

Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellenproduktion durch genetische Algorithmen

Parameter Setting during Production Ramp-Up of Battery Cell Production using Genetic Algorithms

Von der Fakultät für Maschinenwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines
D o k t o r s d e r I n g e n i e u r w i s s e n s c h a f t e n
genehmigte Dissertation

vorgelegt von
Henning Clever

Berichter:

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Achim Kampker, MBA

apl. Prof. Dr.-Ing. Dipl.-Wirt.-Ing. Heiner Hans Heimes

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Februar 2025

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Chair of Production Engineering of E-Mobility Components (PEM) der RheinischWestfälischen Technischen Hochschule (RWTH) Aachen University entstanden.

Zunächst möchte ich Herrn Professor Achim Kampker danken. Sein Engagement für die Elektromobilitätsforschung und seine Unterstützung während meiner gesamten Promotionszeit haben mich und meine Arbeit maßgeblich beeinflusst. Außerdem danke ich Herrn Professor Heiner Hans Heimes für die Möglichkeit, unter seiner Leitung zu forschen, Projekterfahrung zu sammeln und meine Promotion durchzuführen. Ihre fachliche Expertise und ihr Feedback waren äußerst wertvoll für meine persönliche Weiterentwicklung. Desweiteren danke ich Herrn Professor Johannes Heinrich Schleifenbaum für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes und Herrn Professor Robert Schmitt für die Übernahme des Prüfungsbeisitzes.

Ein großer Dank gebührt meinen geschätzten Kolleginnen und Kollegen am Lehrstuhl. Während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter hatte ich die Möglichkeit, nicht nur meine eigene Forschung voranzutreiben, sondern auch aktiv an der strategischen Ausrichtung im Bereich Battery Production mitzuwirken. Das gesamte Team hat mich dabei auf individuelle Weise geprägt und dazu beigetragen, dass meine Zeit am Lehrstuhl stets in positiver Erinnerung bleibt. Der regelmäßige fachliche Austausch, die anregenden Diskussionen, die gemeinsamen Projekte und die Unterstützung auch außerhalb des beruflichen Rahmens waren von unschätzbarem Wert und haben maßgeblich zu meinem persönlichen und beruflichen Wachstum beigetragen. Danke für die gemeinsame Zeit und die daraus gewachsenen Freundschaften.

Mein größter Dank gebührt meiner Familie und meinen Freunden für ihre fortwährende Unterstützung und Ermutigung in allen Lebenslagen. Insbesondere möchte ich mich bei meiner Frau Jacqueline bedanken. Ihr Zuspruch, ihr offenes Ohr und ihre Unterstützung haben mich durch Höhen und Tiefen begleitet und immer wieder ermutigt, mein Bestes zu geben. Die Unterstützung meiner Familie und Freunde waren für mich ein unschätzbarer Rückhalt und haben dazu beigetragen, dass diese Dissertation Wirklichkeit geworden ist.

Lüneburg, April 2025

Henning Clever

Zusammenfassung

Die steigende Nachfrage nach Batteriezellen infolge der Elektrifizierung der Automobilindustrie stellt die Batteriezellhersteller vor erhebliche Herausforderungen. Der Produktionsanlauf einer Batteriezellfertigung erstreckt sich über mehrere Jahre, wobei selbst etablierte Hersteller nach dieser Phase lediglich eine Gesamtanlageneffektivität von 65 % mit einer Ausschussrate von 10 % des Produktionsvolumens erreichen. Dies verdeutlicht die ineffiziente Vorgehensweise bei der Parametereinstellung im Produktionsanlauf und den hohen Bedarf an Optimierung. Die aktuelle Situation in der Batteriezellproduktion ähnelt in Bezug auf Effizienz und Ressourcenverbrauch der Automobilindustrie der 1960er Jahre, da sie größtenteils auf einem Trial-and-Error-Ansatz basiert. Die Komplexität der Batteriezellproduktion und die Vielzahl von Einflussfaktoren auf die Produktqualität erschweren eine systematische Optimierung der Produktionsprozesse.

Die vorliegende Arbeit untersucht daher die Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion und zielt darauf ab, mithilfe von künstlicher Intelligenz und unter Einbeziehung von Bestandsdaten aus der Produktion die Anlaufphase zu optimieren und zu beschleunigen. Angesichts der Herausforderungen bei der Parametereinstellung im Produktionsanlauf sowie der begrenzten Ressourcen ist ein systematischer Ansatz erforderlich, um die Produktionsprozesse zu optimieren. Dabei werden genetische Algorithmen und maschinelles Lernen als vielversprechende Ansätze eingeführt, um die Prozessparameter basierend auf Produktionsdaten zu identifizieren und als globales Optimierungsproblem zu betrachten.

Die entwickelte Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung in der Batteriezellproduktion umfasst mehrere Schritte, beginnend mit der Definition des Referenzsystems und der Identifizierung relevanter Prozesskenngrößen. Anschließend werden vorhandene Daten in Teilmodelle strukturiert und aufbereitet, bevor die eigentliche Modellierung, das Training und die Bewertung der einzelnen Modelle erfolgen. In einem weiteren Schritt werden die Teilmodelle in ein übergeordnetes Gesamtmodell integriert, um eine ganzheitliche Optimierung der Parametereinstellungen zu ermöglichen. Die Implementierung eines Software-Demonstrators umfasst eine Benutzer- und eine Systemebene, wobei das Frontend eine grafische Benutzeroberfläche zur intuitiven Nutzung des genetischen Algorithmus bietet und das Backend den genetischen Algorithmus implementiert. Die Flexibilität und Anpassbarkeit des Software-Demonstrators ermöglichen eine systemunabhängige Lösung für die Parameteroptimierung in verschiedenen Produktionsumgebungen. Die Validierung erfolgt durch die Überprüfung der Reproduzierbarkeit, Konvergenz und Parametersensitivität des Gesamtmodells. Die Ergebnisse zeigen, dass das Gesamtmodell reproduzierbare und konvergente Ergebnisse liefert und eine erfolgreiche Optimierung der Parametereinstellungen ermöglicht. Insgesamt bietet die entwickelte Methodik einen vielversprechenden Ansatz zur Optimierung der Batteriezellproduktion. Durch die Integration von Machine Learning Modellen und die Nutzung vorhandener Produktionsdaten kann die Parametereinstellung der Produktionsprozesse effizienter gestaltet und beschleunigt werden.

Summary

The increasing demand for battery cells as a result of the electrification of the automotive industry poses considerable challenges for battery cell manufacturers. The production ramp-up of battery cell manufacturing takes several years, with even established manufacturers only achieving an overall system efficiency of 65 % after this phase with an output rate of 10 % of the production volume. This illustrates the inefficient approach to parameter setting during production start-up and the high need for optimization. The current situation in battery cell production is similar to the automotive industry of the 1960s in terms of efficiency and resource consumption, as it is largely based on a trial-and-error approach. The complexity of battery cell production and the large number of factors influencing product quality make it difficult to systematically optimize production processes.

This thesis therefore considers the parameter setting in the production start-up of battery cell production and aims to optimize and accelerate the ramp-up phase with the help of artificial intelligence and the integration of existing production data. In view of the challenges involved in setting parameters during production start-up and the limited resources available, a systematic approach is required to optimize production processes. Genetic algorithms and machine learning are introduced as promising approaches to identify the process parameters based on production data and consider them as a global optimization problem.

The methodology developed for optimizing parameter settings in battery cell production comprises several steps, starting with the definition of the reference system and the identification of relevant process parameters. Existing data is then structured and processed into sub-models before the actual modeling, training and evaluation of the individual models takes place. In a further step, the sub-models are integrated into a superordinate overall model to enable holistic optimization of the parameter settings. The implementation of a software demonstrator comprises a user and a system level, whereby the front end provides a graphical user interface for intuitive use of the genetic algorithm and the back end implements the genetic algorithm. The flexibility and adaptability of the software demonstrator enable a system-independent solution for parameter optimization in different production environments. The validation includes the verification of the reproducibility, convergence and parameter sensitivity of the overall model. The results show that the overall model delivers reproducible and convergent results and enables successful optimization of the parameter settings. Overall, the developed methodology offers a promising approach to optimize battery cell production. By integrating machine learning models and using existing production data, the parameter setting of the production processes can be made more efficient and accelerated.

Inhaltsverzeichnis

Table of Contents

1 Einleitung.....	1
1.1 Ausgangssituation und Problemstellung	1
1.2 Wissenschaftstheoretische Einordnung der Arbeit.....	5
1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	6
2 Stand der Technik.....	8
2.1 Aufbau von Lithium-Ionen Batteriezellen.....	8
2.1.1 Funktionsweise einer Lithium-Ionen Batteriezelle.....	8
2.1.2 Materialien einer Lithium-Ionen Batteriezelle	10
2.1.3 Zellformate und Dimensionen	15
2.1.4 Herausforderungen bei der Produktgestaltung	18
2.2 Prozessschritte in der Batteriezellproduktion	21
2.2.1 Elektrodenfertigung	21
2.2.2 Zellenassemblierung.....	24
2.2.3 Zellfinalisierung.....	27
2.2.4 Prozess- und Produktwechselwirkungen	30
2.3 Produktionsanlauf und Inbetriebnahme von Produktionssystemen.....	32
2.3.1 Phasen des Produktionsanlaufs.....	32
2.3.2 Phasen und Meilensteine der Inbetriebnahme	34
2.4 Digitalisierung und Künstliche Intelligenz.....	37
2.4.1 Bedeutung der Digitalisierung im Produktionskontext	37
2.4.2 Grundlagen des maschinellen Lernens	39
2.4.3 Vorgehen zur Durchführung von Data Analytics Projekten.....	45
2.5 Handlungsbedarf aus der Praxis	50
3 Bestehende Ansätze und Forschungsbedarf.....	53
3.1 Themenfelder und Bewertungskriterien der Literaturrecherche.....	53
3.2 Vorstellung bestehender Forschungsansätze	57
3.2.1 Ansätze zur Datenanalyse in der Batteriezellenproduktion.....	57
3.2.2 Ansätze zur Parameteroptimierung durch maschinelles Lernen	67
3.2.3 Ansätze zur Anlaufunterstützung von Produktionssystemen	71
3.3 Handlungsbedarf aus der Theorie	73
3.4 Ableitung eines methodischen Lösungsansatzes	78
4 Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung.....	81
4.1 Grundlagen der Methodikgestaltung	81
4.1.1 Modelltheorie und Systemtechnik	81
4.1.2 Aufbau und Strukturierung einer Methodik	83
4.2 Allgemeine Vorgehensweise und Ablaufstruktur.....	85
4.3 Detaillierte Beschreibung der Methodik und der Teilmodelle	86

4.3.1 Phase 1: Prozess- und Datenanalyse	86
4.3.2 Phase 2: Modellzuordnung und Datenmodellierung	96
4.3.3 Phase 3: Modellintegration und Parameteroptimierung	102
4.4 Zwischenfazit.....	108
5 Implementierung eines Software-Demonstrators	110
5.1 Softwarearchitektur.....	110
5.2 Frontend: Grafische Benutzeroberfläche	111
5.3 Backend: Datenverarbeitung	113
5.4 Zwischenfazit.....	115
6 Anwendung und Validierung der Methodik.....	116
6.1 Definition und verwendete Validierungstechniken	116
6.2 Anwendungsbeispiel aus der Batteriezellproduktion	118
6.2.1 Definition des Referenzsystems	119
6.2.2 Ermittlung und Auswahl der Prozesskenngrößen.....	120
6.2.3 Analyse der vorhandenen Daten und Versuchsdurchführung	121
6.2.4 Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle.....	126
6.2.5 Modellierung der Prozesskenngrößen beim Mischen.....	132
6.2.6 Modellierung der Prozesskenngrößen beim Beschichten.....	140
6.2.7 Integration der Teilmodelle in ein Gesamtmodell	148
6.2.8 Validierung und Optimierung des Gesamtmodells.....	151
6.3 Zwischenfazit und kritische Reflexion	156
6.3.1 Reflexion der Validierungsergebnisse	156
6.3.2 Überprüfung der Anforderungen an die Methodik	157
7 Zusammenfassung und Ausblick	159
8 Literaturverzeichnis.....	163
9 Anhang	181
9.1 Maschinen und Anlagen der Validierungsversuche	181
9.2 Programmcode der Prozessmodellierung	183

Abbildungsverzeichnis

List of Figures

Abbildung 1: Vergleich der globalen Nachfrage mit den geplanten Produktionskapazitäten ...	2
Abbildung 2: Leistungskennzahlen einer Batteriezellproduktionslinie im Anlauf.....	4
Abbildung 3: Wissenschaftssystematik nach Ulrich	5
Abbildung 4: Funktioneller Aufbau einer Lithium-Ionen-Batterie”	9
Abbildung 5: Materialpaarungen für kommerziell erhältliche Batteriezellen	10
Abbildung 6: Marktanteile nach Kathodenchemie der Batteriezellen	12
Abbildung 7: Übersicht gängiger Elektrodenmaterialkombinationen	13
Abbildung 8: Zellformate und Elektrodenanordnung für Lithium-Ionen Batteriezellen	15
Abbildung 9: Seitenverhältnisse und Abmessungen für Pouchzellen.....	16
Abbildung 10: Seitenverhältnisse und Abmessungen für prismatische Zellen.....	17
Abbildung 11: Seitenverhältnisse und Abmessungen für zylindrische Zellen	18
Abbildung 12: Schnittstelle und Wechselwirkungen auf skalenübergreifender Produktebene	19
Abbildung 13: Entwicklungsprozess für die Produktgestaltung von Batteriezellen.....	20
Abbildung 14: Prozesskette der Elektrodenfertigung	21
Abbildung 15: Prozesskette der Zellausbaufertigung für Rundzellen	24
Abbildung 16: Prozesskette der Zellausbaufertigung für prismatische Zellen	25
Abbildung 17: Prozesskette der Zellausbaufertigung für Pouchzellen.....	26
Abbildung 18: Prozesskette der Zellfinalisierung	27
Abbildung 19: Wechselwirkungen auf der Produkt-, Prozess- und Produktionsebene.....	31
Abbildung 20: Parametermatrix zur Konsolidierung von Prozess- und Produktabhängigkeiten	31
Abbildung 21: Einordnung des Produktionsanlaufs in den Produktentstehungsprozess’	33
Abbildung 22: Phasen und Meilensteine der Montage und Inbetriebnahme	35
Abbildung 23: Extremer Verlauf einer Inbetriebnahme	36
Abbildung 24: Angestrebter Verlauf einer Inbetriebnahme von Anlagen	36
Abbildung 25: Die vier Phasen der industriellen Revolution	38
Abbildung 26: Entscheidungsunterstützung durch maschinelles Lernen in der Produktion ...	39
Abbildung 27: Einordnung und Abgrenzung des maschinellen Lernens.....	40
Abbildung 28: Arten des Maschinellen Lernens.....	41
Abbildung 29: Funktionsprinzip SVM (links) und teilbare und nicht teilbare Datensätze (rechts)	43
Abbildung 30: Funktionsprinzip k-Means Clustering.....	44
Abbildung 31: Funktionsprinzip neuronaler Netze	45
Abbildung 32: Entwicklung von Data-Mining und Data-Science Modellen	46
Abbildung 33: Vorgehen des Knowledge Discovery in Databases (KDD)	47
Abbildung 34: Vorgehen des Cross-Industry Standard Process for Data Mining (CRISP-DM)	48

Abbildung 35: Vorgehen des Data Mining Methodology for Engineering Applications (DMME).....	49
Abbildung 36: Potential einer optimierten Parametereinstellung im Produktionsanlauf.....	51
Abbildung 37: Handlungsbedarf aus der Praxis.....	52
Abbildung 38: Themenfelder und Fokus der Literaturrecherche.....	53
Abbildung 39: Bewertung der Berücksichtigung bestehender Ansätze mit Fokus Batteriezellproduktion.....	74
Abbildung 40: Bewertung bestehender Ansätze und Forschungsergebnisse.....	75
Abbildung 41: Auswertung des betrachteten Modellierungsgegenstand innerhalb der Ansätze	76
Abbildung 42: Anforderungen an die Methodik.....	77
Abbildung 43: Phasen der Modellbildung	82
Abbildung 44: Bestandteile eines Systems	83
Abbildung 45: Aufbau einer Methodik als strukturiertes Vorgehensmodell	84
Abbildung 46: Ansatz zur Modellintegration für die Optimierung der Parametereinstellung.....	85
Abbildung 47: Prozessanalyse zur Definition eines Referenzsystems.....	86
Abbildung 48: Bestimmung der Nebenprozesse mit Einfluss auf den Hauptprozessschritt....	87
Abbildung 49: Parameterdiagramm für definierte Haupt- und Nebenprozesse.....	88
Abbildung 50: Auswahl und Verknüpfung der Prozesskenngrößen.....	89
Abbildung 51: Morphologischer Kasten zur Auswahl möglicher Visualisierungsarten.....	92
Abbildung 52: Histogramme mit unterschiedlicher Anzahl der Intervalle	94
Abbildung 53: Zuordnung der identifizierten Prozesskenngrößen zu Teilmodellen	96
Abbildung 54: Datenaufteilung bei einer k-fachen Kreuzvalidierung	99
Abbildung 55: Modellierungsschaltbild zur Integration der Teilmodelle in ein Gesamtmodell	102
Abbildung 56: Darstellung einer Population sowie der genetischen Operatoren	103
Abbildung 57: Beispielhafte Kodierung der Eingangsgrößen als Gene eines Chromosoms'	104
Abbildung 58: Ablauf bei der Optimierung durch einen genetischen Algorithmus	105
Abbildung 59: Übersicht etablierter Operatoren in genetischen Algorithmen'.....	106
Abbildung 60: Schematische Architektur des Software-Demonstrators.....	110
Abbildung 61: Eingabe der Grenzen für die Prozessparameter und Eingabe der Zielgrößen	111
Abbildung 62: Konfiguration des genetischen Algorithmus und der Operatoren	112
Abbildung 63: Darstellung der Ergebnisse und Parametereinstellungen.....	112
Abbildung 64: Prozesskette der Batteriezellproduktion für Pouchzellen	119
Abbildung 65: Schematische Darstellung des Referenzsystems (mit Haupt- und Nebenprozess)	119
Abbildung 66: Parameterdiagramm für die Prozesse Mischen und Beschichten	121
Abbildung 67: Auszug der Fließkurvenmessungen mit variierten Bindemittelgehalten	122
Abbildung 68: Auszug der Fließkurvenmessungen mit variierten Graphit-Silizium Verhältnissen.....	123

Abbildung 69: Fließkurven der verwendeten Slurries für die Beschichtungsversuche	124
Abbildung 70: Auszug der Bildaufnahmen aus den Beschichtungsversuchen inkl. Nassschichtdicke	125
Abbildung 71: Zuordnung der Daten in Teilmodelle	126
Abbildung 72: Strömungsprofil und Scherraten bei hoher (oben) und niedriger Ausbringung (unten)	128
Abbildung 73: Angepasste Modellierungskurve für die Viskosität	128
Abbildung 74: Beschichtungsbild vor (links) und nach der Vorverarbeitung (rechts)	129
Abbildung 75: Trägheit für verschiedene Anzahlen von Clustern	130
Abbildung 76: Charakteristische Beschichtungsbilder aus jedem der identifizierten Cluster	131
Abbildung 77: Vergleich von Vorhersage und Eingabe für das lineare Modell	134
Abbildung 78: Performance von linearer und Polynom-basierter Regression bei 1000 Datensplits	135
Abbildung 79: Trainingsverlauf über die Verlustfunktion von ANN-2	137
Abbildung 80: Verteilung des relativen Fehlers von ANN-4 auf dem Testdatensatz	139
Abbildung 81: Entscheidungsgrenzen der SVM für zwei Parameter	141
Abbildung 82: Entscheidungsbereiche der linearen Kernel-SVM	143
Abbildung 83: Entscheidungsgrenzen des ANN für zwei Parameter	144
Abbildung 84: Entscheidungsbereiche von ANN-1 (oben) und ANN-2 (unten)	145
Abbildung 85: Trainingsverlauf von ANN-2 für den balancierten Datensplit	147
Abbildung 86: Integriertes Gesamtmodell aus den Misch- und Beschichtungsmodellen	151
Abbildung 87: Identifizierte Parametereinstellungen innerhalb des vordefinierten Prozessbereichs	152
Abbildung 88: Resultierende Vorhersagen für die identifizierten Parametereinstellungen...	152
Abbildung 89: Konvergenz des Fitnesswerts über mehrere Generationen	153
Abbildung 90: Histogramm der Generationen bis zum Erreichen des angestrebten Fitnesswerts	154
Abbildung 91: Korrelationsmatrix der Eingangs- und Zielgrößen des genetischen Algorithmus	155
Abbildung 92: Sensitivität von Graphit und der Pumpendrehzahl gegenüber Silizium	155
Abbildung 93: Sensitivität von Drehzahl und Clustervorhersage gegenüber der Bahngeschwindigkeit	156
Abbildung 94: Präzisionswaage (links) und Mischer der Firma Eirich Typ EL 1 (rechts) ...	181
Abbildung 95: Rotationsviskosimeter (links) und Viskositätsmessung (rechts)	181
Abbildung 96: Beschichtungsanlage der Firma Bürkle 2000K1	182
Abbildung 97: Schichtauftrag mit Schlitzdüse (links) und Kamera der Firma Cognex (rechts)	182
Abbildung 98: Programmcode des genetischen Algorithmus, 1/2	183
Abbildung 99: Programmcode des genetischen Algorithmus, 2/2	184
Abbildung 100: Programmcode der Prozessmodellierung Mischen, 1/2	184

Abbildung 101: Programmcode der Prozessmodellierung Mischen, 2/2.....	185
Abbildung 102: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 1/3	185
Abbildung 103: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 2/3	186
Abbildung 104: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 3/3	187

Formelzeichen und Abkürzungsverzeichnis

Formula Symbols and Abbreviations

-	GWh	Gigawattstunde
ACIR	Ω	Wechselstrom-Innenwiderstand
ANN	-	Artificial Neural Network (künstliches neuronales Netz)
API	-	Application programming interface (Programmierschnittstelle)
ARD	-	Automatic Relevance Determination
bspw.	-	beispielsweise
C	h^{-1}	Laderate (C-Rate)
CATL	-	Contemporary Amperex Technology Co., Limited
CMC	-	Carboxymethylcellulosen
CNN	-	Convolutional Neural Network
CPPS	-	Cyber-physischen Produktionssystemen
CPS	-	Cyber-Physical Systems
CRISP-DM	-	Cross-industry standard process for data mining
CSS	-	Cascading Style Sheets
DCIR	Ω	Gleichstrom-Innenwiderstand
DEC	-	Diethylcarbonate
DMC	-	Dimethylcarbonate
DMME	-	Data Mining Methodology for Engineering Applications
DSS	-	Decision Support System
EC	-	Ethylencarbonate
EKD	-	Expert Knowledge Database
EMC	-	Ethylmethylcarbonate
EoL	-	End-of-Line
FMEA	-	Fehlermöglichkeits- und Einflussanalyse
GA	-	Genetic algorithm (genetischer Algorithmus)
GLM	-	Generalized Linear Models
GRD	-	Gaussian Process Regression
HT	$^{\circ}\text{C}$	Hochtemperatur
HTML	-	Hypertext Markup Language

HVAC	-	Heating, Ventilation and Air Conditioning (Klimatechnik)
IPA	-	Institut für Produktionstechnik und Automatisierung
KDD	-	Knowledge Discovery in Databases
KI	-	Künstliche Intelligenz
LCO	-	Lithium-Kobalt-Oxid
LFMP	-	Lithium-Eisen-Mangan-Phosphat
LFP	-	Lithium-Eisen-Phosphat
LMO	-	Lithium-Mangan-Oxid
LTO	-	Lithiumtitanat
MAE	-	Mean absolute error
MAPE	-	Mean absolute percentage error
MDM	-	Multiple-Domain Matrizen
ML	-	Machine Learning (maschinelles Lernen)
MLP	-	Multi-Layer-Perceptron
NCA	-	Lithium-Nickel-Kobalt-Aluminium-Oxid
NMC	-	Lithium-Nickel-Kobalt-Mangan-Oxid
OEE	-	Overall Equipment Effectiveness (Gesamtanlageneffektivität)
OVO	-	One-vs-One (Klassifizierung)
OVR	-	One-vs-Rest (Klassifizierung)
PC	-	Propylencarbonate
PS	-	Prozessschritt
PSO	-	Particle Swarm Optimization
PT	-	Produktionstest
R ²	-	Coefficient of determination (Determinationskoeffizient)
ReLU	-	Rectified Linear Unit
RMSE	-	Root mean-squared error
RSM	-	Response Surface Methodology
RT	°C	Raumtemperatur
SBR	-	Styrol-Butadien-Kautschuk
SEI	-	Solid-Electrolyte-Interphase
SGD	-	Stochastic gradient descent
SISSO	-	Sure Independent Screening and Sparsifying Operator

SOC	%	State-of-Charge (Ladezustand)
SVM	-	Support Vector Machine
USA	-	United States of America (Vereinigten Staaten)
VEP	-	Virtual experiments platform
vgl.	-	vergleiche
VIF	-	Variance inflation factor
XGB	-	eXtreme Gradient Boosting
z.B.	-	zum Beispiel
η	Pa·s	(dynamische) Viskosität

1 Einleitung

Introduction

„Die Batteriezellproduktion ist heute zum großen Teil immer noch auf einem Stand, auf dem die Automobilindustrie in den 1960er Jahren war: Man probiert Dinge aus, wartet ab, ob sie sich in der Praxis bewähren und justiert dann den Fertigungsprozess nach. Diese Trial-and-Error-Methode ist nicht nur sehr ineffizient, sondern auch langwierig und mit dem Verbrauch von Energie und Ressourcen Verbunden.“¹

– Kai Peter Birke, Fraunhofer IPA

Die vorliegende Arbeit thematisiert die Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion durch den Einsatz von genetischen Algorithmen und maschinellem Lernen durch die Einbindung von Bestandsdaten aus der Produktion. In diesem Kapitel werden zunächst die Ausgangssituation und Problemstellung (Abschnitt 1.1) dieser Arbeit beschrieben. Danach erfolgt die wissenschaftstheoretische Einordnung (Abschnitt 1.2) der Dissertation. Abschließend werden die zugrundeliegende Zielsetzung formuliert sowie der Aufbau der Arbeit (Abschnitt 1.3) dargestellt.

1.1 Ausgangssituation und Problemstellung

Initial situation and problem definition

Mit den weltweiten Klimabewegungen haben sich die Forderungen an die Politik verschärft, verstärkte Maßnahmen einzuführen und umzusetzen. Obwohl die Dekarbonisierungsziele sämtliche Sektoren betreffen, trägt der Verkehrssektor europaweit etwa 25 % zu den Treibhausgasemissionen bei und verzeichnet in den letzten Jahren als einziger Sektor eine Zunahme der Emissionen aufgrund steigender Mobilitätsanforderungen. In Wissenschaft und Industrie herrscht mittlerweile weitgehender Konsens, dass die Elektrifizierung der Mobilität die maßgebliche Antriebstechnologie der Zukunft ist. In den kommenden Jahren wird ein signifikanter Markthochlauf erwartet. Der Anteil der Elektrofahrzeuge an den weltweiten Neuzulassungen wird bis 2030 auf bis zu 75 % geschätzt. Andere Antriebstechnologien wie Wasserstoff in Kombination mit der Brennstoffzelle oder synthetische Kraftstoffe werden unter ambitionierten Klimaschutzstrategien vorwiegend im Langstrecken- und Schwerlastverkehr eine Rolle spielen.²

¹ Vgl. Weik (Pressemitteilung - Handbook on Smart Battery Cell Manufacturing) 2022.

² Vgl. Thielmann et al. (Batterien für Elektroautos: Faktencheck und Handlungsbedarf) 2020, S. 7.

In den vergangenen Jahren hat sich die Batterietechnologie im Zuge der Energiewende und der damit verbundenen Transformation zu einer Schlüsseltechnologie für die Elektrifizierung der Automobilindustrie entwickelt. In einem batterieelektrischen Fahrzeug stellen die Batteriekosten etwa 33 % bis 44 % der Gesamtkosten dar. Dabei entfallen etwa 60 % dieser Kosten wiederum auf die Batteriezellen. Dies betont die essenzielle Rolle der Batterie im Kontext des Elektrofahrzeugs. Somit trägt die Batteriezelle einen erheblichen Teil zur Wertschöpfung bei der Herstellung von Elektrofahrzeugen dar.³

Die Lithium-Ionen-Batterie hat sich als dominierende Technologie im Markt etabliert. Aufgrund ihrer umfassenden Vorteile wie beispielsweise hohe Energiedichte, geringe Selbstentladung und hohe Lebensdauer stellt sie für eine Vielzahl von Anwendungen eine ideale Technologielösung dar. Eine Aufschlüsselung der Kosten einer branchenüblichen Batteriezelle zeigt, dass die Materialkosten mit einem Anteil von etwa 72 % den größten Beitrag leisten und trotz Verbesserung der Zellchemie in Zukunft nur schwer zu senken sein werden. Aber auch die Fertigungskosten haben mit etwa 22 % einen hohen Einfluss. Daher sind sie ein vielversprechender Hebel für eine progressive Kostensenkung.⁴

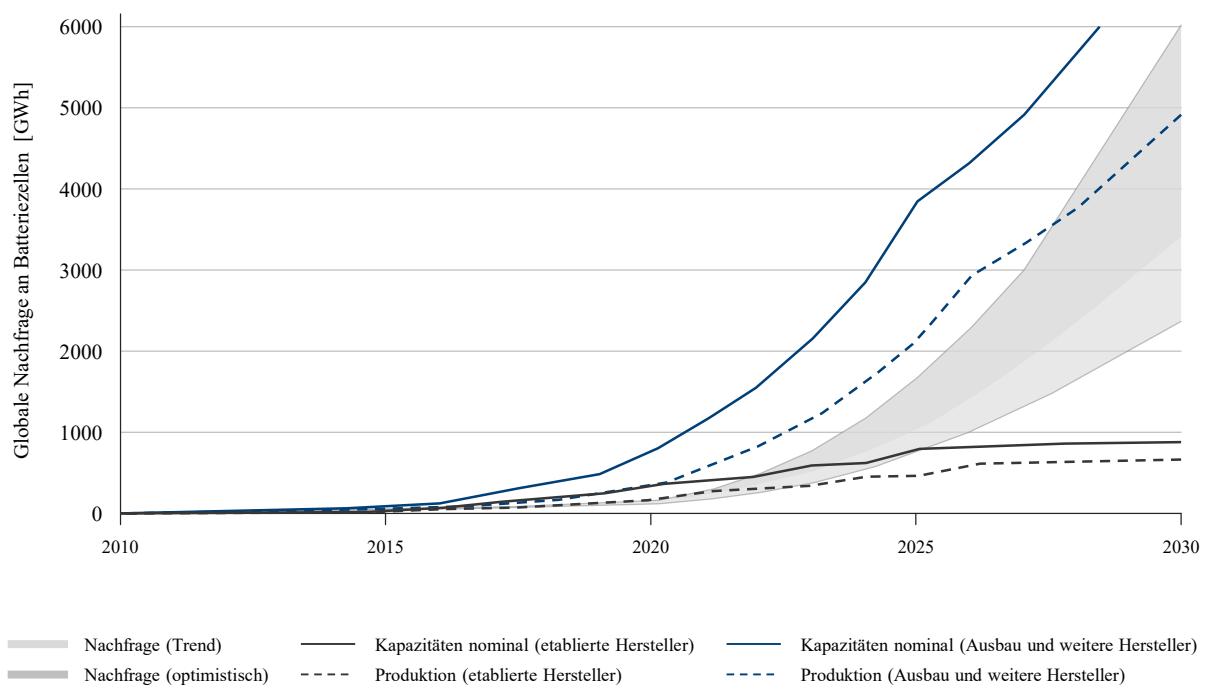


Abbildung 1: Vergleich der globalen Nachfrage mit den geplanten Produktionskapazitäten⁵

Der weltweite Bedarf nach Batteriezellen ist in den letzten Jahren stark angestiegen, was vor allem auf die wachsende Nachfrage an Elektrofahrzeugen zurückzuführen ist. Dies hat zu zahlreichen Ankündigungen neuer Produktionsstätten für Batteriezellen geführt, um die steigende Nachfrage zu befriedigen und die regionale Unabhängigkeit in der Produktion zu

³ Vgl. Heimes et al. (Elektromobilität als Schlüsseltechnologie der Mobilitätswende) 2024, S. 56.

⁴ Vgl. Bernhart et al. (Rising opportunities for battery equipment manufacturers) 2020, S. 7ff.

⁵ Vgl. Michaelis et al. (Roadmap Batterie-Produktionsmittel 2030) 2023, S. 14.

gewährleisten. Insbesondere Europa entwickelt sich zu einem wichtigen Standort für die Produktion von Batteriezellen für die Elektromobilität. In den letzten Jahren wurden verschiedene Ankündigungen und Vorhaben von Automobilherstellern, Batteriezellherstellern und neuen Marktteilnehmern bekannt gegeben, die diese Entwicklung bestätigen. In Abbildung 1 wird die globale Nachfrage an Batteriezellen im Vergleich mit den angekündigten Produktionskapazitäten dargestellt. Die Erweiterungsabsichten der führenden Zellhersteller stehen im Wettbewerb mit den Ankündigungen neuer Marktteilnehmer. Diese Dynamik zwischen etablierten Akteuren und neuen Wettbewerbern prägt die Marktlandschaft und kann zu erheblichen Veränderungen in der Produktionsstruktur führen. Der Ausbau und Einstieg neuer Hersteller ist nicht nur eine Reaktion auf die steigende Nachfrage, sondern auch eine strategische Initiative, um eine führende Rolle im globalen Wettbewerb der Batterieproduktion einzunehmen und die Unabhängigkeit von Lieferanten zu stärken.⁶

Der Haupttreiber für die Nachfrage an Batteriezellen ist die Automobilindustrie.⁷ Die Vorgaben der Automobilhersteller bezüglich Qualitätsstandards, Leistungskriterien, Kosten und technischen Spezifikationen haben einen weitreichenden Einfluss auf die Anforderungen an eine Batteriezellproduktion.⁸ Um die steigende Nachfrage zu bedienen, müssen Batteriezellhersteller nicht nur den strengen Anforderungen gerecht werden, sondern auch den Ausbau der Produktionskapazitäten planen. In der Regel geschieht der Ausbau in einem stufenweisen Anlaufprozess. In dieser Anlaufphase müssen nicht nur die Fabrik gebaut, die Produktionsanlagen eingerichtet, sondern auch die Produktionsprozesse qualifiziert und die Produkte validiert werden, damit sie den geforderten Standards entsprechen. Der Spagat zwischen den zeitlichen Vorgaben der Automobilindustrie und der Sicherstellung qualitativ hochwertiger Produkte ist eine Herausforderung.⁹

In Abbildung 2 ist ein typisches Anlaufszenario einer neuen Batteriezellproduktion für die ersten Jahren der Produktion einschließlich exemplarischer Leistungskennzahlen der Fertigungsline dargestellt. Der Produktionsanlauf erstreckt sich über bis zu fünf Jahre. In dieser Zeit wird ein gestaffeltes Produktionsvolumen vorgesehen, um einen stufenweisen Ausbau der Produktionskapazitäten umzusetzen. Allerdings verzeichnen selbst etablierte und erfahrene Batteriezellenhersteller hohe Ausschussraten, die insbesondere im ersten Jahr bis zu 25 % betragen können. Darüber hinaus stellt eine niedrige Gesamtanlageneffektivität ein weiteres Problem dar. Auch nach dem Produktionsanlauf liegen die Werte für eine Batterieproduktion im Großserienmaßstab deutlich unter 80 % der geplanten Kapazitäten.

Hohe Ausschussraten sind eine finanzielle Belastung und erschweren eine schnelle Amortisation der getätigten Investitionen. Aufgrund der langen Produktionsanlaufzeiten ist die Amortisationszeit insbesondere für neue Produktionsstätten ein großes Risiko. Dadurch wird die Notwendigkeit unterstrichen, Maßnahmen zur Effizienzsteigerung umzusetzen, um die globale

⁶ Vgl. Michaelis et al. (Roadmap Batterie-Produktionsmittel 2030) 2023, S. 10ff.

⁷ Vgl. Bernhart (How to manage supply chain risk for lithium-ion batteries) 2022.

⁸ Vgl. Frith et al. (A non-academic perspective on the future of lithium-based batteries) 2023, S. 2ff.

⁹ Vgl. Hackmann (Outlook on the battery manufacturing equipment industry) 2023.

Wettbewerbsfähigkeit zu sichern, eine nachhaltige Produktion zu gewährleisten und die Produktionskosten zu senken.¹⁰

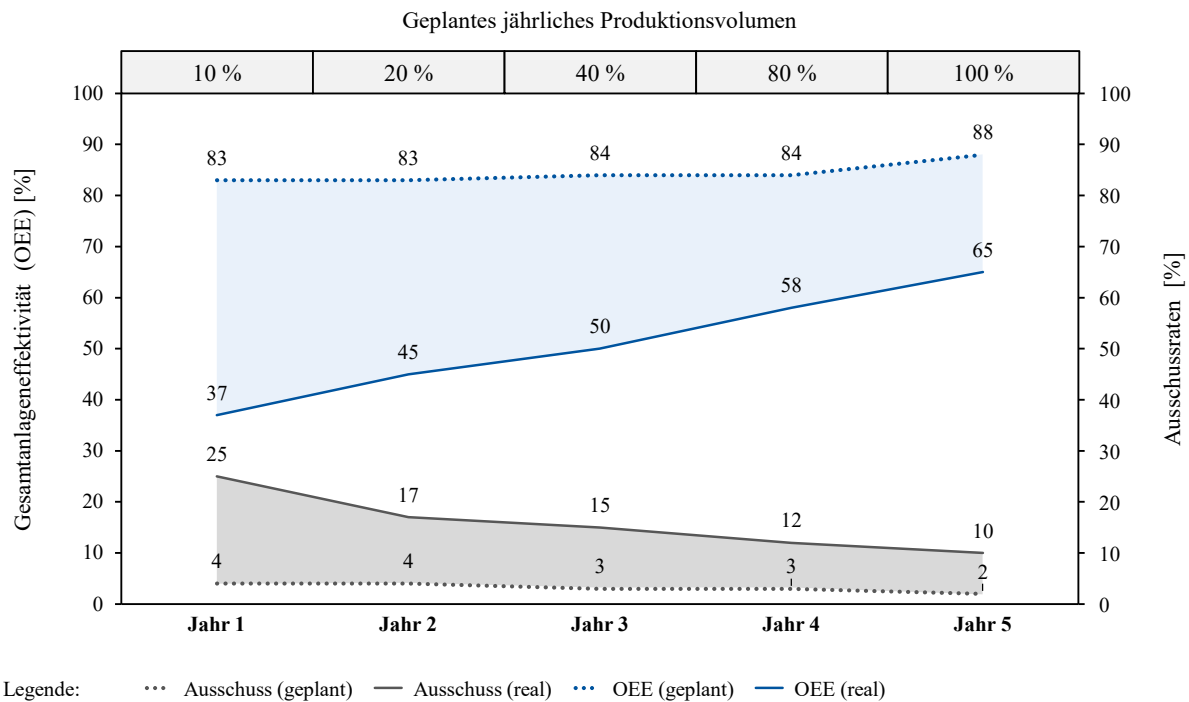


Abbildung 2: Leistungskennzahlen einer Batteriezellproduktionslinie im Anlauf¹¹

Ein wesentlicher Grund für die hohe Ausschussrate liegt in der technologischen Komplexität der Batteriezellproduktion. Der Grund für diese Komplexität liegt in der Kombination aus kontinuierlichen und diskontinuierlichen Prozessen sowie der Verkettung von Stück- und Batchprozessen. Die Vielzahl der Prozesse, ihre Diversität und zeitliche Abhängigkeit führen zu einer komplexen Reihe von Ursache-Wirkbeziehungen zwischen Prozessparameter und der Produktqualität.¹² Infolge der langen Prozesskette wirken sich die Prozessparameter der einzelnen Prozessschritte auf die strukturellen Eigenschaften der Zwischenprodukte aus, die wiederum die endgültigen Produkteigenschaften beeinflussen. Abweichungen in den Prozessparametern können somit zu Qualitätsmängeln und Ausschuss führen. Um diese Herausforderungen zu adressieren und die Effizienz der Batteriezellproduktion zu steigern, ist eine umfassende Optimierung der Parametereinstellung für die Anlagentechnik erforderlich.¹³

Bisher sind die Kausalitäten und Interdependenzen zwischen den Prozessparametern und Umgebungsbedingungen in Hinblick auf die Zwischen- und Endprodukteigenschaften der Batterie zelle weitgehend unbekannt. In den letzten Jahren haben insbesondere datengetriebene Ansätze aufgrund der fortschreitenden Digitalisierung in der Produktion an Bedeutung gewonnen, um eine kosteneffiziente und qualitätsorientierte Optimierung der Prozesskette der Batteriezell-

¹⁰ Vgl. Heimes et al. (Vom Prototypen zur Serienfertigung) 2024, S. 217ff.

¹¹ Vgl. Hackmann (Outlook on the battery manufacturing equipment industry) 2023.

¹² Vgl. Westermeier et al. (Complexity Management for the Start-up in Lithium-ion Cell Production) 2014, S. 13.

¹³ Vgl. Turetsky et al. (Toward Data-Driven Applications in Lithium-Ion Battery Cell Manufacturing) 2020, S. 1.

produktion zu ermöglichen. Ein ganzheitlicher Einsatz von datengestützten trägt dazu bei, die Batteriezellproduktion effizienter zu gestalten und gleichzeitig die Entwicklung neuer Batteriematerialien voranzutreiben.¹⁴

1.2 Wissenschaftstheoretische Einordnung der Arbeit

Scientific-theoretical context of the thesis

Für eine nachvollziehbare Darstellung der Ergebnisse und Erkenntnisse erfolgt in diesem Abschnitt die forschungsmethodische Einordnung. Die Inhalte der vorliegenden Arbeit lassen nach dem wissenschaftssystematischen Bezugsrahmen nach ULRICH¹⁵ einordnen, welcher zwischen den Formalwissenschaften und Realwissenschaften unterscheidet (vgl. Abbildung 3). Während in der Formalwissenschaft die Konstruktion von Sprache und Anwendungsregeln von abstrakten Zeichensystemen behandelt werden, beschäftigt sich die Realwissenschaft mit der Beschreibung und Erklärung von nachweisbaren und empirischen Zusammenhängen. Die reinen Grundlagenwissenschaften beabsichtigen die Entwicklung von theoretischen Erklärungsmodellen zur Beschreibung der wahrnehmbaren Realität. Die angewandten Wissenschaften betrachten und analysieren vorwiegend die praktischen Handlungsalternativen und der Entwicklung von Entscheidungsmodellen.

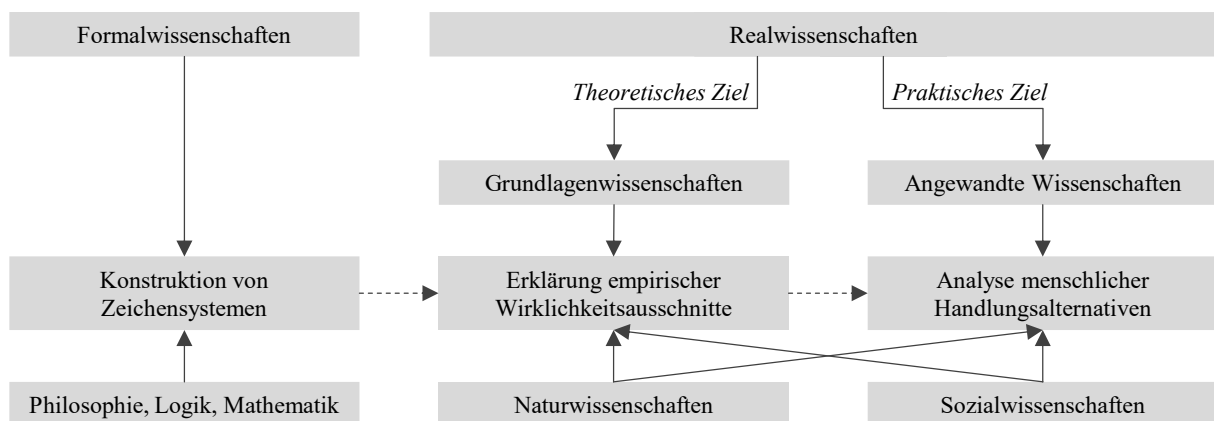


Abbildung 3: Wissenschaftssystematik nach Ulrich

Die Europäische Kommission¹⁶ unterscheidet darüber hinaus zwischen Grundlagenforschung und angewandte Forschung. Während sich die Grundlagenforschung darauf fokussiert, neues Grundlagenwissen ohne unmittelbare praktische Anwendungen zu erlangen, umfasst die angewandte Forschung sowohl industrielle Forschung als auch experimentelle Entwicklung. Die industrielle Forschung bezeichnet das systematische Erforschen zur Entwicklung neuer Produkte, Verfahren oder Dienstleistungen sowie wesentliche Verbesserungen an bestehenden Innovationen vorzunehmen. Dies schließt die Entwicklung von Teilen komplexer Systeme und Prototypen in Laborumgebungen ein, wenn dies für die Validierung technologischer

¹⁴ Vgl. Haghi et al. (Machine Learning in Lithium-Ion Battery Cell Production) 2023, S. 1.

¹⁵ Vgl. Ulrich et al. (Wissenschaftstheoretische Grundlagen der Betriebswirtschaftslehre) 1976, S. 304ff.

¹⁶ Vgl. Europäische Kommission (Unionsrahmen für staatliche Beihilfen zur Förderung von Forschung, Entwicklung und Innovation) 2014.

Grundlagen erforderlich ist. Die experimentelle Entwicklung umfasst den gezielten Einsatz vorhandener Wissensressourcen zur Entwicklung neuer oder verbesserter Produkte, Verfahren oder Dienstleistungen. Dies beinhaltet Konzeption, Planung, Dokumentation sowie Entwicklung von Prototypen und Pilotprojekten, insbesondere unter realen Bedingungen, um noch nicht endgültig festgelegte Innovationen wesentlich zu verbessern.

Die vorliegende Arbeit ist den Ingenieurwissenschaften zuzuordnen und lässt sich demnach als Schnittstelle zwischen den grundlegenden und angewandten Wissenschaften klassifizieren. Die angestrebten Ergebnisse und Erkenntnisse sollen die Optimierung und Durchführung des Produktionsanlaufs der Batteriezellproduktion unterstützen. Demnach entspringt die Zielsetzung einem praktischen Kontext und strebt eine Methode zur Ableitung von objektiven Entscheidungen und Maßnahmen an.

1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Objectives and structure of the thesis

Die zunehmende Bedeutung der Batteriezellproduktion erfordert eine Optimierung der Parametereinstellung für Prozesse und Anlagentechnik, um die Wettbewerbsfähigkeit im globalen Kontext zu gewährleisten. Die Fokussierung auf die Reduzierung der Anlaufzeit zielt auf eine unmittelbare Verbesserung der Produktionseffizienz ab. Diese Dissertation adressiert diese Herausforderung, indem sie auf die Einbindung von Produktionsdaten und den systematischen Einsatz von maschinellem Lernen setzt. Durch die systematische Analyse und Optimierung der Parametereinstellung strebt die Arbeit eine Erhöhung der Gesamtanlageneffektivität an. Der Beitrag dieser Forschung liegt in der praxisorientierten Anwendbarkeit, um die Leistungsfähigkeit der Batteriezellproduktion während der Inbetriebnahme und des Produktionsanlaufs entscheidend zu steigern.

Die Gliederung der vorliegenden Arbeit folgt der wissenschaftstheoretischen Einordnung und dem explorativen Forschungsansatz nach Kubicek¹⁷. Daraus ergibt sich der Aufbau der Arbeit anhand von sieben Schritten, um den beschriebenen Handlungsbedarf aus der Praxis in einen theoretischen Anwendungszusammenhang zu überführen und praktischen Handlungsempfehlungen abzuleiten.

Das erste Kapitel beschreibt die Ausgangssituation und Problembeschreibung der vorliegenden Arbeit. Außerdem erfolgen die forschungsmethodische Einordnung und die Ableitung der Zielsetzung. Das zweite Kapitel adressiert den Betrachtungsbereich und stellt die wissenschaftlichen Grundlagen der vorliegenden Arbeit dar. Zunächst werden die allgemeinen Grundlagen der Batteriezellproduktion vorgestellt und ein einheitliches Begriffsverständnis zur Anwendung von genetischen Algorithmen und maschinellem Lernen geschaffen. Dabei werden insbesondere die praktischen Herausforderungen im Produktionsanlauf und Inbetriebnahme von

¹⁷ Vgl. Kubicek (Heuristische Bezugsrahmen und heuristisch angelegte Forschungsdesign) 1976, S. 13.

