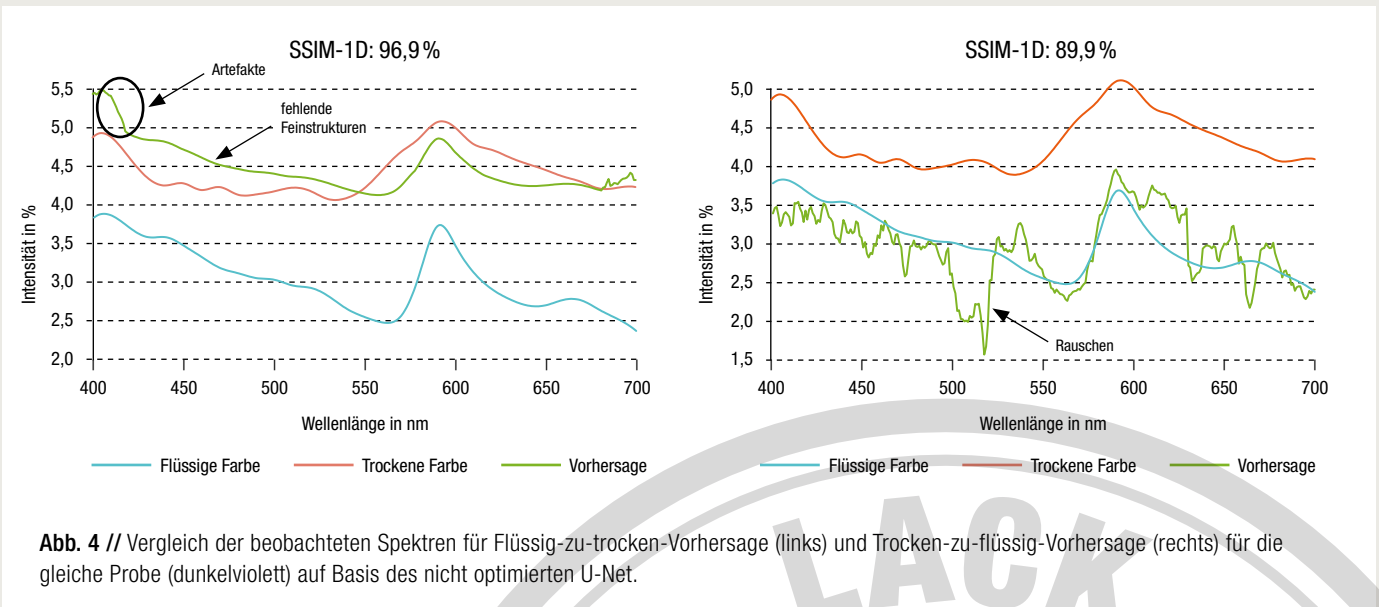


Abb. 4 // Vergleich der beobachteten Spektren für Flüssig-zu-trocken-Vorhersage (links) und Trocken-zu-flüssig-Vorhersage (rechts) für die gleiche Probe (dunkelviolett) auf Basis des nicht optimierten U-Net.

