



## KI-gestützte CO<sub>2</sub>-Reduktion bei der Zementherstellung

Gemeinsam mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) entwickelte iteratec einen KI-basierten Ansatz aus der Materialforschung weiter. Entstanden ist daraus ein digitaler Laborzwilling, welcher als Web-Applikation zukünftig einem breiten Publikum aus Forschung und Industrie zugänglich gemacht werden kann.

### Das Unternehmen

Die BAM ist eine wissenschaftlich-technische Bundesoberbehörde im Geschäftsbereich des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz. Sie prüft, forscht und berät zum Schutz von Mensch, Umwelt und Sachgütern.

### Die Herausforderung

Die industrielle Herstellung von Zement stellt einen der größten CO<sub>2</sub>-Emittenten der Erde dar – wäre dieser Industriezweig ein Staat, würde er sich im Länder-Ranking nach CO<sub>2</sub>-Ausstoß unter den Top 5 bewegen. Die Forschung an neuen Zementrezepturen mit besserer CO<sub>2</sub>-Bilanz stellt daher einen gewaltigen Hebel bei der Erreichung wichtiger Klimaziele dar.

Da neue Zementrezepturen entlang zahlreicher Freiheitsgrade gefunden werden müssen und ihre experimentelle Untersuchung im Labor sehr aufwendig ist, liegt in einer vorausgehenden Priorisierung neuer Kandidaten ein großes wirtschaftliches Potential. Die BAM hat für diese Aufgabe einen KI-basierten Prototypen entwickelt.

Um diesen datengetriebenen Ansatz einem breiten Anwenderkreis aus Forschung und Industrie zugänglich zu machen, war die BAM auf der Suche nach einem Partner für die Realisierung der wesentlichen nächsten Schritte: a) die Weiterentwicklung und technische Härtung des KI-Cores und b) seiner Integration in eine neu zu schaffende, professionelle und anwenderfreundliche Software-Lösung. Hier waren also gleichermaßen KI-Kompetenz auf wissenschaftlichem

Niveau als auch technische Exzellenz und Effizienz in der klassischen Softwareentwicklung gefragt.

### Die Lösung

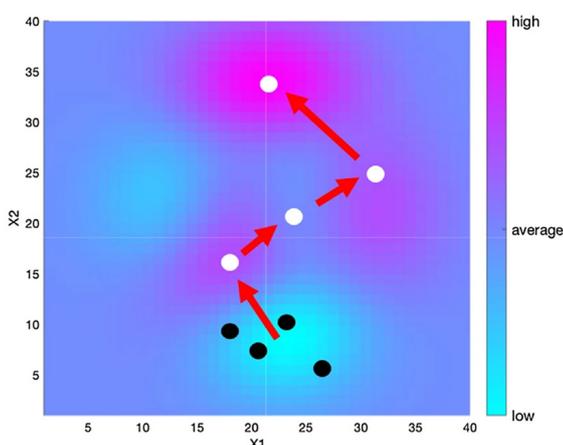
iteratec ist sehr stolz, diese hohen Anforderungen erfüllen zu können und die BAM beim Erreichen dieser wichtigen Ziele erfolgreich zu unterstützen. In Zusammenarbeit mit den Wissenschaftlern der BAM ist es gelungen, dem Prototypen entlang wichtiger Koordinaten die nötige Reife zu verleihen:

- Weiterentwicklung und Validierung von state-of-the-art KI-Methoden, die aus einem dünn besiedelten und hochdimensionalem Datenraum Optimierungsvorschläge inkl. Konfidenzaussagen ableiten können
- Integration des KI-Cores in eine vollständig neuentwickelte, leichtgewichtige und zugängliche Web-Applikation
- Anreicherung um fachlich komplexe und dennoch anwenderfreundliche Funktionen zur Pflege von Materialien, Rezepturen und Testkampagnen (digitaler Laborzwilling)
- Robuste Funktionen zur Steuerung der KI-Komponente, Analyse und Visualisierung der KI-Vorhersagen

### Der Kundennutzen

Durch den Ausbau eines wissenschaftlichen Prototyps zu einer webbasierten Anwendung konnte ein wichtiges Werkzeug zur Optimierung der Forschung nach klimafreundlicheren Zementformeln einem breiten Publikum aus Forschung und Industrie zugänglich gemacht werden. Technisch kann und soll dies auch als ein erster Schritt in Richtung eines autonomen, vollautomatisierten Labors im Sinne eines datengetriebenen Experimentkreislaufs verstanden werden: KI-basierte Auswahl des vielversprechendsten nächsten Experiments -> automatisierte Durchführung der entsprechenden Analysen durch entsprechende Roboter und Analytik-Geräte -> Einfließen der Ergebnisse in den Datenbestand -> Vorschlag des nächsten Experiments usw. (Sequentielles Lernen).

Der BAM war es außerdem wichtig, ein kosten- und lizenzfreies Werkzeug zu erstellen. Dieses Ziel konnte durch eine entsprechende Ausrichtung der Architektur und Auswahl der verwendeten Technologien erreicht werden.



Quelle: Völker, C., Firdous, R., Stephan, D. et al. Sequential learning to accelerate discovery of alkali-activated binders. *J Mater Sci* 56, 15859–15881 (2021)