Maschinen- und Anlagentechnik betrachtet und der Handlungsbedarf aus Sicht der Praxis hergeleitet.

Im dritten Kapitel werden bestehende Ansätze zur Einbindung von Bestandsdaten im Produktionsanlauf durch Methoden des maschinellen Lernens vorgestellt. Dabei werden insbesondere solche Ansätze betrachtet, die sich in den Kontext des Betrachtungsbereichs einordnen lassen und den Handlungsbedarf aus Sicht der Praxis indizieren. Anschließend werden die Ansätze hinsichtlich ihres Beitrags zur Problemlösung bewertet und der Handlungsbedarf aus Sicht der Theorie dargestellt. Im vierten Kapitel erfolgt die Konzeptionierung einer Methodik zur Parametereinstellung im Produktionsanlauf durch den Einsatz von genetischen Algorithmen und maschinellem Lernen. Dafür wird zunächst das Grundkonzept vorgestellt sowie methodische Vorgehensweise inklusive der dazugehörigen Phasen und Lösungsbausteine detailliert. Im Fokus liegt dabei die Anwendung im industriellen Umfeld und Ableitung von praktischen Handlungsempfehlungen.

Das fünfte Kapitel beschreibt die praktische Erprobung und die Implementierung eines Software-Demonstrators. Nach einer eingehenden Erklärung der Softwarearchitektur konzentriert sich die Beschreibung auf das Frontend, welches die grafische Benutzeroberfläche präsentiert, sowie auf das Backend, das die Datenverarbeitung orchestriert. Dadurch wird die praxisnahe Implementierung der Anwendung und Umsetzung in realen Anwendungsszenarien aufgezeigt.

Im sechsten Kapitel erfolgen die Verifizierung und Validierung der Ergebnisse. Dabei werden insbesondere die Güte der Parameterbestimmung auf Grundlage von materialspezifischen Bestandsdaten bewertet und Fehlerraten für verschiedene Ausführungsszenarien quantifiziert. Abschließend erfolgt der Vergleich zwischen einer konventionellen Parametereinstellung basierend auf industriellen Erfahrungswerten und einer Parametereinstellung durch den Einsatz von genetischen Algorithmen und maschinellem Lernen. Das siebte Kapitel fasst die zentralen Ergebnisse und Erkenntnisse der vorliegenden Arbeit zusammen und gibt eine kritische Reflexion hinsichtlich des weiterführenden Forschungsbedarfs.

2 Stand der Technik

State of the art

Das folgende Kapitel erläutert die Grundlagen der Batteriezellproduktion von Lithium-Ionen Batteriezellen sowie Zusammenhänge im Kontext des Produktionsanlaufs und Inbetriebnahme. Außerdem werden die Grundlagen der Digitalisierung und künstlicher Intelligenz sowie die zentralen Herausforderungen und Potentiale bei der Anwendung datenbasierter Ansätze in der Produktion thematisiert.

Die Produktion von Batteriezellen ist ein entscheidender Faktor für den Erfolg der Elektromobilität, da die Kosten der Batterie einen erheblichen Anteil am Gesamtfahrzeug ausmachen. Da die Lithium-Ionen-Batteriezelle derzeit die vorherrschende Technologie auf dem Markt darstellt, wird sie in der vorliegenden Arbeit als Referenz zugrunde gelegt. Um ein grundlegendes Verständnis zu schaffen, wird zunächst auf den Aufbau der Batteriezelle sowie die etablierten Prozessschritte eingegangen (Abschnitt 2.1) und daraufhin die Produktionsprozesse einer Lithium-Ionen Batteriezellen (Abschnitt 2.2) vorgestellt. Anschließend wird der Produktionsanlauf in der Automobilindustrie vorgestellt und darüber hinaus die Inbetriebnahme von verfahrenstechnischen Anlagen (Abschnitt 2.3) detailliert. Weiter werden die Grundlagen datenbasierter Ansätze in der Produktion behandelt und Begriffe aus dem Themenfeld Digitalisierung und künstlicher Intelligenz (Abschnitt 2.4) erläutert. Abschließend wird der Handlungsbedarf aus der Praxis (Abschnitt 2.5) veranschaulicht, der sich aus der Einbindung von datenbasierten Ansätzen in den Anlauf der Batteriezellproduktion ergibt.

2.1 Aufbau von Lithium-Ionen Batteriezellen

Design of lithium-ion battery cells

In dem folgenden Abschnitt werden zunächst der allgemeine Aufbau und die Funktionsweise einer Lithium-Ionen Batteriezelle (Abschnitt 2.1.1) erläutert. Anschließend wird ein Überblick der verwendeten Materialien einer Lithium-Ionen Batteriezellen (Abschnitt 2.1.2) gegeben, um das Spektrum an Materialkombinationen darzustellen. Außerdem erfolgt die Einordnung der etablierten Zellformate und Dimensionen der Batteriezellen (Abschnitt 2.1.3) für automobiler Anwendungen. Darauf aufbauend werden die Herausforderungen und die Komplexität der Produktgestaltung (Abschnitt 2.1.4) beschrieben.

2.1.1 Funktionsweise einer Lithium-Ionen Batteriezelle

Operating principle of a lithium-ion battery cell

Die grundlegende Funktionsweise und der Aufbau von Lithium-Ion Batteriezellen ist ungeachtet der Anwendung, Form und Dimensionierung identisch (Abbildung 4). Die grundlegenden Bestandteile einer Batteriezelle sind Anode und Kathode sowie Separator und Elektrolyt.¹⁸ Die

¹⁸ Die verwendeten Begriffe Anode und Kathode beziehen sich hinsichtlich der Oxidations- und Reduktionsprozesse allgemeingültig auf den Entladevorgang der Batterie. Daraus ergibt sich die Anode als positive Elektrode und die Kathode als negative Elektrode.

Anode und Kathode bestehen jeweils aus einem Stromableiter, eine dünne Metallfolie, sowie dem beschichteten Aktivmaterial ergänzt durch Binder, Lösemittel und Additive. Der flüssige Elektrolyt einer Lithium-Ionen Batteriezelle benetzt alle Materialien vollständig und gewährleistet die ionische Leitfähigkeit für den Ladungsaustausch zwischen Anode und Kathode. Der mikroporöse Separator hat eine isolierende Funktion und trennt Anode und Kathode elektrisch voneinander. Allerdings muss der Separator in der Lage sein, den Ionenfluss zwischen Anode und Kathode weiterhin zu ermöglichen, damit sich die Lithium-Ionen entsprechend bewegen und einlagern können.^{19,20,21}

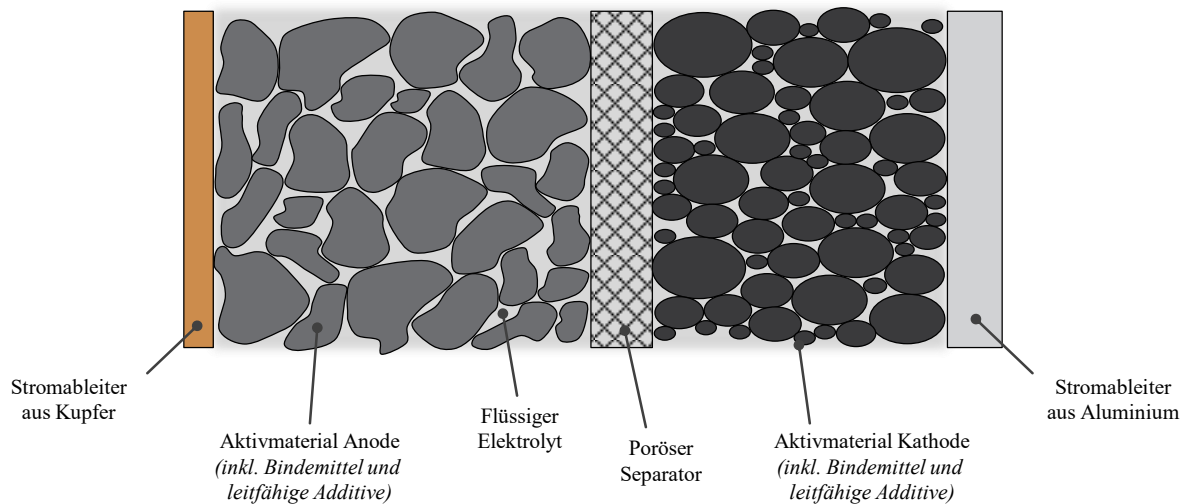


Abbildung 4: Funktioneller Aufbau einer Lithium-Ionen-Batterie^{22,23,24}

Um die Funktionsweise einer Batteriezelle als Energiespeicher darzustellen, werden die chemischen Reaktionen anhand eines Beispiels erläutert. Für eine Lithium-Ionen-Batterie mit einer Anode aus Kohlenstoffgraphit C_6 und einer Kathode aus Lithiummetalloxid $LiMO_2$ (mit einem beispielhaften Übergangsmetall M) lassen sich die elektrochemischen Prozesse wie folgt beschreiben^{25,26}:

- Reaktion der Kathode: $Li_{(1-n)}MO_2 + n \cdot Li^+ + n \cdot e^- \rightarrow LiMO_2$ mit $0 < n < 0,5$
- Reaktion der Anode: $Li_mC_6 \rightarrow 6 C + m \cdot Li^+ + m \cdot e^-$ mit $0 < m < 1$

Beim Entladevorgang oxidiert die Anode und Elektronen werden freigesetzt. Diese Elektronen fließen über den Stromableiter der Anode über eine externe Last hin zum Stromableiter der Kathode. An der Kathode werden die Elektronen durch eine chemische Reduktion aufgenommen. Gleichzeitig findet ein Ionenfluss der Lithium-Ionen über den Elektrolyten durch den

¹⁹ Vgl. Leuthner (Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien) 2013, S. 14f.

²⁰ Vgl. Gao et al. (Brief overview of electrochemical potential in lithium ion batteries) 2016.

²¹ Vgl. Dormann et al. (Compendium Li-ion batteries) 2021, S. 2ff.

²² Vgl. Yao (The Li(ttle) ion that could) 2021.

²³ Vgl. Leuthner (Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien) 2013, S. 15.

²⁴ Vgl. Heimes et al. (Komponentenherstellung einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2019, S. 3.

²⁵ Vgl. Vuorilehto (Materialien und Funktion) 2013, S. 22f.

²⁶ Vgl. Monconduit et al. (Electrodes for Li-ion Batteries) 2015, S. xi.

Separator statt, wodurch die elektrochemische Ausgleichsreaktion abgeschlossen wird.²⁷ Der funktionale Aufbau aus Anode, Kathode, Separator und Elektrolyte und die Funktionsweise der Lithium-Ionen-Batterie bleiben alle Zellformate identisch.²⁸

2.1.2 Materialien einer Lithium-Ionen Batteriezelle

Materials of a lithium-ion battery cell

Die erste Generation kommerzieller Batterien basiert auf den Forschungsarbeiten von Goodenough, Whittingham und Yoshino zur Verwendung von LiCoO_2 -Graphit Batterien und stellte einen bedeutenden Durchbruch in der Geschichte der Lithium-Ionen Batteriezelle dar. Auch heute noch findet die Generation von Batteriezellen breite Anwendung, insbesondere für die Unterhaltungselektronik. Neben Kenngrößen wie Leistung, Kapazität, Lebensdauer und Sicherheit haben die eingesetzten Elektrodenmaterialien einen großen Einfluss auf das elektrochemische Potential und die daraus resultierende Zellspannung. In Abbildung 5 werden gängige Materialpaarungen von kommerziell erhältlichen Lithium-Ionen-Batterien hinsichtlich der gravimetrischen und volumetrischen Energiedichte dargestellt. Die optimale Kombination von Kathoden- und Anodenmaterialien ist die Voraussetzung, um aktuelle und künftige Anforderungen an eine hohe Energie- und Leistungsdichte zu erfüllen.^{29,30}

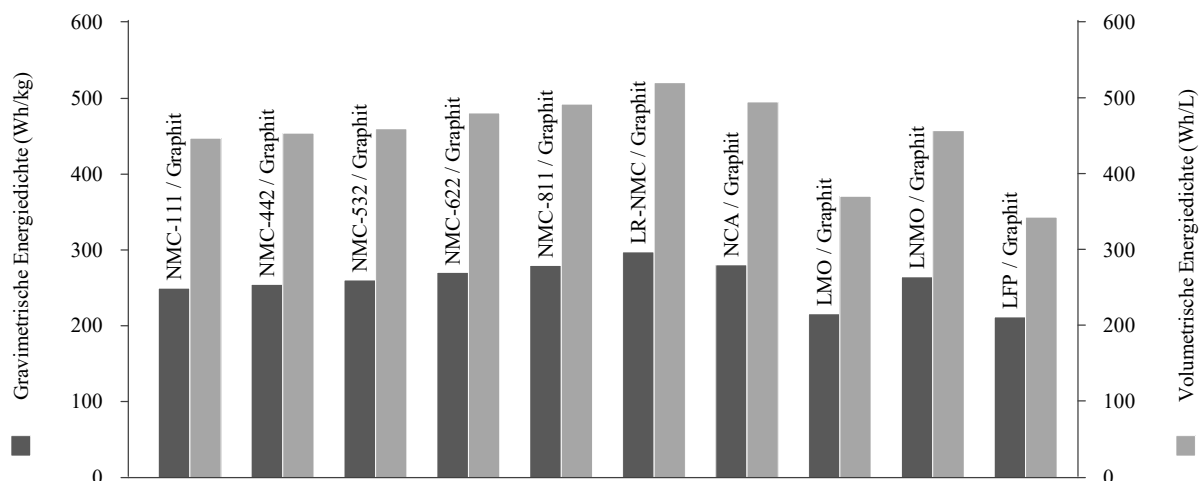


Abbildung 5: Materialpaarungen für kommerziell erhältliche Batteriezellen³¹

Aktivmaterialien der Kathode

Die derzeitigen Entwicklungen der Kathodenmaterialien für Lithium-Ionen-Batterien beziehen sich auf Hochenergiekathoden, Hochleistungskathoden mit hoher Stabilität und kostengünstige Alternativen. Die eingesetzten Aktivmaterialien für Lithium-Ionen-Batterien variieren je nach Anwendungsfall. In Abhängigkeit der verwendeten Materialkombinationen ergeben sich

²⁷ Vgl. Kampker (Elektromobilproduktion) 2014, S. 45f.

²⁸ Vgl. Kampker (Elektromobilproduktion) 2014, S. 54ff.

²⁹ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 1ff.

³⁰ Vgl. Dormann et al. (Compendium Li-ion batteries) 2021, S. 3ff.

³¹ Vgl. Wentker et al. (A Bottom-Up Approach to Lithium-Ion Battery Cost Modeling) 2019, S. 6.

unterschiedliche Eigenschaften der Batteriezelle.³² Zu den derzeit weit verbreiteten Kathoden gehören Lithium-Kobalt-Oxid (LCO), Lithium-Nickel-Kobalt-Aluminium-Oxid (NCA), Lithium-Nickel-Kobalt-Mangan-Oxid (NMC), Lithium-Mangan-Oxid (LMO) und Lithium-Eisenphosphat (LFP).^{33,34}

Lithiumkobaltoxid (LCO) wurde erstmals 1980 durch Goodenough für den Einsatz in Batterien vorgeschlagen. Es zeigt eine hohe theoretische Kapazität, ist aber durch eine kurze Lebensdauer, geringe thermische Stabilität und hohe Kosten eingeschränkt. Materialbeschichtungen wie Metallfluorid und Metallphosphat wird eingesetzt, um die spezifische Kapazität und die thermische Stabilität im Ladezyklus zu erhöhen.³⁵ Aufgrund der hohen Kosten und die schlechte thermische Stabilität ist die Anwendung von LCO in der Elektromobilität allerdings weiterhin begrenzt.³⁶

Lithium-Manganoxid (LMO) zeichnet sich durch kostengünstige und dreidimensionale Diffusionspfade aus, die den Ionenfluss und die Stabilität im Vergleich zu LCO verbessern. Zu den Nachteilen gehören jedoch eine begrenzte Zykluslebensdauer, eine geringe Kapazität und eine schlechte Leistung bei hohen Temperaturen.³⁷

Lithium-Nickel-Kobalt-Aluminiumoxid (NCA) besitzt eine hohe spezifische Energie, eine hohe spezifische Leistung und eine lange Lebensdauer. Die Verwendung von Aluminium und Kobalt verbessert die thermische Stabilität und die Leistung, was zu einer höheren spezifischen Kapazität und Energiedichte führt. Die Oberflächenbehandlung von NCA mit Kohlenstoffröhren (engl.: Carbon Nanotubes) erhöht die Kapazität und Leistung bei hohen Stromstärken, wodurch sie zu einer vielversprechenden Wahl für Anwendungen werden, die eine hohe Energiedichte und Langlebigkeit erfordern.³⁸

Lithium-Nickel-Kobalt-Mangan-Oxid (NMC) besitzt eine vergleichbare spezifische Kapazität und Spannung wie LCO, ist aber aufgrund des geringeren Kobaltgehalts kostengünstiger. Die Einführung von nickelreichen NMC-Kathoden wie NMC-622 und NMC-811 zielt darauf ab, die spezifische Energie zu erhöhen und die Kosten zu senken. Die Erforschung kobaltfreier Alternativen begegnet den Bedenken im Zusammenhang mit der begrenzten Verfügbarkeit, den Kosten und der Unverträglichkeit von Kobalt.³⁹

Lithium-Eisenphosphat (LFP) erweist sich als eine Alternative mit guter elektrochemischer Leistung, geringem Widerstand und langer Lebensdauer. Obwohl es gegenüber Vollladung resistenter ist, schränken die geringe Leitfähigkeit und die geringe theoretische Kapazität den Einsatz ein. In der Elektromobilität ist LFP aktuell vor allem aufgrund der geringen Kosten und

³² Vgl. Joos et al. (Virtual Electrode Design for Lithium-Ion Battery Cathodes) 2021, S. 1.

³³ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 25ff.

³⁴ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 2.

³⁵ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 25f.

³⁶ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 3.

³⁷ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 25f.

³⁸ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 26.

³⁹ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 25f.

der hohen Stabilität gefragt.⁴⁰ Eine Weiterentwicklung von LFP ist LFMP, wobei Mangan zur Leistungssteigerung eingesetzt wird, um die Energiedichte und die Schnellladefähigkeit deutlich zu steigern.⁴¹ Diese Kathoden sind besonders attraktiv für Anwendungen, bei denen Sicherheit, thermische Stabilität und Kosten im Vordergrund stehen.

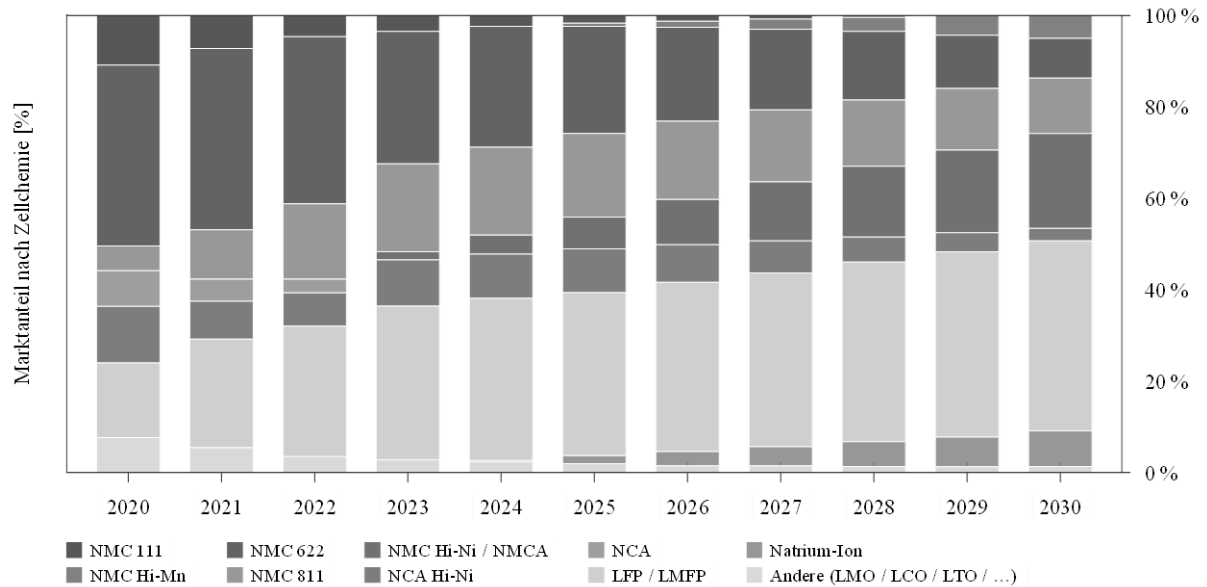


Abbildung 6: Marktanteile nach Kathodenchemie der Batteriezellen⁴²

Künftige Trends im Bereich der Kathodenmaterialien liegen in der Entwicklung kobaltfreier Alternativen, Optimierung der Zusammensetzungen sowie in der Erforschung von Materialien mit höheren spezifischen Kapazitäten, höheren Energiedichten und verbesserten Sicherheitseigenschaften. In der Automobilindustrie finden Kathodenmaterialien wie NMC-Kathoden, insbesondere nickelhaltige Varianten wie NMC-811 und NMC-622, aufgrund ihrer spezifischen Eigenschaften, ihrer Massentauglichkeit und ihrer laufenden Entwicklungsarbeit immer mehr Beachtung. Obwohl die Energiedichte und Schnellladefähigkeit von LFP geringer ist, wird bis 2030 ein starker Anstieg des Marktanteils erwartet (Abbildung 6). Die Hintergründe sind, dass LFP einerseits signifikant günstiger ist und andererseits auf Nickel und Kobalt verzichtet. Diese Kathoden bieten ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Leistung, Sicherheit und ökonomischen Aspekten, wodurch sie für Elektrofahrzeuge in der Automobilindustrie geeignet sind.

Aktivmaterialien der Anode

Das ideale Anodenmaterial sollte ein niedriges Spannungspotential, eine hohe Kapazität, eine lange Lebensdauer, niedrige Kosten und eine hohe Zuverlässigkeit aufweisen.

Graphit ist derzeit das im Markt am häufigsten verwendete Anodenmaterial⁴³ und zeichnet sich durch seine Formbeständigkeit, eine moderate Energiedichte und niedrige Kosten aus. Die

⁴⁰ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 4.

⁴¹ Vgl. Werwitzke (Gotion High-Tech bereitet Fertigung von LMFP-Zellen vor) 2023.

⁴² Vgl. Kampker et al. (Battery Monitor 2023) 2023, S. 20.

⁴³ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 12.

Schichtgitterstruktur ermöglicht eine einfache Ein- und Auslagerung der Lithium-Ionen (Interkalation). Die Hindernisse wie die Kointerkalation mit Lösungsmitteln wurden durch Verbesserungen des Elektrolyten und den Aufbau einer stabilen Grenzschicht an der Materialoberfläche angegangen. Die laufende Forschung konzentriert sich auf die Verbesserung der Schnellladefähigkeit von Graphit bei gleichzeitiger Gewährleistung der thermischen Stabilität.⁴⁴

Lithiumtitanat (LTO) stellt im Vergleich zu Graphit eine Alternative mit höherer thermischer Stabilität, Lebensdauer und Schnellladefähigkeit dar. Das hohe Delithierungspotenzial von LTO gewährleistet eine hohe Beständigkeit, indem es Lithium-Plating und die Ausbildung von SEI verhindert. Die spannungsfreie Eigenschaft und der hohe Diffusionskoeffizient für Li-Ionen tragen trotz der geringeren Kapazität zu einer ausgezeichneten Zyklusleistung und Potenzialrate bei.⁴⁵

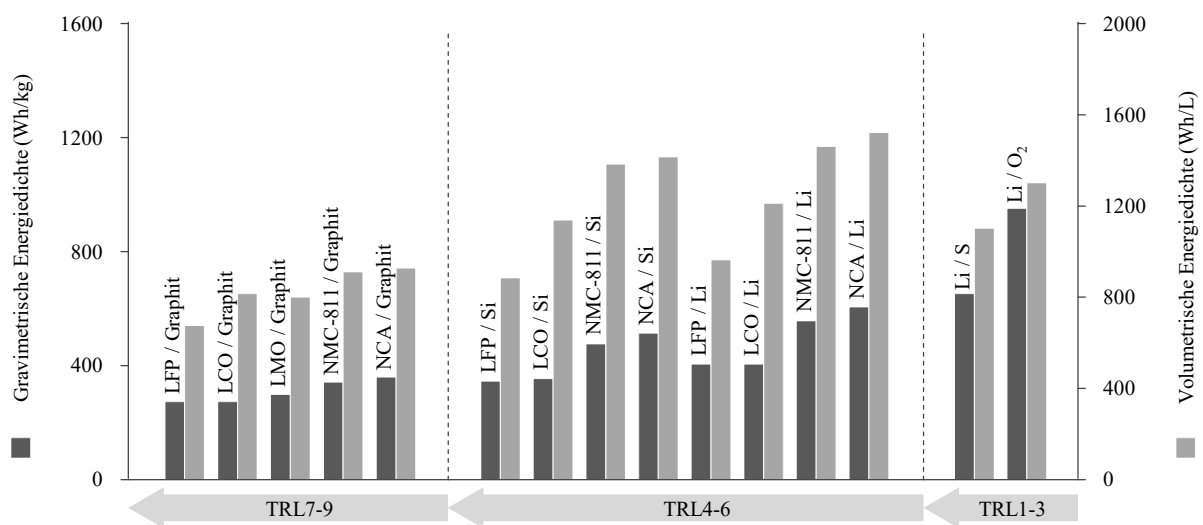


Abbildung 7: Übersicht gängiger Elektrodenmaterialkombinationen⁴⁶

Bei der Weiterentwicklung von Anodenmaterialien mit höherer Energiedichte wird derzeit vor allem Silizium erforscht. Silizium ist für seine hohe theoretische Kapazität und sein natürliches Vorkommen bekannt. Trotz des Potenzials von Silizium gibt es nach wie vor Herausforderungen, da es sich während der Lade- und Entladezyklen erheblich ausdehnt (Volumenänderung um mehr als 300 %).⁴⁷ Diese Ausdehnung führt zu einer hohen Belastung der Elektroden und einem Kapazitätsabfall. Für die industrielle Anwendung wird die Kombination von Graphit und Silizium immer bedeutender. Allerdings sind die derzeitigen kommerziellen Entwicklungen durch einen geringeren Siliziumanteil (unter 5 %) begrenzt. Ein differenziertes Verständnis der geometrischen Struktur, der Belastungsdynamik und des Ionentransports ist erforderlich, um

⁴⁴ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 5.

⁴⁵ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 5.

⁴⁶ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 2.

⁴⁷ Vgl. Pantoja et al. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies) 2022, S. 12.

einen höheren Siliziumanteil mit einer dauerhaften Kapazitätserhaltung und einer langen Lebensdauer zu erreichen.⁴⁸

Die Auswahl und Abstimmung von Kathoden- und Anodenmaterialien ermöglicht die künftigen Anforderungen an eine hohe Energie- und Leistungsdichte zu erfüllen. Ein Ausschnitt der zurzeit erforschten Materialkombinationen für Elektroden wird in Abbildung 7 dargestellt. Neben dem Einsatz von Silizium zeigen Untersuchungen von Batterien mit einer Lithium-Metall-Anode eine praktische Energiedichte von bis zu 400 Wh/kg und 900 Wh/L. Die Industrialisierung neuer Elektrodenmaterialien birgt jedoch neue Herausforderungen. Faktoren wie Lebensdauer, Zyklenfestigkeit, Temperaturbeständigkeit, Sicherheit, Kosten und Herstellungsprozesse sind entscheidend für die Realisierbarkeit neuer Technologien für eine breite Anwendung.⁴⁹

Elektrolyt

Neben der Weiterentwicklung von Elektrodenmaterialien werden auch bei dem Elektrolyten diverse Multikomponentensysteme aus Leitsalzen, organischem Lösungsmittel und Additiven erforscht. Die Kombination der einzelnen Komponenten ist wiederum abhängig von dem Anforderungsprofil der Batteriezelle und bestimmt wesentlich die chemischen und elektrochemischen Eigenschaften. Die Leitsalze erhöhen den Lithium-Ionenfluss und müssen daher in einer hohen Konzentration bedingt durch eine hohe Löslichkeit vorliegen. Ein weitverbreitetes Leitsalz ist Lithium-hexa-Fluorophosphat (LiPF_6). Das Lösungsmittel hingegen sollte einen weiten Flüssigkeitsbereich⁵⁰ bei gleichzeitig niedriger Viskosität aufweisen. In der Regel werden auf organische Carbonate wie Ethylencarbonate (EC), Propylencarbonate (PC), Dimethylcarbonate (DMC), Diethylcarbonate (DEC) oder Ethylmethylcarbonate (EMC) verwendet. Die Ergänzung von Additiven dient der Erhöhung der Lebensdauer und Zyklenfestigkeit sowie der Gewährleistung der Sicherheit und Überladeschutz während der Nutzung. Alle Elektrolytmaterialien sollten dabei über die gesamte Betriebstemperatur inert gegenüber den Elektrodenmaterialien sein.⁵¹

Separator

Separatoren verhindern physischen Kontakt und elektrische Kurzschlüsse zwischen der positiven und negativen Elektrode in einer Batteriezelle. Gleichzeitig ermöglichen sie einen Ionenaustausch, wodurch der Ladungsausgleich und die Funktionalität der elektrochemischen Zellen gewährleistet werden. Die Porosität des Separators hat hohen Einfluss auf die endgültige Zellleistung. In der Regel handelt es sich bei Separatoren mit mikroporösen Strukturen, die vollständig mit dem Elektrolyten benetzt sind. Derzeitige Separatoren für Lithium-Ionen-Batterien wie z.B. Polyolefinmembranen, weisen aufgrund der Materialwahl und der Herstellungsprozesse nur eine begrenzte Durchstoßfestigkeit, Schrumpfung und Schmelzverhalten auf.⁵²

⁴⁸ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 21.

⁴⁹ Vgl. Shen et al. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries) 2021, S. 2.

⁵⁰ Der liquide Bereich (Flüssigkeitsbereich) beschreibt den flüssigen Zustand des Elektrolyts zwischen Schmelzpunkt und Siedepunkt.

⁵¹ Vgl. Hartnig et al. (Elektrolyte und Leitsalze) 2013, S. 61ff.

⁵² Vgl. Weber et al. (Separatoren) 2013, S. 79ff.

Mikroporöse Separatoren besitzen eine geringere Porosität als Vliesstoff-Separatoren (engl.: Non-woven separators). Vliesstoff-Separatoren, insbesondere solche mit keramischen Zusätzen, zeigen außerdem eine höhere Ionenleitfähigkeit als mikroporöse Separatoren. Die elektrochemische Stabilität eines Separators hängt mit dem Elektrolyttyp zusammen, wobei keramische Zusätze diese Stabilität erhöhen.⁵³

2.1.3 Zellformate und Dimensionen

Cell formats and dimensions

Derzeit haben sich drei Zellformate im Markt etabliert: Prismatische Zelle, Pouchzellen und zylindrische Zellen (Abbildung 8). Zylindrische und prismatische Zellen haben einen vergleichbaren Grundaufbau. Bei der Herstellung werden die Elektroden- und Separatorschichten zu einem Wickel aufgerollt und in einem festen Gehäuse eingebracht. Bei der Pouchzelle hingegen werden die inneren Elektrodenstapeln gestapelt und in einer speziellen Aluminiumverbundfolie verpackt.⁵⁴

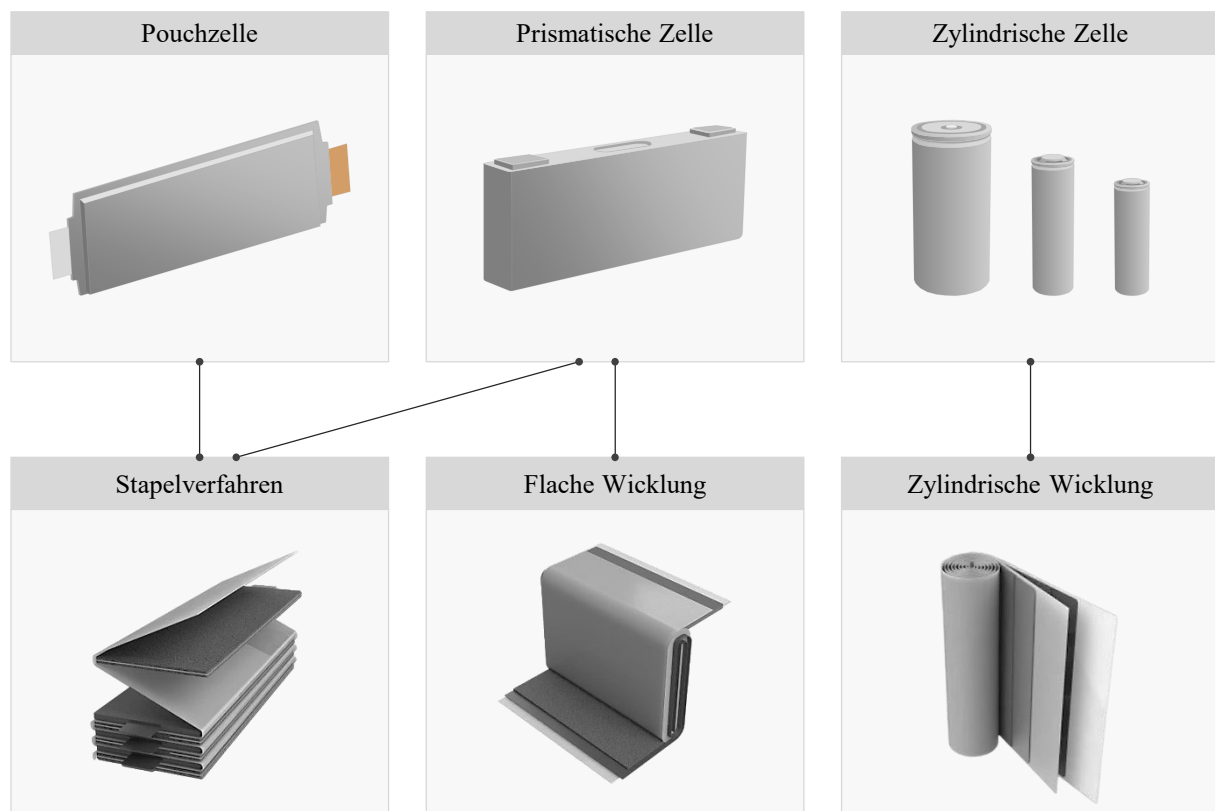


Abbildung 8: Zellformate und Elektrodenanordnung für Lithium-Ionen Batteriezellen⁵⁵

Der globale Wettbewerb für Batteriezellen zeichnet sich durch ein starkes Wachstum und eine zunehmende Marktfragmentierung aus. Derzeit sind die zehn größten Batteriezellhersteller alle in Asien ansässig, wobei die Unternehmen CATL, LG Energy Solutions und Panasonic für etwa

⁵³ Vgl. Francis et al. (Lithium-Ion Battery Separators for Ionic-Liquid Electrolytes) 2020, 1–22.

⁵⁴ Vgl. Lensch-Franzen et al. (Different Cell Formats and their System Integration) 2020, S. 69f.

⁵⁵ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 25.

70 % des weltweiten Gesamtvolumens verantwortlich sind. Eine Auswertung der Produktionskapazitäten für das Jahr 2021 zeigt, dass etwa 78 % aller Batteriezellen in China produziert werden, wobei die prismatische Zelle das vorherrschende Format ist. In Europa mit etwa 8 % Marktanteil werden vorwiegend Pouchzellen produziert. Wohingegen die USA sich mit einem Marktanteil von etwa 5 % insbesondere auf zylindrische Zellen fokussiert. Diese Anteile können sich jedoch im Zuge der weltweiten Ankündigungen noch ändern.⁵⁶

Aus produktionstechnischer Sicht sind insbesondere die Unterschiede in der Produktstruktur und dem Aufbau der Batteriezellkomponenten sowie die wechselnden Abmessungen je nach Hersteller im Vordergrund.

Pouchzellen

Pouchzellen zeichnen sich durch ihr flexibles Gehäuse aus, das aus einem Aluminium-Kunststoffverbund besteht. Diese flexible Hülle ermöglicht den Herstellern Freiheitsgrade bei der Formgebung und Gestaltung der Zellen. Aufgrund ihrer vielseitigen Einsetzbarkeit erstrecken sich ihre Anwendung von der Unterhaltungselektronik bis hin zur Elektromobilität.

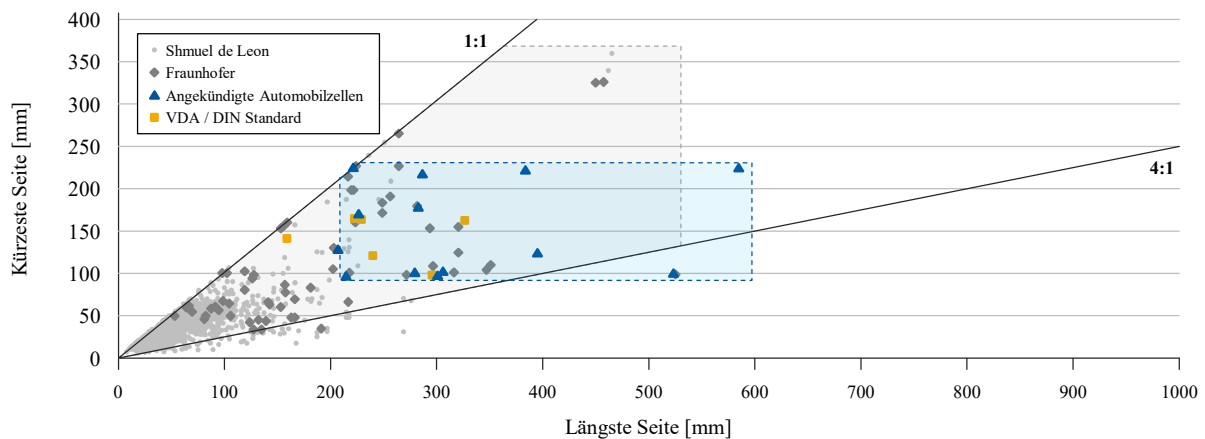


Abbildung 9: Seitenverhältnisse und Abmessungen für Pouchzellen⁵⁷

Die Abmessungen variieren stark und haben in der Regel eine Länge von bis zu 400 mm. Die Standardformate für die Automobilindustrie liegen zwischen 160 mm und 330 mm für die längste Seite. Ankündigungen in der Automobilindustrie reichen bis 500 mm und 600 mm. Das Seitenverhältnis liegt in der Regel zwischen 1:1 und 4:1. Die Dicke variiert je nach Anwendung und liegt zwischen 2 mm und etwa 15 mm. Trotz ihrer geringeren mechanischen Stabilität sind Pouchzellen aufgrund ihrer flexiblen Formgebung besonders für Anwendungen mit begrenztem Platzbedarf geeignet. Die Flexibilität ist ein bemerkenswerter Vorteil bei der Herstellung von Pouchzellen, der zu einem vereinfachten Produktionsprozess beiträgt und somit die Kosteneffizienz steigert. Aufgrund der flexiblen Hülle ergibt sich jedoch auch eine erhöhte Anfälligkeit für Beschädigungen, da Pouchzellen ohne ein festes Gehäuse auskommen. Trotz ihrer geringeren mechanischen Stabilität ermöglichen Pouchzellen eine hohe Energieeffizienz und eine

⁵⁶ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 17f.

⁵⁷ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 20.

einfache Anpassung an verschiedene Formen und Größen in Batteriepacks. Es ist jedoch zu beachten, dass die konstruktiven Anforderungen für das Modulintegration aufgrund der geringen mechanischen Stabilität anspruchsvoll sind.⁵⁸

Prismatische Zellen

Prismatische Zellen zeichnen sich durch ihre charakteristische rechteckige Form und hohe mechanische Robustheit aus. Aktuelle Trends deuten darauf hin, dass längere und schmalere Zellen bevorzugt werden, um die Integration in den Unterboden von Fahrzeugen zu optimieren. Prismatische Zellen bieten aufgrund ihrer festen Hülle strukturelle Vorteile. Die mechanische Robustheit ermöglicht die direkte Integration in Module und Packs, was das Gesamtdesign vereinfacht und die Effizienz steigert. Darüber hinaus ermöglichen prismatische Zellen eine direkte Integration in das Batteriepack (Cell-to-Pack).

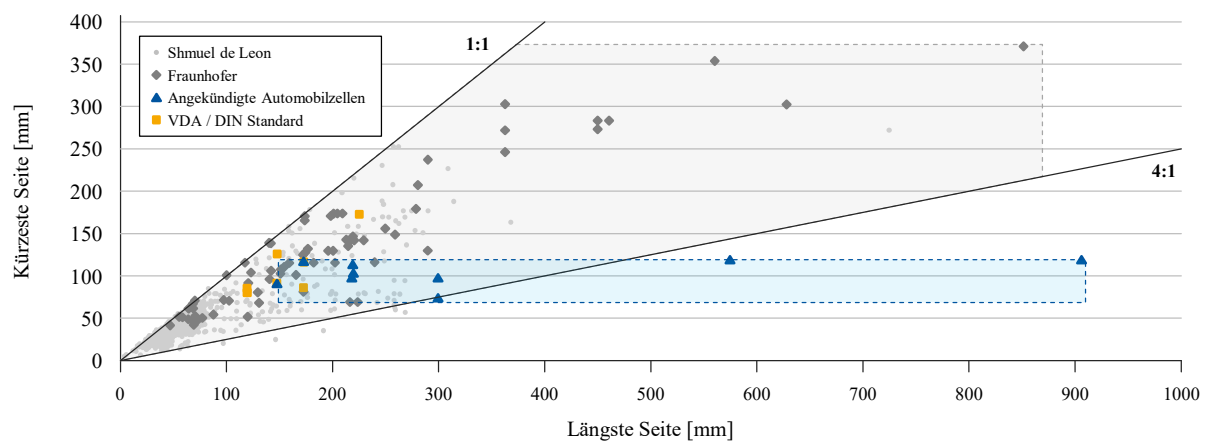


Abbildung 10: Seitenverhältnisse und Abmessungen für prismatische Zellen⁵⁹

Standardformate im Automobilbereich reichen von 120 mm bis 225 mm für die längste Seite. Das Seitenverhältnis variiert jedoch je Anwendung zwischen 1:1 und 4:1. Meist liegt die längste Seite unter 300 mm, wobei neuere Formate eine Seitenlänge bis zu 900 mm ankündigen. Die prismatischen Zellen zeigen auch eine beträchtliche Dickenvariation von 5 mm bis über 70 mm, was eine vielfältige Anwendungspalette ermöglicht. Obwohl sie eine etwas geringere Energiedichte aufweisen, gewinnen prismatische Zellen insbesondere in der Automobilindustrie zunehmend an Bedeutung. Zukünftige Entwicklungen schließen anstelle eines Flachwickels gestapelte Elektroden für prismatische Zellen ein, um Leistung und Energieeffizienz zu verbessern. Insgesamt bieten prismatische Zellen eine optimale Kombination aus mechanischer Robustheit und vielseitiger Anwendbarkeit.⁶⁰

Zylindrische Zellen

Zylindrische Zellen sind aufgrund etablierter Herstellungsprozesse und ihrer vergleichsweise kleinen Größe mit hoher Energiedichte weit verbreitet. Bekannte Formate wie 18650 und 21700

⁵⁸ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 5ff.

⁵⁹ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 19.

⁶⁰ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 5ff.

sind branchenübergreifend zu Standards geworden, insbesondere in der Unterhaltungselektronik und der Automobilindustrie. Sie zeichnen sich durch ihre zylindrische Form aus, wodurch eine effiziente Nutzung des Volumens für gewinkelte Elektroden ermöglicht wird. Dies resultiert in einer hohen Energiedichte, Robustheit und Kosteneffizienz. Allerdings kann der Winkelpunkt der Elektrode zu mechanischen Kräften innerhalb der Zelle führen.

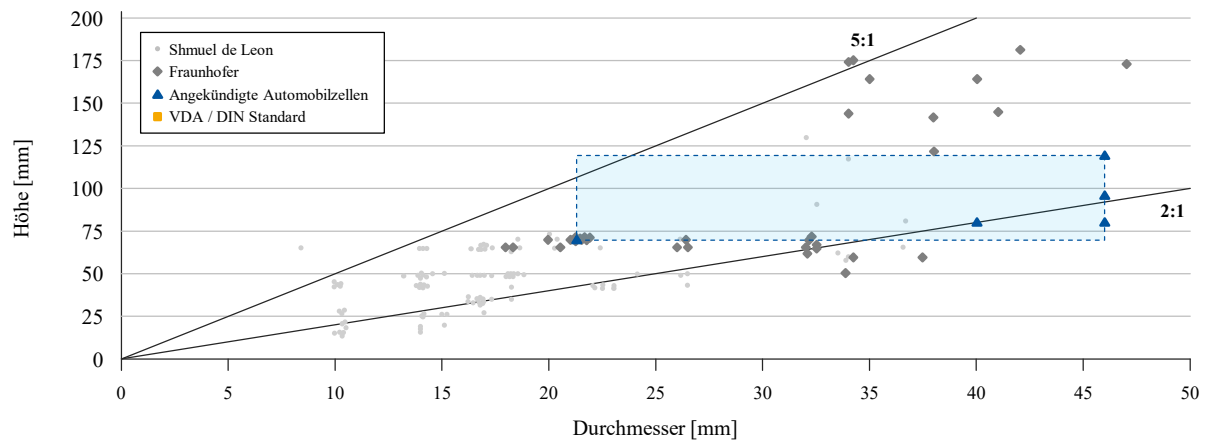


Abbildung 11: Seitenverhältnisse und Abmessungen für zylindrische Zellen⁶¹

Insbesondere in der Automobilindustrie finden zylindrische Zellen Anwendung, wobei sich ein Trend zu größeren Formaten wie 4080 und 4680 abzeichnet. Unternehmen wie Tesla und Samsung kündigen diesen Schritt an, um die Energiedichte zu erhöhen und den Anforderungen der Elektromobilität gerecht zu werden. Die Integration der zylindrischen Zellen erfordert jedoch eine sorgfältige Auslegung des Batteriesystems. Die fortschreitende Entwicklung in Richtung größerer Zellformate unterstreicht die kontinuierlichen Bemühungen, die Leistungsfähigkeit und Anwendungsbreite dieser Batteriezellen weiter zu verbessern.⁶²

Zusammenfassend zeigt sich, dass jedes Zellformat individuelle Eigenschaften und Vorteile mit sich bringt. Pouchzellen bieten Flexibilität und Anpassungsfähigkeit. Bei prismatischen Zellen stehen mechanische Robustheit und Integration im Vordergrund. Zylindrische Zellen bieten eine hohe Energiedichte auf Zellebene und verwenden etablierte Herstellungsverfahren.

2.1.4 Herausforderungen bei der Produktgestaltung

Challenges in product design

Die zunehmende Nachfrage nach Batteriezellen mit immer höheren Energie- und Leistungsdichten, der steigende Mangel an Ressourcen und den Marktanforderungen hinsichtlich höherer Schnellladefähigkeit werden begleitet durch Sicherheitsbedenken im Betrieb, Kostendruck in der Herstellung und die Entwicklung innovativer Materialien. Neben der Weiterentwicklung

⁶¹ Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 20.

⁶² Vgl. Neef et al. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats) 2022, S. 5ff.

der Zellkonzepte und der Einführung neuer Materialien stellt zusätzliche die nachhaltige und ökologische Herstellung von Lithium-Ionen-Batterien eine Herausforderung dar.^{63,64}

Die Auswahl einer Batteriezelle und der Materialkombination wird durch Faktoren wie Kosten, Sicherheit, Flexibilität, Energiedichte, Thermomanagement und Widerstandsfähigkeit beeinflusst. Die Trends der drei Formate zeigen die aktuelle Dynamik in der Elektromobilität. Zylindrische Zellen sind in der Regel kostengünstig, prismatische Zellen sind robust und Pouchzellen sind flexibel. Die Ankündigungen der Automobilhersteller zeigen eine Verlagerung hin zu größeren Zellformaten, was mit einer Erhöhung der Energiedichte einhergeht. Allerdings wirft der Anstieg der Energiedichte weitere Sicherheitsbedenken aufgrund steigender Kapazitäten auf. Außerdem werden Fortschritte in der Batterietechnologie durch Innovationen im Produktdesign und der Materialauslegung vorangetrieben, um den Anforderungen der verschiedenen Anwendungen gerecht zu werden.

Das Spannungsfeld zwischen einer bedarfsgerechten Systemauslegung und den materialspezifischen Überlegungen führen zu Herausforderungen bei der Produktgestaltung einer Batteriezelle. In Abbildung 12 werden die Schnittstellen der Produktebenen dargestellt.