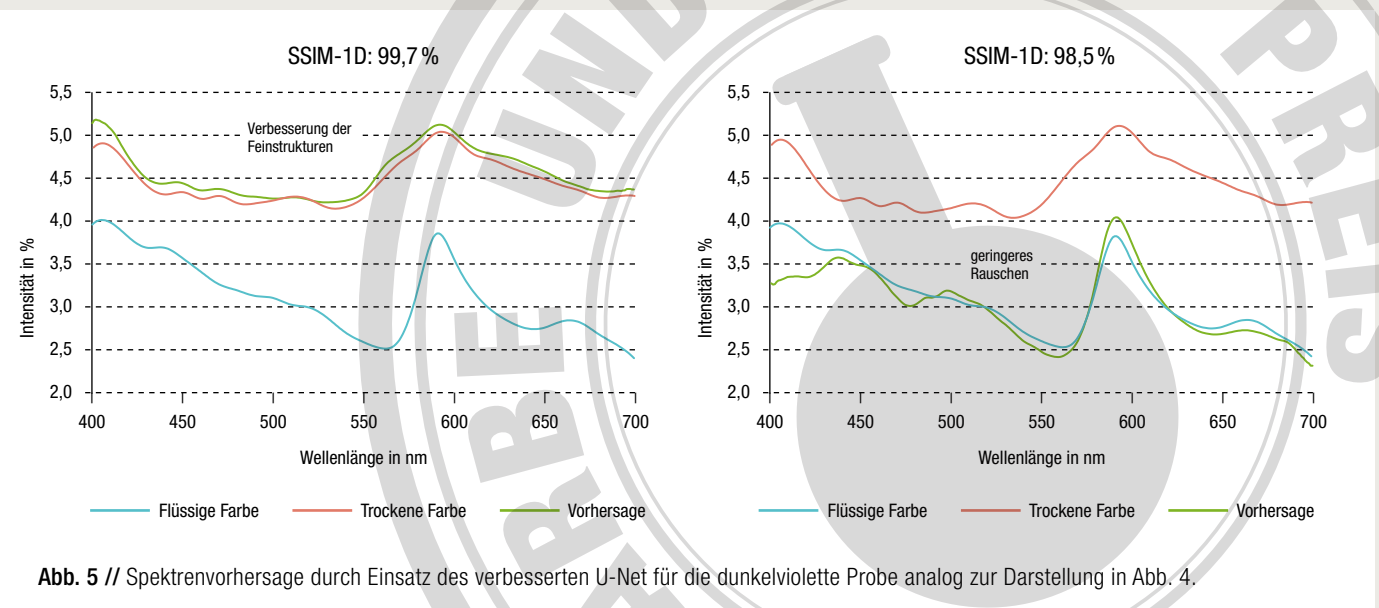


Abb. 5 // Spektrenvorhersage durch Einsatz des verbesserten U-Net für die dunkelviolette Probe analog zur Darstellung in Abb. 4.

de für die Verbesserungen können direkt in Abb. 5 anhand der optimierten Spektrumsvorhersage beobachtet werden. Es tritt deutlich geringeres bzw. kein Rauschen auf und es werden keine neuen Bande als Artefakte durch die KI hinzugefügt. Selbst feinere Strukturen können durch das KI-Modell besser aufgelöst werden.

**Trocken-zu-flüssig-KI-Modell für Farbtonentwicklungen**

Die Einsatzmöglichkeiten der Flüssigfarbmessung werden durch das spektrale Mapping zur Vorhersage zwischen den beiden Materialzuständen von Farben deutlich breiter gefä-

chert. Sie reichen von der Qualitätssicherung bis zur Farbtonentwicklung. Für diesen Ansatz zum Mapping eines gesamten Portfolios eines Mischlack- oder Pastensystems wurde eine App als Beispiel zusammen mit einem Prozessablaufschema für die Farbtonentwicklung entworfen. Die App (Abb. 6) ermöglicht

