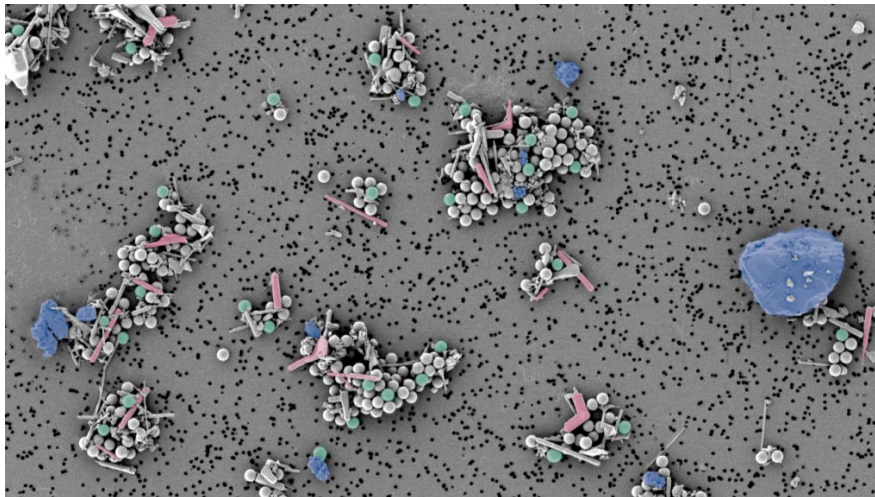


Stellenart: Masterarbeit, Bachelor-Arbeit  
Eintrittstermin: ab sofort  
Kontaktperson: [M. Sc. Haoran Ji](mailto:haoran.ji@kit.edu) – haoran.ji@kit.edu

**Thema: Entwicklung einer datengetriebenen Bruchfunktion für Mehrstoff-Populationsbilanzmodelle mittels Monte-Carlo-Simulation und maschinellem Lernen**

**Hintergrund:**



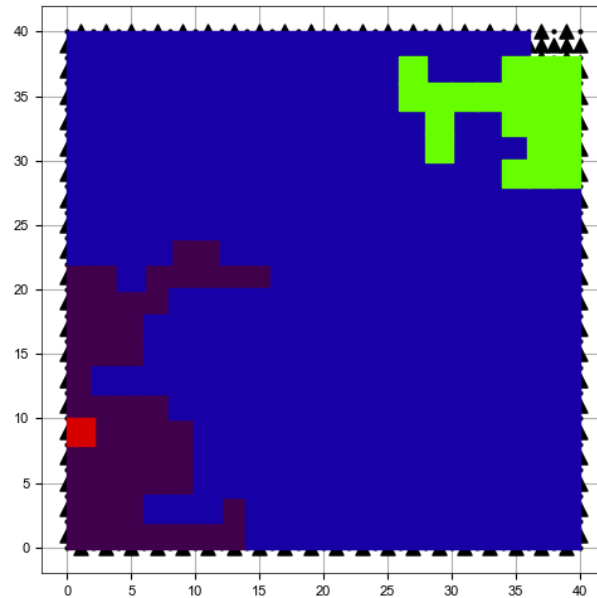
**Abbildung 1:** Agglomerate aus mikroskopischer Perspektive

Die Agglomeration und der Bruch in Mehrstoffsystemen sind zentrale Phänomene in der Verfahrenstechnik, die die Materialien maßgeblich prägen. Agglomeration führt Primärpartikel zu größeren Einheiten zusammen, beeinflusst durch interpartikuläre Wechselwirkungen in Suspensionen, während Bruchprozesse diese wieder in kleinere Fragmente teilen. Diese Phänomene sind für die Entwicklung und Optimierung von Prozessen in zahlreichen Anwendungsbereichen, wie der Trenntechnik oder der Herstellung von Batteriematerialien, von großer Bedeutung.

Angesichts der experimentellen Herausforderungen bei der Untersuchung der Mikrostruktur von Hetero-Agglomeraten und der begrenzten analytischen Möglichkeiten auf der sub- $\mu\text{m}$  Skala motiviert dies die Nutzung numerischer Simulationsmethoden. Diese bieten tiefe Einblicke in die Mikroprozesse und ermöglichen präzise Vorhersagen über Produkteigenschaften und Prozessausgänge. Die Populationsbilanzgleichungen (PBE) sind eine verbreitete Methode zur Beschreibung von Partikelprozessen, die auf partiellen Differentialgleichungen basieren, welche die Konzentration der Partikel in einem System modellieren. Obwohl PBEs typischerweise durch Diskretisierung und zeitliche Integration gelöst werden können, steigt die Komplexität exponentiell in Mehrstoffsystemen. Insbesondere für den Bruchprozess in Mehrstoffsystemen ist es schwierig, eine analytische Bruchfunktion zu etablieren, die die Verteilung der Partikelfragmente beschreibt. Existierende Bruchfunktionen, die meist auf dem Partikelvolumen basieren, können die Auswirkungen der Materialzusammensetzung unterschiedlicher Partikel auf die Fragmentverteilung bei gleichem Volumen nicht adäquat erfassen.

Vor diesem Hintergrund findet die Monte-Carlo-Methode (MC-Methode) aufgrund ihrer Fähigkeit, das individuelle Verhalten von Partikeln zu simulieren, breite Anwendung bei der Berechnung von

Populationsbilanzgleichungen (PBE). Ein innovatives Modell, das auf der MC-Methode basiert, ermöglicht die detaillierte Simulation des Bruchprozesses in Mehrstoff-Agglomeraten durch die Berücksichtigung der Bindungsstärke zwischen den Partikeln, um den Rissausbreitungspfad zu verfolgen und die entstehenden Partikelfragmente zu charakterisieren.



**Abbildung 2:** Ein Partikel in MC-Modell, der in vier Stücke zerbrochen ist. Das ursprüngliche Partikel wurde in einem 2D-Gitter als Quadrat vereinfacht. Jede unterschiedliche Farbe steht für ein Bruchstück.

### Ziel der Arbeit:

Das Hauptziel dieser Arbeit besteht darin, mittels des neuen MC-Modells eine Bruchfunktion für die Berechnung der PBE zu entwickeln. Dies erfordert zunächst eine Parameterstudie des Modells, um die Auswirkungen verschiedener Eingabeparameter auf die Verteilung der Partikelfragmente zu untersuchen. Angesichts des Rechenaufwands der MC-Methode wird dieses Modell jedoch nicht direkt für Berechnungen innerhalb der PBE eingesetzt. Stattdessen soll es dazu dienen, eine generische, datengetriebene Bruchfunktion zu generieren. Dieser Prozess erfolgt durch den Einsatz von maschinellem Lernen, beispielweise tiefen neuronalen Netzen (DNN). Dabei werden Eingabe- und Ausgabeparameter des MC-Modells trainiert, um so eine effizientere und vereinfachte Anwendung in zukünftigen Berechnungen zu ermöglichen.

Bei Interesse gerne Kontakt per E-Mail aufnehmen!  
haoran.ji@kit.edu