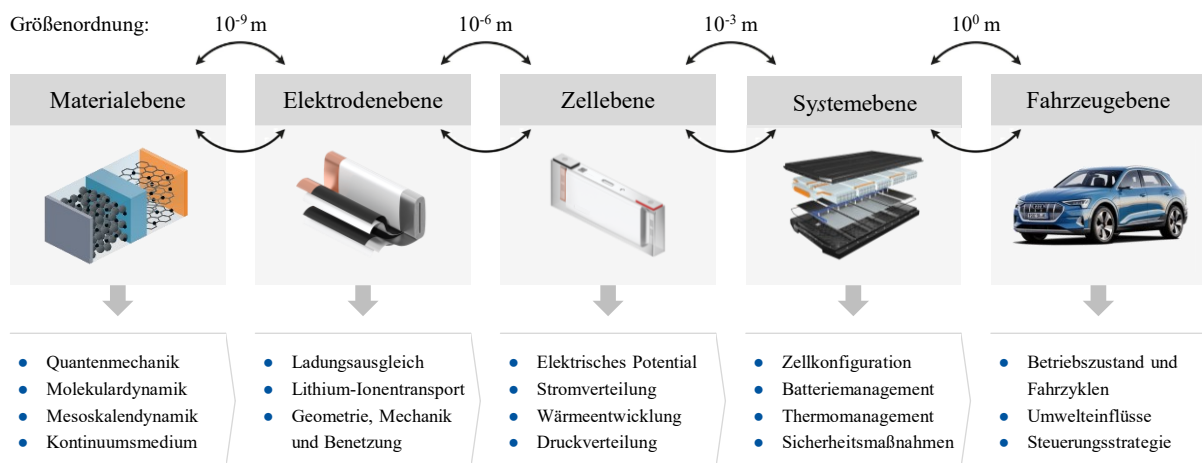


Abbildung 12: Schnittstelle und Wechselwirkungen auf skalenerübergreifender Produktebene⁶⁵

Die skalenerübergreifende Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien umfasst Untersuchungen auf Materialebene, die Modellierung auf Elektrodenenebene, gefolgt von Modellen auf Zell- und Systemebene unter Berücksichtigung der Fahrzeugebene. Die Simulation jedes dieser Modellmaßstäbe dient unterschiedlichen Zwecken und Abbildung verschiedener Zusammenhänge. Während auf der Materialebene vorwiegend physikalische und materialspezifischen Dynamiken im Vordergrund stehen, betrachtet die Fahrzeugebene in erster Linie die technische Integration und Betrieb der Batterie. Das Verständnis über die Beziehung zwischen den Mechanismen auf diesen Maßstäben kann mit zunehmender Komplexität des untersuchten Systems nicht mehr

⁶³ Vgl. Li et al. (From Materials to Cell) 2022, S. 943f.

⁶⁴ Vgl. Wu et al. (Guidelines and trends for next-generation rechargeable lithium-ion batteries) 2020, S. 1609.

⁶⁵ Vgl. Singh et al. (Modeling and Simulation in Battery Cell Manufacturing) 2022, S. 107.

mit einfachen Ansätzen oder zeitintensiven Simulationen abgebildet werden.⁶⁶ Ein vollständiges Verständnis ergibt sich nur aus der Betrachtung des Systems als Ganzes, bei der die Effekte durch eine ganzheitliche Sichtweise miteinander in Beziehung gesetzt werden.⁶⁷

Durch die aktuelle Transformation hin zur Elektromobilität und die kontinuierliche Weiterentwicklung der Batterietechnologie hat sich bisher keine einheitliche „One-fits-all“ Batteriezelle durchgesetzt. Für Batteriezelle als zentraler Bestandteil eines Batteriesystems haben sich eine Vielzahl von Produktvarianten auf dem Markt etabliert, die sich in ihren Eigenschaften und Ausprägungen unterscheiden. Die Hauptunterscheidungsmerkmale liegen in der Paarung der Aktivmaterialien, der Elektrodenanordnung, der Dimensionierung der Batteriezelle sowie der Auslegung der Kontaktierung. Ein stufenweiser Entwicklungsprozess wird verwendet, um die Produkteigenschaften und Freiheitsgrade zu spezifizieren.

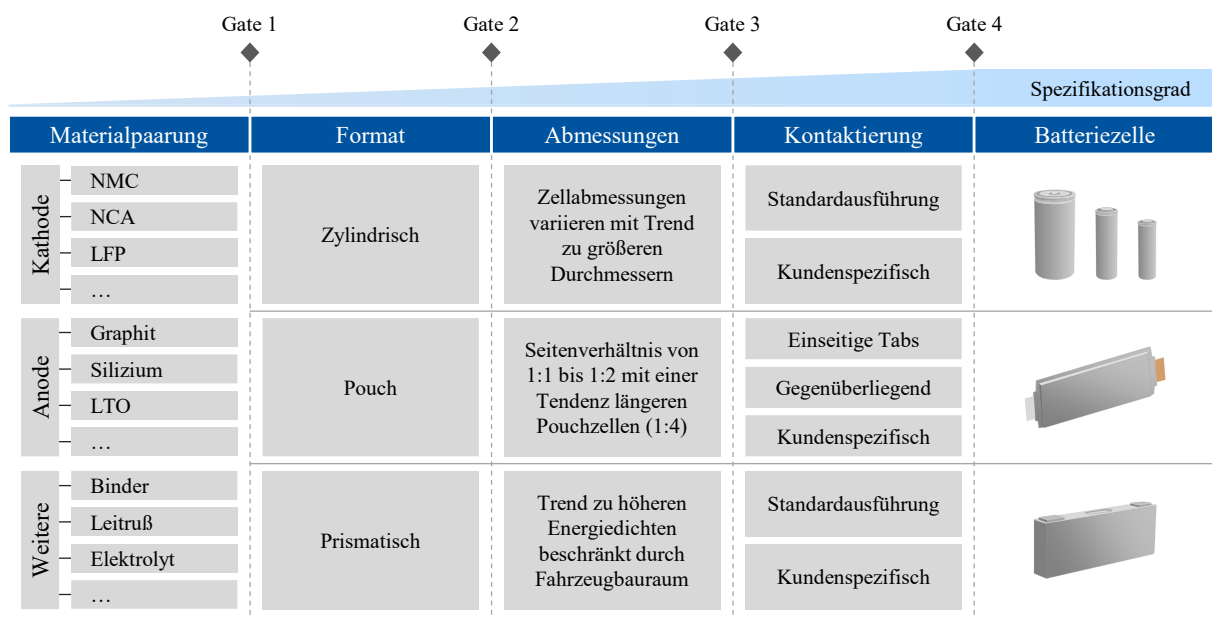


Abbildung 13: Entwicklungsprozess für die Produktgestaltung von Batteriezellen⁶⁸

Aufgrund von Änderungen und Anpassungen der Batteriezellkomponenten müssen Hersteller in der Lage sein, ihre Produktionsprozesse schnell anpassen zu können, um Variationen des Aktivmaterials, der Elektrodenstruktur und der Produktgestaltung zu berücksichtigen. Diese Anpassungsfähigkeit ist entscheidend, um den Marktanforderungen und technologischen Innovationen gerecht zu werden. Die Vielfalt der Produktvarianten bedingt allerdings eine individuelle Ausgestaltung von Abmessungen, Komponenten und Prozessabfolgen. Infolgedessen ist eine enge Abstimmung zwischen Produktgestaltung und Prozessplanung notwendig, um Spezifikationen unter Berücksichtigung von Produktivität und Flexibilität zu ermöglichen.

⁶⁶ Vgl. Franco et al. (Boosting Rechargeable Batteries R&D by Multiscale Modeling) 2019, S. 4571.

⁶⁷ Vgl. Singh et al. (Modeling and Simulation in Battery Cell Manufacturing) 2022, S. 106ff.

⁶⁸ Vgl. Kampker et al. (Potentials and Implementation Strategies For Flexible Battery Cell Production) 2023, S. 879.

2.2 Prozessschritte in der Batteriezellproduktion

Process steps in battery cell production

Die Batteriezellproduktion gliedert sich in die Bereiche Elektrodenfertigung, Zellenassemblierung und Zellfinalisierung. In der Elektrodenfertigung (Abschnitt 2.2.1) werden die Grundbestandteile der Batteriezelle durch die Verarbeitung der Aktivmaterialien zu Elektroden hergestellt. In der Zellenassemblierung (Abschnitt 2.2.2) erfolgt die Integration der Elektroden, Separatoren, Elektrolyt und weiteren Komponenten für den Zusammenbau der Batteriezelle. Die Zellfinalisierung (Abschnitt 2.2.3) umfasst die elektrochemische Aktivierung der Batteriezelle durch erste Ladevorgänge und umfassende Qualitätsprüfungen. Abschließend wird auf die Komplexität und die Wechselwirkungen zwischen den Prozessparametern und Produktmerkmalen (Abschnitt 2.2.4) eingegangen.

2.2.1 Elektrodenfertigung

Electrode manufacturing

Die Elektrodenfertigung umfasst die Herstellung der positiven (Kathoden) und negativen (Anoden) Elektroden. Dafür werden verschiedene verfahrenstechnische Prozesse genutzt, um dünne Schichten des Aktivmaterials gleichmäßig auf metallische Substratfolien aufzubringen. Die Elektroden fungieren als Träger des Aktivmaterials, welches die elektrochemischen Prozesse während des Lade- und Entladezyklus ermöglicht. Die Qualität der Elektroden beeinflusst maßgeblich die Leistungsfähigkeit, Kapazität und Lebensdauer der Batteriezelle.⁶⁹

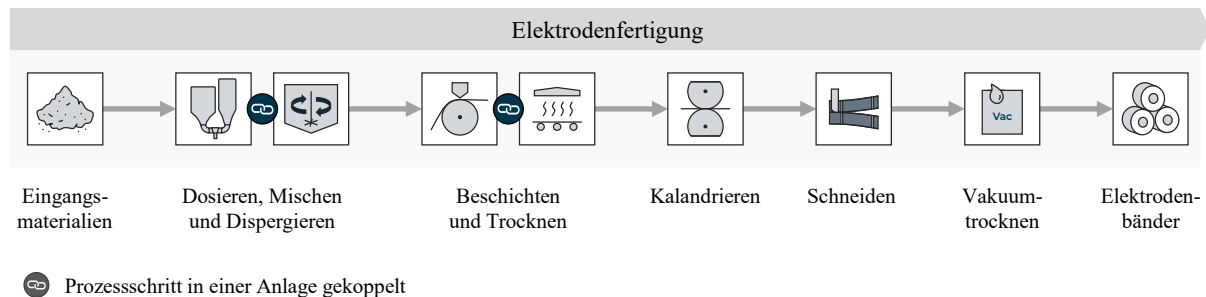


Abbildung 14: Prozesskette der Elektrodenfertigung

Die Herstellung der Anoden und Kathoden erfolgt auf zwei unterschiedlichen Produktionslinien. Zwar kommt in der Regel die gleiche Anlagentechnik zum Einsatz, allerdings werden die Produktionslinien räumlich voneinander abgegrenzt, um mögliche Verunreinigungen zu vermeiden.⁷⁰ Die Prozesskette der Elektrodenfertigung wird in Abbildung 14 dargestellt. Im Folgenden werden die zugrundeliegenden Prozessschritte der Elektrodenfertigung erläutert und vorgestellt.

⁶⁹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 259f.

⁷⁰ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 259f.

Dosieren, Mischen und Dispergieren

Die Elektrodenfertigung beginnt mit einer automatisierten Dosierung und präzisen Zugabe von Aktivmaterialien, Leitrüß, Binder und Lösungsmitteln in einen Mischbehälter. Die Dosierung gewährleistet die exakte Zusammensetzung für die geforderten Eigenschaften der Lithium-Ionen-Batterien. Anschließend werden die Stoffe zur Auflösung der heterogenen Phasen trocken gemischt und anschließend mit Lösungsmitteln versetzt und nass dispergiert. Der Misch- und Dispergierprozess hat das Ziel, eine homogene Paste, das sogenannte Slurry, mit definierter Viskosität, Partikelgröße und Materialverteilung zu erzeugen. Der Einsatz von rotierenden Werkzeugen, unterstützt durch Vakuum, ermöglicht das Homogenisieren des Slurry.⁷¹ Die Mischdauer, Temperatur und Atmosphäre im Mischbehälter werden präzise gesteuert. Eine unzureichende Durchmischung kann zur Bildung von Blasen und Agglomeraten der Eingangsmaterialien führen, was einen erhöhten Grenzflächenwiderstand zur Folge hat.⁷² Die Qualität des Slurry beeinflusst direkt die Leistung der Elektroden und somit die Gesamtfunktionalität der Batteriezellen. Die Homogenität und Viskosität des Slurry, die Agglomeratgröße, fehlende Lufteinschlüsse und Reinheit hinsichtlich Fremdkörper sind entscheidende Qualitätsparameter. Die genaue Dosierung und gründliche Vermischung sind daher essenzielle Schritte, um möglichen Inhomogenitäten vorzubeugen und eine optimale Batterieleistung zu gewährleisten.⁷³

Beschichten und Trocknen

Beim Beschichten wird das Elektrodenmaterial gleichmäßig auf einen metallischen Stromableiter aufgetragen, um eine homogene Schicht zu erzeugen. Dieser Vorgang erfolgt mittels unterschiedlicher Technologien wie Schlitzdüsen oder Rakel innerhalb eines Rolle-zu-Rolle-Prozesses. Die Beschichtung unterliegt dabei strengen Prozessanforderungen, die die Qualität der Elektrode beeinflussen. Die Qualität der Beschichtung wird durch Parameter wie Schichtdickengenauigkeit, Homogenität und Oberflächenqualität definiert.⁷⁴ Im Anschluss an die Beschichtung durchläuft die beschichtete Stromableiterfolie einen unmittelbar angebundenen Trocknungsprozess. Hier wird das Lösungsmittel aus der Beschichtung verdampft. Die Bahngeschwindigkeit, Trocknungsstrecke und das Temperaturprofil in den Trocknerzonen sind dabei kritische Prozessparameter. Die Adhäsion zwischen Beschichtung und Substrat, die Restfeuchte und die Oberflächenqualität sind entscheidend für den Trocknungsprozess. Ein optimales Gleichgewicht zwischen Trocknungseffizienz und Qualitätssicherung ist von grundlegender Bedeutung. Eine geeignete Folienspannung ist entscheidend, um Foliensrisse zu vermeiden.⁷⁵ Die Art des Lösungsmittels bestimmt den Umfang der Entsorgung (z.B. thermische Nachbehandlung) oder Aufbereitung (z.B. Lösemittelrückgewinnung).⁷⁶ In der Anwendung wird zwischen einseitiger oder simultaner doppelseitiger Beschichtung unterschieden, wodurch die

⁷¹ Vgl. Kwade et al. (Current status and challenges for automotive battery production technologies) 2018, S. 292f.

⁷² Vgl. Nakajima et al. (Effect of Electrode Mixing Conditions on the Performance of Lithium-Ion Batteries) 2015, S. 87ff.

⁷³ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 4.

⁷⁴ Vgl. Schmitt et al. (Slot-die processing of lithium-ion battery electrodes) 2013, S. 32ff.

⁷⁵ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 5.

⁷⁶ Vgl. Ahmed et al. (Energy impact of cathode drying and solvent recovery) 2016, S. 169ff.

Prozessabläufe variieren. In jedem Fall muss eine beidseitige Beschichtung der Stromleiterfolie sichergestellt werden.⁷⁷

Kalandrieren

Das Kalandrieren dient der Optimierung der elektrochemischen Eigenschaften der Elektroden. Nach dem Auftragen und Trocknen des Aktivmaterials erfolgt die Kompression mittels eines Kalanders bestehend aus beheizten Walzen. Durch den Walzvorgang wird eine definierte Porosität der Aktivschicht erzeugt, welche die Grundlage für die gewünschten elektrochemischen Eigenschaften bildet. Während des Kalandrierens wird die beidseitig beschichtete Stromabnehmerfolie durch ein rotierendes Walzenpaar verdichtet. Um Verunreinigungen zu vermeiden, wird vor diesem Vorgang eine gründliche Reinigung der Beschichtungs Oberfläche vorgenommen. Die Verdichtung des Materials erfolgt durch Kalandrierwalzen, die einen präzise definierten Liniendruck auf die Beschichtung ausüben. Der Prozess verbessert die mechanische Stabilität der Elektroden und homogenisiert die Schichtdicke der Beschichtung. Die Kalandriergeschwindigkeit und die Walzentemperatur sind wesentliche Prozessparameter. Eine ausgewogene Einstellung des Kalandrierprozesses ist entscheidend, da eine übermäßige Verdichtung zu einer verringerten Elektrolytverteilung und geringerer Tortuosität der Beschichtung führen kann.⁷⁸ Die Qualität des kalandrierten Elektrodenmaterials wird anhand der definierten Porosität, der Schichtdicke, der Adhäsion des Materials auf der Folie und der Oberflächenreinheit bewertet.⁷⁹

Schneiden

Beim Schneiden der Elektroden werden das breite Elektrodenband (Muttercoil) in schmalere Bänder (Tochtercoil) aufgeteilt. Dieser Vorgang wird mit Hilfe von rollierenden Messern oder Laserschneidanlagen in einem Rolle-zu-Rolle-Prozess durchgeführt. Die kalandrierten Muttercoils werden manuell in die Schneidanlage eingebracht. Das Schneiden selbst muss gratfrei und unter geringen Schnittbreitentoleranzen erfolgen, um den geforderten Abmessungen für die späteren Batteriezellen zu entsprechen. Die Tochtercoils werden im Anschluss an den Schneidvorgang gereinigt und aufgerollt. Wesentliche Prozessparameter sind die Schnittgeschwindigkeit und die Absaugung für der Kantenbeschnitte, um die technische Sauberkeit zu gewährleisten.⁸⁰

Vakuumtrocknen

Das Vakuumtrocknen dient der Beseitigung von überschüssiger Feuchtigkeit in den Elektroden. Der Prozess beginnt mit dem Platzieren der beschichteten Tochtercoils auf speziellen Warenschienen, gefolgt von der Einbringung in den Vakuumofen. Während des Vakuumtrocknens werden Temperatur und Druck überwacht und gesteuert, um optimale Trocknungsbedingungen zu gewährleisten. Die Trocknungszeit erstreckt sich über bis zu 48 Stunden pro Charge, um

⁷⁷ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 261.

⁷⁸ Vgl. Turetsky (Data analytics in battery production systems), S. 19.

⁷⁹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 7.

⁸⁰ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 7.

Restfeuchte und Lösungsmittel aus dem Elektrodencoil zu verdampfen. Durch einen geringen Umgebungsdruck (Vakuum) kann die Restfeuchte auch bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen reduziert werden. Optional kann eine Inertgaszuführung gegen Kupferkorrosion erfolgen. Qualitätsparameter umfassen die Aufrechterhaltung einer konstanten Wärmezufuhr und eines stabilen Vakuums. Nach dem Vakuumtrocknen werden die Elektrodencoils entweder direkt über eine Schleuse in den Trockenraum überführt oder unter Vakuum trocken verpackt. Das Vakuumtrocknen ist von großer Bedeutung, um die erforderliche Restfeuchte der Elektroden zu erreichen und unerwünschte Reaktionen aufgrund von Feuchtigkeit vermieden.^{81,82}

Die Elektrodenfertigung ist ein komplexer Prozess, dessen Optimierung ein tiefes Verständnis über die spezifischen elektrochemischen Eigenschaften der Materialien sowie die Wechselwirkungen der physikalisch-chemischen Prozesse der Elektrodenfertigung erfordert.

2.2.2 Zellassemblierung

Cell assembly

Die Zellassemblierung ist ein zentraler Bestandteil der Batteriezellproduktion. Dabei hängt die Prozesskette stark von der Zellgeometrie ab. Während die Pouchzelle ein Stapelverfahren zugrunde legt, werden für Rundzellen und prismatische Zellen weitestgehend Wickelverfahren verwendet.⁸³ Im Folgenden werden die Unterschiede in den Prozessketten beleuchtet, um ein tieferes Verständnis der Zellassemblierung in Bezug auf Rundzellen, Pouchzellen und prismatische Zellen zu ermöglichen.

Zellassemblierung – Rundzellen

Die Zellassemblierung von Rundzellen zeichnet sich durch die charakteristische zylindrische Form der Batteriezelle aus, welche durch den Wickelprozess der Elektroden entsteht. In Abbildung 15 wird die Prozesskette der Zellassemblierung für Rundzellen dargestellt.⁸⁴

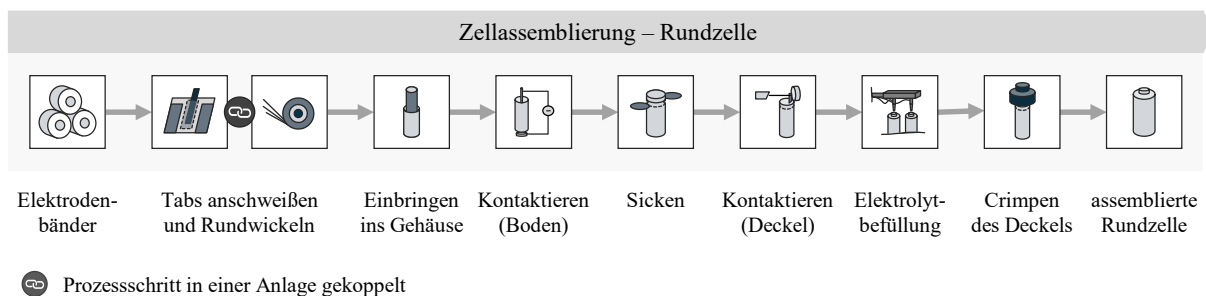


Abbildung 15: Prozesskette der Zellassemblierung für Rundzellen

Die Zellassemblierung von Rundzellen beginnt mit der Herstellung des Zellwickels (Jelly-Roll). In der Wickelanlage werden zunächst die Zelleiter (Tabs) auf den Elektrodenbahnen mit Ultraschallschweißen angeschweißt. Anschließend werden die Elektrodenbahnen

⁸¹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 8.

⁸² Vgl. Kwade et al. (Current status and challenges for automotive battery production technologies) 2018, S. 293.

⁸³ Vgl. Kampker et al. (Potentials and Implementation Strategies For Flexible Battery Cell Production) 2023, S. 877.

⁸⁴ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 262ff.

gemeinsam mit zwei Separatorbahnen um einen Center-Pin gewickelt und durch einen Klebestreifen fixiert.⁸⁵ Der Center-Pin kann anschließend wahlweise entfernt werden. Diese Wickeltechnik ermöglicht einen Maschinendurchsatz von bis zu 30 Zellen pro Minute.⁸⁶ Nach dem Wickeln folgt das Einbringen der Jelly-Roll in das Zellgehäuse. Dabei wird die Jelly-Rolle an der Ober- und Unterseite des Wickels durch ein Isolationsring geschützt. Der Anoden-Tab wird am Boden des Zellbechers mittels Widerstandsschweißen befestigt. Durch Sicken wird unmittelbar über dem Zellwickel eine Wulst in das Gehäuse eingeprägt, um die Jelly-Roll zu stabilisieren und gegen Bewegung zu fixieren. Anschließend wird der Kathoden-Tab eine Deckelbaugruppe geschweißt. Die Deckelbaugruppe beinhaltet Druckventile und weitere Sicherheitskomponenten. Bevor die Zelle verschlossen wird, erfolgt die Elektrolytbefüllung. Während und nach der Befüllung wird die Zelle mit einem dynamischen Unterdruckprofil beaufschlagt, um eine homogene Elektrolytverteilung zu gewährleisten. Abschließend erfolgt das Crimpen, wodurch die Deckelbaugruppe mit dem Gehäuse befestigt und die Rundzelle dauerhaft verschlossen wird.^{87,88}

Zellassemblierung – Prismatische Zellen

Die Zellassemblierung von prismatischen Zellen wird durch die prismatische Form des Batteriezellgehäuses charakterisiert, in welches der Elektrodenwickel eingesetzt wird. Die Prozesskette der Zellassemblierung für prismatische Zellen wird in Abbildung 16 dargestellt.⁸⁹

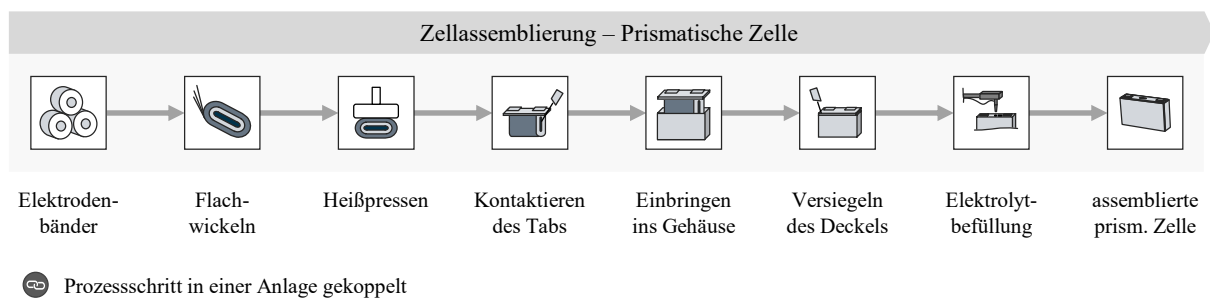


Abbildung 16: Prozesskette der Zellassemblierung für prismatische Zellen

Die Assemblierung prismatischer Zellen beginnt unmittelbar mit dem Flachwickeln von Anoden-, Kathoden- und Separatorbahnen um einen breiten Wickelkern. Dieser Vorgang resultiert in einem Wickel mit ovaler Form. Nach dem Wickeln erfolgt das Heißpressen zur Fixierung und Formung der Zellwickel. Anschließend werden die Stromableiterfolien der Elektroden mittels Ultraschallschweißung verschweißt und mit der Deckelbaugruppe kontaktiert. Dieser Schritt stellt die elektrische Verbindung zwischen dem Zellstapel und den Polen der Deckelbaugruppe her. Beim Einbringen des Wickels ins Gehäuse wird der vorbereitete Wickel gemeinsam mit einer isolierenden Schutzfolie und dem Zelldeckel in das Zellgehäuse platziert

⁸⁵ Vgl. Baazouzi et al. (Design, Properties, and Manufacturing of Cylindrical Li-Ion Battery Cells) 2023, S. 15ff.

⁸⁶ Vgl. Brodd et al. (Cost comparison of producing high-performance Li-ion) 2013, S. 298.

⁸⁷ Vgl. Tagawa et al. (Production Processes for Fabrication of Lithium-Ion Batteries) 2009, S. 186ff.

⁸⁸ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 9ff.

⁸⁹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 262ff.

wird. Dieser Vorgang zielt darauf ab, den Zellstapel sicher im Gehäuse zu positionieren und potenzielle Kontakteinflüsse mit dem Gehäuse zu vermeiden. Anschließend wird der Deckel durch Laserschweißen mit dem Gehäuse verschweißt und die Zelle verschlossen, sodass keine unerwünschten äußeren Partikel in die Zelle eindringen. Der darauffolgende Prozessschritt ist die Elektrolytbefüllung. Über ein Befüllloch im Zelldeckel wird der Elektrolyt in die Zelle dosiert. Das Befüllloch wird nach dem Prozess mit einem Dorneinsatz temporär verschlossen. Abschließende wird die assemblierte Zelle gereinigt und elektrisch isoliert.⁹⁰

Zellassemblierung – Pouchzellen

Die Zellassemblierung von Pouchzellen differenziert sich durch eine flache und flexible Verpackungsfolie, die als Gehäuse der Batteriezelle dient. Hierfür wird ein Stapelverfahren genutzt, wodurch eine hohe Packungsdichte erzielt wird. In Abbildung 17 wird die Prozesskette der Zellassemblierung für Pouchzellen dargestellt.⁹¹

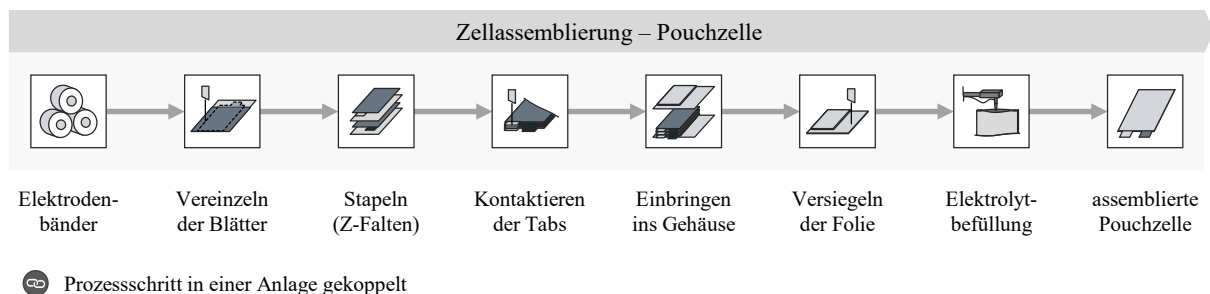


Abbildung 17: Prozesskette der Zellassemblierung für Pouchzellen

Die Zellassemblierung von Pouchzellen beginnt mit dem Vereinzeln der Elektrodenblätter. Dafür werden einzelne Elektrodenblätter aus dem kontinuierlichen Elektrodenband herausgetrennt. Durch einen vorherigen Zuschnitt (engl.: Notching) wird optional die Kontur der Stromableiterfähnchen geformt. Die Vereinzelung kann mittels Laser- oder Scherschnitt erfolgen. Die resultierenden Elektrodenblätter werden magaziniert und zum nächsten Schritt transportiert. Der Zellstapel entsteht durch die alternierende Anordnung von Anode, Separator und Kathode. Als etabliertes Verfahren werden beim Z-Falten die Anoden- und Kathodenblätter in eine kontinuierliche Separatorbahn eingelegt. Durch den Z-förmigen Verfahrensweg des Separators erhält der Prozess seinen charakteristischen Namen. Im Gegensatz wird bei der Einzelblattstapelung auch die Separatorfolie vereinzelt. Nach dem Stapeln wird der Zellstapel umwickelt, der Separator abgeschnitten und mit einem Klebestreifen fixiert. Im nächsten Schritt werden die unbeschichteten Fähnchen des Zellstapels gekürzt und mit den Stromableitern verschweißt. Anschließend wird der Zellstapel in das Gehäuse eingebracht. Das Gehäuse ist eine Verbundfolie (Pouchfolie), welche zuvor tiefgezogen wurde. Der Zellstapel liegt in der Pouchfolie, sodass die Ableiter über den Rand hinausragen. Anschließend wird die Pouchfolie an drei Seiten versiegelt, wobei die offene Seite zur Elektrolytbefüllung dient. Die Elektrolytbefüllung erfolgt

⁹⁰ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 9ff.

⁹¹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 262ff.

durch eine Dosierlanze. Nach der Elektrolytbefüllung wird die Pouchtasche vollständig versiegelt.⁹²

Die Zellassemblierung umfasst den Zusammenbau der wesentlichen Komponenten in das endgültige Format der Batteriezelle. Im Gegensatz zur Elektrodenfertigung und der Zellfinalisierung konzentriert sich die Zellassemblierung ausschließlich auf die Montage und Integration der Bauteile in die gewünschte Zellgeometrie. Die Herausforderung liegt in der maßgeschneiderten Umsetzung von Prozessketten für das entsprechende Zellformat.

2.2.3 Zellfinalisierung

Cell finalization

Die Zellfinalisierung stellt den letzten Abschnitt der Batteriezellenproduktion dar. Im Mittelpunkt dieses Prozesses steht die elektrochemische Aktivierung der Batteriezelle durch initiale Ladezyklen begleitet von umfassenden Qualitätstests. Besonderes Augenmerk wird auf die Ausbildung der materialspezifischen Grenzschichten der Batteriezelle gelegt, die einen wesentlichen Einfluss auf die Leistung und Lebensdauer der Batteriezelle haben. In diesem Abschnitt werden die Prozesse zur Vorbehandlung, Formierung und Qualitätsprüfung in der Zellfinalisierung detailliert vorgestellt.

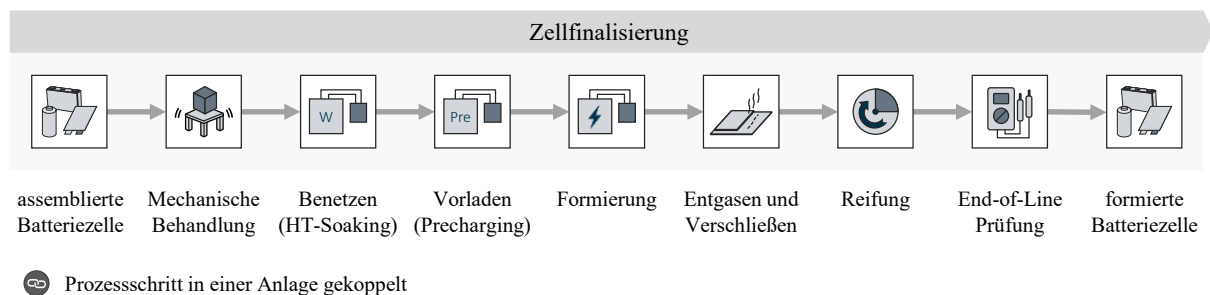


Abbildung 18: Prozesskette der Zellfinalisierung

Trotz der Formatunterschiede sind die grundlegenden Verfahren der Zellfinalisierung weitgehend identisch. Die Prozesskette der Zellfinalisierung wird in Abbildung 18 dargestellt. Aufgrund der starken Abhängigkeit durch chemische Prozesse kann der Prozessablauf je nach Zellkonzept und Zellchemie in der Reihenfolge, der Häufigkeit der Prozessdurchläufe und der Dauer variieren. Die Zellfinalisierung ermöglicht ein hohes Maß an Prozessflexibilität, insbesondere im Hinblick auf die variable Durchführung verschiedener Prozessschritte und -sequenzen. Derzeitige Anlagentechnik sowie Formations- und Alterungskammern sind beispielsweise in der Kontaktierung genau auf das jeweilige Batteriezellenformat abgestimmt.^{93,94}

⁹² Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 9ff.

⁹³ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 264.

⁹⁴ Vgl. Kampker et al. (Potentials and Implementation Strategies For Flexible Battery Cell Production) 2023, S. 880.

Vorbehandlung

Die Vorbehandlung in der Zellfinalisierung zielt darauf ab, die Benetzung der Elektroden zu verbessern und inaktive Bereiche während der Formierung zu vermeiden. Die Methoden lassen sich in mechanische, thermische und elektrische Verfahren unterteilen.⁹⁵ Insgesamt dienen diese Vorbehandlungsverfahren der Vorbereitung der Batteriezellen für den Formierungsprozess, indem sie den Elektrolytfluss fördern, die Benetzung der Elektroden verbessern und potenzielle Inhomogenitäten oder Einflüsse minimieren.⁹⁶ Beim Presswalzen wird ein definierter Druck mittels Walzenpaare auf die Pouchzelle aufgebracht, um den Elektrolyten in die Poren zu drücken. Aufgrund des starren Gehäuses von prismatischen Zellen und Rundzellen, erfolgt die Benetzung alternativ durch Vibration. Durch diese mechanischen Einwirkungen wird das Eindringen des Elektrolyten in die Poren der Elektroden unterstützt. Beim Benetzen wird die Zellumgebung erwärmt, was zu einer Verringerung der Viskosität des Elektrolyten führt. Dadurch wird das Eindringen des Elektrolyten in die Mesoporen der Elektrode und des Separators begünstigt. Die thermische Vorbehandlung verbessert somit die Benetzbarkeit und fördert die homogene Verteilung des Elektrolyten. Die Dauer der Benetzung hängt von verschiedenen Faktoren wie der Zellengröße, dem Format, der Zellchemie und der Elektrolytbefüllung ab.⁹⁷ Beim Vorladen wird die Zelle mit einer geringen C-Rate geladen. Einerseits wird eine Korrosion an den Stromableitern verhindert. Andererseits wird der Prozess genutzt, um die Zelle zu entgasen und damit mechanische Belastungen durch Druckentwicklung zu mindern.^{98,99}

Formierung

Die Formierung bezeichnet den initialen und kontrollierten Lade- und Entladevorgang der Batteriezelle zur Ausbildung der sogenannten "Solid-Electrolyte-Interface" (SEI)-Schicht. Während der Formierung werden definierte Strom- und Spannungsverläufe eingehalten, wobei sich Lithium-Ionen in die Graphitstruktur der Anodenseite einlagern. Die SEI-Schicht bildet sich als Resultat der Elektrolytzersetzung während der ersten Ladezyklen und fungiert als passivierende Grenzschichten auf der Elektrodenoberfläche.¹⁰⁰ Für die Formierung werden die Zellen in speziellen Warenträgern in Formationsregalen platziert und über Federkontaktstifte kontaktiert, wobei geringe Übergangswiderstände entscheidend sind. Die Formierung beginnt mit einem Ladevorgang mit einer geringen Stromstärke von etwa 0,1 C bis 0,5 C gefolgt von einer sukzessiven Steigerung der C-Raten in jedem Zyklus. Der Ausbau der SEI-Schicht ist von verschiedenen Faktoren wie der C-Rate, der Temperatur und der Anzahl an Ladezyklen abhängig. Somit beeinflussen die Formierungsparameter maßgeblich die Leistungsfähigkeit, Lebensdauer

⁹⁵ Vgl. Kampker et al. (Optimizing the Cell Finishing Process) 2023, S. 3ff.

⁹⁶ Vgl. Hagemeister et al. (Lean Cell Finalization in Lithium-Ion Battery Production) 2023, S. 1ff.

⁹⁷ Vgl. Günter et al. (Influence of the Cell Format on the Electrolyte Filling Process of Lithium-Ion Cells) 2020, S. 1ff.

⁹⁸ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 16.

⁹⁹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen) 2024, S. 264f.

¹⁰⁰ Vgl. Wood et al. (Prospects for reducing the processing cost of lithium ion batteries) 2015, S. 239.

und Sicherheit der Batteriezelle. Der zeitliche Ablauf der Formierung kann bis zu 24 Stunden dauern und variiert je nach Zellhersteller, Zellkonzept und Zellchemie.¹⁰¹

Entgasen und Verschließen

Das Entgasen und Verschließen wird insbesondere für Pouchzellen und prismatische Zellen verwendet. Während der ersten Ladevorgänge größerer Zellen kommt es zur Gasbildung.¹⁰² Bei Pouchzellen werden diese Gase durch eine Gastasche aufgefangen, während prismatische Zellen einen temporären Stopfen verwenden. Das Entgasen erfolgt durch Anstechen der Gastasche und Entfernen des Stopfens in einer Vakuumkammer. Die entstandenen Gase werden abgesaugt. Die abgesaugten Gase unterliegen einer nachgelagerten Behandlung gemäß Arbeitsschutz- und Umweltschutzregularien, bevor sie dem Abluftsystem zugeführt werden.¹⁰³ Bei Pouchzellen wird die Gastasche nach dem Entgasen abgetrennt. Anschließend werden die Siegelnähte der Pouchzelle gefaltet und geklebt, um die volumetrische Energiedichte zu steigern. Bei prismatischen Zellen hingegen wird das Befüllloch durch Laserschweißen verschlossen.¹⁰⁴

Reifung

Die Reifung bezeichnet den ersten Schritt zur Bestimmung der Zellqualität, um die Stabilität der Grenzschicht und die Langzeitfunktionalität der Zelle sicherzustellen. Während der Reifung werden die Zellen in speziellen Alterungsregalen gelagert, wobei der Ladezustand zu Beginn zwischen 30 % und 80 % State-of-Charge (SOC) liegt. Hierbei wird zwischen Hochtemperatur (HT)- und Raumtemperatur (RT)-Reifung unterschieden. Die Überwachung der Zelleigenschaften erfolgt durch regelmäßige Messungen der Leerlaufspannung. Eine konstante Leerlaufspannung zeigt an, dass die Zelle keine signifikanten Veränderungen aufweist und somit für die Auslieferung geeignet ist. Besonderes Augenmerk gilt auch der Selbstentladerate und dem Innenwiderstand.¹⁰⁵ Eine erhöhte Verlustrate von über 5 mV pro Woche deutet auf mögliche zellinterne Kurzschlüsse hin. Die Reifung kann bis zu drei Wochen dauern und variiert je nach Zellhersteller und der verwendeten Zellchemie. Zusammenfassend stellt die Reifung sicher, dass die Batteriezellen den erforderlichen Qualitätsstandards entsprechen und für den Einsatz geeignet sind.¹⁰⁶

End-of-Line Prüfung

Die End-of-Line (EoL) Prüfung markiert den letzten Schritt in der Batteriezellproduktion bevor die Zellen das Werk verlassen. Dieser Prozess gewährleistet die Qualität und Zuverlässigkeit der hergestellten Batterien. Die EoL-Prüfung umfasst sowohl mechanische als auch elektrische Kontrollen. Dazu gehören unter anderem Pulstests, Innenwiderstandsmessungen, optische Inspektionen, Prüfung der Leerlaufspannung, Kapazitäts- und Dichtheitstests, um sicherzustellen,

¹⁰¹ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 17.

¹⁰² Vgl. Self et al. (Survey of Gas Expansion in Li-Ion NMC Pouch Cells) 2015.

¹⁰³ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 18.

¹⁰⁴ Vgl. Plumeyer et al. (A Review of Process Innovations in the Cell Finishing of Lithium-Ion Batteries) 2023, S. 583f.

¹⁰⁵ Vgl. R-Smith et al. (Li-Ion Cell Measurements Including Internal Resistance for Quality Inspection and Classification) 2021, S. 1ff.

¹⁰⁶ Vgl. Heimes et al. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezelle) 2023, S. 19.

dass die Batterien den geforderten Leistungsstandards entsprechen. Elektrische Messungen wie die Selbstentladung, der Wechselstrom-Innenwiderstand (ACIR) und der Gleichstrom-Innenwiderstand (DCIR) haben sich in der Industrie als Standard etabliert. Die EoL-Prüfung variiert je nach Hersteller und Zellformat. Die Zellen werden nach erfolgreichem Abschluss der Prüfungen entsprechend ihrer Leistungsdaten sortiert. Dies ermöglicht eine Klassifizierung in verschiedene Leistungsklassen. Bei unzureichender Qualität werden die Zellen aussortiert. Erst nach Abschluss aller Tests und erfolgreicher Qualifizierung können die Zellen verpackt und versendet werden. Die End-of-Line Prüfung gewährleistet, dass nur Batterien höchster Qualität den Produktionsprozess verlassen und sie den Anforderungen verschiedener Anwendungen gerecht werden.¹⁰⁷ Aktuelle Bestrebungen in der EoL-Prüfung adressieren die Optimierung der zeitaufwändigen Verfahren und den verstärkten Einsatz von Inline-Messungen. Mit wachsender Größe der Batteriezellen wird die Sicherung der Qualität einzelner Zellen zu einer Herausforderung. Mit wachsender Zellengröße werden mögliche Inhomogenitäten verstärkt, was genauere Messmethoden erfordert, um potenzielle Unregelmäßigkeiten oder Defekte in den Zellen frühzeitig zu erkennen.¹⁰⁸

Die Zellfinalisierung spielt eine entscheidende Rolle in der Batteriezellenproduktion und beeinflusst maßgeblich die Zellqualität. Insbesondere die Formierung und Reifen stellen zeit- und kostenintensive Prozesse dar. Derzeit existiert kein branchenweiter Standard für die Prozessabfolge, da Hersteller unterschiedliche Verfahren und alternative Protokolle in Abhängigkeit von Zellformat, -größe und -chemie nutzen. Aktuelle Bestrebungen in Forschung und Industrie zielen insbesondere auf eine Verkürzung der Prozesszeiten ab, indem alternative Verfahren und Formierungsprotokolle für die Anwendung in der Serienproduktion diskutiert werden.¹⁰⁹

2.2.4 Prozess- und Produktwechselwirkungen

Process and product interdependencies

In der Batteriezellproduktion haben die Parametereinstellungen der Prozessschritte eine hohe Auswirkung auf die Effizienz, Qualität und Wirtschaftlichkeit der gesamten Prozesskette. Die Eigenschaften einer Batteriezelle hängen direkt mit den Produkteigenschaften der verwendeten Materialien sowie den Parametereinstellungen der vorangegangenen Prozessschritten zusammen. Eine Veränderung in einem Produktionsschritt kann die Leistungsfähigkeit, die Lebensdauer oder die Sicherheit der Batteriezelle negativ beeinflussen. In Abbildung 19 werden die Wechselwirkungen und Abhängigkeiten auf Produkt-, Prozess- und Produktionsebene dargestellt.¹¹⁰

¹⁰⁷ Vgl. Plumeyer et al. (A Review of Process Innovations in the Cell Finishing of Lithium-Ion Batteries) 2023, S. 585f.

¹⁰⁸ Vgl. Kampker et al. (Optimizing the Cell Finishing Process) 2023, S. 16.

¹⁰⁹ Vgl. Kampker et al. (Optimizing the Cell Finishing Process) 2023, S. 22.

¹¹⁰ Vgl. Ventura Silva et al. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production) 2023, S. 2.

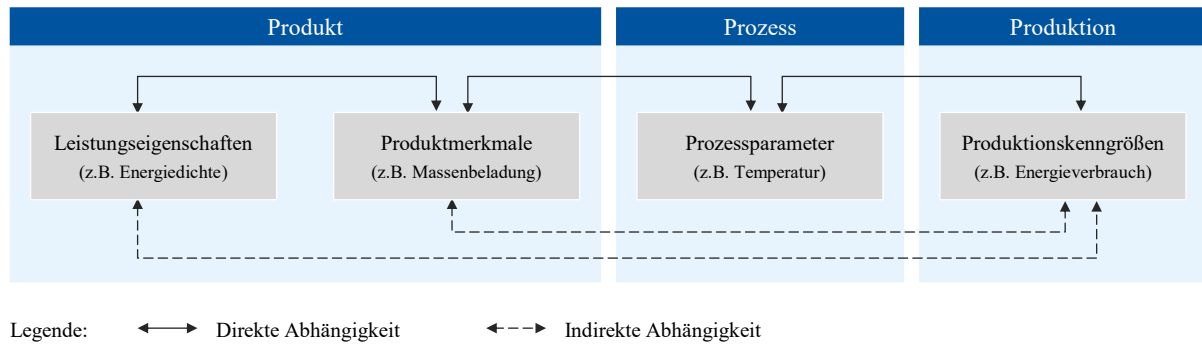


Abbildung 19: Wechselwirkungen auf der Produkt-, Prozess- und Produktionsebene^{111,112}

Aufgrund der Komplexität der Prozesse und den vielfältigen Wechselwirkungen ist die Kausalität zwischen den Prozessparametern und Produktionskenngrößen sowie den Produktmerkmalen und Leistungseigenschaften der endgültigen Zelle als auch ihrer Zwischenprodukte größtenteils unbekannt.¹¹³

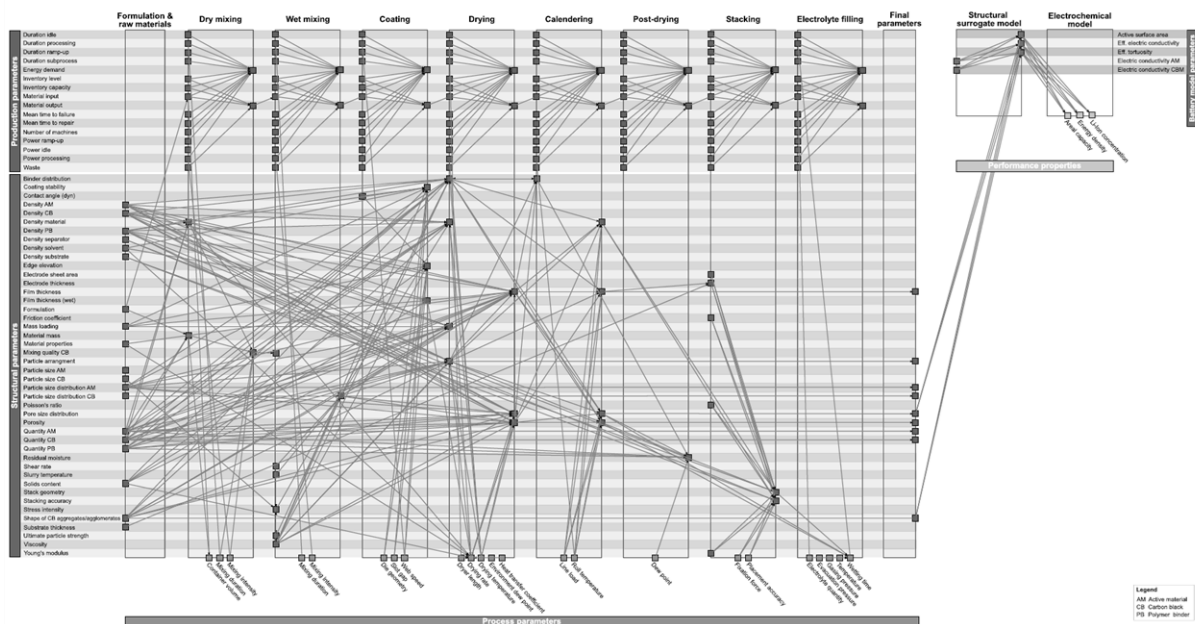


Abbildung 20: Parametermatrix zur Konsolidierung von Prozess- und Produktabhängigkeiten¹¹⁴

Jeder Prozessschritt in einem realen Produktionssystem ist durch eine Vielzahl von Parametern definiert, die wechselseitig aufeinander einwirken und die Leistungseigenschaften des Endprodukts beeinflussen. In Abbildung 20 wird anhand einer vereinfachten Prozesskette das Ausmaß und die Komplexität der Abhängigkeiten zwischen den Prozessparametern und den Produktmerkmalen in der Batteriezellproduktion veranschaulicht.¹¹⁵ Aufgrund der komplexen Wechselwirkungen zwischen Prozessparametern und Produkteigenschaften, gepaart mit einer

¹¹¹ Vgl. Ventura Silva et al. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production) 2023, S. 6.