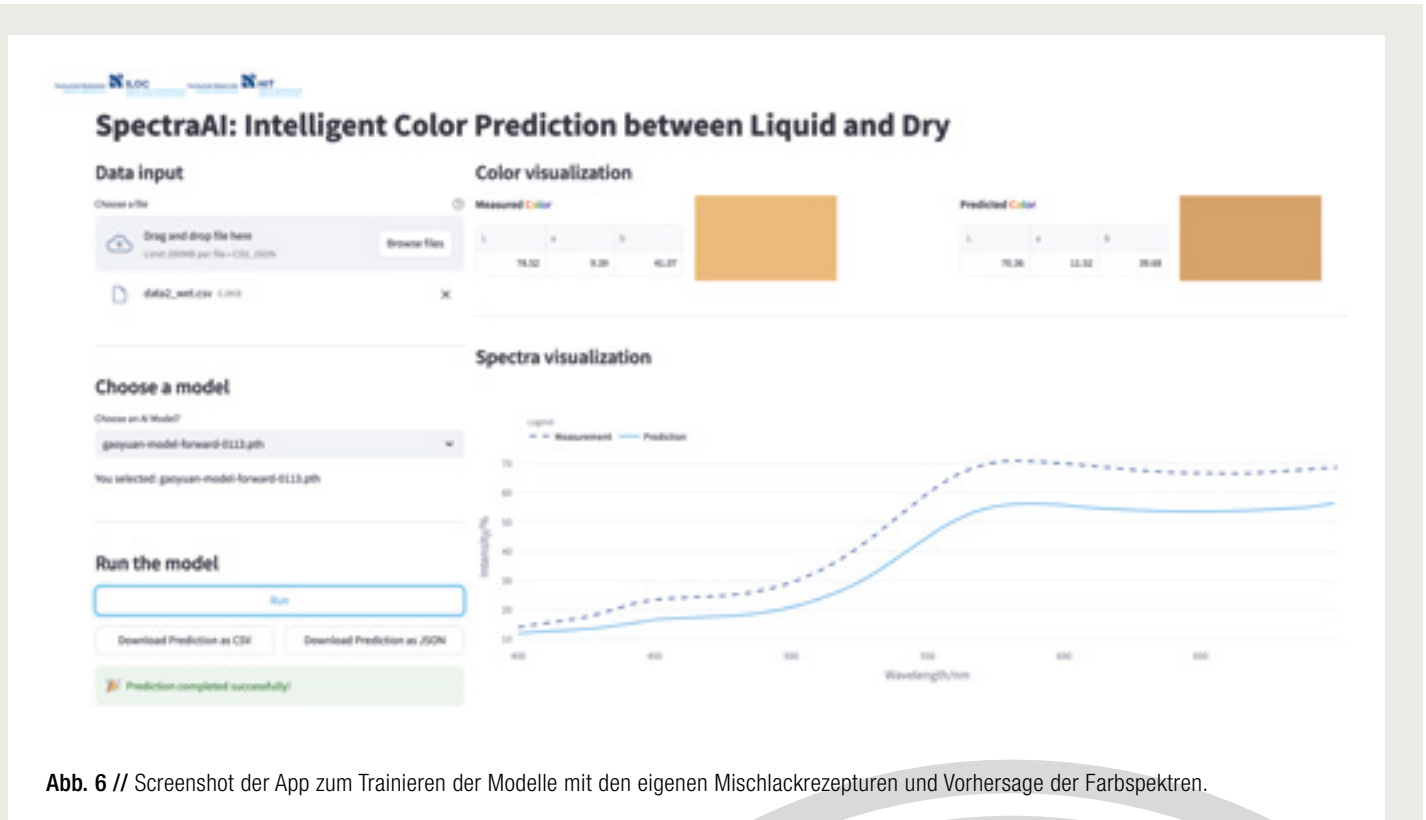


Abb. 6 // Screenshot der App zum Trainieren der Modelle mit den eigenen Mischlackrezepturen und Vorhersage der Farbspektren.