¹¹² Vgl. Thomitzek et al. (Simulating Process-Product Interdependencies in Battery Production Systems) 2018, S. 348.

¹¹³ Vgl. Haghi et al. (Machine Learning in Lithium-Ion Battery Cell Production) 2023, S. 2.

¹¹⁴ Vgl. Ventura Silva et al. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production) 2023, S. 5.

¹¹⁵ Vgl. Ventura Silva et al. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production) 2023, S. 2ff.

unzureichenden Erfahrung hinsichtlich der Auswirkungen der Produktgestaltung auf die Produktionsleistung, resultieren erheblich erhöhte Ausschussraten.¹¹⁶ Diese Komplexität und Unwissenheit manifestieren sich in einer äußerst zeitaufwändigen und kostenintensiven Inbetriebnahme der Fertigungsanlagen und einem langwierigen Produktionsanlauf. Eine detaillierte Untersuchung der Ursache-Wirkungs-Beziehungen entlang der Batteriezellproduktion ermöglicht ein tieferes Verständnis dafür, wie unterschiedliche Prozessparameter die Leistung der Batteriezelle beeinflussen, um somit den Produktionsanlauf und Inbetriebnahme von Produktionssystemen zu optimieren.

2.3 Produktionsanlauf und Inbetriebnahme von Produktionssystemen

Production ramp-up and commissioning of production systems

Der Anlauf von Produktionssystemen stellt den Übergang von der Entwicklung und Planung hin zur Produktion unter Serienbedingungen dar. In den folgenden Abschnitten werden zunächst die Phasen des Produktionsanlaufs (Abschnitt 2.3.1) im Umfeld der Automobilindustrie vorgestellt. Im Anschluss erfolgt eine detaillierte Darstellung der Inbetriebnahme von Fertigungsanlagen (Abschnitt 2.3.2) und die Einordnung der Parametereinstellung im Produktionsanlauf.

2.3.1 Phasen des Produktionsanlaufs

Phases of the production ramp-up

Der Produktionsanlauf gliedert sich in der Automobilindustrie in drei Hauptphasen: Vorserie, Nullserie und Hochlauf. In Abbildung 21 wird die Einordnung des Produktionsanlaufs in den Produktentstehungsprozess beginnend mit der Entwicklung von Prototypen bis hin zur Produktion bei Nennleistung dargestellt. Jede Phase spielt eine spezifische Rolle bei der Gewährleistung eines reibungslosen Übergangs und einer erfolgreichen Serienproduktion.

Die Vorserie beschreibt den ersten Schritt im Produktionsanlauf und kennzeichnet den Beginn der Anlaufphase. Nachdem die Entwicklung abgeschlossen wurde, erfolgt die Freigabe für den Serienanlauf. Dabei werden Prototypen in großer Stückzahl unter seriennahen Bedingungen hergestellt, wobei einige Komponenten bereits aus Serienwerkzeugen stammen. Das Ziel der Vorserie ist vor allem die frühzeitige Identifikation von Problemen im Produktionsprozess, Erprobung von Materialien, Werkzeugen und Maschinen sowie und die Qualifikation der Mitarbeiter. Die Nähe zu Serienbedingungen ermöglicht eine präzise Problemerkennung und trägt dazu bei, kostspielige Änderungen in späteren Anlaufphasen zu minimieren.^{117,118}

Nachdem die Produktionsbereitschaft sichergestellt wurde, repräsentiert die Nullserie die nächste Stufe im Produktionsanlauf. Die Nullserie setzt erstmals vollständig auf Serienwerkzeuge und -materialien, wodurch eine realitätsnahe Erprobung des Zusammenspiels von

¹¹⁶ Vgl. Ventura Silva et al. (Model-based process design considering production performance for battery cell production) 2023, S. 780.

¹¹⁷ Vgl. Schuh (Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen) 2008, S. 2f.

¹¹⁸ Vgl. Schier (Iteratives Vorgehen im operativen Anlauf disruptiver Produkte) 2023, S. 33ff.

Produkt und Prozess ermöglicht wird. Die Produktion findet entweder auf separaten Pilotwerken, Pilotlinien oder sogar auf den späteren Serienproduktionslinien statt. Diese Phase ermöglicht die Erprobung unter realen Bedingungen und ist entscheidend, um sicherzustellen, dass unvorhergesehene Änderungen am Produkt oder Prozess behoben und die Produktion auf die geplante Serienkapazität hochgefahren werden kann.^{119,120}

Die Hochlaufphase schließt sich nach der Anlagenabnahme und der Serienfreigabe an die Nullserie an und markiert mit der Markteinführung den Übergang zur Serienproduktion. Während dieser Phase werden Produkte in größerem Umfang hergestellt, um die Kundennachfrage zu bedienen. Im Vergleich zur Serienproduktion weist der Produktionshochlauf häufig eine geringere Ausbringungsmenge begleitet von einem höheren Personal- und Materialbedarf auf. Das Hauptziel des Produktionshochlaufs besteht darin, das Produktionssystem in einen stabilen Zustand zu versetzen. Die Beendigung der Hochlaufphase ist ein entscheidender Meilenstein im Produktionsanlauf. In der Automobilindustrie wird häufig das Erreichen der Kammlinie als Ende des Hochlaufs betrachtet.^{121,122}

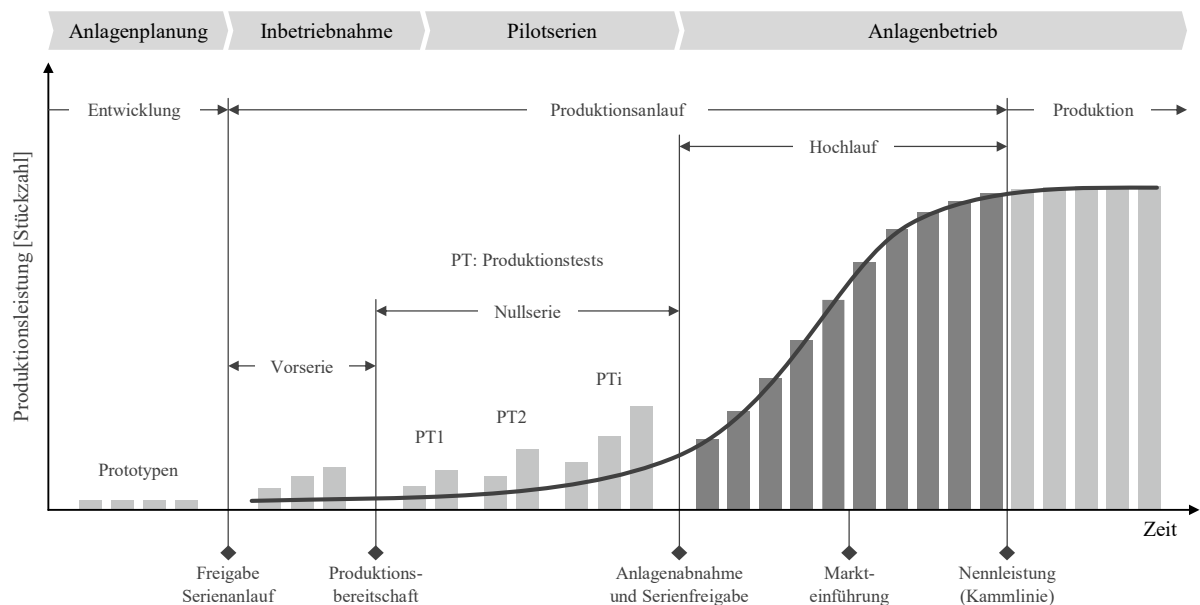


Abbildung 21: Einordnung des Produktionsanlaufs in den Produktentstehungsprozess^{123,124}

Die steigende Komplexität im Produktionsanlauf resultiert aus der Vernetzung verschiedener Gestaltungsobjekte und Funktionalbereiche, die während des Anlaufs erstmals miteinander interagieren. Darüber hinaus werden bei Beginn der Serienproduktion durch den Kunden erwartet, dass die Produktion vollständig angelaufen und eine stabile Produktqualität gewährleistet ist. Hierbei ist entscheidend, dass die Produktionsprozesse zum Zeitpunkt des Produktionsstarts

¹¹⁹ Vgl. Schuh (Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen) 2008, S. 2f.

¹²⁰ Vgl. Schier (Iteratives Vorgehen im operativen Anlauf disruptiver Produkte) 2023, S. 33ff.

¹²¹ Vgl. Schuh (Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen) 2008, S. 2f.

¹²² Vgl. Schier (Iteratives Vorgehen im operativen Anlauf disruptiver Produkte) 2023, S. 33ff.

¹²³ Vgl. Dyckhoff et al. (Ansätze einer Produktionstheorie des Serienanlaufs) 2012, S. 1430.

¹²⁴ Vgl. Westermeier (Qualitätsorientierte Analyse komplexer Prozessketten), S. 51.

eine zuverlässige und konforme Produktqualität sicherstellen. Geringe Prozessstabilitäten im Produktionsanlauf führen zu erhöhten Ausschussraten und einer geringen Anlagenproduktivität. Diese Probleme treten nicht nur zu Beginn des Serienbetriebs auf, sondern beeinflussen die Produktion in Teilen langfristig negativ. Entsprechende Prozessfenster dienen dazu, unvermeidbare Schwankungen innerhalb der vorgegebenen Toleranzbereiche bei qualitätsrelevanten Prozessparametern zu berücksichtigen und auszugleichen.¹²⁵

2.3.2 Phasen und Meilensteine der Inbetriebnahme

Phases and milestones of commissioning

Die Planung und Inbetriebnahme der Produktionsanlagen bis hin zum Anlagenbetrieb findet parallel zum Produktionsanlauf statt (vgl. Abbildung 21). Das Anlagenkonzept wird basierend auf den übergeordneten Projektzielen und dem Produktkonzept abgeleitet. Die notwendige Anzahl der Arbeitsstationen sowie die geforderten Taktzeiten und Verfügbarkeiten bilden die Grundlage für die detaillierte Prozess- und Anlagenplanung. Die Beschaffung der Anlagen erfolgt nach der Übergabe der Ausschreibungsunterlagen und des Lastenhefts an den potenziellen Lieferanten. Dieser übernimmt die Feinplanung, Konstruktion und Fertigung der Komponenten und Baugruppen.¹²⁶

Die detaillierte Ausgestaltung des Anlagenaufbaus ist integraler Bestandteil der Feinplanung und beinhaltet die Abstimmung von Zeit- und Baustellenplänen für die Montage sowie entsprechenden Produktionstests für die Inbetriebnahme.¹²⁷ Die notwendigen Aufgaben der Inbetriebnahme hängen maßgeblich von dem zu implementierenden Produktionssystem ab. Allgemein lassen sich die folgenden Begriffsdefinitionen unterscheiden:¹²⁸

- **Inbetriebnahme** (engl.: Commissioning) bezeichnet das Vorgehen, bei dem eine Anlage vom Ruhezustand in den Dauerbetriebszustand überführt wird, einschließlich der Erstinbetriebnahme nach Mechanischer Fertigstellung und werkvertraglicher Abnahme.
- **Anfahren** (engl.: Start-up) bezeichnet die Startphase des Probetriebs und ist die Überführung der Anlage aus dem Ruhezustand in einen stationären Betriebszustand, in dem alle Anlagenteile und Verfahrensstufen funktionsgerecht im Dauerbetrieb arbeiten.

Das Lebenszyklusmodell der Anlage differenziert zwischen das Errichten (Bau und Montage), die Inbetriebnahme und den Betrieb als inbetriebnahmespezifische Projektphasen. Die wesentlichen Phasen und Meilensteine zur Vorbereitung und Durchführung der Montage und Inbetriebnahme sind in Abbildung 22 dargestellt.¹²⁹

Die Errichterphase umfasst sämtliche Arbeiten auf der Baustelle beginnend mit der Baustelleneröffnung bis zur mechanischen Fertigstellung. Viele Tätigkeiten parallel zur Montage dienen

¹²⁵ Vgl. Schuh (Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen) 2008, S. 46f.

¹²⁶ Vgl. Meling (Methodik für die Rekombination von Anlagentechnik) 2012, S. 15ff.

¹²⁷ Vgl. Meling (Methodik für die Rekombination von Anlagentechnik) 2012, S. 19f.

¹²⁸ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 1ff.

¹²⁹ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 15.

als systematische Vorbereitung der Inbetriebnahme. Darüber hinaus sind Sicherheits- und Qualitätskontrollen am Ende der Montagephase notwendig. Während der Bau- und Montagephase muss auch die vorherige Inbetriebnahme einzelner Nebenanlage berücksichtigt werden, insbesondere in Turnkey-Verträgen zwischen Generalunternehmern und Subunternehmern. Das Errichten der Anlagen endet mit der mechanischen Fertigstellung.¹³⁰

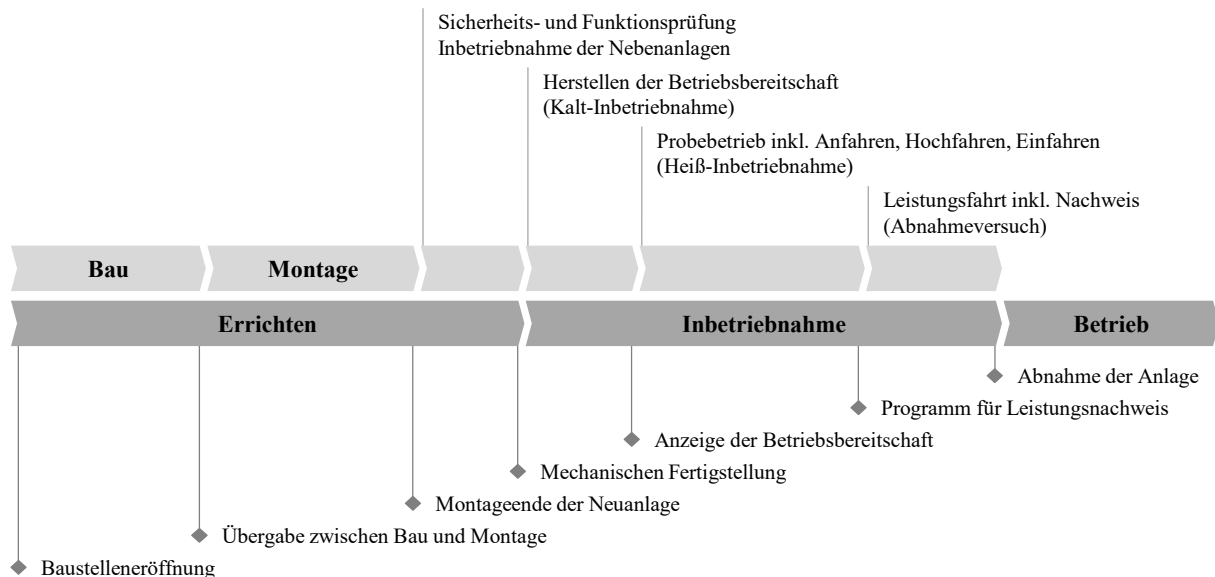


Abbildung 22: Phasen und Meilensteine der Montage und Inbetriebnahme¹³¹

Die Inbetriebnahme einer technischen Anlage gliedert sich üblicherweise in drei Abschnitte. Die Herstellung der Betriebsbereitschaft (Kalt-Inbetriebnahme) beschreibt den Übergang zwischen der mechanischen Fertigstellung und dem Probetrieb einer Anlage. In diesem Abschnitt werden umfassende Maßnahmen ergriffen, um die Anlage betriebsbereit zu machen. Dieser Prozess ist besonders entscheidend bei komplexen und sicherheitsrelevanten verfahrenstechnischen Anlagen. Im Idealfall kann die Betriebsbereitschaft zeitgleich mit der mechanischen Fertigstellung erklärt werden. Jedoch zeigt die Praxis, dass insbesondere bei Anlagen mit höherem Gefahrenpotential ein zusätzlicher Test- und Vorbereitungszeitraum erforderlich sein kann. Die Betriebsbereitschaft wird durch ein Protokoll dokumentiert, um die Betriebsbereitschaft festzuhalten. Anschließend erfolgt der Probetrieb (Heiß-Inbetriebnahme) durch das erstmalige Betreiben der Anlage unter realen Betriebsbedingungen. Das Ziel besteht darin, die Anlage und Prozesse zu stabilisieren und zu optimieren sowie die vertraglich festgelegten Leistungsparameter zu erreichen und die dauerhafte Nutzungsfähigkeit der Anlage sicherzustellen. Der erfolgreiche Probetrieb ist entscheidend für den zeitlichen und finanziellen Aufwand der gesamten Inbetriebnahme. Daher ist er in der Regel in mehrere Inbetriebnahmeschritte unterteilt, die vom Anfahren bis zur Leistungsfahrt reichen. Die Leistungsfahrt (Abnahmeversuch) ist ein vertraglich vereinbarter Betriebszeitraum während der Inbetriebnahme, der den

¹³⁰ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 15ff.

¹³¹ Vgl. Weber (Aufgaben, Schnittstellen und Spezifik der Inbetriebnahme) 2016, S. 16.

rechtsverbindlichen Leistungsnachweis für die Gesamtanlage erbringen soll. Nach erfolgreichem Leistungsnachweis werden in der Regel die Abnahmeverhandlungen eingeleitet und die Anlage kann in den bestimmungsgemäßen Betrieb übergehen.¹³²

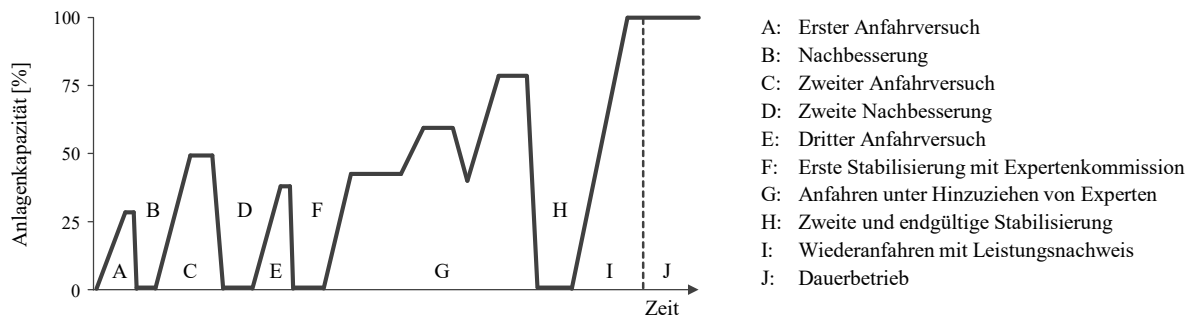


Abbildung 23: Extremer Verlauf einer Inbetriebnahme¹³³

Die Inbetriebnahme kontinuierlicher verfahrenstechnischer Anlagen (zum Beispiel in der Elektrodenfertigung) kann stark variieren. In einem extremen Szenario (vgl. Abbildung 23) können Probleme während der Inbetriebnahme auftreten, wodurch wiederholt Anfahrversuche und das Hinzuziehen von Experten und Fachleuten für die Stabilisierung der Anlagen und Einstellung der Betriebsparameter notwendig sind.¹³⁴

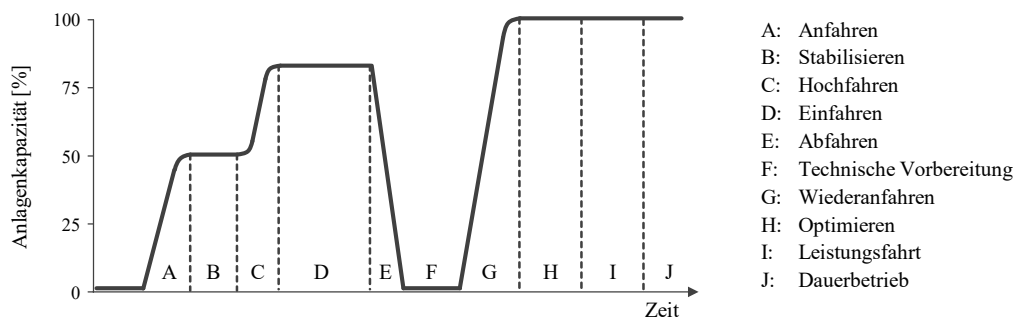


Abbildung 24: Angestrebter Verlauf einer Inbetriebnahme von Anlagen¹³⁵

In einem idealen Verlauf (vgl. Abbildung 24) erfolgt ein reibungsloses Anfahren mit sicherem Produktionsstart. Das Stabilisieren umfasst erfolgreiche Funktionsprüfungen und Behebung kleinerer Mängel. Beim Hochfahren wird der Durchsatz gesteigert, Kapazitätsengpässe werden adressiert und die Anlage stabilisiert. Die technische Vorbereitung des Leistungsnachweises erfolgt effizient. Während des Einfahrens wird die Anlage in dem geplanten Nennzustand erprobt, um die Produktqualität und Einhaltung von Garantiewerten sicherzustellen. Nach der technischen Vorbereitung des Leistungsnachweises und dem Wiederanfahren wird die Anlage zügig in den stabilen Nennlastbereich gebracht. Die Leistungsfahrt kennzeichnet damit das Ende der Inbetriebnahme und den Beginn des Dauerbetriebs. Die Einstellung der Parameter für

¹³² Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 18f.

¹³³ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 480.

¹³⁴ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 479ff.

¹³⁵ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 481.

den Dauerbetrieb erfolgt weitestgehend während des Hochfahrens der Anlagen. Hierfür werden die Anlagenparameter auf Nennlast erprobt.¹³⁶

Um die Anlagen in den geplanten Nennzustand hochzufahren sind neben den vorgegebenen Mengen insbesondere die Qualität der End- und Nebenprodukte entscheidend. Dieser Vorgang des Einfahrens kann mehrere Wochen in Anspruch nehmen, da die Einstellung der Anlage selbst bei konstanten Eingangs- und Prozessparametern langsam verläuft.¹³⁷

Um sowohl die Entwicklung und Kommerzialisierung von Batteriezellen als auch den Anlauf und Inbetriebnahme der Produktionssysteme zu beschleunigen ist ein tiefgreifendes Verständnis über die Abhängigkeiten der Prozessparameter und Produktmerkmale von großer Bedeutung. Insbesondere die Anwendung datengetriebener Methoden und die umfassende Analyse von Produktionsdaten ermöglichen es, die Effizienz der Produktion zu steigern sowie die Einführung neuer Materialgenerationen zu beschleunigen.¹³⁸

2.4 Digitalisierung und Künstliche Intelligenz

Digitalization and artificial intelligence in production

Die voranschreitende Automatisierung und Digitalisierung im Produktionsumfeld und die fortschreitende Einbindung Künstlicher Intelligenz in die Entscheidungsprozesse haben einen bedeutenden Einfluss auf die Organisationsstrukturen, die Zusammenarbeit von Mensch und Maschine sowie die Verantwortlichkeiten innerhalb der Produktion.¹³⁹ In diesem Abschnitt erfolgt zunächst eine Einordnung und Definition der Begriffe Digitalisierung und Künstliche Intelligenz im Produktionskontext (Abschnitt 2.4.1). Anschließend werden die Grundlagen des maschinellen Lernens (Abschnitt 2.4.2) erläutert sowie allgemeine Ansätze zur Durchführung von Datenanalyseprojekten (Abschnitt 2.4.3) vorgestellt.

2.4.1 Bedeutung der Digitalisierung im Produktionskontext

Meaning of digitalization in the production context

Die Digitalisierung der Produktion ist einer der zentralen Treiber in der Automobilindustrie und bezieht sich auf die Integration von Informationstechnologien in industrielle Prozesse. Dies umfasst die Nutzung von Daten sowie die Automatisierung und Vernetzung von Produktionssystemen, um die Effizienz zu steigern, Produktionsanlagen intelligenter zu gestalten und auf sich ändernde Anforderungen reagieren zu können.¹⁴⁰ Im Produktionskontext bezeichnet der Begriff Digitalisierung „den Einsatz vernetzter, digitaler Technologien in allen Bereichen von Wirtschaft und Gesellschaft. [...] Digitalisierung automatisiert die Datenverarbeitung und erlaubt damit die Verarbeitung sehr großer Datenmengen.“¹⁴¹

¹³⁶ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 479ff.

¹³⁷ Vgl. Weber (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen) 2016, S. 562.

¹³⁸ Vgl. Haghi et al. (Machine Learning in Lithium-Ion Battery Cell Production) 2023, S. 12.

¹³⁹ Vgl. Mockenhaupt (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion) 2021, S. 31ff.

¹⁴⁰ Vgl. Obermaier (Handbuch Industrie 4.0 und Digitale Transformation) 2019, S. 3ff.

¹⁴¹ Vgl. Mockenhaupt (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion) 2021, S. 33.

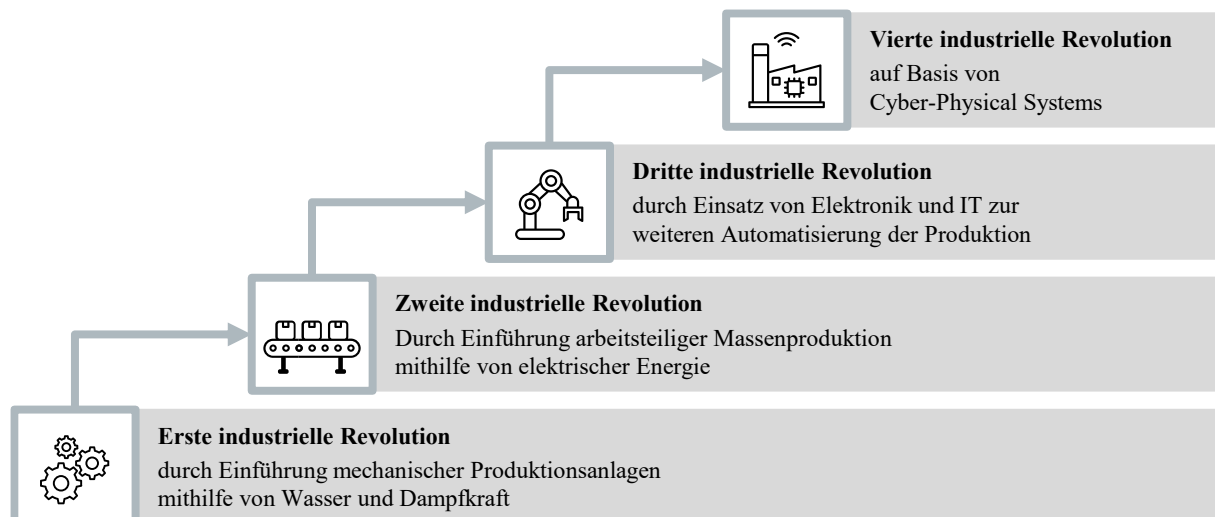


Abbildung 25: Die vier Phasen der industriellen Revolution¹⁴²

Die Digitalisierung traditioneller Industrieunternehmen und die Vernetzung in der Produktion wird oft als vierte industrielle Revolution betrachtet (vgl. Abbildung 25). In diesem Kontext wurde durch die deutsche Bundesregierung außerdem der Begriff Industrie 4.0 geprägt, um die Wettbewerbsfähigkeit zu sichern und den Kostendruck in der Produktion zu adressieren.¹⁴³ Der Begriff Industrie 4.0 bezieht sich insbesondere „auf den industriellen Einsatz und bezeichnet die Integration der Digitalisierung in Produktionsprozesse. Dabei kommen zusätzlich Elemente der [...] Künstlichen Intelligenz (KI) zum Tragen.“¹⁴⁴

Für den Begriff Künstliche Intelligenz gibt es bisher keine einheitliche Definition, was zu einer Vielzahl von Interpretationen des Begriffs führt. Eine bekannte Definition folgt dem Ansatz des Turing Tests, der besagt, dass ein System intelligent ist, wenn dessen Verhalten nicht von dem eines Menschen zu unterscheiden ist. In der Informationstechnologie und Informatik dient Künstliche Intelligenz als Sammelbegriff und adressiert insbesondere dessen theoretischen Grundlagen und daraus resultierende Anwendungen.¹⁴⁵ Allgemein bezieht sich Künstliche Intelligenz auf „die Fähigkeit von Computersystemen, auf sie zugeschnittene Aufgaben selbstständig zu lösen, die aufgrund ihrer Komplexität bislang menschliche Fähigkeiten erforderten.“¹⁴⁶ Der entscheidende Fortschritt in der Produktion zeigt sich durch die Integration von Digitalisierung, gepaart mit Autonomie, eigenständigem Lernen und Selbstoptimierung von Maschinen. Dies geschieht im Rahmen eines umfassenden Konzepts, das die gesamte Wertschöpfungskette und darüber hinaus umspannt.

Die Implementierung der wesentlichen Bestandteile von Industrie 4.0 bedarf hochintegrierte Systeme, die sowohl digitale als auch physische Komponenten miteinander verbinden, um komplexe industrielle Prozesse zu steuern und zu optimieren. Diese Systeme werden als cyber-physische Systeme (engl.: Cyber-Physical Systems) bezeichnet und kombinieren die

¹⁴² Vgl. Singh (Am Vorabend der vierten industriellen Revolution) 2015, S. 10.

¹⁴³ Vgl. Pistorius (Industrie 4.0 – Schlüsseltechnologien für die Produktion) 2020, S. 5f.

¹⁴⁴ Vgl. Mockenhaupt (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion) 2021, S. 33.

¹⁴⁵ Vgl. Wang (On Defining Artificial Intelligence) 2019, S. 6ff.

¹⁴⁶ Vgl. Gethmann et al. (Künstliche Intelligenz in der Forschung) 2022, S. 8.

traditionelle Produktionsumgebung mit modernen Informations- und Kommunikationstechnologien. Allgemein sind cyber-physische Systeme „verteilte, miteinander vernetzte und in Echtzeit kommunizierende, eingebettete Systeme, welche mittels Sensoren die Prozesse der realen, physischen Welt überwachen und durch Aktuatoren steuernd bzw. regulierend auf diese einwirken.“¹⁴⁷

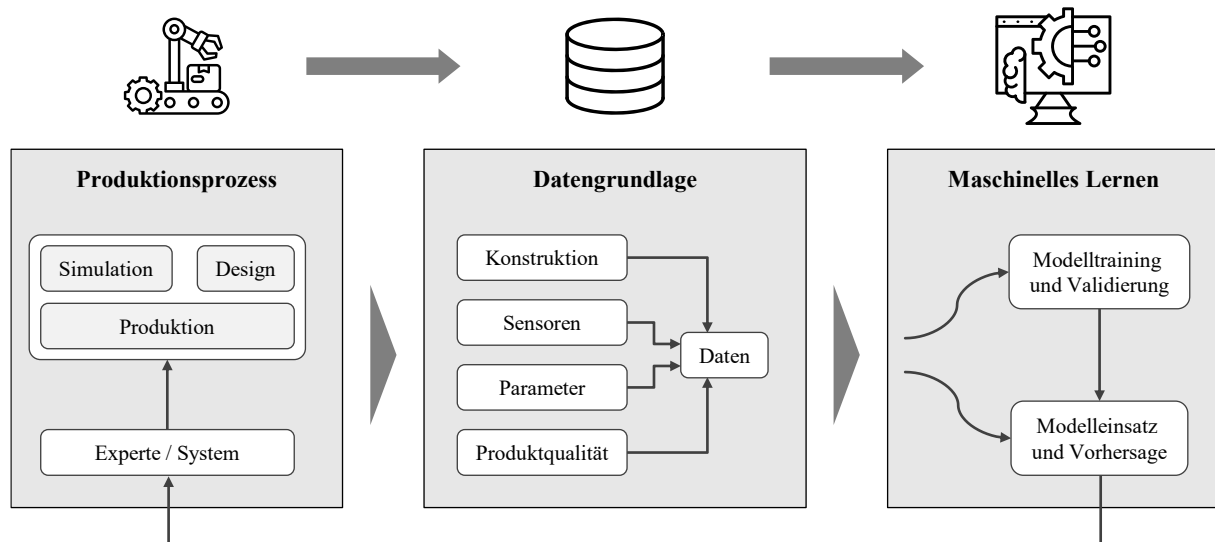


Abbildung 26: Entscheidungsunterstützung durch maschinelles Lernen in der Produktion¹⁴⁸

Insbesondere die Kombination cyber-physische Systeme mit Methoden aus den Bereichen maschinelles Lernen ermöglicht vielversprechende Anwendungen für eine datengetriebene, intelligente Fertigung. In der Produktion werden dafür in der Regel für einen bestimmten Produktionsprozess relevante Prozess- und Qualitätsdaten erfasst und auf dieser Datengrundlage ein maschinelles Lernmodell trainiert, das dann zur Unterstützung von Entscheidungsprozessen eingesetzt wird (vgl. Abbildung 26).¹⁴⁹

2.4.2 Grundlagen des maschinellen Lernens

Fundamentals of machine learning

Der Einsatz von Künstlicher Intelligenz zur Modellierung von Prozessen und zur Vorhersage von Parametern ist ein vielversprechender Ansatz zur Optimierung von Produktionsparametern, Verbesserung der Produktqualität und Reduzierung von Ausschuss in der Produktion.

Die Fähigkeit einer Maschine zu lernen, wurde bisher nicht explizit in den genannten Definitionen erwähnt. Auch wenn eine Künstliche Intelligenz ohne diese Fähigkeit funktionieren kann, wurden erfolgreiche Anstrengungen unternommen, Maschinen zu schaffen, die aus ihren Erfahrungen lernen. Das maschinelle Lernen (engl.: Machine Learning) ist ein Teilgebiet der Künstlichen Intelligenz. Durch den Einsatz von Algorithmen können Muster und

¹⁴⁷ Vgl. Mockenhaupt (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion) 2021, S. 255f.

¹⁴⁸ Vgl. Tercan et al. (Machine learning and deep learning based predictive quality in manufacturing) 2022, S. 1880.

¹⁴⁹ Vgl. Tercan et al. (Machine learning and deep learning based predictive quality in manufacturing) 2022, S. 1879f.

Gesetzmäßigkeiten in Datensätzen erkannt und somit Wissen und Lösungen generiert werden.¹⁵⁰ Die grundlegende Funktionalität des maschinellen Lernens kann wie folgt beschrieben werden.¹⁵¹

„A computer program is said to learn from experience E with respect to some class of tasks T and performance measure P, if its performance at tasks in T, as measured by p, improves with experience E.”

In Abbildung 27 wird die Einordnung des maschinellen Lernens im Kontext der Künstlichen Intelligenz und der Datenwissenschaft (engl.: Data Science) dargestellt. Künstliche Intelligenz umfasst allgemein Programme, die die Fähigkeit besitzen, wahrzunehmen, zu entscheiden, zu handeln und sich anzupassen. Als Teil der Künstlichen Intelligenz bezieht sich das maschinelle Lernen auf die Umsetzung von Algorithmen, welche eigenständig aus Daten lernen, um spezifische Probleme zu lösen. Ein Unterbereich des maschinellen Lernens ist das Deep Learning, das sich auf neuronale Netze spezialisiert, um komplexe Aufgaben durch das Lernen aus großen Datenmengen zu bewältigen. Auf der Anwendungsebene der Datenwissenschaft liegt der Fokus auf der Gewinnung verwertbarer Erkenntnisse aus Daten durch die Kombination strategischer Vorgehensweisen und wissenschaftlicher Methoden. Als Teilbereich der Datenwissenschaft befasst sich die Datenanalyse (engl.: Data Analytics) mit der Sammlung, Speicherung, Verarbeitung und Analyse von Daten, um strategische und geschäftsrelevante Einsichten zu gewinnen. Die Anwendung von maschinellem Lernen wird in bereits in alltäglichen Anwendungsbereichen wie der Zeichen- und Schrifterkennung, der Bildklassifizierung sowie der Prozessanalyse und -vorhersage in Fertigungsumgebungen deutlich. Besonders in Situationen, in denen menschliche Expertise nicht oder beschränkt verfügbar ist, ermöglicht maschinelles Lernen neue Erkenntnisse zu generieren. Dennoch bleibt die menschliche Expertise entscheidend für die Gestaltung der Algorithmen, die Definition von Bewertungsmetriken und die Auswahl der entsprechenden Algorithmen und Lernverfahren.¹⁵²

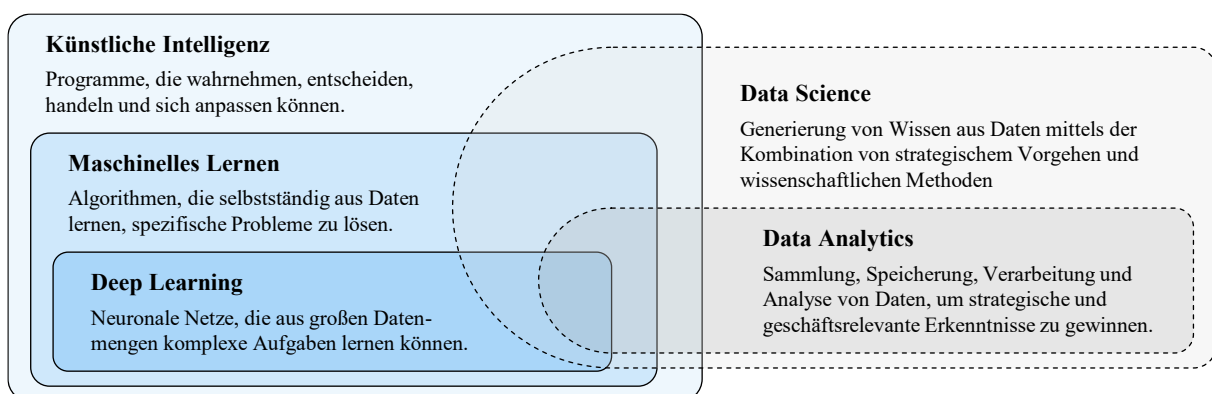


Abbildung 27: Einordnung und Abgrenzung des maschinellen Lernens¹⁵³

¹⁵⁰ Vgl. Mockenhaupt (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion) 2021, S. 134.

¹⁵¹ Vgl. Mitchell (Machine learning) 2010, S. 2.

¹⁵² Vgl. Greiner et al. (Analytics und Artificial Intelligence) 2022, S. 70.

¹⁵³ Vgl. Greiner et al. (Analytics und Artificial Intelligence) 2022, S. 70.

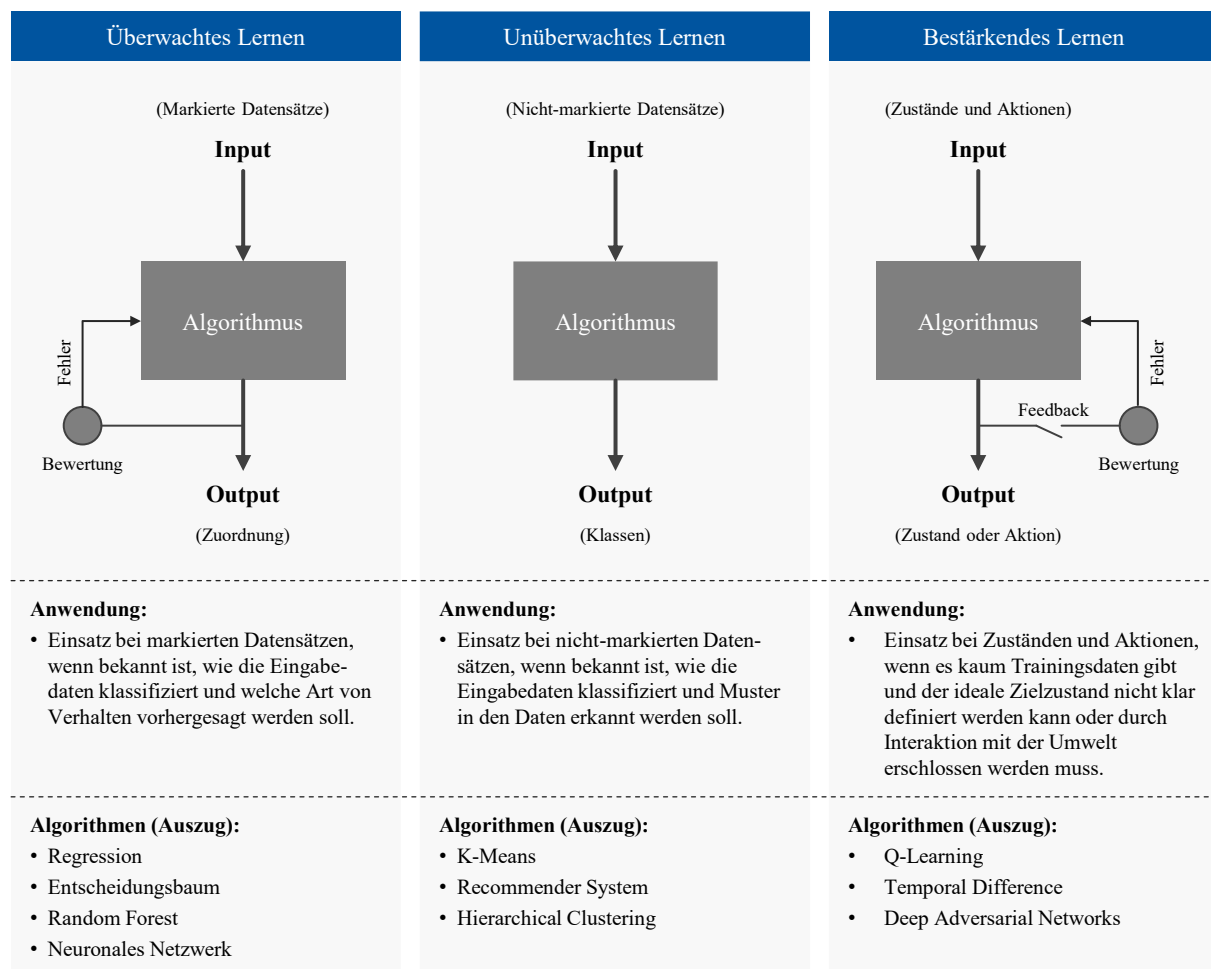


Abbildung 28: Arten des Maschinellen Lernens¹⁵⁴

Abhängig von der Anwendung lassen sich drei Arten des maschinellen Lernens unterscheiden (vgl. Abbildung 28). Das überwachtes Lernen (engl.: Supervised Learning) ist ein Ansatz, bei dem ein Algorithmus mithilfe von markierten Trainingsdaten (engl.: Labeled data) trainiert wird, um eine bestimmte Zielvariable vorherzusagen oder zu klassifizieren. Das bedeutet, dass für jede Eingabe eine entsprechende Zuordnung bekannt ist, die dem Algorithmus während des Trainings zur Verfügung gestellt wird. Das unüberwachtes Lernen (engl.: Unsupervised Learning) hingegen bezieht sich auf einen Ansatz, bei dem ein Algorithmus mit unmarkierten Daten (engl.: Unlabeled data) trainiert wird ohne eine bestimmte Vorgabe für die Ausgabe. Stattdessen sucht der Algorithmus nach Mustern oder Strukturen in den Daten, um diese zu klassifizieren oder zu gruppieren. Das bestärkende Lernen (engl.: Reinforcement Learning) ist ein Paradigma des maschinellen Lernens, bei dem ein Agent durch Interaktion mit einer Umgebung lernt. Ziel ist es, in verschiedenen Situationen Aktionen zu ergreifen, um eine Belohnung zu maximieren oder einen bestimmten Zielschritt zu erreichen. Der Agent erhält Feedback in Form von Belohnungen oder Bestrafungen für seine Handlungen, was ihm ermöglicht, seine Strategien im Laufe der Zeit anzupassen und zu verbessern.

¹⁵⁴ Vgl. Weber (Künstliche Intelligenz für Business Analytics) 2020, S. 39ff.

Im folgenden Abschnitt werden auszugsweise die Algorithmen Regressionsanalyse, Support-Vektor-Maschinen, k-Means-Clusteranalyse und Neuronale vorgestellt, da sie im weiteren Verlauf der Validierung (Kapitel 6) verwendet werden.

Regressionsanalyse

Die Regressionsanalyse ist eine statistische Methode zur Untersuchung der Beziehung zwischen einer abhängigen Variablen und einer oder mehreren unabhängigen Variablen. Die einfachste Form einer linearen Regression durch Gleichung (2.1) beschrieben. Diese einfache lineare Regression lässt sich für multivariable Regressionsprobleme durch Gleichung (2.2) erweitern. Dadurch ergibt sich der Lösungsraum aus der Summe der Teilfunktionen:¹⁵⁵

$$y(x) = w_0 + w_1 x + \epsilon \quad (2.1)$$

$$y(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_n x_n = w_0 + \sum_i w_i x_i \quad (2.2)$$

w_i : Regressionskoeffizient (Gewichtung)

ϵ : Residuum

Zur Ermittlung einer Regression, die die Daten bestmöglich abbildet, wird eine Verlustfunktion definiert, die den Fehler E innerhalb der Trainingsmenge D beschreibt. In der Regel wird für die lineare Regression der quadratische Fehler (L2-Funktion) verwendet:¹⁵⁶

$$E = \sum L_2(y, x) = \sum_{i=1}^n \left(y_i - (w_i x_i + w_0) \right)^2 \quad (2.3)$$

y : Ausgabewert (durch das Modell)

x : Eingabewert (aus dem Datensatz)

Allgemein ermöglicht die Regressionsanalyse, Vorhersagen zu treffen oder Muster in Daten zu identifizieren. Durch die Modellierung dieser Beziehungen können Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge aufgedeckt und Prognosen für zukünftige Ereignisse abgeleitet werden.¹⁵⁷

Support-Vektor-Maschinen

Die Support-Vektor-Maschine (SVM) ist ein Algorithmus, der für binäre Klassifizierungsaufgaben verwendet wird. Der Algorithmus sucht nach einer optimalen Trennlinie oder Hyperfläche, die die verschiedenen Klassen (Label) in den Daten voneinander trennt. Eine SVM zielt darauf ab, den Abstand (engl.: Margin) zwischen den Datenpunkten verschiedener Klassen zu

¹⁵⁵ Vgl. Russell et al. (Artificial intelligence) 2022, S. 694ff.

¹⁵⁶ Vgl. Russell et al. (Artificial intelligence) 2022, S. 695.

¹⁵⁷ Vgl. Lanquillon et al. (Knowledge Science) 2023, S. 35f.

maximieren und dabei den Generalisierungsfehler zu minimieren. Dabei kann eine Klassifizierungsaufgabe wie folgt beschrieben werden:¹⁵⁸

$$y(x) = \text{sign}(w^T x + b) \quad \text{mit} \quad y_i = \pm 1 \quad (2.4)$$

$$\text{Margin:} \quad \max \frac{2}{\|w\|} \quad (2.5)$$

x : Datenpunkt
 w : Gewichtung
 b : Bias

Das Funktionsprinzip einer SVM wird in Abbildung 29 dargestellt. Für linear teilbare Daten dient eine zweidimensionale Linie als Entscheidungsgrenze. Bei nicht-linearen Daten kann eine Abbildung in einen höherdimensionalen Raum durch die Einführung von Kernels erfolgen (z.B. durch die Abbildung von zweidimensionalen Daten in einen dreidimensionalen Raum).¹⁵⁹

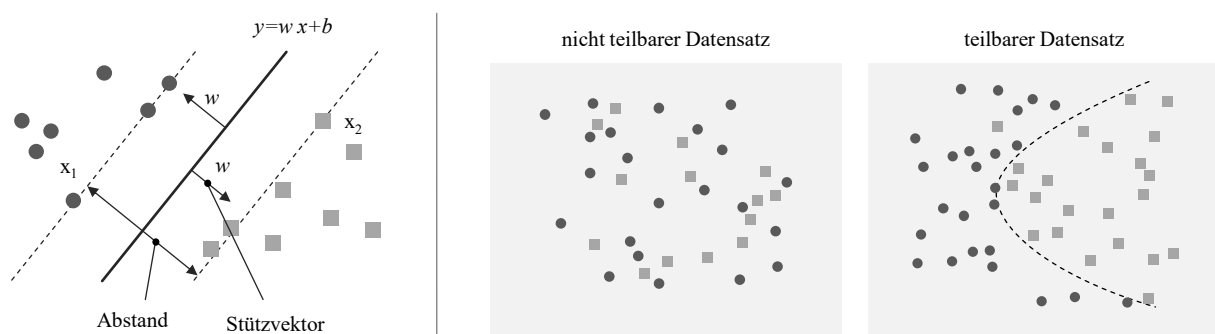


Abbildung 29: Funktionsprinzip SVM (links) und teilbare und nicht teilbare Datensätze (rechts)¹⁶⁰

Die Anwendung von SVM ist besonders bei einem Datensatz mit hoher Dimensionalität robust, da der Generalisierungsfehler unabhängig von der Dimensionalität des Eingaberaums ist.

k-Means

Der k-Means Algorithmus ist ein unüberwachtes Lernverfahren zur Gruppierung von Datenpunkten in k homogene Cluster. Er findet insbesondere bei der Identifizierung von Klassen und Mustern innerhalb von Daten Anwendung. Das Prinzip basiert auf der Minimierung der Summe der quadrierten Abstände zwischen Datenpunkten und ihren jeweiligen Clusterzentren.¹⁶¹

¹⁵⁸ Vgl. Saigal (Support-Vector Machines) 2020, S. 2ff.

¹⁵⁹ Vgl. Campbell et al. (Learning with Support Vector Machines) 2011, S. 1ff.

¹⁶⁰ Vgl. Campbell et al. (Learning with Support Vector Machines) 2011, S. 2ff.

¹⁶¹ Vgl. Jung (Machine Learning) 2022, S. 155ff.

$$\hat{y}^{(i)}(x) \in \operatorname{argmin} \|x^{(i)} - \mu^{(c)}\| \quad \text{mit} \quad c \in \{1, \dots, k\} \quad (2.6)$$

x : Datenpunkt
 μ : Clusterzentrum
 k : Anzahl der Cluster

Das grundlegende Prinzip des k-Means Clustering ist in Abbildung 30 dargestellt. Durch Iteration werden die Datenpunkte den Clustern zugeordnet. Die Clusterzentren werden aktualisiert, bis eine Konvergenz erreicht ist.¹⁶²

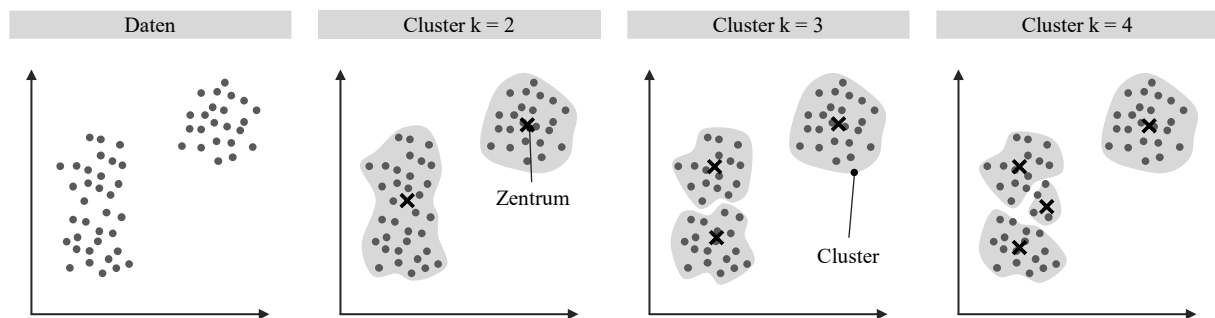


Abbildung 30: Funktionsprinzip k-Means Clustering¹⁶³

In der Praxis kann die Kombination von Clustering-Methoden mit Ansätzen des überwachten Lernens wie z.B. der linearen Regression von Vorteil sein. Durch die Verwendung von Clustering zur Zuweisung von Datenpunkten zu verschiedenen Klassen als zusätzliche Merkmale für die Modellierung kann die Genauigkeit der Vorhersagen und die Leistung des Modells verbessert werden.¹⁶⁴

Neuronale Netze

Neuronale Netze sind ein wichtiger Bestandteil des maschinellen Lernens, insbesondere im Bereich des Tiefen Lernens. Neuronale Netze sind Modelle, die durch Schichten und Knoten bestehend aus künstlichen Neuronen (vgl. Abbildung 31) komplexe Muster in Daten erfassen und komplexe Datenverarbeitungsaufgaben ausführen können. Sie sind inspiriert von der Funktionsweise des menschlichen Gehirns. Ein künstliches Neuron ist eine vereinfachte Nachbildung eines biologischen Neurons. Ein Neuron empfängt Eingaben von anderen Neuronen oder externen Elementen, verarbeitet sie und gibt sie an andere Neuronen weiter. Diese Verarbeitung erfolgt durch Gewichtungen w_i und Aktivierungsfunktionen a , die bestimmt, ob das Neuron aktiviert wird und welche Ausgabe es erzeugt.¹⁶⁵

¹⁶² Vgl. Lanquillon et al. (Knowledge Science) 2023, S. 53.

¹⁶³ Vgl. Kersting et al. (Wie Maschinen lernen) 2019, S. 87.

¹⁶⁴ Vgl. Jung (Machine Learning) 2022, S. 169.

¹⁶⁵ Vgl. Gillhuber et al. (Künstliche Intelligenz und Data Science in Theorie und Praxis) 2023, S. 35ff.

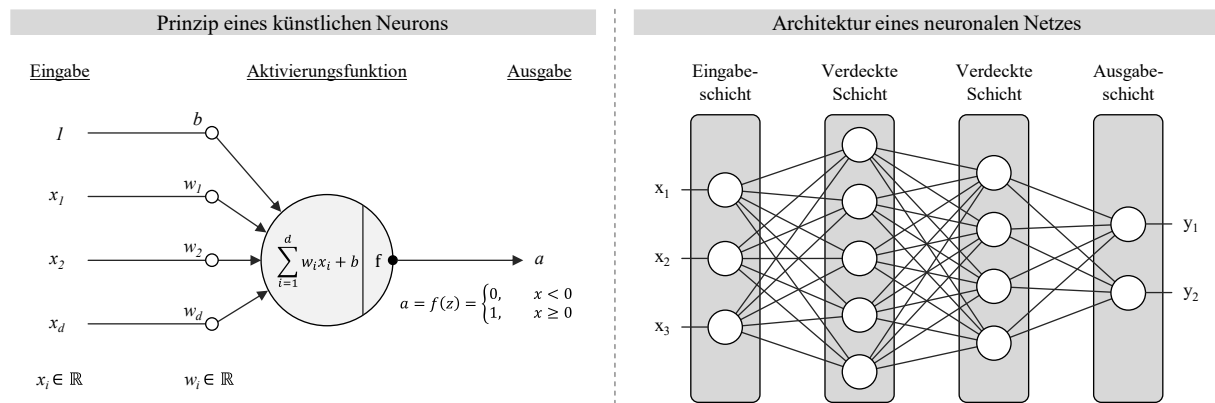


Abbildung 31: Funktionsprinzip neuronaler Netze¹⁶⁶

Die Architektur eines neuronalen Netzes umfasst typischerweise eine Eingabeschicht, eine oder mehrere verdeckte Schichten (engl.: Hidden Layer) und eine Ausgabeschicht. Die verdeckten Schichten ermöglichen, komplexe nicht-lineare Beziehungen in den Daten zu erfassen. Ein typisches neuronales Netz ist vollständig verbunden, was bedeutet, dass jedes Neuron einer Schicht mit jedem Neuron in der nächsten Schicht verbunden ist. Durch die Verwendung eines Multi-Layer-Perceptrons (MLP)¹⁶⁷ können neuronale Netze eine breite Palette von Funktionen approximieren und erlernen, sofern ausreichend Trainingsdaten und eine geeignete Architektur vorhanden sind. Das Training eines neuronalen Netzes erfolgt durch die Anpassung der Gewichtungen und Bias-Terme b der Neuronen mittels eines geeigneten Lernalgorithmus und einer Verlustfunktion, die den Unterschied zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Ausgaben misst. Der Lernprozess besteht darin, die Parameter des Netzes so anzupassen, dass die Verlustfunktion minimiert wird und das Netz die gewünschten Ausgaben erzeugt. Insgesamt bieten neuronale Netze eine leistungsstarke Methode zur Verarbeitung von Daten und zum Lernen von Mustern, die in komplexen Datensätzen enthalten sind. Ihr Einsatz erstreckt sich über eine Vielzahl von Anwendungen, darunter Bilderkennung, Sprachverarbeitung, maschinelle Übersetzung und vieles mehr.¹⁶⁸

2.4.3 Vorgehen zur Durchführung von Data Analytics Projekten

Approaches for the implementation of data analytics projects

Die Einführung und Entwicklung von systematischen Vorgehensweisen und Ansätzen für Data Analytics Projekte ist eng mit der wachsenden Komplexität von Mustern und Informationen in großen Datenmengen verbunden. Durch ein systematisches Vorgehen wird ein methodischer Rahmen für den gesamten Lebenszyklus von Data Analytics Projekten geschaffen, wodurch einerseits der effiziente Einsatz von Ressourcen für die Planung, Durchführung und Bewertung von Analyseprojekten ermöglicht wird. Andererseits verbessern sie die Zusammenarbeit zwischen verschiedenen Teams und Abteilungen innerhalb eines Unternehmens, indem sie ein gemeinsames Verständnis und eine gemeinsame Sprache für den Analyseprozess schaffen. Durch

¹⁶⁶ Vgl. Gillhuber et al. (Künstliche Intelligenz und Data Science in Theorie und Praxis) 2023, S. 37ff.

¹⁶⁷ Ein Multi-Layer Perceptron ist ein neuronales Netzwerk mit mindestens einer verdeckten Schicht zwischen Eingabe- und Ausgabe.

¹⁶⁸ Vgl. Gillhuber et al. (Künstliche Intelligenz und Data Science in Theorie und Praxis) 2023, S. 35ff.

die Abgrenzung aufeinander folgender Phasen stellen die Methoden sicher, dass Projekte fokussiert und auf die übergeordneten Ziele ausgerichtet bleiben. Durch die klare Definition von Schritten und Metriken zur Bewertung von Modellen können potenzielle Fehler und Bias frühzeitig erkannt und korrigiert werden.¹⁶⁹

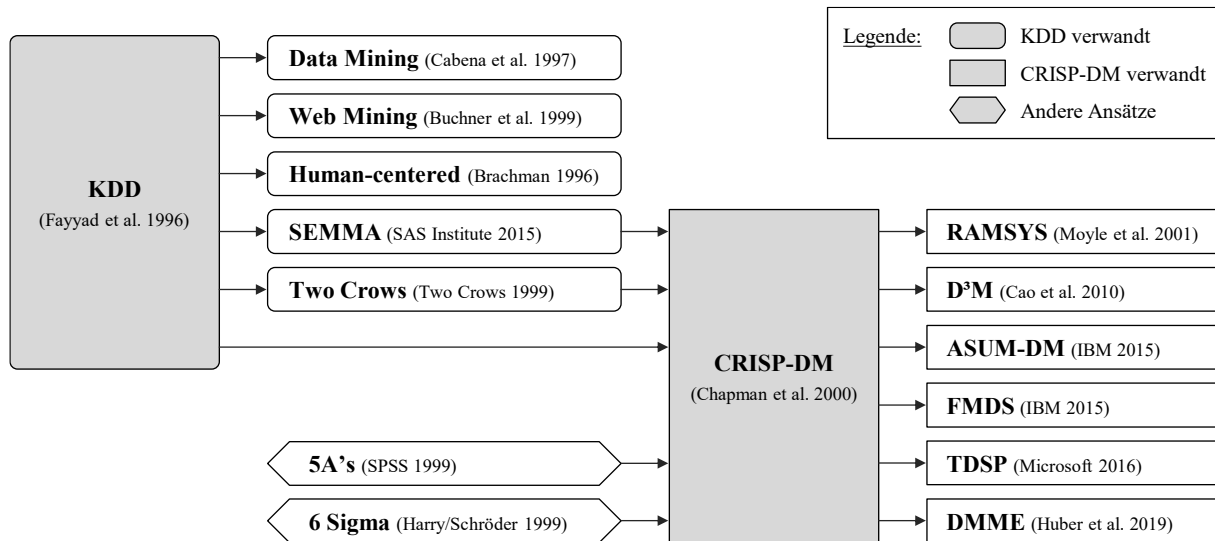


Abbildung 32: Entwicklung von Data-Mining und Data-Science Modellen¹⁷⁰

Einer der ersten etablierten Ansätze für Data Analytics Projekte war das Konzept des "Knowledge Discovery in Databases" (KDD). Dieser Ansatz legte den Grundstein für strukturierte Prozesse zur Identifizierung von Mustern und Wissen in großen Datenmengen. Darauf aufbauend wurde der branchenübergreifende Ansatz „Cross-industry standard process for data mining“ (CRISP-DM) von einem Konsortium von Unternehmen entwickelt, um ein standardisiertes Vorgehen in der Datenanalyse zu schaffen. Im Laufe der letzten Jahre wurden weitere Datenanalysemethoden konzipiert und weiterentwickelt (vgl. Abbildung 32), um anwendungsspezifische Anforderungen zu adressieren und die Organisation solcher Projekte effizienter zu gestalten.¹⁷¹

Im Kontext cyber-physischer Produktionssystemen wurde der CRISP-DM durch Planungsgrundlagen für die Anwendung datengetriebener Methoden in der Fertigung erweitert und durch eine technische Betrachtung und der Bewertung der prozessintegrierten Datenerfassung ergänzt. Der Ansatz des „Data Mining Methodology for Engineering Applications“ (DMME) berücksichtigt neben einer systematischen Betrachtung relevanter Wechselwirkungen ebenfalls eine technische Implementierung im späteren Produktionsumfeld.¹⁷² Diese drei Ansätze werden im Folgenden detailliert vorgestellt.

¹⁶⁹ Vgl. Martinez-Plumed et al. (CRISP-DM Twenty Years Later) 2021, S. 3048ff.

¹⁷⁰ Vgl. Martinez-Plumed et al. (CRISP-DM Twenty Years Later) 2021, S. 3050.

¹⁷¹ Vgl. Martinez-Plumed et al. (CRISP-DM Twenty Years Later) 2021, S. 3049ff.

¹⁷² Vgl. Wiemer et al. (Data Mining Methodology for Engineering Applications) 2019, S. 1ff.

KDD: Knowledge Discovery in Databases

Der Ansatz des KDD ist ein systematischer Ansatz zur Extraktion von nützlichem Wissen oder Informationen aus großen Datenmengen. Der Prozess besteht aus mehreren aufeinanderfolgenden Schritten (vgl. Abbildung 33), um Rohdaten in verwertbare Informationen und Wissen zu überführen.

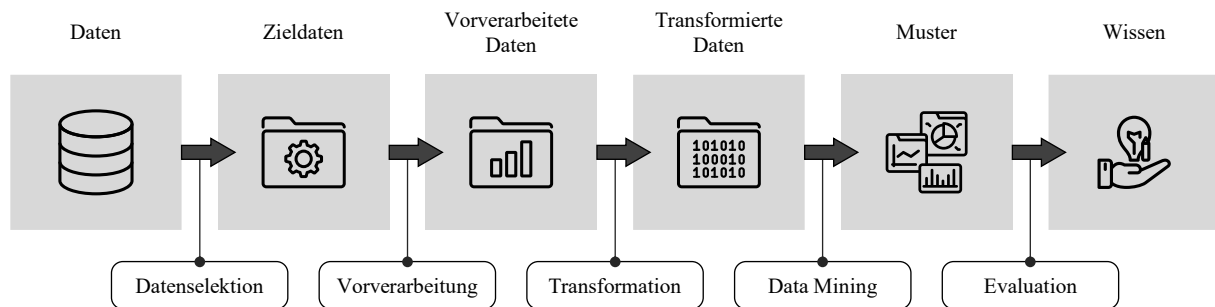


Abbildung 33: Vorgehen des Knowledge Discovery in Databases (KDD)¹⁷³

In der Phase der Datenselektion werden die relevanten Daten aus der Gesamtdatenmenge ausgewählt, die für die Analyse verwendet werden sollen. Dies beinhaltet die Festlegung der Datenquellen und die Definition der Kriterien für die Auswahl. In der Phase der Vorverarbeitung werden die ausgewählten Daten bereinigt und vorverarbeitet, um sicherzustellen, dass sie für die Analyse geeignet sind. Dies beinhaltet die Behandlung von fehlenden Werten, Ausreißern und inkonsistenten Daten. In der Phase der Transformation werden die Daten in ein geeignetes Format überführt, um Muster und Beziehungen zu erkennen. Dies kann die Umwandlung von Daten in eine bestimmte Darstellung oder Struktur umfassen (z.B. die Normalisierung von Daten oder die Reduktion von Dimensionalitäten). In der Phase des Data Mining werden Algorithmen zunächst ausgewählt und angewendet, um Muster, Trends und Beziehungen innerhalb der Daten zu entdecken. Dies umfasst insbesondere die Auswahl der Lernstrategie und der möglichen Techniken wie Clustering, Klassifizierung oder Regression. In der Phase der Evaluation werden die Muster und Erkenntnisse interpretiert und ausgewertet. Dies beinhaltet die Validierung der Gültigkeit und Relevanz der entdeckten Muster im Kontext des Anwendungsgebiets.

CRISP-DM: Cross Industry Standard Process for Data Mining

Der Ansatz des CRISP-DM ist ein umfassendes Modell für den gesamten Lebenszyklus eines Data-Mining-Projekts. Der Lebenszyklus eines Data-Mining-Projekts besteht in der Regel aus sechs Phasen (vgl. Abbildung 34). Die Reihenfolge der Phasen ist jedoch nicht starr. Ein Hin- und Herspringen zwischen einzelnen Phasen ist vom Ergebnis jeder Phase abhängig, sodass spezifische Schritte ggf. erneut durchlaufen werden müssen. Die Pfeile zeigen die typischen Abhängigkeiten zwischen den Phasen des CRISP-DM an.¹⁷⁴

¹⁷³ Vgl. Fayyad et al. (The KDD process for extracting knowledge from data) 1996, S. 29.

¹⁷⁴ Vgl. Chapman et al. (CRISP-DM) 2000, S. 13ff.

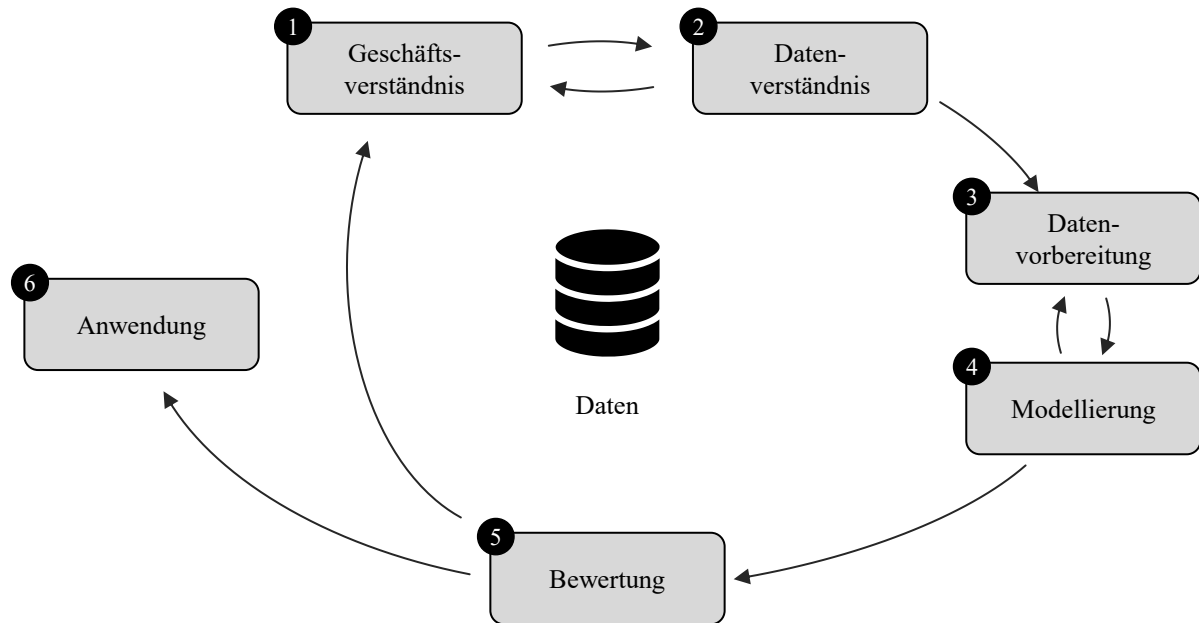


Abbildung 34: Vorgehen des Cross-Industry Standard Process for Data Mining (CRISP-DM)¹⁷⁵

In der ersten Phase (Geschäftsverständnis) liegt der Fokus auf dem Verständnis der Projektziele und -anforderungen. Diese Informationen dienen als Definition des Datenanalyseproblems, um ein vorläufiges Planungskonzept zu erstellen. Die zweite Phase des Datenverständnisses beginnt mit der initialen Datensammlung und Prüfung der Daten. Das Ziel ist es, Datenqualitätsprobleme zu identifizieren, erste Erkenntnisse zu gewinnen und relevante Datensätze zu bestimmen. Anschließend folgt die Phase der Datenvorbereitung, in der alle Aktivitäten zur Erstellung des finalen Datensatzes für die Modellierung (z.B. Auswahl von Tabellen, Datensätze und Attributen sowie Transformation und Bereinigung der Daten) durchgeführt werden. In der Phase der Modellierung werden verschiedene Modellierungstechniken ausgewählt, angewendet und ihre Hyperparameter kalibriert. In der Regel lassen sich mehrere Techniken für denselben Typ von Datenanalyseproblem heranziehen. Daher ist es häufig erforderlich, zu der Phase der Datenvorbereitung zurückzukehren, da einige Lerntechniken spezifische Anforderungen an die Daten haben. In der Phase der Bewertung wird das erstellte Modell (oder die Modelle) einer gründlichen Bewertung unterzogen, um sicherzustellen, dass es die definierten Projektziele angemessen erfüllt. Anschließend wird eine Entscheidung über die Verwendung der Ergebnisse der Datenanalyse getroffen. Sofern die Entscheidung positiv ist, folgt die Bereitstellung und Anwendung des Modells. Dies kann von der Einbindung der Modelle in Entscheidungsprozesse bis hin zur Implementierung wiederholbarer Datenanalysen in der Organisation reichen. Abschließend werden die gewonnenen Erkenntnisse organisiert, dokumentiert und präsentiert.¹⁷⁶

DMME: Data Mining Methodology for Engineering Applications

Der Ansatz des DMME ist eine Erweiterung des CRISP-DM und wurde konzipiert, um den spezifischen Anforderungen innerhalb ingenieurstechnischer Anwendungen gerecht zu werden.

¹⁷⁵ Vgl. Chapman et al. (CRISP-DM) 2000.

¹⁷⁶ Vgl. Chapman et al. (CRISP-DM) 2000, S. 13ff.

Der Ansatz verfolgt einen systematischen Prozess für die Entwicklung und Dokumentation aller erforderlichen Schritte und Einbindung von technischem Fachwissen im Produktionskontext (z.B. Optimierung von Produktionsprozessen, Zustandsüberwachung sowie vorausschauende Wartung). Der DMME ergänzt daher die Phasen des technischen Verständnisses, der technische Umsetzung und der technischen Implementierung (vgl. Abbildung 35).¹⁷⁷

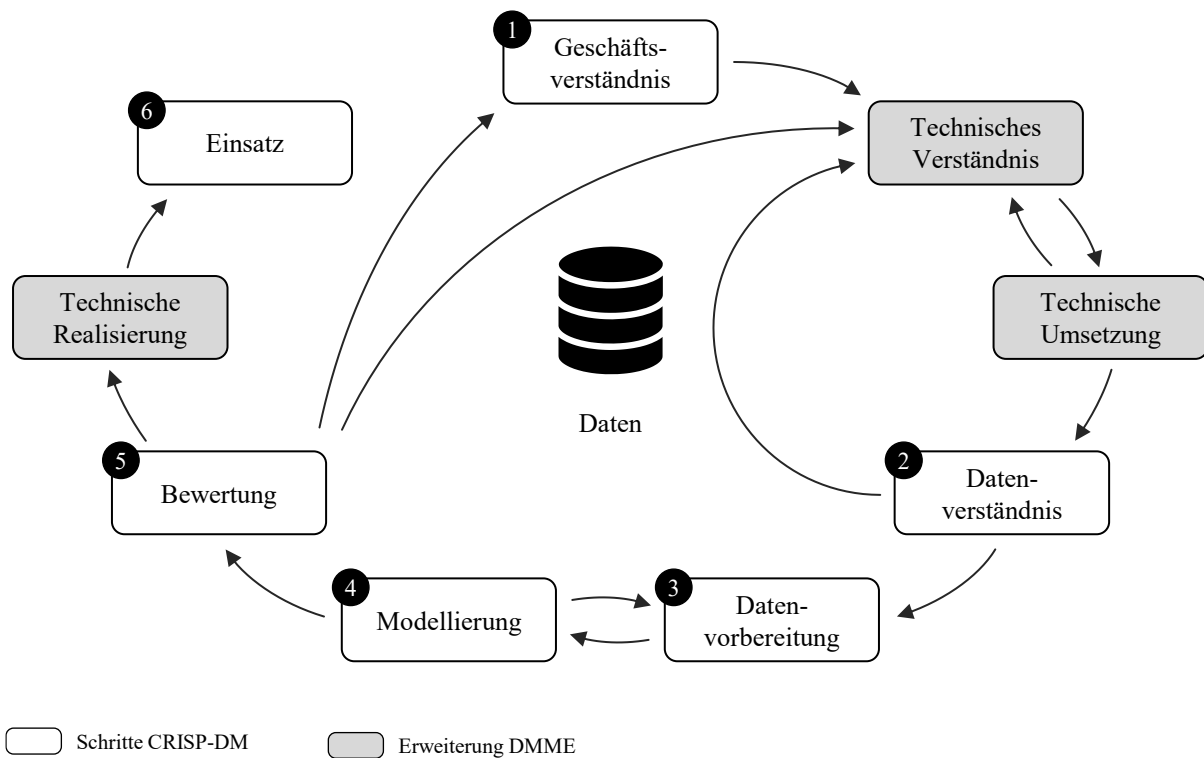


Abbildung 35: Vorgehen des Data Mining Methodology for Engineering Applications (DMME)¹⁷⁸

Die Phase des technischen Verständnisses beinhaltet die Überführung der Geschäftsziele in messbare technische Ziele, die Erfassung vorhandenen Fachwissens über physikalische und Prozesseffekte sowie die Entwicklung eines Versuchsplans. Zu den Aufgaben gehören sowohl die Analyse der Systemstruktur, Prozesse und zugehörigen Parameter als auch die Definition der technischen Ziele und die Ableitung der technischen Analyseaufgaben. Der zentrale Aspekt besteht in der Aufbereitung und Dokumentation des vorhandenen Fachwissens über physikalische Effekte, die Definition relevanter physikalischer Parameter sowie die technische Planung für die Durchführung der nachfolgenden Messungen. Die Phase der technischen Realisierung umfasst die Entwicklung eines technischen Testaufbaus, die Auswahl von geeigneten Messsystemen und Datenerfassungsmethoden. Dabei werden außerdem mögliche technische Einschränkungen, mögliche Fehlerquellen sowie die Datenqualität (der Messtechnik) erfasst. Anschließend erfolgt Durchführung der Versuchsreihen zur Datengenerierung, um alle relevanten Informationen und Merkmale für die nachfolgenden Datenanalyseaufgaben zu erhalten. Die Phase der technischen Implementierung betrachtet das evaluierte Modell und dessen Einbindung in

¹⁷⁷ Vgl. Huber et al. (Data mining methodology for engineering applications) 2019, S. 406.

¹⁷⁸ Vgl. Huber et al. (Data mining methodology for engineering applications) 2019, S. 406.

der Produktion mit Echtzeitdaten, indem die Datenerfassung in eine langzeitfähige Lösung überführt wird. Dazu gehören die Überprüfung aller verwendeten Sensortechnologien, die Bereitstellung der erforderlichen Stromversorgung, den Umgang mit Verbindungsverlusten und die Entwicklung oder Auswahl einer Softwareinfrastruktur zur Verarbeitung von Maschinen- und Sensordatenströmen.¹⁷⁹

2.5 Handlungsbedarf aus der Praxis

Challenges in the industry

Nachdem die Grundlagen der Batteriezellproduktion sowie allgemeine Aktivitäten im Produktionsanlauf und der Inbetriebnahme erläutert wurden, werden in dem folgenden Abschnitt die Herausforderungen aus der Praxis verdeutlicht und die Potentiale künstlicher Intelligenz bei der Anwendung datenbasierter Ansätze in der Produktion herausgestellt.

Die steigende Nachfrage nach Batteriezellen treibt die kontinuierliche Weiterentwicklung neuer Zellkonzepte und nachhaltiger Materialien voran. Materialinnovationen zielen darauf ab, die Leistungsfähigkeit, Sicherheit und Lebensdauer von Batteriezellen zu verbessern, während gleichzeitig Umweltbelastungen minimiert werden. Wie in Abschnitt 2.1.4 beschrieben, stellt jedoch die Auswahl, Gestaltung und Kommerzialisierung neuer Batteriezellen und Materialkombinationen eine Herausforderung in der Praxis dar. Neben der Industrialisierung und Validierung neuer Produktgenerationen erfordert insbesondere die Vielfalt der Produktvarianten eine hohe Anpassungsfähigkeit der Produktionsanlagen, um den unterschiedlichen Anforderungen, Spezifikationen und Abmessungen gerecht zu werden. Daraus resultiert die Notwendigkeit, die Parametereinstellung der Anlagentechnik schnell und ohne größere Produktionsunterbrechungen entlang der gesamten Fertigungslinie auf das zu produzierende Batteriezelldesign anzupassen.

Die Batteriezellproduktion ist durch eine hohe technologische Komplexität geprägt und umfasst sowohl kontinuierliche als auch diskrete Prozesse (vgl. Abschnitt 2.2.4). Darüber hinaus sind diese Prozesse durch komplexe Wechselwirkungen zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen gekennzeichnet, deren Kausalitäten bisher nicht ausreichend bekannt sind. Um eine kontinuierliche Prozessoptimierung umzusetzen, ist ein tiefgreifendes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen sowie die Implementierung von geeigneten Optimierungsstrategien notwendig. Simulationsbasierte Ansätze stoßen angesichts dieser Wechselwirkungen an ihre Grenzen. Die Vielzahl von erzeugten Produktionsdaten bieten allerdings ein hohes Potential für den Einsatz von künstlicher Intelligenz, um komplexe Muster zu erkennen und prädiktive Modelle zu entwickeln (vgl. Abschnitt 2.4).

¹⁷⁹ Vgl. Huber et al. (Data mining methodology for engineering applications) 2019, S. 406f.

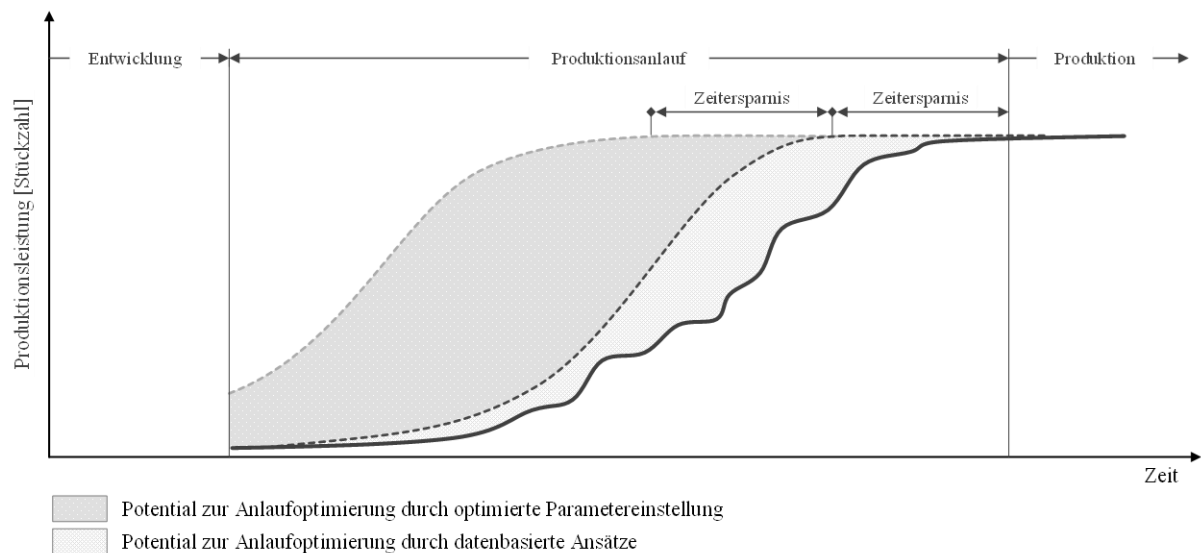


Abbildung 36: Potential einer optimierten Parametereinstellung im Produktionsanlauf

Die Inbetriebnahme von Fertigungsanlagen ist häufig zeit- und kostenintensiv, da ein tiefgreifendes Verständnis der Abhängigkeiten von Prozessparametern und Produktmerkmalen notwendig ist (vgl. Abschnitt 2.3). Insbesondere in der Batteriezellproduktion fehlt dieses Wissen. Dies führt zu wiederholten Anfahrversuchen, um die richtigen Parameter einzustellen und die Anlagen stabil zu betreiben. Aus Abschnitt 1.1 wird allerdings deutlich, dass typische Anlaufszenarien einer neuen Batteriezellproduktion für die ersten Jahren der Produktion weiterhin Ausschussraten von bis zu 25 % und einer Gesamtanlageneffektivität von deutlich unter 80 % vorweisen. Die niedrige Gesamtanlageneffektivitäten sind die Folge komplexer Ursache-Wirkungszusammenhänge und mangelnder Erfahrung in der Batteriezellproduktionen. Der Einsatz datenbasierter Ansätze während des Hochlaufs kann die Anlaufzeit bereits nach ersten Lernprozessen aus Vor- und Nullserie in Teilen verkürzen (vgl. Abbildung 36). Doch „die Batteriezellproduktion ist heute zum großen Teil immer noch auf einem Stand, auf dem die Automobilindustrie in den 1960er Jahren war: Man probiert Dinge aus, wartet ab, ob sie sich in der Praxis bewähren und justiert dann den Fertigungsprozess nach. Diese Trial-and-Error-Methode ist nicht nur sehr ineffizient, sondern auch langwierig und mit dem Verbrauch von Energie und Ressourcen verbunden.“¹⁸⁰ Um den Anlauf und die Inbetriebnahme von Produktionssystemen allerdings weiter zu beschleunigen, ist es notwendig, effiziente Methoden zur Parametereinstellung zu entwickeln und eine Prozessoptimierung zu befähigen. Im Produktionsanlauf wird eine Zeitersparnis insbesondere durch eine optimierten Parametereinstellung in der Inbetriebnahme und dem Hochlauf ermöglicht. Dies kann durch den Einsatz von künstlicher Intelligenz zur Generierung von Wissen über qualitätsrelevante Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge oder Modelle des maschinellen Lernens zur Vorhersage optimaler Prozessparameter erreicht werden.¹⁸¹

¹⁸⁰ Vgl. Weik (Pressemitteilung - Handbook on Smart Battery Cell Manufacturing) 2022.

¹⁸¹ Vgl. Westermeier (Qualitätsorientierte Analyse komplexer Prozessketten), S. 51.

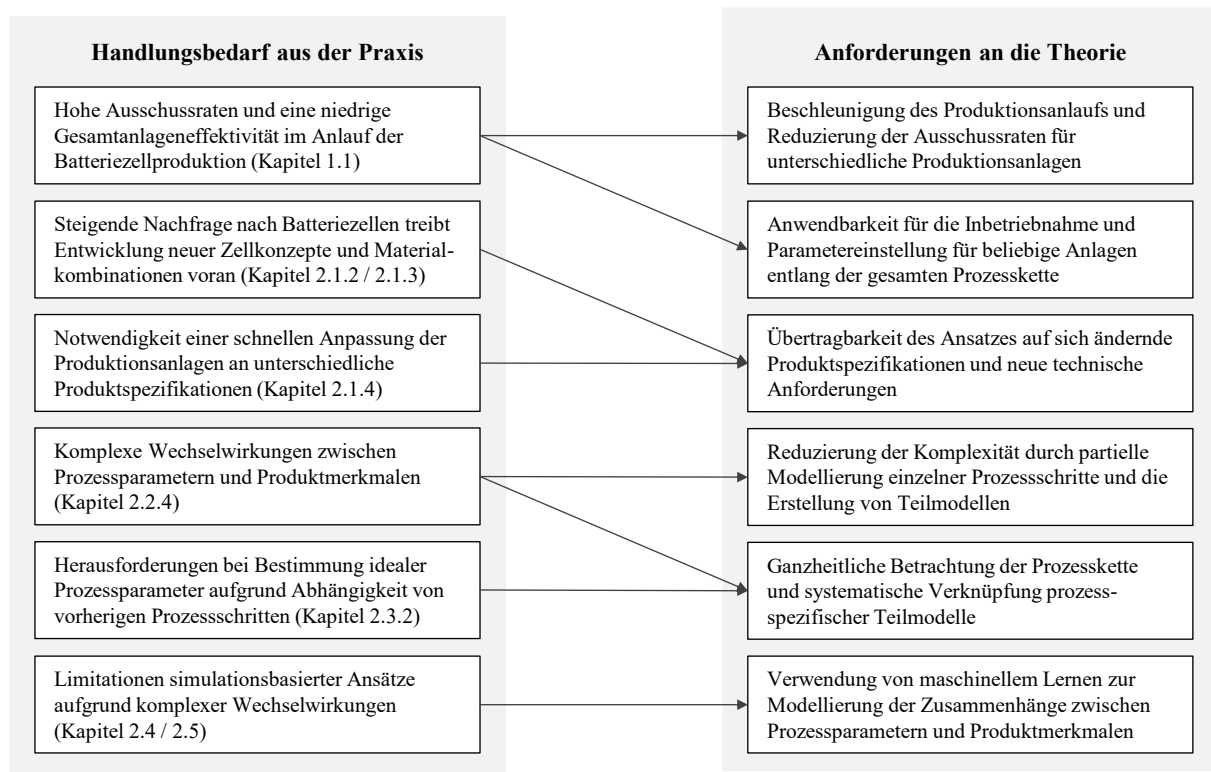


Abbildung 37: Handlungsbedarf aus der Praxis

Die Abbildung 37 zeigt eine Zusammenfassung der identifizierten Handlungsbedarfe aus der Praxis und der daraus abgeleiteten Anforderungen an die Theorie zur Bewältigung dieser Herausforderungen im Kontext der Batteriezellproduktion. Die Beschleunigung des Produktionsanlaufs für einzelne Produktionsanlagen ist notwendig, um den hohen Ausschussraten und der niedrigen Gesamtanlageneffektivität im Anlauf der Batteriezellproduktion entgegenzuwirken. Zudem sollte die Theorie eine schnelle Anpassung der Produktionsanlagen an unterschiedliche Produktspezifikationen ermöglichen. Sie muss außerdem die Übertragbarkeit des Ansatzes auf sich ändernde Produktspezifikationen und neue technische Anforderungen berücksichtigen, um der steigenden Nachfrage nach Batteriezellen und der Entwicklung neuer Zellkonzepte und Materialkombinationen gerecht zu werden. Des Weiteren ist die Reduzierung der Komplexität der Prozesskette in der Batteriezellproduktion durch partielle Modellierung einzelner Prozessschritte und die Erstellung von Teilmodellen erforderlich, um die ausgeprägten Wechselwirkungen zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen zu berücksichtigen. Eine ganzheitliche Betrachtung der Prozesskette und die systematische Verknüpfung der prozessspezifischen Teilmodelle bilden dafür eine wesentliche Grundlage. Die Einsatz von Datenanalyse und maschinellem Lernen zur Modellierung der Zusammenhänge zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen adressieren die Limitationen simulationsbasierter Ansätze und vervollständigen damit die Anforderungen an die Theorie.

3 Bestehende Ansätze und Forschungsbedarf

Existing approaches and need for research

In diesem Kapitel werden bestehende Ansätze im Kontext dieser Arbeit untersucht und daraus der Handlungsbedarf aus der Theorie abgeleitet. Dafür werden basierend auf dem zugrunde liegenden Handlungsbedarf und der Zielsetzung dieser Arbeit relevante Ansätze zur Parametereinstellung im Produktionsanlauf sowie Ansätze zur Einbindung von datenbasierten Ansätzen in der Produktion betrachtet.

Dafür werden zunächst die Themenfelder der Literaturrecherche und Bewertungskriterien für die Auswahl bestehender Ansätze (Abschnitt 3.1) definiert. Anschließend erfolgt die Darstellung bestehender Ansätze und Forschungsergebnisse (Abschnitt 3.2), welche die Problemstellung und Zielsetzung dieser Arbeit tangieren. Im Anschluss wird der Handlungsbedarf aus der Theorie (Abschnitt 3.3) abgeleitet, woraufhin die Forschungsfrage detailliert und der Lösungsansatz (Abschnitt 3.4) hergeleitet wird.

3.1 Themenfelder und Bewertungskriterien der Literaturrecherche

Subject areas and evaluation criteria for the literature research

Basierend auf dem Handlungsbedarf aus der Industrie (vgl. Abschnitt 2.5) konzentriert sich die Literaturrecherche auf drei Themenschwerpunkte: Batteriezellenproduktion, Produktionsanlauf und Datenanalyse (vgl. Abbildung 38). Durch die kritische Bewertung aktueller Forschungsergebnisse sollen umfassende Einblicke in das Forschungsgebiet gewonnen werden.

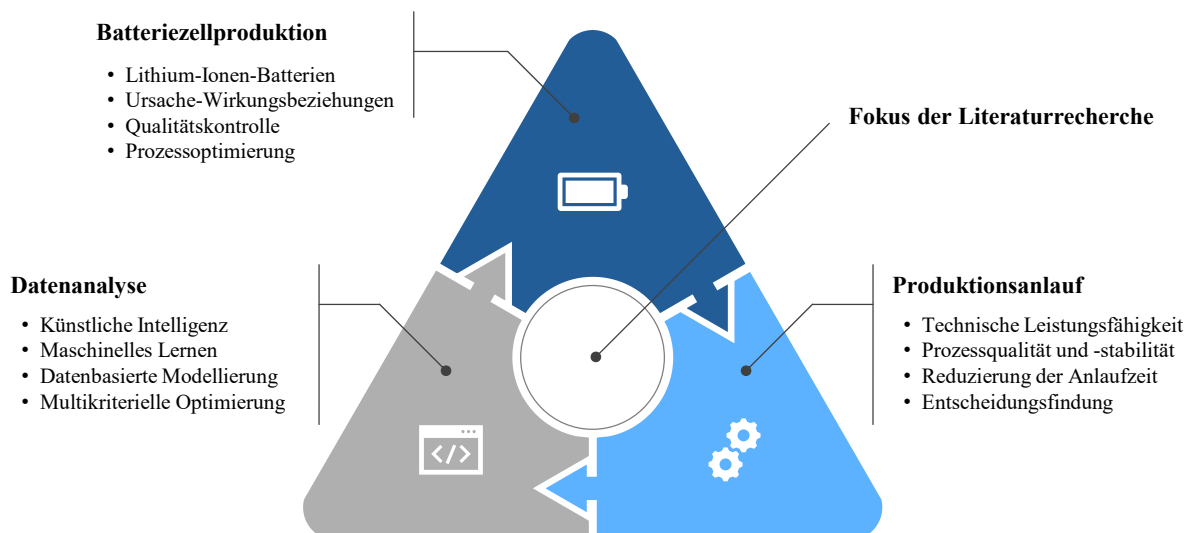


Abbildung 38: Themenfelder und Fokus der Literaturrecherche

Das erste Themenfeld umfasst die Batteriezellproduktion im Kontext von Lithium-Ionen-Batterien. Eine eingehende Analyse der Ursache-Wirkungs-Beziehungen im Produktionsprozess und die Implementierung effektiver Maßnahmen zur Qualitätskontrolle sind entscheidend, um die Qualität und Zuverlässigkeit der Batteriezellen zu gewährleisten. Die Optimierung der Produktionsprozesse spielt eine zentrale Rolle, um die Produktivität zu steigern und potenzielle Fehlerquellen zu identifizieren. Das zweite Themenfeld fokussiert auf den Produktionsanlauf

mit Schwerpunkt auf technischer Leistungsfähigkeit, Prozessqualität und -stabilität. Die Reduzierung der Anlaufzeit sowie die Optimierung der Entscheidungsfindung in dieser kritischen Phase sind von zentraler Relevanz. Eine eingehende Untersuchung dieser Aspekte trägt dazu bei, die Herausforderungen des Produktionsanlaufs zu bewältigen und eine effiziente Inbetriebnahme der Anlagen zu gewährleisten. Das dritte Themenfeld bezieht sich auf datenbasierte Ansätze, einschließlich künstlicher Intelligenz, maschinellem Lernen, datenbasierter Modellierung und multikriterieller Optimierung. Die wachsende Bedeutung dieser Technologien in der industriellen Praxis erfordert eine eingehende Betrachtung ihrer Anwendungen in der Batteriezellenproduktion. Die Integration datenbasierter Ansätze bietet Potenziale zur präzisen Parametereinstellung und ermöglicht die Optimierung von Produktionsprozessen auf Basis umfassender Datenanalysen.

Die eingehende Untersuchung dieser drei Themenfelder gewährleistet ein grundlegendes Verständnis bestehender Ansätze und Forschungsergebnisse. Dies ermöglicht die Identifikation von Lücken und die Ableitung weiterer Forschungsperspektiven.

Im Folgenden werden die Kriterien für die Bewertung bestehender Ansätze vorgestellt. Diese lassen sich anhand von drei Kategorien unterteilen, begründet in der Komplexität der Batteriezellenproduktion. Eine Übersicht der Bewertungskriterien wird in Tabelle 1 dargestellt. Diese differenzierte Analyse des Anwendungsbereichs ermöglicht eine präzise Bewertung, indem sie gezielt auf die spezifischen Herausforderungen in den unterschiedlichen Phasen der Produktion und Modellierung fokussiert. Die Bewertung nach Modellierungsgegenstand reflektiert die Vielschichtigkeit der zu berücksichtigenden Aspekte und Parameter zur Modellierung der Batteriezellproduktion. Die Betrachtung eines prozessübergreifenden Ansatzes unterstreicht die Notwendigkeit einer holistischen Betrachtung. Durch die systematische Verbindung spezifischer Teilmodelle wird die Komplexität der Batteriezellenproduktion reduziert, und gleichzeitig wird Flexibilität für die spezifische Modellierung von Prozessabschnitten oder Anlagen gewährleistet.

Anwendungsbereich

Die Anwendbarkeit auf die Batteriezellproduktion beurteilt die Relevanz eines Ansatzes für die spezifischen Anforderungen der Batteriezellproduktion. Es wird bewertet, inwieweit ein bestehender Ansatz unmittelbar auf die Batteriezellenproduktion angewendet wird und dabei alle relevanten Aspekte dieser komplexen Fertigungsprozesse umfassend berücksichtigt. Die höchste Bewertung zeigt an, dass der Ansatz optimal auf die Abläufe und Anforderungen der Batteriezellproduktion zugeschnitten ist, während niedrigere Bewertungen darauf hinweisen, dass der Ansatz möglicherweise nur teilweise relevant ist oder signifikante Unterschiede zu den spezifischen Herausforderungen aufweist. Dieses Kriterium ermöglicht eine präzise Beurteilung der direkten Anwendbarkeit eines Ansatzes auf die Batteriezellproduktion.