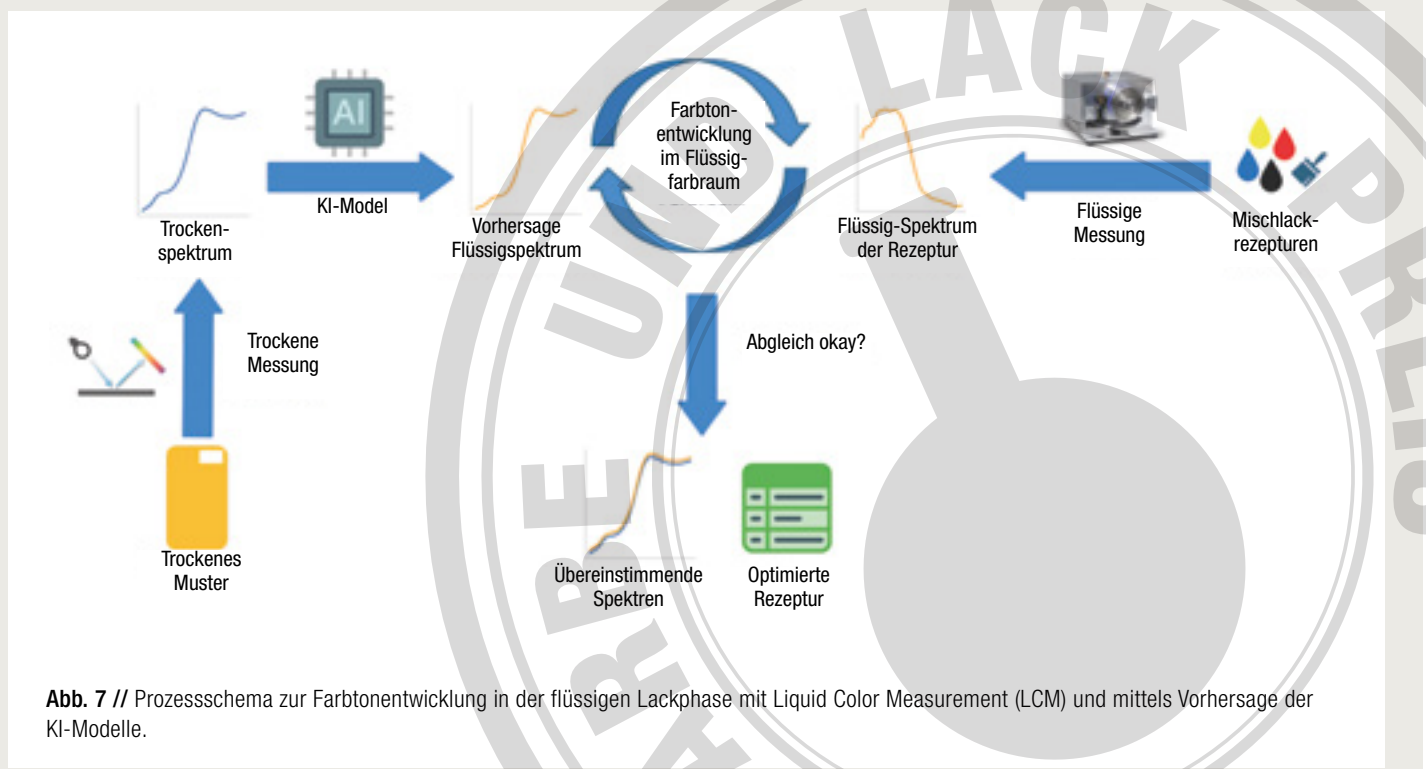


Abb. 7 // Prozessschema zur Farbtonentwicklung in der flüssigen Lackphase mit Liquid Color Measurement (LCM) und mittels Vorhersage der KI-Modelle.

die Implementation in eine Anwendung, um mit Daten der beiden Farbmessungen für ein Mischlacksystem ein Modell zu trainieren und dieses Mapping für die spektrale Vorhersage in jeweils gewünschter Richtung zu nutzen. Das Prozessschema in *Abb. 7* zeigt einen möglichen Ablauf für die Entwicklungsarbeit mit der Flüssigfarbmessung und KI-Modellen nach einem Training der Farbpalette für das Mischlacksystem. Auf der linken Seite wird ein nachzustellender Farbton mittels Trocken-Spektrum gemessen und durch das KI-Modell die Vorhersage für die flüssige Probe erstellt. Diese Vorhersage dient anschließend zur Rezeptentwicklung mit den flüssigen Lacken, wodurch die Trocknungszeiten entfallen und Anpassungen zeitsparend vorgenommen werden können. Als Abgleich dienen die gemessenen Spektren zur Vorhersage, wobei u. a. auch  $L^*a^*b^*$ -Werte auf Basis der Spektraldaten für eine einfachere Umsetzung berechnet werden können. Bei einer Übereinstimmung der beiden Spektren wird die optimierte Rezeptur für diesen Farbton erhalten, und es kann ein trockenes Muster zur Überprüfung der Anforderung hergestellt werden.

**Kontakt // Christian.Schmitz@hs-niederrhein.de**

#### Literatur

[1] (a) Ye, K.; Yang, Y.; Chen, H.; Wu, J.; Wei, H.; Dang, L.: Investigation into Pigmentation Behaviors and Mechanism of Pigment Yellow 180 in Different Solvents. *Processes* 2023, 11 (10), 2951. (b) Renge, I.: Solvent Induced Transformations of  $n-\pi^*$  Absorption in Formaldehyde, Acetaldehyde, and Acetone. *J. Phys. Chem. A* 2015, 119 (32), 8599–8610. (c) Boldrini, B.; Cavalli, E.; Painelli, A.; Terenziani, F.: Polar Dyes in Solution: A Joint Experimental and Theoretical Study of Absorption and Emission Band Shapes. *J. Phys. Chem. A* 2002, 106 (26), 6286–6294

[2] Lyu, S.; Meng, D.; Hou, M.; Tian, S.; Huang, C.; Mao, J.: Nonlinear Mixing Characteristics of Reflectance Spectra of Typical Mineral Pigments. *Minerals* 2021, 11 (6), 626

[3] Korten, O.; Hustert, H.; Polke, D.; Surjana, A.; Zhang, G.; Ahle, E.; Schmitz, C.: Liquid Colour Measurement in Standardised Automation Processes. Automating Data Acquisition with Standardised Interfaces in the Process Industry for Machine Learning Application. *Eur. Coat. J.* 2024, 04/2024, 36–40

[4] Bäurle, T.; et al.: *Coloristik Für Lackanwendungen*. Vincentz Network, 2014

[5] Ronneberger, O.; Fischer, P.; Brox, T.: U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. *arXiv* May 18, 2015. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1505.04597>