Der Fokus auf technische Befähigung im Produktionsanlauf untersucht, inwieweit die technischen Aspekte während des Produktionsanlaufs berücksichtigt werden. Die niedrigste Bewertung weist darauf hin, dass die technische Befähigung im Produktionsanlauf unberücksichtigt bleibt und keine produktqualitätsorientierten Maßnahmen untersucht werden. Auf der anderen

Tabelle 1: Beschreibung der Ausprägungen für die Bewertungskriterien

Bewertungskriterium	○	◐	◑	●
A1: Anwendbarkeit auf die Batteriezellproduktion	Der Ansatz bezieht sich nicht auf die Batteriezellproduktion oder einen vergleichbaren Produktionskontext.	Der Ansatz wird in konventionellen Produktionskontext angewendet, ist jedoch nicht auf die Batteriezellproduktion ausgerichtet.	Der Ansatz bezieht sich auf einen vergleichbaren Produktionskontext, zeigt jedoch Unterschiede zur Batteriezellproduktion.	Der Ansatz bezieht sich auf spezifische Aspekte der Batteriezellproduktion, weist jedoch vereinfachende oder nicht umfassende Betrachtungen auf.
A2: Fokus auf technische Befähigung im Produktionsanlauf	Die technische Befähigung im Produktionsanlauf bleibt unberücksichtigt und keine produktqualitätsorientierte Maßnahmen untersucht.	Die technische Befähigung im Produktionsanlauf wird benannt, jedoch produktqualitätsorientierte Maßnahmen nicht weiter spezifiziert.	Die technische Befähigung im Produktionsanlauf wird als kritisch benannt, aber keine produktqualitätsorientierte Maßnahme untersucht.	Die technische Befähigung im Produktionsanlauf wird untersucht und produktqualitätsorientierte Maßnahmen validiert.
A3: Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens	Der Ansatz betrachtet weder maschinelles Lernen noch physikalische Simulationen zur Modellierung der Produktion.	Der Ansatz betrachtet den Einsatz von physikalischen Simulationen für die Modellierung.	Der Ansatz betrachtet den hybriden Einsatz von maschinellem Lernen mit starkem Fokus auf Simulationen.	Der Ansatz betrachtet vollständig die Modellierung durch maschinelles Lernen und verzichtet auf physikalische Simulationen.
B1: Modellierung von Zwischen- und Endprodukteigenschaften	Die Verwendung von Produkteigenschaften in der Modellierung bleibt unberücksichtigt.	Produkteigenschaften werden als kritisch für die Modellierung identifiziert und als Eingangsvariablen berücksichtigt.	Die Berücksichtigung von Produkteigenschaften zur Ableitung von Korrelationen ist erkennbar, jedoch ohne klare Ansätze zur Prognose.	Produkteigenschaften dienen als Ausgangsvariable und werden durch die Modellierung prognostiziert.
B2: Modellierung von Anlageneinstellungen und Prozessparameter	Die Verwendung von Prozessparametern in der Modellierung bleibt unberücksichtigt.	Prozessparameter werden als kritisch für die Modellierung identifiziert und als Eingangsvariablen berücksichtigt.	Die Berücksichtigung von Prozessparametern zur Ableitung von Korrelationen ist erkennbar, jedoch ohne klare Ansätze zur Prognose.	Prozessparameter dienen als Ausgangsvariable und werden durch die Modellierung prognostiziert.
B3: Modellierung von Fertigungs- und Leistungskenngrößen	Die Verwendung von Fertigungskenngrößen in der Modellierung bleibt unberücksichtigt.	Fertigungskenngrößen werden als kritisch für die Modellierung identifiziert und als Eingangsvariablen berücksichtigt.	Die Berücksichtigung von Fertigungskenngrößen zur Ableitung von Korrelationen ist erkennbar, jedoch ohne klare Ansätze zur Prognose.	Fertigungskenngrößen dienen als Ausgangsvariable und werden durch die Modellierung prognostiziert.
B4: Modellierung von Hyperparameter und Operatoren	Die Verwendung von Hyperparametern in der Modellierung bleibt unberücksichtigt.	Hyperparameter werden als kritisch für die Modellierung identifiziert und als Eingangsvariablen berücksichtigt.	Die Berücksichtigung von Hyperparametern zur Ableitung von Korrelationen ist erkennbar, jedoch ohne klare Ansätze zur Prognose.	Hyperparameter dienen als Ausgangsvariable und werden durch die Modellierung prognostiziert.
C1: Ansatz zur Verkettung prozessspezifischer Teilmodelle	Eine Anwendung und systematische Verkettung von prozessspezifischen Teilmodellen bleiben unberücksichtigt.	Die Anwendung von prozessspezifischen Teilmodellen wird als kritisch identifiziert und für einen Prozess umgesetzt.	Die Anwendung von prozessspezifischen Teilmodellen wird als kritisch identifiziert und für eine Prozesskette umgesetzt.	Die systematische Verkettung von spezifischen Teilmodellen ist ein zentraler Bestandteil des betrachteten Ansatzes.

Seite deutet die höchste Bewertung darauf hin, dass nicht nur die technische Befähigung im Produktionsanlauf untersucht wird, sondern auch produktqualitätsorientierte Maßnahmen erfolgreich validiert wurden. Somit spiegelt dieses Kriterium die Effektivität der technischen Ausrichtung und Durchführung des Produktionsanlaufs wider, wobei besonderes Augenmerk auf der Qualitätssicherung liegt.

Der Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens umfasst, inwieweit ein Ansatz zur Produktionsmodellierung auf Methoden des maschinellen Lernens zurückgreift. Die niedrigste Bewertung beschreibt, dass der Ansatz weder maschinelles Lernen noch physikalische Simulationen zur Modellierung der Produktion berücksichtigt. Im Gegensatz dazu spiegelt die höchste Bewertung wider, dass der Ansatz ausschließlich auf maschinelles Lernen setzt und auf den Einsatz von physikalischen Simulationen vollständig verzichtet. Zwischen diesen Extremen werden verschiedene Stufen bewertet, die den Grad des hybriden Einsatzes von physikalischen Simulationen und maschinellem Lernen beschreiben, wobei der Fokus entweder auf Simulationen oder auf der direkten Modellierung von Produktionsdaten durch maschinelles Lernen liegt.

Modellierungsgegenstand

Die Modellierung im Produktionskontext wird in vier Betrachtungsebenen unterschieden, die jeweils spezifische Aspekte des Produktionsprozesses repräsentieren. Die Produktebene berücksichtigt die von Zwischen- und Endprodukteigenschaften wie beispielsweise physikalische Eigenschaften, Qualitätsmerkmale oder Materialzusammensetzungen. Die Prozessebene bezieht sich auf Anlageneinstellungen und Prozessparameter wie beispielsweise Maschineneinstellungen, Temperaturen und Geschwindigkeiten. Auf der Produktionsebene werden Fertigungs- und Leistungskenngrößen betrachtet wie Produktionsmengen, Ausschussraten und Effizienz. Die Modellebene betrachtet Hyperparameter und Operatoren wie beispielsweise Lernraten, Aktivierungsfunktionen und Auswahlkriterien für Algorithmen. Die Bewertungskriterien für den Modellierungsgegenstand sind auf allen Betrachtungsebenen (Produkt, Prozess, Produktion, Modell) einheitlich festgelegt. Die niedrigste Bewertung beschreibt, dass relevante Parameter vollständig unberücksichtigt bleiben und nicht in die Modellierung einfließen. Die nachfolgenden Abstufungen bewerten, inwiefern entsprechende Parameter als relevant erkannt und in der Modellierung als Ein- oder Ausgangsvariablen berücksichtigt werden. Dazu zählen unter anderem die Untersuchung von Korrelationen sowie die Umsetzung erster Prognoseansätze. Auf der höchsten Stufe fungieren die entsprechenden Parameter als Ausgangsvariablen und werden vollständig durch die Modellierung prognostiziert. Insgesamt zeigt die Bewertung des Modellierungsgegenstands die Tiefe und den Umfang der Berücksichtigung spezifischer Parameter in den Modellierungsansatz.

Prozessübergreifender Ansatz

Die Verkettung prozessspezifischer Teilmodelle bezieht sich auf die Integration von Teilmodellen innerhalb eines Ansatzes oder der Lösungssystems. Die niedrigste Bewertung weist darauf hin, dass die Anwendung und systematische Verkettung einzelner Teilmodelle unberücksichtigt bleiben. Die höchste Bewertung hingegen wird erreicht, wenn die systematische Verkettung von spezifischen Teilmodellen ein zentraler Bestandteil des betrachteten Ansatzes ist.

Dies impliziert, dass nicht nur die prozessspezifischen Teilmodelle identifiziert und angewendet werden, sondern dass auch eine methodische Verknüpfung dieser Modelle erfolgt. Die systematische Verkettung prozessspezifischer Teilmodelle trägt dazu bei, die Komplexität in der Modellierung von Prozessketten und Produktionssystemen zu reduzieren, indem sie die Flexibilität in Bezug auf die spezifische Modellierung von Prozessabschnitten oder Anlagen erhöht. Durch die Verbindung dieser Teilmodelle wird eine anwendungsgerechte Umsetzung für individuelle Anforderungen und Gegebenheiten ermöglicht.

3.2 Vorstellung bestehender Forschungsansätze

Summary of existing research approaches

In diesem Abschnitt werden bestehende Ansätze und Forschungsergebnisse im Themenfeld der Literaturrecherche vorgestellt. Dafür werden einerseits Ansätze zur Datenanalyse im Bereich der Batteriezellproduktion untersucht, um ein fundiertes Verständnis für die Herausforderungen zu schaffen und die Potenziale verschiedener Ansätze zu beleuchten (Abschnitt 3.2.1). Andererseits werden Ansätze zur Parameteroptimierung durch maschinelles Lernen beleuchtet, die eine Optimierung von Fertigungsprozessen oder Algorithmen betrachten (Abschnitt 3.2.2). Abschließend werden Ansätze für die Anlaufunterstützung von Produktionssystemen bewertet, die sich mit den Herausforderungen bei der Einführung neuer Produkte oder der Umsetzung effektiver Anlaufstrategien auseinandersetzen (Abschnitt 3.2.3).

3.2.1 Ansätze zur Datenanalyse in der Batteriezellenproduktion

Approaches for data analysis in battery cell production

Die präzise Auswertung von Produktionsdaten spielt eine entscheidende Rolle bei der Identifizierung von Optimierungspotenzialen und der Fehlerprävention. Dieser Abschnitt präsentiert einen umfassenden Überblick über bestehende Forschungsansätze zur Datenanalyse in der Batteriezellenproduktion, wobei sowohl methodische Ansätze als auch aktuelle Entwicklungen auf diesem Gebiet betrachtet werden.

Drakopoulos et al. (2021) konzentrieren sich auf die Materialzusammensetzung und die Fertigung von Lithium-Ionen-Elektroden auf Graphitbasis. Dabei werden die Auswirkungen verschiedener Parameter auf die Energiedichte und die Lebensdauer untersucht. Die Autoren verwenden einen Alchemite-Algorithmus, um einen Datensatz mit 27 verschiedenen Elektrodenrezepturen und Herstellungsprotokollen zu analysieren. Dabei werden Adhäsion und Innenwiderstand als kritische physikalische Eigenschaften identifiziert, die die elektrochemische Leistung beeinflussen. Eine hohe Adhäsion korreliert mit einem niedrigen Innenwiderstand, was auf einen engen Zusammenhang zwischen den physikalischen Eigenschaften der Elektroden und ihrer Zykluslebensdauer hinweist. Der Alchemite-Algorithmus nutzt erlernte Zusammenhänge und empfiehlt Parameterkombinationen für neue Elektrodenrezepturen außerhalb des ursprünglichen Datensatzes, um die Zykluslebensdauer zu verbessern. Der Schwerpunkt liegt auf der Optimierung der Rezeptur durch Minimierung der Bindemittel- und Rußkonzentration. Der

durch maschinelles Lernen gelenkte Designansatz trägt zur Entwicklung von Elektroden mit verbesserter Kapazitätshaltung bei größeren Schichtdicken bei.¹⁸²

Duquesnoy et al. (2020) beschäftigen sich mit der Optimierung des Herstellungsprozesses von Lithium-Ionen-Batterien durch einen Ansatz, der experimentelle Charakterisierungen, in-silico Generierung von Mesostrukturen und maschinelles Lernen zur Analyse des Kalandrierungsprozesses kombiniert. Dabei wird ein hybrider Ansatz verwendet, der die Zuverlässigkeit von Experimenten und physikbasierter Modellierung mit der Effizienz von stochastisch generierten Elektroden durch maschinelles Lernen verknüpft. Für die Analyse wurde der Sure Independent Screening and Sparsifying Operator (SISSO) Algorithmus verwendet, um die Abhängigkeiten zwischen den Prozessparametern und den Elektrodeneseigenschaften zu verstehen. Dadurch wird die Bewertung von Auswirkungen auf die Elektrodenbeschaffenheit im Vergleich zu herkömmlichen Trial-and-Error-Methoden beschleunigt. Die experimentellen Daten bilden die Grundlage, die physikalischen Modelle liefern detaillierte Informationen auf Mesoskala und durch maschinelles Lernen werden Muster und Korrelationen aus den Daten extrahiert. Die Ergebnisse der Studie zeigen wesentliche Abhängigkeiten zwischen dem Kalandrierdruck, der initialer Elektrodenporosität und den mesoskaligen Elektrodeneseigenschaften. Darüber hinaus erfordert eine optimale Elektrodenleistung ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Aktivmaterial, Leitruf und Binder. Außerdem wird eine Kompromissbeziehung zwischen den Tortuositäten der flüssigen und festen Phasen innerhalb der Mesostruktur. Eine Limitation besteht in der stochastischen Natur der Erzeugung der Elektrodenmesostruktur und die Herausforderung, bestimmte mesoskalige Eigenschaften experimentell zu erfassen. Die abgeleiteten mathematischen Modelle und Korrelationen des maschinellen Lernens dienen als Leitfaden und ermöglichen es, fundierte Entscheidungen auf der Grundlage der angestrebten Eigenschaften zu treffen. Spezifische Parametereinstellungen werden nicht explizit vorausgesagt.¹⁸³

Duquesnoy et al. (2021) untersuchen die Auswirkungen von Herstellungsparametern auf die Heterogenität der Elektroden von Lithium-Ionen-Batterien. Der Fokus liegt auf den Eigenschaften von Elektroden-slurry und den Beschichtungsparametern, um die Leistungsfähigkeit und Lebensdauer von Batterien zu verbessern. Der datengetriebene Ansatz nutzt experimentellen Datensatz und kombiniert anschließend Hauptkomponentenanalyse, K-Means-Clustering, statistische Analysen und Gaußsche Naive Bayes-Klassifikatoren für die Bewertung der Heterogenität. Die Validierung umfasst eine umfassende Analyse durch die Variation bei den Zusammensetzungen, den Flüssigkeits-Feststoff-Verhältnissen und den Beschichtungsabständen. Insgesamt wurden 24 Slurries aus vier Materialzusammensetzungen mit jeweils sechs Mischverhältnissen hergestellt. Anschließend wurde jedes Slurry mit sechs Beschichtungsspaltabständen beschichtet. Das primäre maschinelle Lernmodell ist der Gaussian Naive Bayes Algorithmus für die Vorhersage der Elektrodenheterogenität. Dieser probabilistische Algorithmus erweist sich als effektiv bei der Klassifizierung von Elektroden als homogen oder heterogen beschichtet. Als wesentliches Ergebnis zählt die automatische Bewertung von Auswirkungen der

¹⁸² Vgl. Drakopoulos et al. (Formulation and manufacturing optimization of lithium-ion graphite-based electrodes) 2021.

¹⁸³ Vgl. Duquesnoy et al. (Data-driven assessment of electrode calendaring) 2020.

eingehenden Prozessparameter auf die Heterogenität der Elektroden. Es werden zwar keine spezifische Parametereinstellungen durch das Modell angegeben, aber wertvolle Erkenntnisse für Parameteranpassungen zur Erzielung der angestrebten Elektrodeneigenschaften geliefert. Darüber hinaus weisen die Autoren darauf hin, dass ihre Versuche sich auf NMC-811 beschränken und weitere Untersuchungen mit verschiedenen Kathodenmaterialien notwendig sind.¹⁸⁴

Filz et al. (2020) befassen sich mit der Minimierung der Gesamtqualitätskosten und der Gewährleistung von Transparenz in den Prozess-Produkt-Beziehungen durch die Entwicklung virtueller Qualitätsprüfpunkte (engl.: Quality Gates), die cyber-physische Systeme und Datenanalytik zur Steigerung der Fertigungseffizienz nutzen. Der Ansatz bietet eine klare Struktur für die Implementierung virtueller Quality Gates in Fertigungssystemen zur Reduzierung von Fehlern und zur Verbesserung der Transparenz. Dafür wurde ein morphologischer Kasten für individualisierte virtuelle Quality-Gate-Ansätze entwickelt und anhand von Fallstudien veranschaulicht. Im Mittelpunkt steht die Anwendung von Methoden des maschinellen Lernens bei der Entwicklung virtueller Quality Gates. Dabei werden Daten aus der physischen Produktionsumgebung genutzt, um valide virtuelle Modelle zu erstellen, die aktuelle Produkt- und Prozesseigenschaften vorhersagen. Die Autoren betrachten das Hochfahren von Anlagen für die Batteriezellenproduktion und beschreiben, die Verbesserung der Qualitätskontrolle, die Minimierung der Ausschussraten und die Sicherstellung der Qualität von Zwischenprodukten. Der Ansatz bietet zwar einen umfassenden Überblick, allerdings fehlt eine detaillierte Betrachtung des potenziellen Nutzens virtueller Quality Gates. Weitere Forschungsarbeiten sind erforderlich, um produktspezifische Strategie zur Qualitätsprüfung zu definieren und Datenmodelle branchenübergreifend umzusetzen.¹⁸⁵

Husseini et al. (2022) stellen die Entwicklung eines digitalen Zwillings für die Optimierung von Ramp-Up-Prozessen in der Lithium-Ionen-Batterieproduktion vor. Der Fokus liegt auf den Herausforderungen in der Inbetriebnahme von Maschinen für die Zellstapelbildung aufgrund fehlenden Wissens über Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge. Dafür werden sowohl ein kinematisches Prozessmodell als auch ein Simulationsmodell zur Vorhersage der Elektrodenbahnspannung entwickelt. Das kinematische Prozessmodell repräsentiert die Bewegungsabläufe der Produktionsmaschine für die Zellstapelbildung. Das Simulationsmodell verwendet zeitabhängige Differentialgleichungen zur Vorhersage der Elektrodenbahnspannung basierend auf Eigenschaften des Elektrodenmaterials (z.B. Elastizitätsmodul, Querschnittsbereich, Gewicht). Ein übergeordnetes Modell integriert das kinematische Prozessmodell und das Simulationsmodell und bildet die Verbindung zwischen den Eingabe- und Ausgabeparametern. Ein künstliches neuronales Netz wird verwendet, um die Rechenleistung zu verbessern. Durch den digitalen Zwilling können verschiedene Optimierungsansätzen für den Ramp-Up-Prozess in einer virtuellen Umgebung getestet werden. Außerdem liefert der Ansatz Einblicke in die Absicherung der Elektrodenbahnspannung und kinematische Prozessgrenzen. Es besteht jedoch weiterer Forschungsbedarf, um den Ansatz auf andere Prozesse in der Batteriezellproduktion

¹⁸⁴ Vgl. Duquesnoy et al. (Machine learning-based assessment of electrode heterogeneity) 2021.

¹⁸⁵ Vgl. Filz et al. (Virtual Quality Gates in Manufacturing Systems) 2020.

zu übertragen und eine umfassende Optimierung für verschiedene mechanische Komponenten und Materialverhalten zu ermöglichen.¹⁸⁶

Liu et al. (2021) befassen sich auf die Anwendung von maschinellem Lernen zur Vorhersage der Massenbeladung der Elektroden von Lithium-Ionen-Batterien insbesondere durch den Einsatz von Gaussian Process Regression (GPR) mit Automatic Relevance Determination (ARD)-Kernen. Das Ziel ist die Quantifizierung der Auswirkungen von vier Merkmalsvariablen (Massenanteil des Aktivmaterials, Feststoff-Flüssigkeits-Verhältnis, Spaltabstand und Viskosität) unter Verwendung der Regressionsmodelle. Die ARD-Kerne verbessern die Regressionsgenauigkeit und Robustheit, indem sie den Hyperparametern unterschiedliche Skalen zuweisen. Die Studie unterstreicht die Bedeutung der Untersuchung und Überprüfung von Zwischenmerkmalen. Unter den vier Merkmalsvariablen wurde der Spaltabstand als die entscheidendste Kenngröße für die Regression der Elektrodenmassenbeladung identifiziert. Die Untersuchung liefert zwar wertvolle Einblicke in die Bedeutung von Merkmalsvariablen, sagt aber nicht explizit spezifische Parametereinstellungen für die bei der Batteriezellenproduktion verwendeten Anlagen voraus. Die zentrale Herausforderung besteht dabei in der Analyse von stark vernetzten Merkmalsvariablen und Prozessparametern.¹⁸⁷

Kirchhof et al. (2020) untersuchen komplexe Ursachen-Wirkungsbeziehungen in der Produktion von Lithium-Ionen-Batterien. Das Hauptaugenmerk liegt auf der Entwicklung einer Methode zur Wissenserfassung und Anwendung in der Ursachenanalyse. Der Ansatz umfasst die Verbindung von einer Fehlermöglichkeits- und Einflussanalyse (FMEA) mit einem Bayesian Network zur Ursachenanalyse. Während der FMEA bewerten die Experten den Schweregrad, die Auftretswahrscheinlichkeit und Entdeckungswahrscheinlichkeit der identifizierten Fehler entlang der Produktionskette von Lithium-Ionen-Batterien. Nach der Durchführung der FMEA werden die Expertenbewertungen zu Fehlerwahrscheinlichkeiten und Ursachenbeziehungen auf Konsistenz geprüft. Das Bayesian Network repräsentiert statistisch das komplexe Netzwerk von Ursachen-Wirkungs-Beziehungen und wird durch die Umwandlung der FMEA in Zufallsvariablen erstellt, wobei die Leaky Noisy-OR Gates als Teil der Modellierung die Abhängigkeiten zwischen Fehlern repräsentieren. Der genetische Algorithmus sucht nach einem optimalen Vektor von Parametern, der die Konsistenz zwischen dem vorgeschlagenen Netzwerk und dem von Experten bereitgestellten Netzwerk maximiert. Diese Methode bietet eine strukturierte Möglichkeit, Expertenwissen in der Lithium-Ionen-Batterieproduktion zu formalisieren und für probabilistische Ursachenanalysen zu nutzen. Da während des Ramp-up-Prozesses nur begrenzte Produktionsdaten verfügbar sind, wird die Erfassung von Expertenwissen durch Methoden wie FMEA als entscheidend für die Qualitätskontrolle und die Identifizierung von Ursachen von Fehlern betrachtet.¹⁸⁸

¹⁸⁶ Vgl. Hussein et al. (Development of a Digital Twin for Improved Ramp-Up Processes in Li-Ion-Battery-Cell-Stack-Formation) 2022.

¹⁸⁷ Vgl. Liu et al. (Mass load prediction for lithium-ion battery electrode clean production) 2021.

¹⁸⁸ Vgl. Kirchhof et al. (Failure Analysis in Lithium-Ion Battery Production with FMEA-Based Large-Scale Bayesian Network) 2020.

Krauß et al. (2023) setzen sich mit der nachhaltigen Produktion von Batteriezellen durch virtuelle Experimente auseinander. Der Schwerpunkt liegt auf der Identifizierung und Optimierung von Prozessparametern, Rezepturen und Technologien mithilfe digitaler Zwillinge. Die Autoren führen dafür das Konzept der virtuellen Experimente ein, um Ursache-Wirkungs-Beziehungen von Maschinenparametern und Produktionsausgaben zu verstehen. Der Ansatz umfasst die Entwicklung einer Plattform für virtuelle Experimente (engl.: Virtual experiments platform, VEP) als Dienstleistung eines digitalen Zwillings. Der Ansatz trägt dazu bei, die Parameter für die Inbetriebnahme und den Hochlauf von Anlagen in der Batteriezellenproduktion zu optimieren. Die VEP ermöglicht es, Input- und Zielparameter festzulegen und optimierte Parameter für die physische Maschine abzurufen. Es wird darauf hingewiesen, dass sowohl datenbasierte als auch physikalische Datenmodelle die Grundlage der virtuellen Experimente-Plattform (VEP) bilden. Die Autoren betonen den Einsatz von maschinellem Lernen insbesondere bei der Entwicklung von Datenmodellen für die VEP und die Optimierung von Maschinenparametern. Allerdings werden in der Arbeit Ansätze des maschinellen Lernens nicht explizit benannt oder vorgestellt. Die Zusammenfassung gibt keine eindeutigen Hinweise darauf, ob die virtuelle Experimente-Plattform (VEP) bereits in der Praxis umgesetzt und validiert wurde. Es wird darauf hingewiesen, dass die VEP am Beispiel der Elektrodenproduktion von Lithium-Ionen-Batterien entwickelt wurde, allerdings werden keine detaillierten Informationen zur konkreten Umsetzung oder den Ergebnissen der Anwendung der VEP bereitgestellt.¹⁸⁹

Kornas et al. (2019) untersuchen Ursache-Wirkungs-Beziehungen in der Produktion von Lithium-Ionen-Batterien durch Integration von Experten- und datengetriebenen Methoden für eine automatisierte Fehlererkennung, -diagnose und -prognostik. Dafür führen die Autoren einen methodischen Ansatz ein, der ein Benutzerschnittstelle (Automated Self-Service System) und eine Wissensdatenbank (Expert Knowledge Database, EKD) umfasst. Über die Benutzerschnittstelle können Aufgaben wie die Auswahl von Datenquellen, die Bewertung von Datenmustern und die Vorbereitung von Datensätzen durchgeführt werden. In der Validierung werden verschiedene Modelle des maschinellen Lernens wie eXtreme Gradient Boosting (XGB), Deep Neural Network, Random Forest, Decision Tree und Generalized Linear Models (GLM) betrachtet, um Ursache-Wirkungs-Beziehungen zu identifizieren. Auf Grundlage von 147 Produkt- und Prozessparametern werden anschließend die Haupteinflüsse auf die maximale Zellkapazität bestimmt: Elektrolytmenge, Anodenlänge, Kathodenlänge, Bahnspannung und Wickelgeschwindigkeit. Die Wissensdatenbank stützt sich in erster Linie auf expertenbasierte Bewertungen. Die Autoren schlagen vor, mathematische Funktionen für die Prozesskette oder physikalische Simulationen in die EKD zu integrieren. Durch den vorgestellten Ansatz wird eine Identifizierung von Qualitätstreibern und kritischen Einflussfaktoren ermöglicht und liefert somit einen Beitrag zur Qualitätsverbesserung und Fehlererkennung in der Batteriezellproduktion. Allerdings werden keine Empfehlung für die Parametereinstellung oder Optimierung einzelner Prozessanlagenparameter adressiert.¹⁹⁰

¹⁸⁹ Vgl. Krauß et al. (Virtual Experiments for a Sustainable Battery Cell Production) 2023.

¹⁹⁰ Vgl. Kornas et al. (Data-and Expert-Driven Analysis of Cause-Effect Relationships in Lithium-Ion Batterie Production) 2019.

Kornas et al. (2020) befassen sich mit einem ganzheitlichen Ansatz zur multikriteriellen Optimierung der Produktqualität durch die Kombination von Expertenwissen und statistischer Prozesskontrolle, um die Herausforderungen komplexer Ursache-Wirkzusammenhänge im Produktionsprozess zu adressieren. Ein zentrales Element ist die Einführung von Zielfunktionen (engl.: desirability functions), um die Auswirkungen der Eingangsvariablen auf verschiedene Qualitätsparameter aufzuzeigen. Der Ansatz wurde durch die Ableitung zweier linearer Regressionsmodelle und eine multikriterielle Optimierung mit Zielfunktionen für Batteriekapazität und Zellgewicht in Abhängigkeit von Prozessparametern und Elektrolytmenge validiert. Die Untersuchungen beschränken sich auf einen bestimmten Produkttyp und vernachlässigen die Komplexität der Elektrodenproduktion. Darüber hinaus verhindert eine statistisch signifikante Anzahl von produzierten Batteriezellen eine abschließende Bewertung der Reduzierung der Ausschussrate. Allerdings beinhaltet der Ansatz keine direkten Empfehlungen für die Einstellung von Prozessparametern.¹⁹¹

Rohkohl et al. (2022) befassen sich mit datengesteuerten Methoden zur Optimierung kontinuierlicher Produktionsprozesse. Dazu wird ein dreistufiger Ansatz vorgestellt, der verschiedene Module für die kontinuierliche Herstellung von Anodenslurry integriert. Das erste Modul dient der Rezepturgenerierung und nimmt die Zielprodukteigenschaften des Slurry als Eingabe, um Prozessparameter als Empfehlung an die Prozessexperten auszugeben. Das zweite Modul berechnet mit Hilfe einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsfunktion eine erwartete Prozessparameterverteilung basierend auf den prognostizierten spezifischen Prozessparametern. Das dritte Modul prognostiziert anschließend die erwarteten Produkteigenschaften auf Grundlage tatsächlicher oder erwarteter Prozessparameter. Durch die Einbindung des maschinellen Lernens in die Batteriezellenproduktion bietet der Ansatz einen umfassenden Rahmen für die Nutzung von Produktionsdaten. Bei der Untersuchung von Methoden des maschinellen Lernens werden eine differenzierte Anwendung von datengetriebenen Modellen und die Herausforderungen der Datenintegration und der Interpretierbarkeit von Modellen gezeigt. Nichtsdestotrotz ergeben sich Herausforderungen im Zusammenhang mit dem realen Einsatz und der Anpassungsfähigkeit an dynamische Produktionsumgebungen.¹⁹²

Rynne et al. (2020) beschäftigen sich mit der Optimierung von Elektrodenrezepturen für Lithium-Ionen-Batterien durch statistische Versuchspläne. Die Analyse der Beziehungen zwischen Materialzusammensetzung, mikrostrukturelle Eigenschaften und elektrochemischer Leistung liefert einen relevanten Beitrag zum Verständnis der Auswirkungen verschiedener Materialien, Bindemittel und Additive auf die Elektrodenleistung. Die Studie zeigt das Potenzial von statistischen Versuchsplänen zur Optimierung von Elektroden in der Praxis. Der Einfluss der Materialien auf die Leistungseigenschaften wurden für LFP und LTO Elektroden auf Grundlage einer quadratischen Regression modelliert. Im Gegensatz zu bisherigen Annahmen wird empfohlen, einen geringen Anteil an leitfähigen Additiven und einen minimalen Bindemittelanteil zu nutzen. Die Autoren deuten zwar den möglichen Einsatz von künstlicher

¹⁹¹ Vgl. Kornas et al. (Multi-Criteria Optimization in the Production of Lithium-Ion Batteries) 2020.

¹⁹² Vgl. Rohkohl et al. (A data mining approach for continuous battery cell manufacturing processes) 2022.

Intelligenz und Deep Learning in Verbindung mit Versuchsplänen an, um aussagekräftigere Erkenntnisse zu erzielen, gehen aber nicht näher auf die Modellierung durch maschinelles Lernen ein.¹⁹³

Schmidt et al. (2020) setzen sich mit der Prozesskettensimulation zur Modellierung von Herstellungsprozessen und deren Einfluss auf die Elektrodenstruktur auseinander. Dabei geht es um die Untersuchung von Unsicherheiten innerhalb der Herstellungsprozesse und deren Auswirkungen auf die Leistungsfähigkeit der Batteriezelle. Die Untersuchung beschäftigt sich insbesondere mit den Variationen von Strukturparametern wie der Kathodendicke, der Porosität und der Tortuosität. Die Autoren stützen sich auf einen modellbasierten Ansatz und Prozesssimulationen, um die Auswirkungen von Unsicherheiten in Fertigungsprozessen mit Hilfe von statistischen Kennzahlen wie Mittelwerte, Standardabweichungen und relative Standardabweichungen zu bewerten. Eine Modellierung durch maschinelles Lernen wird nicht berücksichtigt. In der Validierung werden Variationen der Prozessparameter beim Beschichten, Trocknen und Kalandrieren untersucht. Insbesondere die Schichtdicke und Massenbeladung der Kathode wird durch Unsicherheiten im Beschichtungsprozess stark beeinflusst. Die Schwankungen von Parametern wie Porosität und Tortuosität sind mit Unsicherheiten im Kalandrierungsprozess verbunden. Der Schwerpunkt liegt auf dem Verständnis der Auswirkungen von Prozessabweichungen und deren Einfluss auf die Endprodukteigenschaften. Die Ableitung von Parametereinstellungen für Anlagen in der Batterieproduktion wird nicht betrachtet.¹⁹⁴

Schnell et al. (2019) untersuchen die Anwendung von Data-Mining Methoden zur Verbesserung der Produktionsprozesse bei der Herstellung von Lithium-Ionen-Batterien. Die Studie stützt sich auf die Vorgehensweise nach dem CRISP-DM. Dafür werden verschiedene Modellierungsansätze wie Generalized Linear Model, neuronalen Netzen, Decision Trees, Random Forest und Gradient Boosted Trees zur Analyse von Produktionsdaten eingesetzt. Der Schwerpunkt liegt auf der Vorhersage der Batteriezellenkapazität vor dem Formierungsprozess. Im Rahmen der Untersuchung wurden die Prozesse der Elektrodenherstellung und die Elektrolyt-befüllung als entscheidende Qualitätstreiber identifiziert. Eine Schwierigkeit besteht darin, einen ausreichend großen Datensatz mit vollständigen Informationen zu erhalten. Daher wurden einige Parameter wie die Durchmischungsqualität des Slurry und die Beschichtungsdicke aufgrund von Problemen mit der Datenqualität nicht berücksichtigt. Die Notwendigkeit eines umfassenden Datensatzes und die Feinabstimmung der Modelle werden als zentrale Herausforderung genannt. Insbesondere die Bedeutung unterschiedlicher Chargen von als zentraler Qualitätstreiber für die Zellkapazität hervorgehoben. Auch wenn spezifische Parameter nicht vorhergesagt werden, ermöglicht das Verständnis der entscheidenden Einflussgrößen den Entscheidungsträgern, die Effizienz zu steigern und die Produktionsqualität insgesamt zu verbessern.¹⁹⁵

¹⁹³ Vgl. Rynne et al. (Li-Ion Battery Electrode Formulation Optimization Study) 2020.

¹⁹⁴ Vgl. Schmidt et al. (Modeling the Impact of Manufacturing Uncertainties on Lithium-Ion Batteries) 2020.

¹⁹⁵ Vgl. Schnell et al. (Data mining in lithium-ion battery cell production) 2019.

Schönemann et al. (2019) präsentieren einen Multiskalen-Simulationsansatz zur Optimierung der Batteriezellproduktion und zeigt die Anwendung in einer Pilotlinie im Labormaßstab. Die Autoren verschiedene Prozesskonfigurationen in der Elektrodenfertigung. Der Ansatz beinhaltet ein agentenbasiertes Prozesskettenmodell, das in einer Simulationsumgebung implementiert wurde. Das Modell umfasst Maschinen, Produkte, Arbeitskräfte und Gebäudebereiche (mit Schnittstellen zu Druckluft- und HVAC-Modellen). Die Arbeit verwendet gekoppelte Simulationsmodellen, wobei detaillierte Einzelmodelle für bestimmte Elemente der Produktion verwendet werden. Die Arbeit zeigt das Potenzial der Multiskalensimulation für die Bewertung verschiedener Prozesskonfigurationen in der Elektrodenfertigung für Batterien. Dafür werden die Auswirkungen der Prozesskonfiguration auf Produkteigenschaften, Durchlaufzeiten, Anlagenauslastung und Energiebedarfsprofilen bewertet. Die Studie räumt ein, dass die Komplexität der Modellentwicklung eine Herausforderung darstellt und fordert verbesserte Softwaretools für eine effiziente Simulation.¹⁹⁶

Thiede et al. (2019) befassen sich mit der Vorhersage von Qualitätsparametern von Batteriezellen entlang der gesamten Produktionskette, wobei ein datengetriebener Ansatz im Kontext von cyber-physischen Produktionssystemen (CPPS) verwendet wird. Die Methodik umfasst Regressionsmodelle zur Vorhersage von Endprodukteigenschaften auf der Grundlage von Einflussfaktoren (Prozessparameter und Zwischenproduktmerkmalen) in der gesamten Prozesskette der Batterieproduktion. Im Rahmen der Untersuchung wird das Konzept der virtuellen Quality Gates umgesetzt, das eine Echtzeitsteuerung der Prozesse und eine Ausschussreduzierung ermöglicht. Zunächst wurden die betrachteten Prozessparameter, resultierende Zustandsgrößen sowie entsprechende Zwischenproduktmerkmale und die Endprodukteigenschaften definiert. Anschließend wurden exemplarisch Prozessparameter wie Beschichtungsdichte, Schneidgeschwindigkeit und Laserparameter im Zusammenhang mit Endprodukteigenschaften wie Kapazität, Innenwiderstand und anderen kritischen Qualitätsparametern dargestellt. Der Ansatz basiert auf eine Pilotproduktionslinie mit insgesamt über 500 Prozessparametern und Zustandsgrößen, 1029 Zwischenproduktmerkmalen und 65 verschiedene Endprodukteigenschaften. Durch die Ermittlung der Beziehungen zwischen bestimmten Prozessparametern und den Eigenschaften des Endprodukts ermöglicht die Studie die Optimierung der Anlageneinstellungen. Die entwickelten Modelle dienen in erster Linie der Vorhersage von Endprodukteigenschaften. Auf eine Ableitung von spezifischen Parametereinstellung durch die Modelle wird nicht adressiert. Die Autoren betonen, dass aufgrund der inhärenten Komplexität der Batterieproduktion in Verbindung mit einzigartigen Produktmerkmalen jeder Produktionsumgebung kontextspezifische Merkmale bei der Anwendung und Entwicklung datengetriebener Modelle berücksichtigt werden müssen.¹⁹⁷

Thiede et al. (2020) untersuchen den Einsatz von maschinellem Lernen zur Identifizierung und Verbesserung der Energieeffizienz in der Batteriezellproduktion. Die Autoren verfolgen einen datengetriebenen "Black Box"-Ansatz, der besonders bei neuartigen Prozessen nützlich ist, wo

¹⁹⁶ Vgl. Schönemann et al. (Multiscale simulation approach for production systems) 2019.

¹⁹⁷ Vgl. Thiede et al. (Data mining in battery production chains towards multi-criterial quality prediction) 2019.

detailliertes Prozesswissen und physikalische Modelle oft nicht vorhanden sind. Die Methodik durchläuft die Phasen des CRISP-DM und legt einen Schwerpunkt auf die Betrachtung von multivariater Regression, künstlichen neuronalen Netzen und Random Forest Modellierungen. Dabei wird ein probabilistisches Modell zur Clusterung von Energiezuständen verwendet, um eine Grundlage für die spätere Analyse von Verbesserungspotenzialen zu schaffen. Die Übertragbarkeit der Methodik und die Anwendung in einem Anwendungsfall zeigen das Potenzial bei der Identifizierung von Einflussfaktoren und der Ableitung von umsetzbaren Erkenntnissen zur Verbesserung der Energieeffizienz. Allerdings werden weitere Auswirkungen auf Ressourcen, Prozessproduktivität und die Produktqualität vernachlässigt.¹⁹⁸

Thomitzek et al. (2018) untersuchen die Komplexität von Batterieproduktionsprozessen durch die Verwendung eines mehrstufigen Simulationsansatzes, der agentenbasierte Prozesskettensimulation mit einem erweiterten pseudo-2-dimensionalen Batteriemodell sowohl deterministische als auch stochastische Ansätze kombiniert. Dieser umfassende Rahmen verfolgt eine ganzheitliche Analyse von Prozess-Produkt-Interdependenzen in Batterieproduktionssystemen. Dafür führen die Autoren ein Simulationskonzept ein, das die Auswirkungen von schwankenden Prozessparametern auf die Verteilungen von Struktur- und Batteriemodellparametern aufzeigt. Im Fokus stehen dabei in erster Linie simulationsbasierte Ansätze. Obwohl maschinelles Lernen kein zentrales Thema ist, bietet die Arbeit Einblicke in die optimalen Prozessparametereinstellungen, indem Toleranzen für Struktur- und Batteriemodellparameter auf der Grundlage von Produktionsdaten bestimmt werden. Ein zentrales Ergebnis ist das Konzept der Prozesskettensimulation mit Interaktionen von Zwischenprodukten und Prozessschritten sowie sich verändernden Parameterverteilungen. Es wird ein robuster Simulationsrahmen geschaffen, allerdings bestehen weiterhin qualitative Wissenslücken bei der Bestimmung von Wechselwirkungen innerhalb des Produktionsprozesses.¹⁹⁹

Turetsky et al. (2020) untersuchen den Einsatz datengetriebener cyber-physischer Systeme und Qualitätsprüfpunkten zur Optimierung der Batteriezellproduktion. Der Ansatz verfolgt die Verbesserung der Produktqualität und der Produktionssteuerung durch Vorhersage der Leistungseigenschaften anhand von Zwischenproduktmerkmalen. Der Forschungsschwerpunkt liegt in der Identifizierung relevanter Zwischenproduktmerkmale, die die Endprodukteigenschaften der Batteriezelle beeinflussen und Erkenntnisse zur Qualitätsverbesserung und Produktionsoptimierung liefern. Die Autoren vergleichen die Anwendung von Regressionsmodellen, Random Forest und künstlichen neuronalen Netzen, um quantitative Beziehungen zwischen Zwischenproduktmerkmalen und Endprodukteigenschaften herzustellen. Für die Merkmalsauswahl wurden sowohl lineare (Lasso-Lars-Regression) als auch nicht-lineare (Random Forest) Modelle betrachtet. Die Ableitung von Qualitätsprüfpunkten für die Vorhersagemodellierung von Zwischenproduktmerkmalen leistet einen wesentlichen Beitrag für den Hochlauf von Produktionsanlagen. Die Autoren unterstreichen jedoch die Notwendigkeit einer umfangreichen Wissensdatenbank und den Einsatz von differenziertem Expertenwissen, um das Risiko

¹⁹⁸ Vgl. Thiede et al. (Machine learning approach for systematic analysis of energy efficiency potentials) 2020.

¹⁹⁹ Vgl. Thomitzek et al. (Simulating Process-Product Interdependencies in Battery Production Systems) 2018.

einer Überanpassung zu verhindern. Darüber hinaus sollte eine Mehrzielmodellierung berücksichtigt werden, um eine Optimierung der Ursache-Wirkungs-Beziehungen entlang der gesamten Produktionskette sicherzustellen.²⁰⁰

Turetskyy et al. (2021) betrachten den Ansatz eines Multi-Output-Modell zur Qualitätsvorhersage für die Produktionsplanung einer Batteriezellproduktion. Im Fokus steht weiterhin die Vorhersage von Endprodukteigenschaften basierend auf Zwischenproduktmerkmalen. In der Studie wird ein Multi-Output-Modell eingeführt, das verschiedene Endprodukteigenschaften einer Batteriezelle aus einem Datensatz von Zwischenproduktmerkmalen vorhersagt. Im Gegensatz zu traditionellen Modellen, die sich auf einen einzigen Zielwert konzentrieren, berücksichtigt dieser Ansatz die komplexen Abhängigkeiten zwischen den verschiedenen Produktmerkmalen. Die praktische Anwendung in einer Fallstudie innerhalb einer industriellen Pilotproduktionslinie demonstriert die reale Anwendbarkeit und die Verbesserung der Vorhersagen bei kundenspezifischen Anpassungen. Die Autoren vergleichen künstliche neuronale Netze und andere Algorithmen des maschinellen Lernens für das Training und die Validierung des Modells. Die Korrelation der Zwischenproduktqualität in Bezug auf die Endprodukteigenschaften ermöglicht eine frühzeitige Abstimmung der Produktionssteuerung. Allerdings wird für die Ableitung der benötigten Prozessparametern weiterhin auf umfangreiche Produktionsprozesssimulation durch Prozessexperten verwiesen.²⁰¹

Ventura Silva et al. (2022) stellen eine Digitalisierungsplattform für eine nachhaltige Batteriezellenproduktion vor, die eine Kopplung mechanistischer Modelle und dem den Wechselwirkungen auf Prozess-, Produktions- und Produktebene adressiert. Durch einen modularen Ansatz wird eine mehrstufige Abbildung der Batteriezellenproduktion in einzelnen Modulen ermöglicht: Prozesskettenmodell, Batteriezellenmodell, Datenspeicherung und Analyse. Der Ansatz legt besonderen Schwerpunkt auf Flexibilität und ermöglicht den individuellen oder kombinierten Einsatz von Modellen, wodurch die Anpassungsfähigkeit an spezifische Produktionskontexte verbessert wird. Die verwendeten mechanistischen Modelle innerhalb des Prozesskettenmodells und des Batteriezellenmodells nutzen Simulationen, um verschiedene Faktoren einschließlich struktureller und prozessbezogener Parameter abzubilden und zu analysieren. Der Einsatz von Simulationen trägt zu einer kosteneffizienten und zeitsparenden Untersuchung verschiedener Produktionsszenarien bei. Während die Validierung mehrere Prozesse in der Kathodenfertigung und Zellmontage betrachtet, bestehen weiterhin Einschränkungen in der unvollständigen Darstellung des realen Systems und einige nicht modellierter Wechselwirkungen zwischen Produkt und Prozess. Wenngleich maschinelles Lernen nicht explizit zum Einsatz kommt, bilden die modularen und datengetriebenen Bestandteile der Digitalisierungsplattform die Grundlage für eine mögliche künftige Integration zur Verbesserung der Modellierung und Entscheidungsunterstützung.²⁰²

²⁰⁰ Vgl. Turetskyy et al. (Data-driven cyber-physical System for Quality Gates in Lithium-ion Battery Cell Manufacturing) 2020.

²⁰¹ Vgl. Turetskyy et al. (Battery production design using multi-output machine learning models) 2021.

²⁰² Vgl. Ventura Silva et al. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production) 2023.

Westermeier et al. (2014) befassen sich mit der Entwicklung einer Qualitätsmanagementsystematik zur Optimierung der Produktionskette von Lithium-Ionen-Zellen während der Anlaufphase. Der vorgestellte Ansatz fokussiert liegt die Bewältigung der Komplexität der Produktionskette. Der Ansatz basiert auf der Fehlermöglichkeits- und -einflussanalyse (FMEA) und nutzt Multiple-Domain Matrizen (MDM) zur Überführung von Ursache-Wirkungs-Korrelationen über die gesamte Produktionskette. Durch die FMEA werden Informationen über direkte und indirekte Wirkungszusammenhängen entlang der gesamten Produktionskette aufgenommen. Die ermittelten Zusammenhänge werden in MDMs überführt, um indirekte Einflüsse auf die Endproduktqualität zu identifizieren. Anschließend erfolgt die Auswahl qualitätsrelevanter Einflussgrößen durch eine iterative Reduktions- und Validierungsmethode. Zunächst wird eine Pareto-Analyse angewendet, um geringe Korrelationen auszuschließen. Anschließend erfolgt eine Expertenbewertung bezüglich der Variabilität und Messbarkeit der verbleibenden Einflussgrößen. Die reduzierten Informationen dienen als Grundlage für experimentelle Validierungen, um angenommene Korrelationen der ausgewählten Einflussgrößen zu überprüfen und prozessspezifische Korrelationen der MDM zu aktualisieren. Die vorgestellte Methode berücksichtigt kein maschinelles Lernen oder physikalische Simulationsmodelle, sondern stützt sich auf Expertenbefragungen und statistische Auswertungen. Durch die Identifizierung und Klassifizierung von Einflussfaktoren in Hinblick auf die Qualität von Lithium-Ionen-Zellen lassen sich auf diese Weise Sollwerte für die einzelnen Prozesse zur Qualitätsverbesserung und Kostenoptimierung ableiten.²⁰³

3.2.2 Ansätze zur Parameteroptimierung durch maschinelles Lernen

Approaches for parameter optimization using machine learning

Die fortschreitende Integration von künstlicher Intelligenz bietet ein Potenzial für die Vorhersage von Produktionsabläufen und die Optimierung von Fertigungsprozessen. Dieser Abschnitt betrachtet relevante Forschungsansätze ein, die sich mit der Anwendung von maschinellem Lernen zur Modellierung von Produktionssystemen befassen, und hebt dabei relevante methodische Aspekte hervor.

Ghosh et al. (2019) betrachten die Modellierung und Optimierung der Oberflächenrauheit beim Nutfräsen von C40-Stahl unter Nassbedingungen. Die spezifischen Schneidparameter (Spindeldrehzahl, Vorschub, Schnitttiefe) werden als Eingangsparameter betrachtet, wobei die Oberflächenrauheit (Ra) als Ausgangsparameter dient. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt auf der Anwendung von künstlichen neuronalen Netzen (ANN) und Response Surface Methodology (RSM) zur Modellierung sowie genetischen Algorithmen (GA) und Partikelschwarmoptimierung (PSO) zur Modelloptimierung. Für die ANN wird ein Backpropagation-Algorithmus mit Levenberg-Marquardt- und Gradient-Descent-Methode betrachtet. Für die RSM wird ein vollfaktorieller Versuchsplan genutzt, um die Oberflächenrauheit zu modellieren. Die Optimierung wird sowohl mithilfe von genetischen Algorithmen als auch Particle Swarm Optimization

²⁰³ Vgl. Westermeier et al. (Complexity Management for the Start-up in Lithium-ion Cell Production) 2014.