[6] (a) Zhang, H.; Zhou, X.; Tao, Z.; Lv, T.; Wang, J.: Deep Learning-Based Turbidity Compensation for Ultraviolet-Visible Spectrum Correction in Monitoring Water Parameters. *Front. Environ. Sci.* 2022, 10. (b) Pan, Z.; Ru, C.; Zhang, G.; Zhong, Y.; Fang, L.; Yu, F.; Xu, L.; Shi, Y.; Li, Z.: Integrating Convolutional Neural Networks with UV-Vis Spectroscopy for Monitoring the Extraction Procedure of Ganoderma Lucidum Spore Powder. *LWT* 2024, 214, 117135. (c) Zeng, S.-X.; Shi, R.; Yang, G.; Zeng, X.; Wang, Z.; Tuo, X.-G.: Attention-Unet Based Gamma-Ray Full Spectrum Qualitative and

Quantitative Analysis Method. *Radiat. Phys. Chem.* 2025, 229, 112536

[7] Su, R.; Zhang, D.; Liu, J.; Cheng, C.: MSU-Net: Multi-Scale U-Net for 2D Medical Image Segmentation. *Front. Genet.* 2021, 12

[8] Cai, Y.; Wang, Y.: MA-Unet: An Improved Version of Unet Based on Multi-Scale and Attention Mechanism for Medical Image Segmentation. *arXiv* December 20, 2020, arXiv:2012.10952

[9] (a) Settles, B.: From Theories to Queries: Active Learning in Practice. In *Active Learning and Experimental Design workshop In conjunction with AISTATS 2010; JMLR Workshop and Conference Proceedings*, 2011, 1–18. (b)

Lookman, T.; Balachandran, P. V.; Xue, D.; Yuan, R.: Active Learning in Materials Science with Emphasis on Adaptive Sampling Using Uncertainties for Targeted Design. *Npj Comput. Mater.* 2019, 5 (1), 1–17. (c) Pauwels, E.; Lajouanie, C.; Vert, J.-P.: A Bayesian Active Learning Strategy for Sequential Experimental Design in Systems Biology. *BMC Syst. Biol.* 2014, 8 (1), 102

[10] Wang, Z.; Bovik, A. C.; Sheikh, H. R.; Simoncelli, E. P.: Image Quality Assessment: From Error Visibility to Structural Similarity. *IEEE Trans. Image Process.* 2004, 13 (4), 600–612

## Der Artikel erhielt den ECS Conference Award 2025 für das beste Paper.

#### OLIVER KORTEN

wechelte nach Abschluss seines Mathematik-Studiums (Diplom II mit Nebenfach Physik) und der Arbeit als Software-Entwickler im Bereich CNC-Maschinen-Steuerung zu einem großen multinationalen Automobil-Lackhersteller in die Farbmatrik-Abteilung, um einerseits die Software-Entwicklung zu verstärken, andererseits auch bei der Entwicklung neuer Algorithmen im Bereich Farbmatrik zu unterstützen. Seit 2019 arbeitet er für Orontec als Software-Entwickler, Color und Data Scientist in der Entwicklung. Darüber hinaus ist er im Bereich Normung (DIN und ASTM) und in weiteren farbmatischen Komitees aktiv und leitet seit 2018 das Koloristen-Seminar für Vincentz Network.



#### PROF. CHRISTIAN SCHMITZ

absolvierte eine Ausbildung zum Lacklaboranten und studierte anschließend Lackingenieurwesen an der Hochschule Niederrhein. 2017 schloss er seine Promotion zur Photopolymerisation an der Universität Duisburg-Essen ab. Im Anschluss forschte er in Kooperation mit den Lackwerken Peters an KI-gestützten Methoden zur Lackformulierung. Seit 2023 ist er Professor für Lackchemie und digitale Prozesse an der Hochschule Niederrhein und betreut dort am HIT-Institut Forschungsprojekte im Bereich Chemie 4.0.



#### GAOYUAN ZHANG

absolvierte ein Bachelorstudium in Chemie an der Universität Paderborn, bevor er sein Masterstudium in Chemieingenieurwesen an der Hochschule Niederrhein fortsetzte. Dort promoviert er derzeit. Seine Forschungen konzentrieren sich auf wegweisende Entwicklungen in der Modellierung von Beschichtungsformulierungen, der Rohstoffmodellierung und dem Datenmanagement in Beschichtungslaboren. Mit einem starken Hintergrund in Chemie und Ingenieurwissenschaften arbeitet er daran, innovative Ansätze zur Optimierung von Prozessen in der Beschichtungsindustrie zu nutzen.



Mehr zum Thema!



34 Ergebnisse für KI!  
Jetzt testen: [www.farbeundlack.de/360](http://www.farbeundlack.de/360)