(PSO) durchgeführt, um optimale Bearbeitungsparameter zu identifizieren. Zusammenfassend zeigt die Analyse der 3D-Oberflächenplots und die ANOVA-Analyse, dass der Vorschub den größten Einfluss auf die Oberflächenrauheit hat, gefolgt von der Spindeldrehzahl. Eine optimale Kombination aus hoher Spindeldrehzahl, niedrigem Vorschub und geringer Schnitttiefe führt daher zu einer verbesserten Oberflächenqualität. Die Vergleichsanalyse zeigt, dass der RSM-PSO-Ansatz die besten Ergebnisse bei der Minimierung der Oberflächenrauheit liefert. Die Arbeit trägt zur effizienten Modellierung und Optimierung der Schneidbedingungen bei. In der Validierung werden nicht alle relevanten Schneidparameter berücksichtigt, sodass die Vorhersage durch die Integration weiterer Faktoren wie spezifische Werkzeugparameter verbessert werden könnte. Außerdem kann die Materialabtragsrate ebenfalls als Ausgabeparameter betrachtet werden, um ein mehrstufiges Optimierungsproblem zu formulieren.²⁰⁴

Mok et al. (2001) konzentrieren sich auf die Verbesserung bei der Bestimmung der anfänglichen Prozessparameter für das Spritzgießen. Die Autoren thematisieren die Defizite der derzeitigen Trial-and-Error-Praktiken und unterstreicht den Bedarf nach effizienteren Vorgehensweisen angesichts des globalen Wettbewerbs. Dafür verfolgen sie einen hybriden Ansatz, der künstliche neuronale Netze (ANN) und genetische Algorithmen (GA) kombiniert. Ein ANN modelliert komplexe Beziehungen der Prozessparameter, während GA die Parameter bei der anfänglichen Einstellung optimiert. Bei dem ANN handelt es sich um dreischichtiges neuronales Netz mit Backpropagation zur Vorhersage der Qualitätsmerkmale von Formteilen. Der genetische Algorithmus optimiert die Prozessparameter auf der Grundlage der Vorhersagen des neuronalen Netzes. Diese Kombination ermöglicht eine schnelle und genaue Bestimmung der Prozessparameter. Das hybride System reduziert effektiv die Zeit für die Bestimmung der anfänglichen Prozessparameter für das Spritzgießen und liefert Empfehlungen zur Produktion von qualitativ hochwertigen Formteilen. Allerdings geht die Validierung nicht explizit auf die potenziellen Grenzen der gewählten Architektur des neuronalen Netzes oder auf die Empfindlichkeit des genetischen Algorithmus gegenüber Variationen der Eingangsparameter und seiner Anpassungsfähigkeit an verschiedene Arten von Formgebungsprozessen ein.²⁰⁵

Panwar et al. (2021) fokussieren die experimentelle Untersuchung und Optimierung der Oberflächenrauheit beim Drehen von EN 36-Legierungsstahl. Der Fokus liegt auf der Anwendung von Response Surface Methodology (RSM) und genetischen Algorithmen, um optimale Bearbeitungsparameter zu ermitteln. Die RSM ermöglicht die mathematische Modellierung der Oberflächenrauheit in Abhängigkeit von Bearbeitungsparametern. Durch die Box-Behnken-Matrix werden Versuchsdurchläufe geplant, um Daten für die Modellbildung zu generieren. Ein genetischer Algorithmus wird eingesetzt, um optimale Bearbeitungsparameter zu identifizieren und die Materialabtragsrate zu maximieren. Dabei konnte eine minimale Oberflächenrauheit von 1,19 µm erreicht werden. Der Einsatz von maschinellem Lernen, insbesondere des genetischen Algorithmus, ermöglichte eine effiziente Suche nach den optimalen Parametereinstellungen, um die gewünschten Ergebnisse zu erzielen. Die Untersuchung berücksichtigt nicht

²⁰⁴ Vgl. Ghosh et al. (Modeling and optimization of surface roughness in keyway milling) 2019.

²⁰⁵ Vgl. Mok et al. (Approach to the Determination of Initial Process Parameters for Injection Moulding) 2001.

explizit die Anwendbarkeit auf die Batteriezellenproduktion, könnte aber durch spezifischere Parameter für diesen Bereich übertragen werden. Eine Erweiterung der Modellkomplexität könnte zusätzliche Faktoren berücksichtigen, die die Oberflächenrauheit beeinflussen, um die Genauigkeit der Vorhersagen weiter zu verbessern.²⁰⁶

Sette et al. (1996) thematisieren die Optimierung von Produktionsprozessen im Bereich der Faser-Garn-Herstellung mit dem Ziel, die Qualität der Endprodukte zu maximieren. Der Ansatz umfasst die Anwendung von neuronalen Netzwerken mit Backpropagation zur Modellierung des Produktionsprozesses und genetischer Algorithmen zur Optimierung der Parameter. Die Architektur des neuronalen Netzwerks umfasst eine Eingabeschicht mit 19 Knoten, zwei versteckte Schichten mit jeweils 12 Knoten und eine Ausgabeschicht mit zwei Knoten. Die Eingabevektoren für das neuronale Netzwerk repräsentieren 14 Fasercharakteristika und 5 Maschineneinstellungen. Für den genetischen Algorithmus werden eine Pareto-Optimierung und eine Sharing-Funktion zur multikriteriellen Optimierung genutzt, damit Lösungen als Pareto-optimal betrachtet werden und die gesamte Population nicht gegen einen einzigen optimalen Punkt konvergiert. Es ist zu beachten, dass in der Arbeit keine Erwähnung von mehreren neuronalen Netzwerken gemacht wird, sondern dass ein neuronales Netz für die Modellierung des Produktionsprozesses verwendet wird. Die Kombination aus neuronalem Netz und genetischem Algorithmus führt dazu, dass optimale Parametereinstellungen für die Faser-Garn-Herstellung gefunden werden können. Die Autoren zeigen keine spezifischen Limitationen auf, jedoch könnten weitere Arbeiten zur Feinabstimmung von Produktionsprozessen und zur Anwendung auf verschiedene Branchen erfordern.²⁰⁷

Syarif et al. (2016) setzen sich mit der Optimierung von SVM-Parametern mithilfe von Grid Search und genetischem Algorithmus auseinander zur Verbesserung der Klassifikationsleistung von SVM durch Parameteroptimierung, insbesondere für hochdimensionale Datensätze. Dafür werden Grid Search und genetischer Algorithmus angewendet. Bei Grid Search handelt es sich um einen umfangreichen Suchalgorithmus, der verschiedene Parameterkombinationen durchläuft, während der genetische Algorithmus auf der natürlichen Selektion in großen Parameterräumen basiert. Die Grid Search führt zu deutlichen Verbesserungen in der Klassifikationsleistung auf 8 der 9 betrachteten Datensätze. Jedoch ist sie zeitintensiv. Der genetische Algorithmus erweist sich als schnellere Alternative, ohne dabei an Wirksamkeit einzubüßen. In den meisten Fällen erzielt er vergleichbare Ergebnisse zur Grid Search. Die Grid Search wird in hochdimensionalen Datensätzen problematisch, da sie eine umfassende Suche in einem parametrischen Raum erfordert. Dies führt zu einer exponentiellen Zunahme der Kombinationen und somit zu langen Ausführungszeiten. Insbesondere bei einer Vielzahl von Parametern steigt die Anzahl der zu evaluierenden Kombinationen stark an, was die Grid Search ineffizient macht. Dieses Problem wird durch den genetischen Algorithmus überwunden, der auf einer evolutionären Strategie basiert und somit schneller zu den optimalen Parametern führt. Die Ergebnisse liefern Erkenntnisse zur effizienteren Parameteroptimierung von SVM für verschiedene Datensätze.

²⁰⁶ Vgl. Panwar et al. (Experimental investigations and optimization of surface roughness in turning) 2021.

²⁰⁷ Vgl. Sette et al. (Optimising a production process by a neural network and genetic algorithm approach) 1996.

Auch wenn sich die Parameteroptimierung auf die Hyperparameter des SVM beziehen, lassen sich die vorgestellten Methoden auf die Optimierung von Produktionsprozessen übertragen.²⁰⁸

Venkatesan et al. (2009) untersuchen die Anwendung von genetischen Algorithmen und künstlichen neuronalen Netzen zur Optimierung von Bearbeitungsprozessen in der Fertigungsindustrie. Dabei wird ein neuronales Netz als Prozessmodelle eingesetzt, um komplexe Zusammenhänge in der Fertigung zu modellieren. Der genetische Algorithmus dient der Optimierung des neuronalen Netzes. Das neuronale Netz ist ein dreischichtiges Netz mit Backpropagation. Die Eingabeschicht umfasst fünf Knoten, die den relevanten Eingangsvariablen des Drehprozesses entsprechen. Die versteckte Schicht besteht aus fünf Knoten mit Aktivierungsfunktion, um nichtlineare Merkmale zu extrahieren. Die Ausgabeschicht besteht aus vier Knoten, die die Werkzeuglebensdauer, Kraft, Leistung und Rauheit repräsentieren. Der vorgestellte Ansatz nutzt den genetischen Algorithmus insbesondere, um die Vorhersagegenauigkeit des neuronalen Netzes zu verbessern. Die Validierung zeigt die Effektivität von genetischen Algorithmen bei der Suche nach globalen Optima in komplexen Suchräumen. Dadurch trägt die Arbeit zur Parameteroptimierung für den Drehprozess in der Fertigungsindustrie bei. Sie bietet jedoch keine direkten Einsichten für die Parameteroptimierung in der Produktion von Batteriezellen. Insgesamt führt die Verwendung von genetischen Algorithmen (GAs) für die Optimierung der Gewichte des neuronalen Netzes zu genaueren Vorhersagen der Ausgangsvariablen. Die Autoren verweisen jedoch auf den begrenzten Zeitgewinn durch die Verwendung von genetischen Algorithmen. Dies könnte auf den Overhead (zusätzliche Ressourcen oder Zeit) bei der Anwendung zurückzuführen sein.²⁰⁹

Wang et al. (2020) betrachten die Optimierung von Parametern für Support Vector Machines (SVM) bei Klassifikationsproblemen. Sie befasst sich mit der Herausforderung der zeitaufwändigen Hyperparameteroptimierung, indem sie einen Condensation Algorithmus mit einem Algorithmus zur Vorabauswahl des Parameterbereichs kombiniert basierend auf der Distanz zwischen den Mittelwerten zweier Klassifikationsbereiche. Der vorgeschlagene Algorithmus zeigt eine verbesserte Effizienz und eine reduzierte Zeit für die Parameteroptimierung, was ihn für große Datensätze anwendbar macht. Insgesamt konnte die Zeit für die Parameteroptimierung um über 95% reduziert werden, ohne die Effektivität der Klassifikation zu beeinträchtigen. Obwohl die Studie sich auf die Parameteroptimierung von SVM konzentriert, ist eine Übertragbarkeit der Anwendung auf die Parametereinstellung in der Batteriezellenproduktion denkbar. Die Arbeit betont die Effizienzgewinne bei der SVM-Parameteroptimierung, jedoch werden praktische Erkenntnisse für die Batteriezellenproduktion nicht explizit diskutiert. Weitere Forschung ist erforderlich, um die Anwendbarkeit und potenziellen Einschränkungen in industriellen Kontexten wie der Batteriezellenproduktion zu prüfen.²¹⁰

²⁰⁸ Vgl. Syarif et al. (SVM Parameter Optimization using Grid Search and Genetic Algorithm) 2016.

²⁰⁹ Vgl. Venkatesan et al. (A genetic algorithm-based neural network model for the optimization of machining processes) 2009.

²¹⁰ Vgl. Wang et al. (Parameter optimization of support vector machine based on improved grid algorithm) 2020.

3.2.3 Ansätze zur Anlaufunterstützung von Produktionssystemen

Approaches for ramp-up management of production systems

Ein effizienter Produktionsanlauf ist von entscheidender Bedeutung für die Kostenoptimierung und die zeitnahe Markteinführung neuer Produkte. Dieser Abschnitt untersucht Forschungsansätze, die sich mit der Konzeptionierung und Implementierung effektiver Anlaufstrategien für Produktionssysteme auseinandersetzen.

Doltsinis et al. (2020) befassen sich mit der kritischen Phase des Produktionshochlaufs in Industrie 4.0-fähigen Systemen. Die Arbeit konzentriert sich auf den Entscheidungsfindungsprozess während des Hochlaufs und schlägt einen Cyber-Physical Systems (CPS)-Ansatz mit einem Decision Support System (DSS) zur Optimierung der Systemabstimmung vor, um der Forderung der aktuellen Technologi Landschaft nach schnellen Produktionsänderungen und kundenspezifischen Anpassungen gerecht zu werden. Es wird ein sequenzielles Modell für den Hochlauf angenommen und als Entscheidungsprozess definiert, bei dem die Bediener das Produktionssystem fein abstimmen. Das vorgeschlagene DSS umfasst Datenerfassung, Lernmechanismen und Wissensextraktion in der Zusammenarbeit zwischen Bediener und Maschine. Durch die Kombination des Reinforcement Learning mit einem CPS-Ansatz konnte eine Reduzierung der Anlaufschritte um über 40 % erzielt werden, indem der menschliche Bediener mit Leistungsinformationen und Handlungsempfehlungen versorgt wird. Jedoch wird die Notwendigkeit einer weiteren Evaluierung in größeren Produktionssystemen betont, um die Übertragbarkeit des modellbasierten Lernens auf verschiedene Produktionssysteme und die Anwendung in komplexeren Umgebungen zu validieren. In den früheren Arbeiten^{211,212} wurde bereits ein Q-Batch-Lernansatz vorgestellt, der die praktische Entscheidungsfindung während des Fertigungshochlaufs unterstützt und optimale Maßnahmen identifiziert, um das Fertigungssystem auf das gewünschte Leistungsniveau zu bringen. Durch die Kombination von menschlicher Entscheidungsfähigkeit und der Anwendung von Q-Learning auf technische Änderungen wurde die Hochlaufzeit einer Produktionsstation signifikant reduziert.²¹³

Ngo et al. (2020) behandeln die Sicherstellung der Prozessqualität während des Produktionshochlaufs als entscheidenden Faktor für die Kostenreduzierung und die Aufrechterhaltung der Rentabilität. Der Fokus liegt auf dem Einsatz eines auf künstlicher Intelligenz basierendes Entscheidungsmodell für die Konfiguration von qualitätsrelevanten Prozessparametern während des Produktionshochlaufs. Als Ordnungsrahmen wird ein adaptives Entscheidungsmodell auf der Basis von künstlichen neuronalen Netzen (ANN) verwendet. Das Modell analysiert kontinuierlich qualitätsrelevante Prozessdaten zur iterativen Optimierung von Prozessparametern und demonstriert damit einen regelungstechnischen Ansatz durch die Berechnung optimierter Parameterkonfigurationen. Die iterative Anpassung von Prozessparametern führt zu einer kontinuierlichen Verbesserung der Prozessqualität. Die Verfügbarkeit von Daten führt zu einer

²¹¹ Vgl. Doltsinis et al. (Reinforcement Learning for Production Ramp-Up) 2012.

²¹² Vgl. Doltsinis et al. (An MDP Model-Based Reinforcement Learning Approach for Production Station Ramp-Up Optimization) 2014.

²¹³ Vgl. Doltsinis et al. (A Decision Support System for rapid ramp-up of industry 4.0 enabled production systems) 2020.

Einschränkung der Anpassungsfähigkeit des Modells hinsichtlich Veränderungen in einer realen Produktionsumgebung.²¹⁴

Schönherr et al. (2018) adressieren den erfolgreichen Produktionseinführung im Kontext verkürzter Produktlebenszyklen und erhöhter Marktvolatilität. Im Fokus liegt die Notwendigkeit effizienter Produktionsprozesse und die Implementierung selbstlernenden Prozessen in automatisierten Montagesystemen, um Fehler zu vermeiden. Durch die Einführung von maschinellem Lernen wird das Montagesystem befähigt, sich an individuelle Zustände anzupassen und Fehlervermeidungsstrategien zu optimieren. Das selbstlernende System besteht aus zwei Hauptkomponenten. Das erste Modul nutzt Daten von verschiedenen Sensoren, um den Einfluss externer Variablen auf den Montageprozess zu bewerten und Fehler vorherzusagen. Anschließend prognostiziert ein selbstlernendes Modul die Fehlerwahrscheinlichkeit auf der Basis aggregierter Merkmalsvektoren. Der Ansatz liefert wertvolle Erkenntnisse zur Verbesserung des Hochlaufprozesses für automatisierte Montagesysteme, insbesondere im Kontext der Automobilindustrie. Durch die Nutzung von Produktionsdaten und die Implementierung selbstlernender Algorithmen wird das Potenzial zur Verbesserung der Systemrobustheit durch adaptive Entscheidungsfindung demonstriert. Allerdings räumen die Autoren ein, dass Herausforderungen durch ein unvorhersehbares Verhalten des Produktionssystems während der Inbetriebnahme in Form von Abweichungen und Störungen bestehen bleiben.²¹⁵

Terwiesch et al. (2001) untersuchen den Produktionsanlauf im Kontext der Wechselwirkungen zwischen Kapazitätsauslastung, Ausbeute und Lernprozessen mittels gezielter Experimente. Der Fokus liegt auf dem Zielkonflikt zwischen kurzfristigen Erträgen und langfristigen Lernvorteilen während der Produktionsanlaufphase. Die Autoren präsentieren einen Ansatz zur dynamischen Modellierung von Lern- und Prozessverbesserungsaktivitäten während dieser Anlaufphase. In Kampagnen wird die Produktionskapazität kurzfristig reduziert, Potenziale zur Verbesserung zu identifizieren und Lösungen zu testen. Die Bewertung der resultierenden Kosten, des Umfangs und des Mehrwerts ermöglicht, den Kompromiss zwischen kurzfristigen Erträgen und langfristigem Lernen zu formalisieren. Das Modell untersucht verschiedene Phasen des Produktionsanlaufs und bewertet, wie sich die Optimierungsstrategien im Laufe der Zeit verändern sollten, um fundierte Entscheidungen zu treffen und das optimale Gleichgewicht zwischen regulärer Produktion und Lernaktivitäten abzuleiten. In einer weiterführenden Arbeit stellen Terwiesch et al. (2004)²¹⁶ die Copy-Exactly-Strategie vor, die den Prozess für eine festgelegte Zeit einfriert, um keine Veränderungen zuzulassen. Dies entspricht einer Maßnahme zur Prozessverbesserung, die Prozessänderungen verzögert und somit einen nicht monotonen Verlauf beschreibt. Diese Vorgehensweise ist insbesondere dann sinnvoll, wenn das anfängliche Wissensniveau niedrig ist. Durch gezielte Versuchskampagnen können Parameter-

²¹⁴ Vgl. Ngo et al. (Artificial intelligence based decision model for a quality oriented production ramp-up) 2020.

²¹⁵ Vgl. Schönherr et al. (Erfolgreiche Anlaufgestaltung mittels selbstlernender automatisierter Montagesysteme) 2018.

²¹⁶ Vgl. Terwiesch et al. (The Copy-Exactly Ramp-Up Strategy: Trading-Off Learning With Process Change) 2004.

einstellung schrittweise validiert und zusätzliche Produktionsdaten für die Modellierung erfasst werden.²¹⁷

Winkler et al. (2007) präsentieren die Entwicklung eines Steuerungssystems für die Hochlaufphase von Produktionsanlagen. Die steigende Bedeutung kürzerer Produktlebenszyklen erfordert effektive Kontrollmechanismen, um die Auswirkungen von Parameteränderungen vorherzusagen. Der Ansatz beinhaltet die Entwicklung eines Prognosemodells, um den Hochlaufprozess durch mathematische Modelle und Simulationen von Ursache-Wirkungs-Beziehungen zu bewerten. Die Ursache-Wirkungs-Beziehungen basieren auf Erfahrungen aus früheren Hochläufen, Prozesswissen und experimentellen Modellen. Die Analyse führt zu einem logischen Netz, das die Abhängigkeiten zwischen verschiedenen Elementen (Operationen, Objekten und Ressourcen) darstellt und als Grundlage für die mathematische oder logische Abbildung im Prognosemodell dient. Durch die Ursache-Wirkungs-Beziehungen ermöglicht das Modell eine frühzeitige Identifikation von Engpässen, Problemen oder potenziellen Störungen im Hochlaufprozess. Dadurch wird die Entscheidungsfindung während des Hochlaufprozesses verbessert, wodurch sich effektive Strategien ableiten lassen, um frühzeitig auf Probleme zu reagieren und alternative Maßnahmen zu bewerten.²¹⁸

3.3 Handlungsbedarf aus der Theorie

Need for research

Die Batteriezellenproduktion ist derzeit mit diversen Herausforderungen konfrontiert (vgl. Abschnitt 2.5). Einerseits besteht weiterhin ein erheblicher Mangel an Verständnis für die Ursache-Wirkungsbeziehungen zwischen Produkteigenschaften und Prozessparametern. Andererseits sind hohe Ausschussraten und eine niedrige Gesamtanlageneffektivität zu beobachten, insbesondere während des Produktionshochlaufs. Darüber hinaus steht die Branche aufgrund des globalen Wettbewerbs unter hohem Innovationsdruck, was zu hohen Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten in der Batterietechnologie und der Einführung neuer Materialien, Rezepturen, Produktvarianten und Prozessinnovationen führt.

Die Bewertung der bestehenden Ansätze basierend auf den zuvor definierten Bewertungskriterien wird in Abbildung 40 dargestellt. Die Auswertung hinsichtlich der Anwendung im Kontext der Batteriezellproduktion und Datenanalyse zeigt (Abbildung 39), dass ein Großteil der betrachteten Ansätze bereits auf den Einsatz von maschinellem Lernen setzen, um Optimierungspotenziale zu erschließen. Dabei werden Algorithmen und statistische Modelle verwendet, um Muster in Daten zu identifizieren und Vorhersagen zu treffen. Allerdings stützen sich weiterhin einige Untersuchungen auf physikalische Simulationen, um basierend auf mathematischen Modellen das Verhalten von realen physischen Systemen nachzuahmen. Das erfordert eine genaue Kenntnis der physikalischen Eigenschaften und Parameter des Systems. Änderungen im System erfordern oft eine Neumodellierung und Anpassung der Simulation. Weitere Ansätze

²¹⁷ Vgl. Terwiesch et al. (Learning and process improvement during production ramp-up) 2001.

²¹⁸ Vgl. Winkler et al. (A controlling system based on cause–effect relationships for the ramp-up of production systems) 2007.

berücksichtigen weder den Einsatz von maschinellem Lernen noch die Umsetzung von Simulationen. Stattdessen beschreiben sie übergeordnete Digitalisierungsplattformen oder greifen auf traditionelle statistische Methoden zurück. Während der Einsatz von maschinellem Lernen bereits etabliert ist, zeigt sich, dass eine systematische Verknüpfung prozessspezifischer Teilmodelle noch nicht vollständig realisiert wurde. Lediglich ein geringer Anteil der untersuchten Ansätze beschreibt einen umfassenden, prozessübergreifenden Ansatz zur Modellierung der Prozesskette oder betrachtet die systematische Verkettung spezifischer Teilmodelle als zentralen Bestandteil. Die meisten Ansätze verwenden die zugrunde liegenden Teilmodelle lediglich, um diese prozessspezifisch auf einen bestimmten Prozess oder einen Prozessabschnitt anzuwenden. Dabei erfüllen die Teilmodelle primär modellspezifische Aufgaben und dienen nicht der Abbildung eines konkreten Prozessschritts.

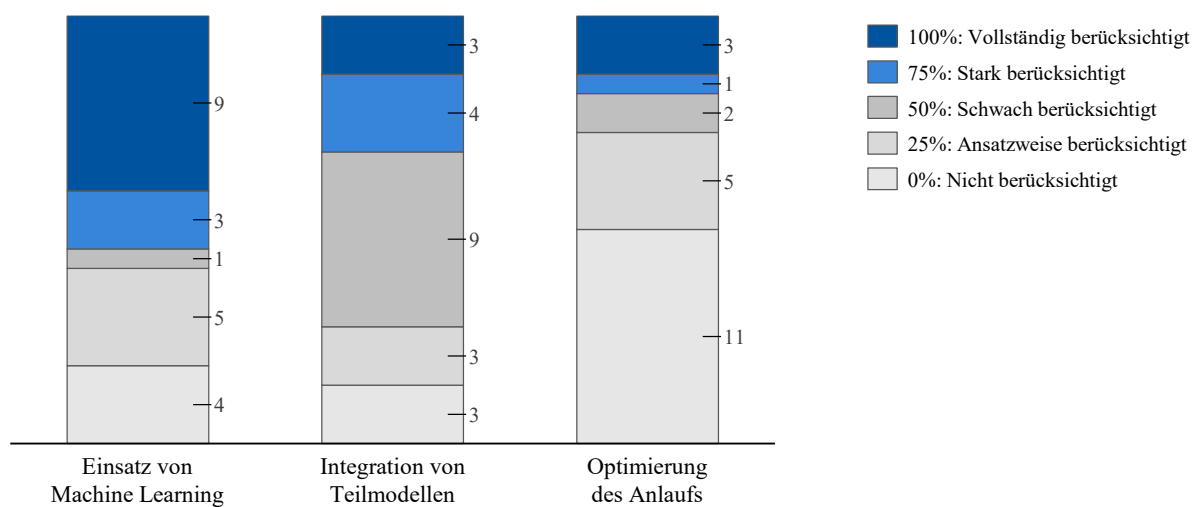


Abbildung 39: Bewertung der Berücksichtigung bestehender Ansätze mit Fokus Batteriezellproduktion

Darüber hinaus mangelt es an Ansätzen, die sich spezifisch mit den Herausforderungen des Produktionsanlaufs und entsprechenden Anlaufstrategien auseinandersetzen. Lediglich vier der untersuchten Ansätze adressieren die Herausforderungen des Produktionsanlaufs und leiten Maßnahmen zur Sicherung der Produktqualität ab. Obwohl einige Ansätze die Herausforderungen des Anlaufs benennen, bleiben Strategien zur Optimierung in dieser Phase unberücksichtigt. Die Hälfte der betrachteten Ansätze lässt den Produktionsanlauf unberücksichtigt. Darüber hinaus zeigt sich, dass Ansätze mit einem speziellen Fokus auf den Produktionsanlauf hauptsächlich auf das Anlaufmanagement als disziplinübergreifenden Prozess setzen.

Eine weiterer Forschungsbedarf offenbart sich im Bereich der Modellierung der Batteriezellproduktion. Während die Mehrheit der Ansätze auf die Modellierung zur Prognose und Korrelation von Produkteigenschaften fokussiert ist, vernachlässigen sie die Prognose der optimalen Prozessparameter weitgehend (vgl. Abbildung 41). Die meisten Ansätze identifizieren und benennen kritischen Prozessparameter oder Produktionskenngrößen. Allerdings werden sie größtenteils nur als Eingangsvariablen in der Modellierung berücksichtigt. Das bedeutet im

	Anwendungsbereich			Modellierungsgegenstand				Ansatz
	(A1)	(A2)	(A3)	(B1)	(B2)	(B3)	(B4)	
	Anwendbarkeit auf die Batteriezellproduktion	Fokus auf technische Befähigung im Produktionsanlauf	Einsatz von Methoden des maschinellen Lernens	Produkt: Zwischen- und Endprodukteigenschaften	Prozess: Anlageneinstellungen und Prozessparameter	Produktion: Produktivitäts- und Effizienzsteigerung	Modell: Hyperparameter und Algorithmen	Einbindung prozessspezifischer Teilmodelle
Fokus Batteriezellproduktion	Drakopoulos et al. (2021)	●	○	●	●	○	●	●
	Duquesnoy et al. (2020)	●	○	●	●	○	○	●
	Duquesnoy et al. (2021)	●	○	●	●	○	○	●
	Filz et al. (2020)	●	●	●	●	●	○	●
	Husseini et al. (2022)	●	●	○	●	○	○	●
	Liu et al. (2021)	●	○	●	●	○	●	●
	Kirchhof et al. (2020)	●	●	○	○	○	○	●
	Krauß et al. (2023)	●	○	○	○	○	○	●
	Kornas et al. (2019)	●	○	○	○	○	○	●
	Kornas et al. (2020)	●	○	○	○	○	○	○
	Rohkohl et al. (2022)	●	○	●	○	○	○	○
	Rynne et al. (2020)	○	○	○	○	○	○	○
	Schmidt et al. (2020)	●	○	●	○	○	○	○
	Schnell et al. (2019)	●	○	●	○	○	○	○
	Schönemann et al. (2019)	●	○	○	○	○	○	○
	Thiede et al. (2019)	●	○	○	○	○	○	○
	Thiede et al. (2020)	●	○	○	○	○	○	○
	Thomitzek et al. (2018)	●	○	○	○	○	○	○
	Turetsky et al. (2020)	●	○	○	○	○	○	○
	Turetsky et al. (2021)	●	○	○	○	○	○	○
Fokus Anlauf	Ventura Silva et al. (2022)	●	○	○	○	○	○	○
	Westermeier et al. (2014)	●	○	○	○	○	○	○
	Doltsinis et al. (2020)	○	○	○	○	○	○	○
	Ngo et al. (2020)	○	○	○	○	○	○	○
	Schönherr et al. (2018)	○	○	○	○	○	○	○
Fokus Modellierung	Terwiesch et al. (2001)	○	○	○	○	○	○	○
	Winkler et al. (2007)	○	○	○	○	○	○	○
	Ghosh et al. (2019)	○	○	○	○	○	○	○
	Mok et al. (2001)	○	○	○	○	○	○	○
	Panwar et al. (2021)	○	○	○	○	○	○	○
	Sette et al. (1996)	○	○	○	○	○	○	○
	Syarif et al. (2016)	○	○	○	○	○	○	○
	Venkatesan et al. (2009)	○	○	○	○	○	○	○
	Wang et al. (2020)	○	○	○	○	○	○	○

Abbildung 40: Bewertung bestehender Ansätze und Forschungsergebnisse

Umkehrschluss, dass nur wenige Ansätze die Frage beantworten, wie die Prozessparameter eingestellt werden müssen, um die gewünschten Produkteigenschaften zu erreichen. Die Prognose der optimalen Prozessparameter für die Batteriezellproduktion wurde bisher nicht umgesetzt. Allerdings setzen sich im Forschungsfeld des maschinellen Lernens Ansätze intensiv mit der Hyperparameteroptimierung auseinander. Während die Modellparameter innerhalb der bestehenden Ansätze im Kontext der Batteriezellproduktion lediglich am Rande benannt werden, lassen sich Ansätze der Hyperparameteroptimierung auf den Produktionskontext für eine Prozessoptimierung übertragen. Die Bandbreite an Techniken zur Hyperparameteroptimierung umfasst dabei sowohl klassische Methoden wie Grid Search als auch Ansätzen wie die Bayes'sche Optimierung und evolutionäre Algorithmen.

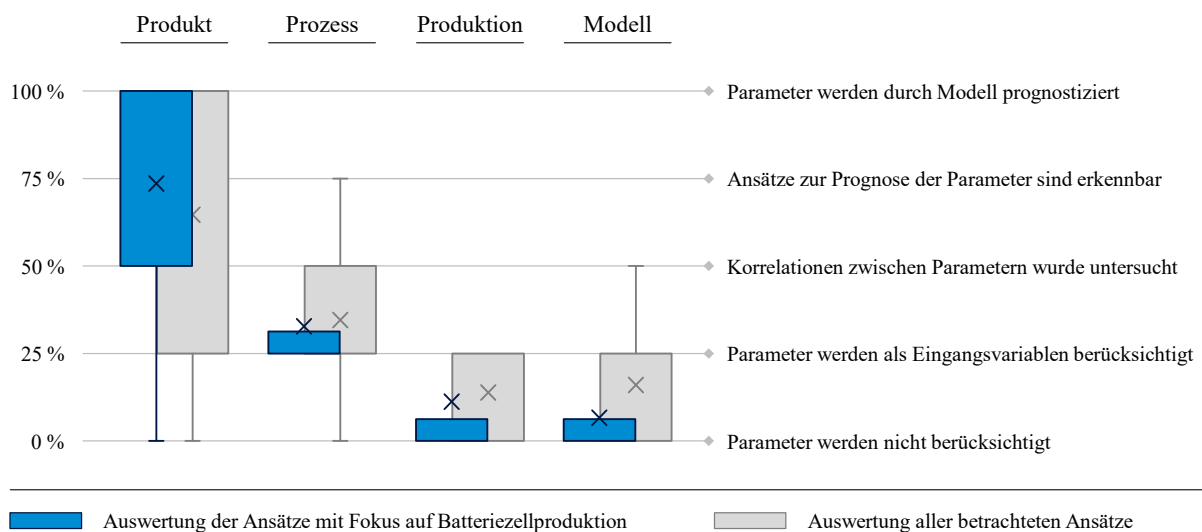


Abbildung 41: Auswertung des betrachteten Modellierungsgegenstand innerhalb der Ansätze

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die aktuellen Herausforderungen in der Batteriezellenproduktion durch ein unzureichendes Verständnis von Ursache-Wirkungsbeziehungen, hohe Ausschussraten, geringer Anlageneffektivität und Innovationsdruck gekennzeichnet sind.

Die Literaturrecherche verdeutlicht, dass bestehende Ansätze des maschinellen Lernens zwar weit verbreitet sind, eine nahtlose Verknüpfung von prozessspezifischen Teilmodellen und die Berücksichtigung spezifischer Herausforderungen im Produktionsanlauf jedoch bislang nicht stattfinden. Besonders hervorzuheben ist die Tatsache, dass sich bestehende Ansätze überwiegend auf die Modellierung von Produkteigenschaften beschränken. Damit wird die Vorhersage der optimalen Prozessparameter basierend auf definierten Zielvorgaben für die Produkteigenschaften weitestgehend vernachlässigt. Hierbei mangelt es an Ansätzen, die eine systematische Verknüpfung prozessspezifischer Teilmodelle realisieren, um die Ursache-Wirkungsbeziehungen zwischen Prozessparametern und Produkteigenschaften abzubilden. Ein weiterer Forschungsbedarf besteht in der Berücksichtigung mehrerer Zielkriterien. Ein Ansatz zur Parametereinstellung sollte sich darauf konzentrieren, multikriterielle Datenanalysen zu integrieren, um verschiedene Zielvorgaben von Produkteigenschaften gleichzeitig zu berücksichtigen. In diesem Zusammenhang besteht ein deutlicher Forschungsbedarf, der sich auf die Parametereinstellung beim Produktionsanlauf der Batteriezellenproduktion durch maschinelles Lernen fokussiert. Dabei sollte die Anwendbarkeit der entwickelten Methodik auf die gesamte

Prozesskette der Batteriezellproduktion sichergestellt werden. Bisherige Ansätze tendieren dazu, sich auf bestimmte Prozessabschnitte zu konzentrieren, ohne eine durchgängige Betrachtung der gesamten Produktionskette zu ermöglichen. Daher sollte die entwickelte Methodik darauf abzielen, potentiell auf die gesamte Prozesskette anwendbar zu sein und eine kohärente Optimierung über alle Anlagen der Batteriezellenproduktion ermöglichen.

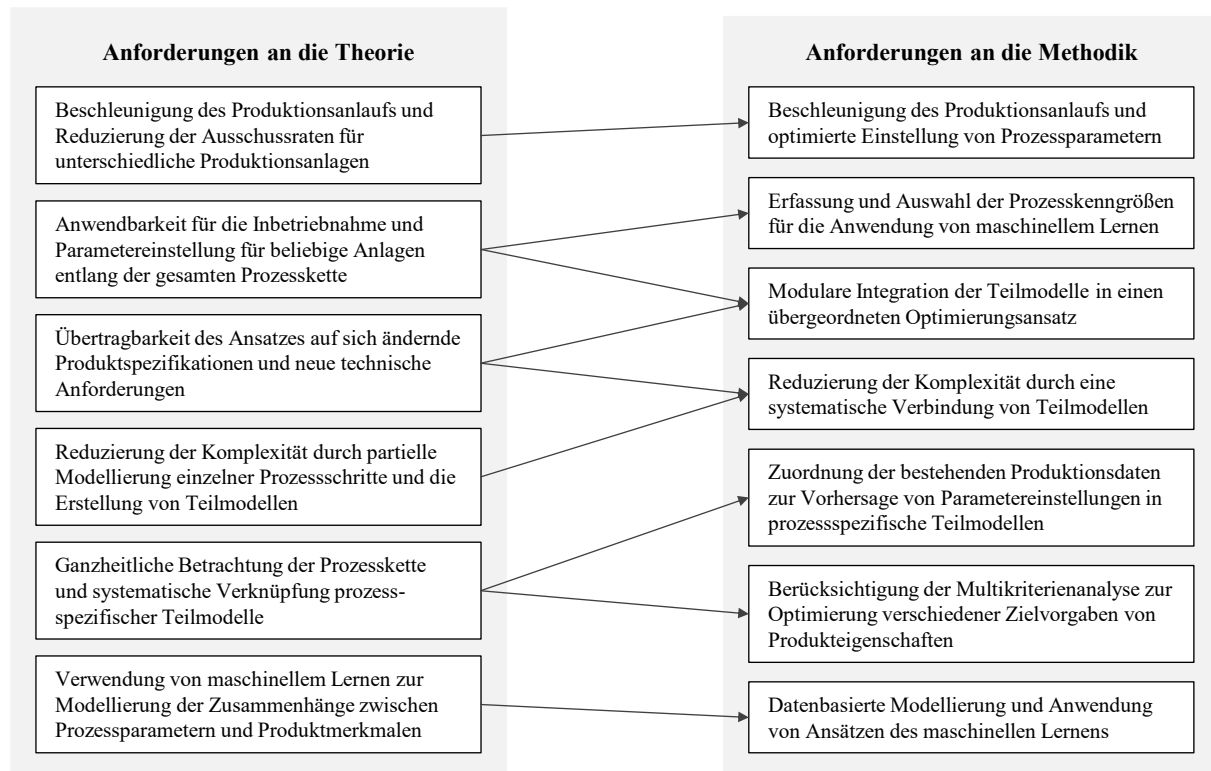


Abbildung 42: Anforderungen an die Methodik

In Abbildung 42 werden die inhaltlichen Anforderungen zur Gestaltung einer neuartigen Methodik dargestellt. Um die Beschleunigung des Produktionsanlaufs und die Reduzierung von Ausschussraten zu ermöglichen, sollte die Methodik die Optimierung der Einstellung von Prozessparametern ermöglichen und gleichzeitig die Anwendbarkeit für die Inbetriebnahme und Parametereinstellung für beliebige Anlagen entlang der gesamten Prozesskette sicherstellen. Die Methodik muss darüber hinaus in der Lage sein, die Anforderungen an die Übertragbarkeit des Ansatzes zu erfüllen, indem sie eine modulare Integration der Teilmodelle in einen übergeordneten Optimierungsansatz ermöglicht. Durch diese modulare Struktur kann die Methodik flexibel auf sich ändernde Produktspezifikationen und neue technische Anforderungen reagieren. Die Reduzierung der Komplexität durch partielle Modellierung einzelner Prozessschritte und die Erstellung von Teilmodellen erfordert eine systematische Verknüpfung prozessspezifischer Teilmodelle sowie die Berücksichtigung einer Multikriterienanalyse zur Optimierung verschiedener Zielvorgaben von Produkteigenschaften. Schließlich muss die Methodik die Verwendung von maschinellem Lernen zur Modellierung der Zusammenhänge zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen ermöglichen und eine datenbasierte Modellierung sowie die Anwendung von Ansätzen des maschinellen Lernens unterstützen, um den Limitationen simulationsbasierter Ansätze und den Herausforderungen der Batteriezellenproduktion gerecht zu werden.

Die inhaltlichen Anforderungen zur Gestaltung einer Methodik für die Parametereinstellung werden durch formale Anforderungen an die Methodik ergänzt:^{219, 220, 221}

- **Handhabbarkeit:** Die neue Methodik sollte innerhalb eines angemessenen Zeitrahmens anwendbar sein. Die Durchführung der einzelnen Schritte sollte praktikabel sein und eine effiziente Umsetzung ermöglichen.
- **Nachvollziehbarkeit:** Ein logischer, verständlicher und systematischer Ablauf ist unerlässlich, um eine breite Akzeptanz bei der Anwendung zu gewährleisten. Die Methodik sollte transparent sein und ermöglichen, die Schritte und Ergebnisse nachzuvollziehen.
- **Allgemeingültigkeit:** Die Methodik sollte nicht nur für spezifische Anwendungsfälle geeignet sein, sondern auch auf andere Bereiche übertragbar sein. Ihre Anwendbarkeit sollte unabhängig von bestimmten Technologien oder Produktionsprozessen sein.
- **Wiederverwendbarkeit:** Die Ergebnisse der Methodik sollten bei gleichen Bedingungen konsistente Ergebnisse liefern und die Methodik sollte mehrfach anwendbar sein, um eine langfristige und effiziente Nutzung zu ermöglichen.
- **Produktivität:** Die Methodik sollte zweckbezogene und brauchbare Antworten liefern, die den spezifischen Anforderungen und Fragestellungen gerecht werden. Sie sollte effektive Lösungen ermöglichen und einen Mehrwert bieten.

Die Berücksichtigung dieser formalen Anforderungen ist entscheidend für die Gestaltung einer Methodik zur optimierten Parametereinstellung, die sowohl in der Theorie als auch in der Praxis erfolgreich angewendet werden kann.

3.4 Ableitung eines methodischen Lösungsansatzes

Derivation of a methodological approach

Im Zuge der Literaturrecherche und einer Betrachtung des Forschungsbedarfs konnte die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit bestätigt werden. Hierbei liegt der Fokus auf der Effizienzsteigerung des Produktionsanlaufs und der optimierten Einstellung von Prozessparametern durch die Nutzung von Produktionsdaten und Ansätzen des maschinellen Lernens. Dieser Ansatz resultiert aus der Notwendigkeit, die Komplexität der Batteriezellenproduktion zu beherrschen und die Effizienz der Anlagentechnik zu maximieren. Ausgehend von den vorgestellten Herausforderungen aus der Praxis ergibt sich die übergeordnete Hauptforschungsfrage:

Hauptfrage: Inwiefern können Produktionsdaten und Ansätze des maschinellen Lernens genutzt werden, um den Produktionsanlauf effizienter zu gestalten und Prozessparameter effizienter einzustellen?

²¹⁹ Vgl. Heimes (Methodik zur Auswahl von Fertigungsressourcen in der Batterieproduktion) 2014, S. 67.

²²⁰ Vgl. Kehrner (Methodik zur Gestaltung des Wiederanlaufs der Lithium-Ionen-Batteriezellproduktion), S. 46f.

²²¹ Vgl. Patzak (Systemtechnik) 1982, S. 309f.

Zur systematischen Bearbeitung der wissenschaftlichen Zielsetzung und zur Beantwortung der Hauptforschungsfrage werden die folgenden Teilforschungsfragen formuliert:

- Teilfrage 1:** Wie lassen sich entscheidende Prozesskenngrößen der Batteriezellproduktion systematisch erfassen und für Ansätze des maschinellen Lernens auswählen?
- Teilfrage 2:** Wie kann eine ausreichende Datengrundlage für die Modellierung durch Methoden des maschinellen Lernens sichergestellt werden?
- Teilfrage 3:** Wie können die vorhandenen Daten in prozessspezifischen Teilmodellen organisiert und anschließend in einem übergeordneten Gesamtmodell integriert werden?
- Teilfrage 4:** Welcher Optimierungsansatz eignet sich für die effiziente Vorhersage der Prozessparametereinstellung einer Prozesskette durch ein übergeordnetes Gesamtmodell?
- Teilfrage 5:** Wie kann die Methode in realen Produktionsumgebungen genutzt werden?

Durch die Herausarbeitung der Forschungsfragen wird eine schrittweise Strukturierung des Lösungsvorgehens ermöglicht. Die detaillierte Ausarbeitung der Teilforschungsfragen umfasst die systematische Erfassung entscheidender Prozesskenngrößen, die Sicherstellung einer ausreichenden Datengrundlage, die strukturierte Organisation von Daten in Teilmodellen, die Auswahl eines optimalen Optimierungsansatzes und die Implementierung in einer realen Produktionsumgebung. Dafür werden im Folgenden die zugrundeliegende Problemstellung detailliert und Lösungshypothesen vorgestellt, die als Grundlage für die Ausarbeitung der methodischen Lösungsbausteine in der vorliegenden Arbeit dienen.

Die zugrundeliegende Problemstellung zeigt sich in den praxisbezogenen Herausforderungen (vgl. Abschnitt 2.5) und besteht darin, Prozessparameter der Anlagentechnik zur Herstellung von gewünschten Zwischen- und Endprodukteigenschaften zu ermitteln und zu prognostizieren. Daher lautet die erste Lösungshypothese:

Lösungshypothese 1: Die Einstellung der Prozessparameter für die Anlagentechnik stellt insbesondere im Produktionsanlauf eine große Herausforderung dar und führt aufgrund der Prozesskomplexität und mangelndes Verständnis über Ursache-Wirkzusammenhängen in der Batteriezellproduktion zu hohen Ausschussraten und niedrigen Anlageneffektivität.

Für eine systematische Beantwortung der Problemstellung wird die Methodik anhand der Phasen des CRISP-DM aufgebaut, um eine strukturierte Umsetzung der Modellierung und Integration zu gewährleisten. Dabei stellt die Problemstellung bereits das Verständnis für das Geschäftsproblem (engl.: Business Understanding) dar.

In einer ersten Phase muss ein Verständnis über die vorliegenden Daten (engl.: Data understanding) geschaffen werden. Dafür werden die Bestandteile der Prozesskette für ein definiertes Referenzsystem analysiert. Der Fokus liegt auf der Identifikation und Auswahl relevanter Prozesskenngrößen, die entscheidend für die Einstellung der Prozessparameter in der Anlagentechnik sind. Durch Auswahl und Vorbereitung der Produktionsdaten muss eine fundierte Datengrundlage (engl.: Data preparation) sichergestellt werden, um Ursache-Wirkungszusammen-

hänge zu verstehen und die Parametereinstellungen zu prognostizieren. Daher lautet die zweite Lösungshypothese:

Lösungshypothese 2: Die Definition eines Referenzsystems und die anschließende Analyse der Prozesskette ermöglicht die Auswahl von relevanten Prozesskenngrößen, um Einflussfaktoren und vorhandene Produktionsdaten basierend auf einer ausreichenden Datengrundlage zu analysieren.

Nachdem eine ausreichende Datengrundlage sichergestellt wurde, muss in einer zweiten Phase durch die Zuordnung der vorhandenen Produktionsdaten in prozessspezifische Teilmodelle eine Grundlage für die iterative Modellierung (engl.: Modeling) der Prozesskenngrößen geschaffen werden. Diese Teilmodelle ermöglichen eine detaillierte Analyse der komplexen Ursache-Wirkungszusammenhänge in der Batteriezellproduktion. Die Daten werden nach relevanten Prozesskenngrößen geordnet. Durch die Teilmodelle, die spezifische Aspekte der Prozessparameter abdecken, können die Vorhersagegenauigkeiten für Muster und Einflussfaktoren effektiver ausgewertet (engl.: Evaluation) werden. Die iterative Modellierung ermöglicht eine kontinuierliche Verbesserung und Anpassung der Modelle an sich ändernde Produktionsbedingungen. Infolgedessen wird eine effiziente Nutzung von Produktionsdaten zur Optimierung der Anlagentechnik und damit zur Steigerung der Gesamteffektivität in der Batteriezellproduktion eröffnet. Auf dieser Basis lautet die dritte Lösungshypothese:

Lösungshypothese 3: Die vorhandenen Produktionsdaten lassen sich in prozessspezifischen Teilmodellen organisieren, um eine iterative Modellierung der Daten durch maschinelles Lernen zu ermöglichen.

Anschließend erfolgt in einer dritten Phase die Integration der Teilmodelle in einen übergeordneten Optimierungsansatz. Dieser Schritt soll eine umfassende Verknüpfung der prozessspezifischen Modelle ermöglichen und legt den Grundstein für eine effiziente Prognose der Prozessparametern. Die sorgfältige Koordination dieser Teilmodelle schafft eine flexible und ganzheitliche Lösung für eine praxisnahe Integration (engl.: Deployment) der Modelle. Daraus ergibt sich die vierte Lösungshypothese:

Lösungshypothese 4: Die Integration der Teilmodelle in einen übergeordnete Optimierungsansatz ermöglicht eine flexible Anwendung von prozessspezifischen Teilmodellen und effiziente Prognose von Prozessparametern.

Zusammenfassend konzentriert sich der Lösungsansatz auf die systematische Bewältigung der komplexen Herausforderungen und Ursache-Wirkzusammenhänge in der Batteriezellproduktion. Die Problemstellung ist gekennzeichnet durch die Einstellung von Prozessparametern und wird durch ein datenbasiertes Vorgehensmodell strukturiert. Die Lösungshypothesen betonen die Bedeutung der Datenanalyse, Modellierung und schließlich der Integration in einen übergeordneten Optimierungsansatz. Der methodische Ansatz strebt eine praxisnahe Lösung an, um die Auswirkungen auf Ausschussraten zu minimieren und die Anlageneffektivität in der Batteriezellproduktion zu maximieren.

4 Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung

Methodology for the optimization of parameter setting

In diesem Kapitel wird die Methode zur Optimierung der Parametereinstellung durch Integration von Modellen des maschinellen Lernens beschrieben. Zunächst werden die Vorgehensweise und allgemeine Ablaufstruktur vorgestellt (Abschnitt 4.2). Daraufhin werden alle Details der Teilmodelle und Abläufe erläutert (Abschnitt 4.3). Abschließend erfolgt ein Zwischenfazit der vorgestellten Methode in Hinblick auf die zuvor definierten Forschungsfragen der Arbeit (Abschnitt 4.4).

4.1 Grundlagen der Methodikgestaltung

Principles of methodology design

Die Methodikgestaltung ermöglicht eine strukturierte und systematische Bearbeitung komplexer wissenschaftlicher und technischer Probleme, indem theoretische Modelle und systematische Ansätze kombiniert werden. Dieses Kapitel führt in die theoretischen Grundlagen der Methodikgestaltung ein, wobei sowohl die allgemeine Modelltheorie als auch die Prinzipien der Systemtechnik (Abschnitt 4.1.1) behandelt werden. Anschließend wird die Strukturierung einer Methodik (Abschnitt 4.1.2) detailliert erläutert.

4.1.1 Modelltheorie und Systemtechnik

Model theory and systems engineering

Ein Modell ist eine vereinfachte Darstellung eines komplexen Systems, die zur Veranschaulichung abstrakter Gegenstandsbereiche und theoretischer Zusammenhänge dient. Modelle bestehen aus heuristischen Analogien und Metaphern sowie ontologischen Festlegungen. Heuristische Analogien und Metaphern ermöglichen die Entwicklung neuer Lösungsansätze und die Strukturierung komplexer Phänomene. Ontologische Festlegungen sind grundlegende Annahmen über das zu betrachtende System, die als Ausgangspunkt für die Anwendung der Theorie dienen und nicht aus dieser abgeleitet werden.²²²

Modelle abstrahieren spezifische Eigenschaften und Verhaltensweisen eines Systems, um einen realen Sachverhalt darzustellen. Die Modelltheorie bildet die Grundlage für die Strukturierung und Analyse komplexer Systeme.²²³ Modelle verwenden physikalische, geometrische und prozessuale Idealisierungen, um charakteristische Eigenschaften realer Probleme zu abstrahieren. Sie können sowohl materielle als auch immaterielle Konstrukte umfassen. Die Modelle umfassen sowohl materielle als auch immaterielle Konstrukte, um eine problemspezifische Fragestellung darzustellen. Durch die Abstraktion wird der Problemlösungsprozess von der Realitätsebene auf eine abstrakte Modellebene verlagert (vgl. Abbildung 43).²²⁴

²²² Vgl. Kornmesser et al. (Wissenschaftstheorie) 2020, S. 87f.

²²³ Vgl. Patzak (Systemtechnik) 1982, S. 307.

²²⁴ Vgl. Vajna et al. (Grundlagen der Modellbildung) 2018, S. 141f.

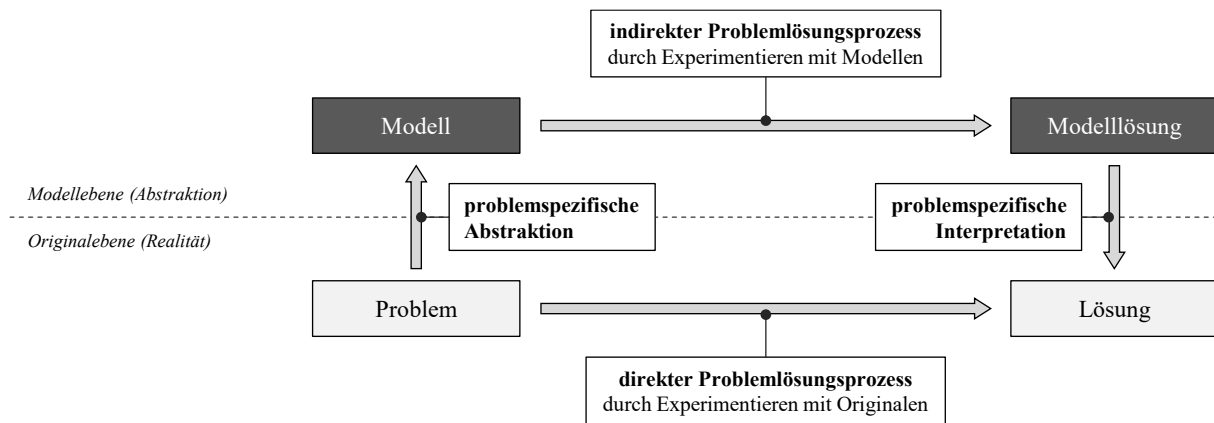


Abbildung 43: Phasen der Modellbildung²²⁵

Es werden verschiedene Arten von Modellen unterschieden. Beschreibungsmodelle dienen der sachlichen Darstellung von Phänomenen und deren Zustände. Sie bieten eine strukturierte Sicht auf die Bestandteile eines Systems, ohne dabei direkte Schlussfolgerungen zu liefern oder tiefere Kausalzusammenhänge zu untersuchen. Erklärungsmodelle hingegen geben Auskunft darüber, warum bestimmte Zustände vorhanden sind. Sie basieren auf logisch induktiven Schritten und formulieren allgemeingültige Zusammenhänge, um ein besseres Verständnis für die betrachteten Ursache-Wirkungs-Beziehungen innerhalb eines Systems zu erreichen. Vorhersagemodelle zielen darauf ab, zukünftige Zustände oder Verhaltensweisen vorherzusagen, indem sie Eintrittswahrscheinlichkeiten für zukünftige Systemzustände basierend auf deduktiven Hypothesen berechnen. Entscheidungsmodelle fokussieren sich auf die Ableitung optimaler Handlungsalternativen basierend auf definierten Zielsetzungen, Randbedingungen und Entscheidungsvariablen. Sie dienen dazu, praxisorientierte Maßnahmen zur Beeinflussung der Realität zu entwickeln und einen anzustrebenden Zustand zu beschreiben.²²⁶

Modelle bieten eine kontrollierte Umgebung für das Testen von Hypothesen und die Überprüfung von Entscheidungen. Der allgemeine Modellbegriff umfasst drei wesentliche Merkmale. Das Abildungsmerkmal legt fest, dass Modelle stets Abbildungen oder Repräsentationen von etwas sind, sei es natürlichen oder künstlichen Ursprungs. Diese Abbildungen können sowohl aus der physischen Realität als auch aus der theoretischen Konzepten stammen, die bestimmte Gestaltungen attributiver Systeme annehmen. Das Verkürzungsmerkmal besagt, dass Modelle im Allgemeinen nicht alle Attribute des repräsentierten Originals erfassen, sondern lediglich diejenigen, die für das Modell relevant erscheinen. Die Auswahl der zu repräsentierenden Attribute kann dabei von einer regellosen Auswahl bis hin zu spezifischen Zweckbestimmungen variieren. Das pragmatische Merkmal betont, dass Modelle nicht automatisch eindeutig ihrer Repräsentation zugeordnet sind. Vielmehr erfüllen sie ihre Funktionen für bestimmte Systeme, innerhalb spezifischer Zeitintervalle und in Bezug auf bestimmte gedankliche oder tatsächliche Operationen.²²⁷

²²⁵ Vgl. Vajna et al. (Grundlagen der Modellbildung) 2018, S. 142.

²²⁶ Vgl. Patzak (Systemtechnik) 1982, S. 313ff.

²²⁷ Vgl. Stachowiak (Allgemeine Modelltheorie) 1973, S. 131ff.

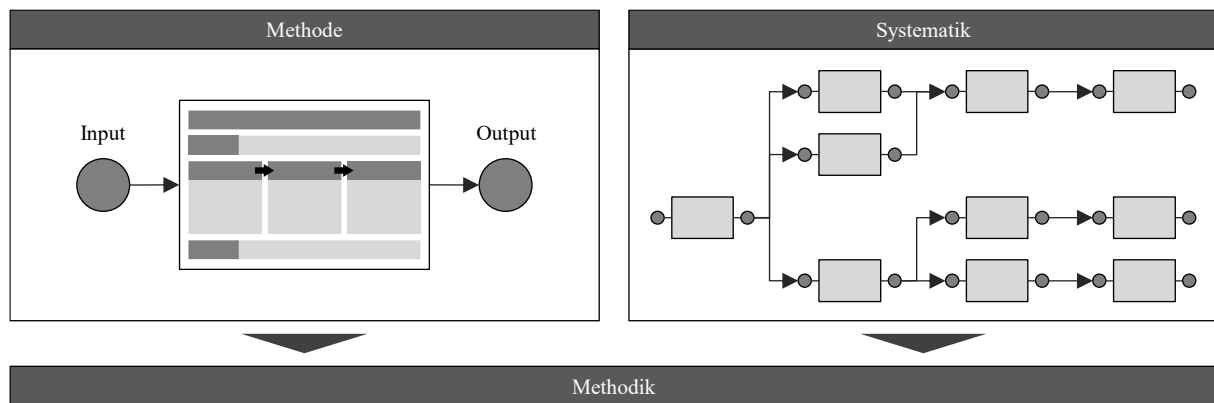


Abbildung 45: Aufbau einer Methodik als strukturiertes Vorgehensmodell²³¹

Die systematische Strukturierung von Methoden und die Integration einer Systematik sind wesentliche Elemente einer Methodik (vgl. Abbildung 45). Die Systematik einer Methodik legt die planmäßige Abfolge der einzelnen Methoden fest und definiert die sachlichen und zeitlichen Zusammenhänge. Diese Strukturierung gewährleistet eine konsistente und effiziente Umsetzung der Methodik. Ein strukturiertes Vorgehensmodell definiert die Abfolge und Verknüpfung der einzelnen Schritte und stellt sicher, dass die Methodik klar und nachvollziehbar bleibt. Ein Daraus ergibt sich einerseits die Aufbaustruktur, die die sachlichen Zusammenhänge und Verknüpfung darstellt, und andererseits die Ablaufstruktur, die die zeitliche Abfolge der Methodik repräsentiert. Diese Strukturierung erleichtert die Planung und Durchführung der Lösungsfindung und sorgt für eine konsistente und effiziente Umsetzung der Methodik. Durch die Berücksichtigung spezifischer Problemstellungen und die Anpassung der Methodik an die jeweiligen Bedingungen kann eine optimale Lösung erreicht werden. Ein klar strukturiertes Vorgehen und eine systematische Methodik sind unerlässlich, um komplexe Probleme effizient und effektiv zu lösen. Die Kombination von zielgerichteten Methoden und einer planmäßigen Abfolge gewährleistet eine konsistente und reproduzierbare Umsetzung der Methodik.^{232,233}

Bei der Strukturierung von Methodiken für Datenprojekte sind neben den theoretischen Grundlagen der Modelltheorie und Systemtechnik spezifische methodische Prinzipien entscheidend. Neben einem iterativen Ansatz ist die Einbindung von Feedbackschleifen essenziell, um direkte Rückmeldungen aus dem Anwendungsgebiet zu berücksichtigen. Agilität spielt eine zentrale Rolle, um flexibel auf Veränderungen der Anforderungen oder Problemlösung zu reagieren. Zudem sollten Unsicherheiten und Risiken berücksichtigt werden, indem die Methodik Mechanismen zur Identifizierung und Bewältigung dieser Aspekte beinhaltet. Darüberhinaus muss eine Grundlage geschaffen, um konsistent in Bezug auf Terminologie und Durchführung der Methodik zu bleiben. Eine integrale Methodik für datenwissenschaftliche Projekte erfordert daher eine umfassende Berücksichtigung von Projekt-, Team- und Informationsmanagement. Sie muss die spezifischen Bedürfnisse des Projekts adressieren und die Generierung von

²³¹ Vgl. Kraus (Anwendungsorientierte Methodik zur frühzeitigen Integration datenbasierter Ansätze) 2023, S. 117.

²³² Vgl. Patzak (Systemtechnik) 1982, S. 39ff.

²³³ Vgl. Bruns (Systemtechnik) 1991, S. 46ff.

Erkenntnissen aus Daten fördern. Die Methodik sollte klare Prozesse für Projektziele, Kommunikation von Expertenteams und die Verwaltung von Daten- und Informationsflüssen bieten. Dies umfasst auch die Umwandlung von implizitem Wissen in explizites Wissen und die Unterstützung bei Entscheidungsprozessen.²³⁴

4.2 Allgemeine Vorgehensweise und Ablaufstruktur

Overall approach and process structure

Das angestrebte Vorgehen basiert auf der Ableitung des methodischen Lösungsansatzes (vgl. Abschnitt 3.4) und soll es ermöglichen, die Parameter für eine beliebige Auswahl von Prozessen auf der Grundlage der vorläufigen Daten des Produktionsanlaufs in optimaler Weise einzustellen und dadurch eine beschleunigte Anlaufphase zu realisieren. Das Vorgehen stützt sich auf die Phasen bestehender Ansätze zur Durchführung von Datenanalyseprojekten. In dieser Arbeit wird das Vorgehen als übergeordneter Rahmen betrachtet und in drei Phasen unterteilt.

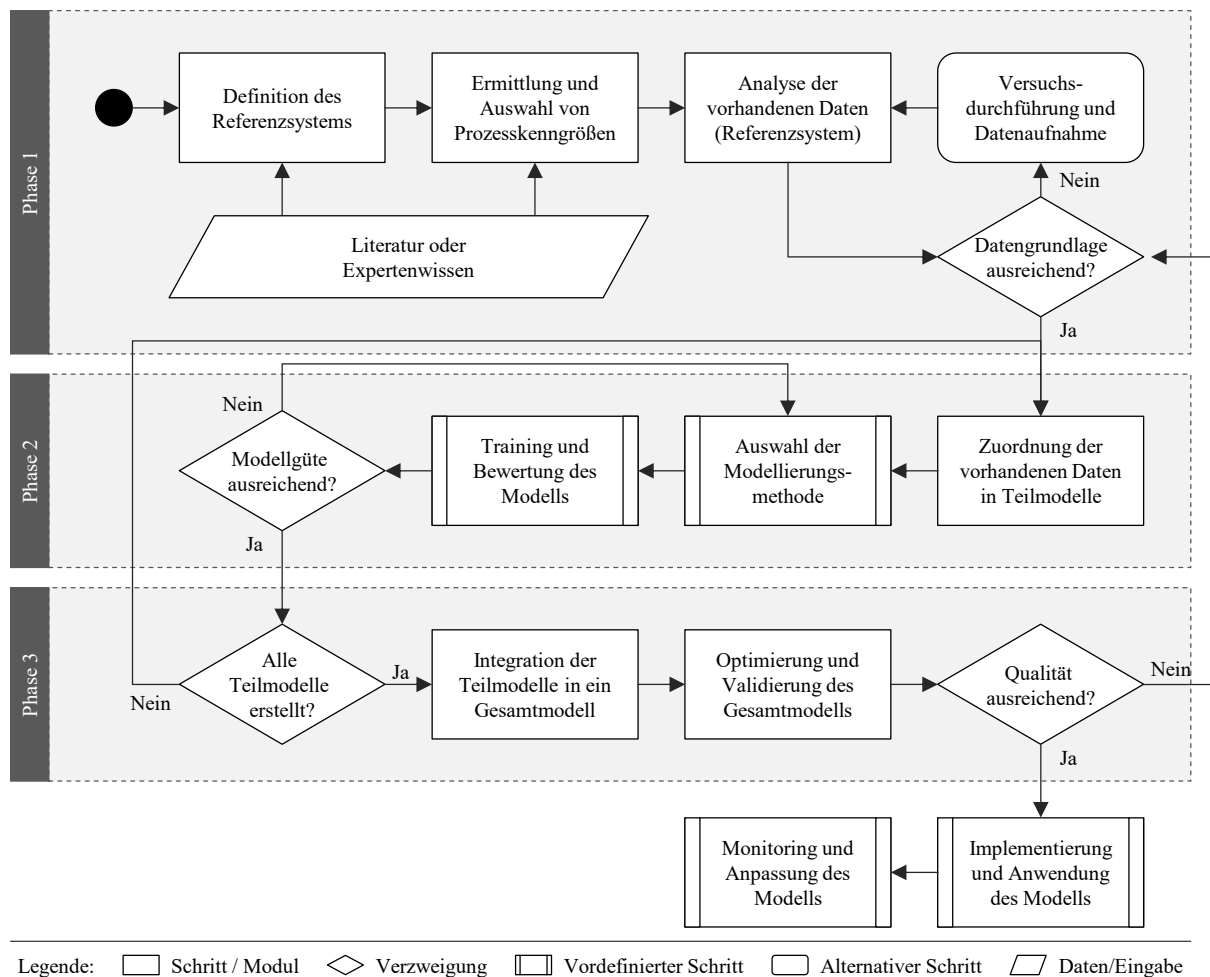


Abbildung 46: Ansatz zur Modellintegration für die Optimierung der Parametereinstellung

²³⁴ Vgl. Martinez et al. (Data Science Methodologies) 2021, S. 3ff.

Nebenprozessen zusammen und wird in der Regel vom Anwender festgelegt. Zur Unterstützung kann die konzipierte Matrix zur Bestimmung der Nebenprozesse mit Einfluss auf den Hauptprozessschritt in Abbildung 48 herangezogen werden. In dieser werden die identifizierten Prozessschritte im oberen Teil aufgeführt. Analog werden im linken Bereich alle Prozessschritte entsprechend ihrer Anlagen aufgeführt. Daraufhin werden potenzielle Kenngrößen mit Einfluss auf nachfolgende Prozessschritte identifiziert und dokumentiert. Hierbei sollte sich auf wesentliche Einflüsse beschränkt werden, beispielsweise erzeugte Zwischenprodukte oder Charakteristika hinsichtlich der Produktqualität und -leistung. Für eine vollständige Sicht ist die Integration von anderen Abteilungen sowie deren Fachwissen und Erkenntnisse wie zum Beispiel der Prozessplanung, dem Qualitätsmanagement und der Produktentwicklung sinnvoll.

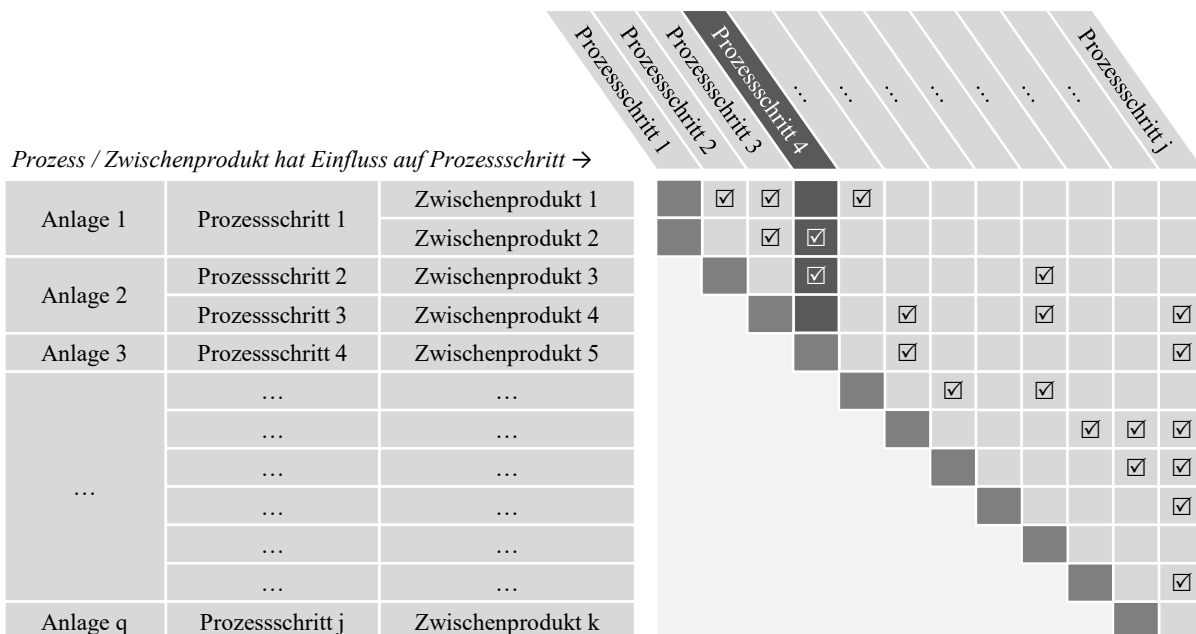


Abbildung 48: Bestimmung der Nebenprozesse mit Einfluss auf den Hauptprozessschritt

Im gezeigten Beispiel wurde Prozessschritt 4 als Hauptprozess definiert. Dabei haben Kenngrößen der Prozessschritte 1 und 2 Einfluss auf den Hauptprozess (bspw. durch Eigenschaften der Zwischenprodukte wie Viskosität, Schichtdicke, Porosität) und wurden daher als Nebenprozesse identifiziert. Diese Prozesse werden somit als gemeinsames Referenzsystem definiert und für die nachfolgende Detaillierung fokussiert.

Ermittlung und Auswahl der Prozesskenngrößen

Für eine differenzierte Betrachtung und den Aufbau des Systemverständnisses wird anschließend ein Parameterdiagramm zur Definition des Referenzsystems (Abbildung 49) genutzt.²³⁵ Hierbei werden die Eingangsgrößen *E*, Störgrößen *S*, Lenkungsgrößen *L* und Ausgangsgrößen *A* für sowohl den Hauptprozess *HP* als auch den Nebenprozess *NP* aufgeführt.

²³⁵ Vgl. Cumming (Innovation overview and future challenges) 1998.

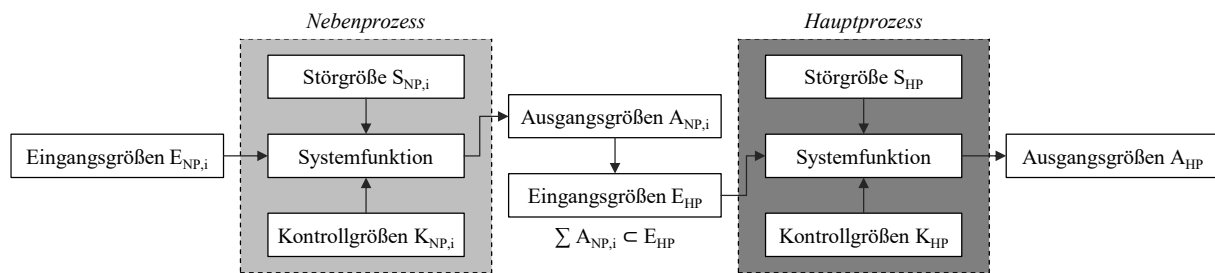


Abbildung 49: Parameterdiagramm für definierte Haupt- und Nebenprozesse

Die Eingangsgrößen umfassen alle Stoff-, Energie- und Signalgrößen des Prozesses, die individuell geändert oder durch den Maschinenbediener gezielt eingestellt werden können. Während Lenkungsgrößen alle Konstruktionsparameter und physikalisch-technischen Merkmale (z.B. von Werkzeugen oder Einzelkomponenten) umfassen, beschreiben Störgrößen alle unkontrollierbaren Einwirkungen und Umwelteinflüsse auf die Prozesse. Die Ausgangsgrößen umfassen alle gewünschten, aber auch ungewünschten Ergebnisse des Prozesses.²³⁶ Durch die Beschreibung der Haupt- und Nebenprozesse innerhalb eines Parameterdiagramms lassen sich die Zusammenhänge zwischen den Eingangsgrößen und Ausgangsgrößen prozessübergreifend darstellen. Wie bereits in vorherigen Abschnitt beschrieben, ist es möglich, dass mehrere Nebenprozesse einen Einfluss auf den Hauptprozess haben.²³⁷

Tabelle 2: Auflistung von Prozesskenngrößen mit beispielhaften Ausprägungen

Prozess	Prozesskenngröße	Einheit	Wertebereich	Gefordert?	Relevant?
Hauptprozess	Eingangsgröße 1	mPa·s	[0.00, 7500.00]	☐	☒
	Eingangsgröße 2	U/min	[50, 500]	☐	☒
	Eingangsgröße 3	m/min	[80.0, 90.0]	☒	☒
	Eingangsgröße 4	...	...	☐	☐
	...	...	...	...	...
	Ausgangsgröße 1	/	ok, nok	☒	☒
	Ausgangsgröße 2	µm	[170.0, 180.0]	☒	☒
	...	...	...	...	...
Nebenprozess 1	Eingangsgröße 1	min	[50.00, 60.00]	☐	☒
	Eingangsgröße 2	/	hoch, mittel, niedrig	☐	☐
	...	...	...	...	...
	Ausgangsgröße 1	mN/m	[500, 2000]	☐	☒
	Ausgangsgröße 2	µm	[50, 80]	☐	☐
	...	...	...	...	...
Nebenprozess 2	Eingangsgröße 1	%	[0.05, 3.00]	☐	☐
	Eingangsgröße 2	%	[90.00, 95.00]	☒	☒
	...	...	...	...	...
	Ausgangsgröße 1	mPas	[0.00, 7500.00]	☐	☒
	...	...	...	...	...

²³⁶ Vgl. Siebertz et al. (Varianten der statistischen Versuchsplanung) 2017, S. 148ff.

²³⁷ Vgl. Fritzsche (Erstellung von Parameter-Diagrammen in der Automobilindustrie) 2006, S. 496.

Um eine möglichst umfangreiche Liste aller Prozesskenngrößen zu erhalten, erfolgt die Ermittlung und Auswahl der Prozesskenngrößen systematisch durch eine qualitative Systembeschreibung anhand von Expertenwissen und Erkenntnissen aus der Literatur^{238,239,240}. Hierbei werden lediglich die Eingangs- und Ausgangsgrößen der Prozesse fokussiert, da diese mit Hilfe der Methoden des maschinellen Lernens optimiert werden können. Das Ziel ist es, die wesentlichen Prozesskenngrößen aus der Menge aller Variablen zu identifizieren und zu dokumentieren.^{241,242} Dabei können bereits vordefinierte oder mögliche Wertebereiche (z.B. Messgenauigkeiten, Auswahlmöglichkeiten, etc.) aufgenommen werden.

Die Prozesskenngrößen können dabei sowohl diskrete als auch kontinuierliche Ausprägungen haben (vgl. Tabelle 2). Die Auswahl der Prozesskenngrößen erfolgt basierend auf dem übergeordneten Optimierungsziel, d.h. den Einstellungsparametern der Anlage (Eingangsgrößen), die während des Produktionsanlaufs in Hinblick auf die Leistungs- und Qualitätsparametern (Ausgangsgrößen) optimiert werden sollen. In diesem Schritt sollten insbesondere definierten Prozesskenngrößen berücksichtigt werden. Einerseits kann die anlagenseitig einstellbare Prozesskenngröße wie die Bahngeschwindigkeit eines Rolle-zu-Rolle Prozesses (z.B. Beschichten) bereits durch die Produktionsplanung vordefiniert (z.B. zwischen 80-90 m/min) sein, um den geforderten Durchsatz zu gewährleisten. Andererseits kann die angestrebte Qualitätskenngröße wie die Nassschichtdicke der Beschichtung für einen Toleranzbereich von 170-180 µm definiert sein, wobei jeweils nur einwandfreie Beschichtungen (d.h. eine Klassifizierung als „ok“) akzeptiert werden. Somit ergibt sich für das definierte Referenzsystem die folgende Darstellung der Prozesskenngrößen analog zum Parameterdiagramm (Abbildung 50). Durch diese Darstellung wird ersichtlich, welche Ausgangsgrößen der Nebenprozess als Eingangsgrößen für den Hauptprozess herangezogen und welche nicht weiter berücksichtigt werden.

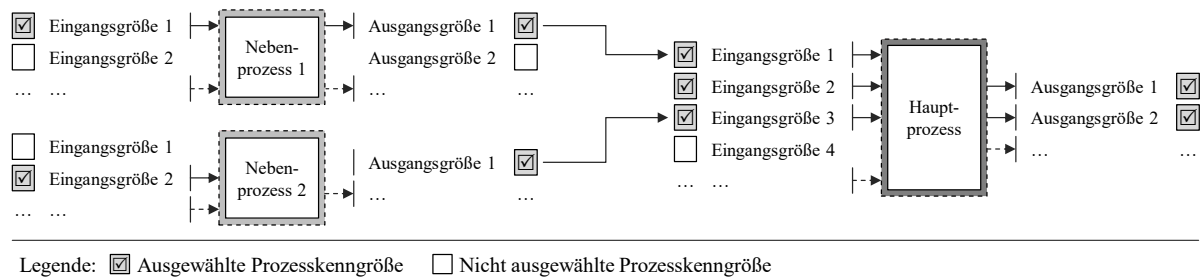


Abbildung 50: Auswahl und Verknüpfung der Prozesskenngrößen

Anhand des Beispiels wird deutlich, dass diverse Ausgangsgrößen aus den Nebenprozessen gleichzeitig als Eingangsgröße für den Hauptprozess fungieren können. Ein mögliches Beispiel aus der Batteriezellproduktion ist die Verarbeitung der Aktivmaterialien zu einem Slurry. Das

²³⁸ Vgl. Fritzsche (Erstellung von Parameter-Diagrammen in der Automobilindustrie) 2006, S. 493.

²³⁹ Vgl. Werdich (FMEA – Einführung und Moderation) 2011, S. 190f.

²⁴⁰ Vgl. Wirth et al. (CRISP-DM: Towards a standard process model for data mining) 2000.

²⁴¹ Eine beispielhafte Auswahl der zu betrachtenden Stellgrößen wurde durch Fuhrmann (2018) für die Prädiktion eines beispielhaften FDM-Prozesses durchgeführt. Hierbei ist ausgehend von der Beschreibung des FDM-Prozesses eine Definition von potenziellen Stell- und Zielgrößen erfolgt. Anschließend wurden die finale Auswahl der relevanten Stellgrößen getroffen und technisch erläutert und begründet.

²⁴² Vgl. Fuhrmann (Qualitätsorientierte modellbasierte Prozessparameteroptimierung für das Fused Deposition Modeling) 2018, S. 53 ff.

Slurry dient nach dem Mischen wiederum als Eingangsgröße für das Beschichten und das darauffolgende Trocknen. Darüber hinaus verfügt der Hauptprozessschritt in der Regel über weitere prozessinhärente Eingangsgrößen, wobei jeweils nur die ausgewählten Kenngrößen in die Betrachtung einfließen. Geforderte Ausgangsgrößen aus den Nebenprozessen, welche nicht als Eingangsgröße für den Hauptprozess in Frage kommen, können dementsprechend vernachlässigt werden.

Analyse der vorhandenen Daten

Nachdem die Prozesskenngrößen festgelegt wurden, erfolgt die Überprüfung der verfügbaren Datengrundlage, um die vorhandenen Daten für das zuvor definierte Referenzsystem und die ausgewählten Prozesskenngrößen zu analysieren.

In der Produktion werden eine Vielzahl von Daten über direkte und indirekte Messtechnologien erfasst wie z.B. Prozessmessdaten auf Anlagenebene, metrologische Daten auf Prozessebene und indirekte zusätzliche Qualitätsmessdaten. Bei Daten aus der Anlagen- und Prozessebene handelt es sich in der Regel um Daten aus hierarchisch strukturierten Fertigungssystemen, die strukturierte Zeitreihendaten mit regelmäßiger Abfrage im (Milli-)Sekundenbereich erzeugen. Demgegenüber kann es sich bei Qualitätsmessdaten um sowohl strukturierte Daten aus Eigenschafts- und Qualitätsprüfungen als auch unstrukturierte Daten aus Formularen, Bildern, Videos oder weiteren Formaten halten. Sie dienen beispielsweise zur Identifizierung von Produkt- oder Komponentenfehlern oder zur ergänzenden Analyse von Informationen, z.B. Stichproben oder Laboruntersuchungen. Die heterogene Natur dieser Daten muss berücksichtigt und ihre Struktur formalisiert werden, um die Datengrundlage zu analysieren.^{243,244}

In der Praxis können Datensätze verschiedene Diskrepanzen aufweisen (z.B. unvollständige, überflüssige oder inkonsistente Informationen). Die Aufbereitung eines Datensatzes, der für die Modellerstellung geeignet ist, erfolgt in der Regel anhand der folgenden Aspekte: Datenquelle, Datenübertragung, Datenumgebung sowie Datenprozessierung.²⁴⁵

Die Handhabung strukturierter Datenattribute ist weniger anspruchsvoll. Bei strukturierten oder auch semi-strukturierten Daten handelt es sich um Informationen, die einem vordefinierten Datenmodell entsprechen. Typische Datenformate sind Comma Separated Values (.csv), Java Script Object Notation (.json), Extensible Markup Language (.xml), Hyper Text Markup Language (.html) und Structured Query Language (.sql).²⁴⁶ Demgegenüber stehen unstrukturierten Daten, die entweder keinem vordefinierten Datenmodell folgen oder nicht auf eine vordefinierte Weise organisiert sind. Typische Beispiele sind Textdateien (z.B. Dokumente, E-Mails, PowerPoint), maschinengenerierte Daten (z.B. Sensordaten, Anlagenprotokolle) oder digitale Medien (z.B. Bilder, Video, Audio).²⁴⁷

²⁴³ Vgl. Ismail et al. (Manufacturing process data analysis pipelines: a requirements analysis and survey) 2019, S. 9f.

²⁴⁴ Vgl. Qin (Process data analytics in the era of big data) 2014, S. 3093ff.

²⁴⁵ Vgl. Karamitsos et al. (Applying DevOps Practices of Continuous Automation for Machine Learning) 2020, S. 6ff.

²⁴⁶ Vgl. Sarkar et al. (Practical Machine Learning with Python) 2018, S. 121ff.

²⁴⁷ Vgl. Eberendu (Unstructured Data: an overview of the data of Big Data) 2016, S. 49f.

Die Herausforderung bei unstrukturierten Daten besteht in der Extraktion nützlicher Informationen oder Merkmale und der Transformation der Informationen in eine strukturierte Darstellung, sodass sie für die Modellierung genutzt werden können. Für die Verarbeitung und Merkmalsextraktion von unstrukturierten Daten existieren diverse Modellierungsansätze, welche in Abhängigkeit von der Zielsetzung und dem Datentyp als Werkzeug²⁴⁸ herangezogen werden können. Jedes Problem oder Modell des maschinellen Lernens erfordert spezifische Attribute, sodass es keine einheitliche Lösung für alle Anwendungsfälle gibt. Jedes Attribut für sich ist ein inhärentes Merkmal dieser Daten. Aus diesen inhärenten Merkmalen können wiederum zusätzliche Merkmale abgeleitet werden. Folglich erfordert der folgende Schritt die Zuordnung von Merkmalen zu Teilmodellen, um die optimale Kombination von Merkmalen und Attributen zur Erstellung des endgültigen Modells zu erhalten. Die Herausforderung liegt in der Komplexität im Umgang mit verschiedenen Datentypen und Variablen.²⁴⁹

Die Daten sind stets von einem neutralen Standpunkt aus zu untersuchen, auch wenn die Zielsetzungen der Modellierung bei der Analyse der Rohdaten berücksichtigt werden können. Die Daten sind erst dann als geeignet zu betrachten, wenn eine grundlegende Plausibilitätsprüfung stattgefunden hat. Dabei werden grundlegende Aussagen über die Datenqualität, d.h. die Repräsentativität, den Informationsgehalt, und das Vorhandensein oder Fehlen von Daten, getroffen. Die Datenqualität beschreibt, inwiefern die Daten für den jeweiligen Anwendungsfall geeignet sind. Allgemein gilt, dass das Ergebnis eines Modellierungsproblems nicht besser sein kann als die Qualität der Eingangsdaten. Die Datenqualität wird anhand verschiedener Dimensionen bewertet:²⁵⁰

- **Genauigkeit:** Maß für die Übereinstimmung zwischen dem Datenwert und dem wahren Wert, welche durch fehlerhafte Einträge, Rauschen oder begrenzte Präzision bei Messungen beeinträchtigt wird. Insbesondere manuelle Eingaben führen zu Problemen in der Genauigkeit.
- **Vollständigkeit:** Maß für das Vorhandensein von Attributwerten und Datensätzen. Idealerweise ist jedem Attribut in einem Datensatz ein wohldefinierter Wert zugeordnet. Fehlende Werte können beispielsweise durch defekte Sensoren oder mangelnde Eingabe begründet sein. Ganze Datensätze können aufgrund technischer oder organisatorischer Probleme unvollständig sein, z.B. Änderungen am Datenbanksystem oder Speicherung unvollständiger Datensätzen.
- **Aktualität:** Maß für die Repräsentativität der verfügbaren Daten, um aktuelle Informationen zu liefern oder Vorhersagen treffen zu können. Dies ist besonders in dynamischen Modellierungsproblemen relevant, in denen veraltete Daten irreführend sein können.

²⁴⁸ Eine umfassende Übersicht zu Werkzeugen und Ansätzen für die Merkmalsextraktion (Feature Engineering) wurde durch Sarkar et al. (2018) für sowohl numerische und kategoriale Daten als auch Text-, Zeit- und Bilddateien im Kontext des angewandten maschinellen Lernens mit Python zusammengestellt und erläutert.

²⁴⁹ Vgl. Sarkar et al. (Practical Machine Learning with Python) 2018, S. 177ff.

²⁵⁰ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 33ff.

In Hinblick auf die Datenmodellierung umfasst die Analyse der Daten neben der Überprüfung der Datenqualität außerdem eine grundlegende Beschreibung der verschiedenen Datenattribute und die Durchführung einer explorativen Datenanalyse. Die Datenbeschreibung gibt Auskunft über die Daten, ihre Quelle und Umfang, ihre Attribute und ihre Beziehung zueinander. Sofern Besonderheiten oder Defizite in den bereitgestellten Daten festgestellt werden, sollten diese dokumentiert und während der Modellierung berücksichtigt werden. Bei der explorativen Datenanalyse werden die Daten im Detail untersucht. Dazu zählen Visualisierungen und Diagramme, Plots sowie deskriptive Statistiken, um die Datenattribute zu analysieren, Assoziationen und Korrelationen zu finden und eventuelle Engpässe in der Datenqualität zu erkennen.²⁵¹

Für die initiale Analyse von Datensätzen und für Diskussionen mit Domänen- und Fachexperten ist die grafische Darstellung von Daten eines der bedeutendsten Werkzeuge. Die Auswahl hängt von den Daten und der zu vermittelnden Information ab. Abbildung 51 zeigt einen Auszug wesentlicher Visualisierungsarten, welche in Abhängigkeit von der Art der Informationen, der Anzahl der Variablen und dem letztendlichen Zweck der Darstellung ausgewählt werden müssen.²⁵²

Art der Informationen	numerisch	kategorisch	relational	zeitlich	...	
Anzahl der Variablen	eine Variable	zwei Variablen		...	mehrere Variablen	
Zweck der Darstellung	Verteilung	Korrelation	Rangfolge	Entwicklung	Komposition	...

Auszug möglicher Visualisierungsarten

 Liniendiagramm

 Säulendiagramm

 Kreisdiagramm

 Treemap-Diagramm

 Netzdiagramm

 Streudiagramm

 Boxplot-Diagramm

 Blasendiagramm

 Histogramm

 Korrelationsmatrix

 Sankey-Diagramm

 Wasserfalldiagramm

 Chord-Diagramm

 Netzwerkdiagramm

 Flächenkartogramm

Abbildung 51: Morphologischer Kasten zur Auswahl möglicher Visualisierungsarten²⁵³

Nachfolgend werden gängige Ansätze und Visualisierungsarten der explorativen Datenanalyse vorgestellt, welche für die Anwendung und Validierung der Methodik genutzt werden. Sie ermöglichen versteckte Muster und potenzielle Erkenntnisse innerhalb der Daten zu identifizieren sowie ein besseres Verständnis für die Daten zu schaffen. In der Datenanalyse sind insbesondere Histogramme und Korrelationsmatrizen von zentraler Bedeutung. Histogramme bieten eine übersichtliche Visualisierung der Datenverteilung und ermöglichen die Bewertung von Zentralwert und Streuung. Eine Korrelationsmatrix ermöglicht, die Beziehungen zwischen Variablen zu analysieren.

²⁵¹ Vgl. Sarkar et al. (Practical Machine Learning with Python) 2018, S. 48f.

²⁵² Vgl. Draux (Visualization of Research Metrics) 2021, S. 365ff.

²⁵³ Vgl. Financial Times (Visual vocabulary - Designing with data) 2021.

Durch Histogramme lassen sich Abschätzungen zur Datenverteilung und Häufigkeiten ableiten. Dafür wird der Wertebereich $X^{(i)}$ jedes Merkmals i für die verfügbaren Datenpunkte in Intervalle m aufgeteilt und die Anzahl n aller Datenpunkte, deren Werte innerhalb der Intervalle liegen, aufsummiert.^{254,255}

$$n = \sum_{k=1}^m h_k(X^{(i)}, m) \quad (4.1)$$

$$\Delta x^{(i)} = \frac{\max\{X^{(i)}\} - \min\{X^{(i)}\}}{m} \quad (4.2)$$

$$\text{nach Sturges:} \quad m = \log_2(n) + 1 \quad (4.3)$$

$$\text{nach Scott:} \quad m = 3,49 \cdot s^{(i)} / \sqrt[3]{n} \quad (4.4)$$

$$\text{nach Freedman-Diaconis:} \quad m = 2 \cdot (Q_{75\%} - Q_{25\%}) / \sqrt[3]{n} \quad (4.5)$$

- $X^{(i)}$: Wertebereich für das Merkmal i
- $\Delta x^{(i)}$: Intervallbreite (Intervall gleicher Breite)
- $s^{(i)}$: Standardabweichung für das Merkmal i
- Q_p : Unteres Quartil ($p = 25\%$) und oberes Quartil ($p = 75\%$)
- m : Anzahl der Intervalle
- n : Stichprobengröße für das Merkmal i
- h_k : Häufigkeit der Werte für Intervall k

Für eine transparente Darstellung werden in der Regel Intervalle gleicher Breite gewählt. Für die Abschätzung einer geeigneten Anzahl der Intervalle existieren die drei grundlegenden Berechnungsregeln nach Sturges (4.3), nach Scott (4.4) und nach Freedman-Diaconis (4.5). Die bestmögliche Intervallanzahl hängt dabei immer von den Daten und ihrer Verteilung ab. In Abbildung 52 werden drei verschiedene Histogramme mit unterschiedlicher Intervallanzahl für eine Stichprobengröße von 1000 Datenpunkten aus einer Überlagerung von zwei Normalverteilungen mit den Mittelwerten 0 und 3 dargestellt. Hierbei wird deutlich, dass eine zu kleine Anzahl von Intervallen (links) irreführend oder eine zu große Anzahl von Intervallen (rechts) ineffizient und nicht mehr aussagekräftig sein kann.^{256,257}

²⁵⁴ Vgl. Runkler (Data Mining) 2010, S. 47f.

²⁵⁵ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 40ff.

²⁵⁶ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 40ff.

²⁵⁷ Vgl. Runkler (Data Mining) 2010, S. 47ff.

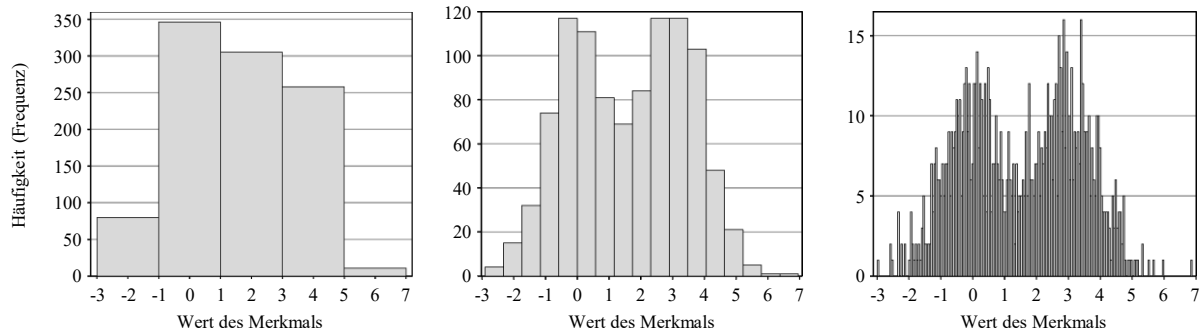


Abbildung 52: Histogramme mit unterschiedlicher Anzahl der Intervalle²⁵⁸

Die Darstellung von Daten in Histogrammen bietet die Möglichkeit, Ausreißer, Asymmetrien, bimodale Verteilungen, Anomalien und andere Eigenschaften der Datenverteilung zu erkennen sowie Untergruppen in den Daten zu untersuchen. Durch die experimentelle Feinabstimmung der Intervallgrößen können interessante Merkmale aus den Daten abgeleitet werden, was diesen Ansatz zu einer grundlegenden und zentralen Methode für die Datenanalyse macht.²⁵⁹

Um die Beziehungen zwischen verschiedenen Datenattributen und extrahierten Merkmalen zu verstehen, wird die Korrelationsanalyse genutzt. Mithilfe einer Korrelationsanalyse kann der mathematische Zusammenhang zwischen zwei statistisch verteilten Variablen beschrieben und durch den entsprechenden Korrelationskoeffizienten $r_{x,y} \in [-1,1]$ quantifiziert werden. Aus dieser dimensionslosen Kennzahl lassen sich sowohl die Richtung als auch die Stärke des Zusammenhangs ablesen. Dabei beschreibt der Wert $|r| = 1$ eine vollkommene Korrelation der Variablen, während bei dem Wert $r = 0$ keine Korrelation zwischen Variablen vorliegt. Der empirische Korrelationskoeffizient nach Pearson (Pearson Korrelation) beschreibt lineare Wechselwirkungen zwischen zwei normalverteilten Variablen und ist definiert als:²⁶⁰

$$r_{x,y} = \frac{\sum_{i=1}^{n_r} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_r} (x_i - \bar{x})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^{n_r} (y_i - \bar{y})^2}} \quad (4.6)$$

x_i, y_i : Werte der beiden Variablen x und y

$\bar{x}, \bar{y}$: Mittelwerte der beiden Variable x und y

n_r : Stichprobengröße

Während bei der Pearson-Korrelation lediglich lineare Korrelationen abgebildet werden, besteht die Möglichkeit funktionale, monotone Abhängigkeiten über den Rangkorrelationskoeffizient einer Variablen nach Spearman zu bestimmen.²⁶¹ Dazu werden alle Werte x_i aufsteigend

²⁵⁸ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 41f.

²⁵⁹ Vgl. Nuzzo (Histograms: A Useful Data Analysis Visualization) 2019, S. 312.

²⁶⁰ Vgl. Siebertz et al. (Statistische Versuchsplanung) 2017, S. 381ff.

²⁶¹ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 61.

sortiert und anhand ihrer Rangzahl R_i^x innerhalb der Datenreihe ausgedrückt. Wenn zwei oder mehr Variablenausprägungen denselben Wert aufweisen, wird ihnen die gleiche Rangzahl zugewiesen, die sich aus dem Mittelwert der anfänglichen Rangzahlen ergibt. Dadurch ist die Rangkorrelation robuster gegenüber Ausreißern. Der Rangkorrelationskoeffizient $r_{x,y} \in [-1,1]$ nach Spearman (Spearman-Korrelation) ergibt sich durch:²⁶²

$$r_{x,y} = \frac{\sum_{i=1}^{n_r} (R_{x_i} - \bar{R}_x)(R_{y_i} - \bar{R}_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_r} (R_{x_i} - \bar{R}_x)^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^{n_r} (R_{y_i} - \bar{R}_y)^2}} = 1 - \frac{6 \cdot \sum_{i=1}^{n_r} (R_{x_i} - R_{y_i})^2}{n_r \cdot (n_r^2 - 1)} \quad (4.7)$$

R_{x_i}, R_{y_i} : Rangzahl der Variablenwerte x_i und y_i

$\bar{R}_x, \bar{R}_y$: Mittelwerte der Rangzahl der Variablen x und y

n_r : Stichprobengröße

Um die Ergebnisse einer Korrelationsanalyse einheitlich interpretieren zu können, existieren einheitliche Einordnungen für die Bedeutung und Interpretation der Wertebereiche eines Korrelationskoeffizienten (vgl. Tabelle 3).

Tabelle 3: Interpretation der Pearson-Korrelationskoeffizienten²⁶³

Interpretation	Geringe Korrelation	Moderate Korrelation	Starke Korrelation
Pearson-Korrelation	$ r_{x,y} \geq 0,10$	$ r_{x,y} \geq 0,30$	$ r_{x,y} \geq 0,50$
Spearman-Korrelation	$ r_{x,y} \geq 0,10$	$ r_{x,y} \geq 0,30$	$ r_{x,y} \geq 0,50$

Die Ergebnisse einer Korrelationsanalyse von mehreren Merkmalen (Datenattributen und Variablen) werden in der Regel in einer Korrelationsmatrix dargestellt. Korrelationen können anhand eines Farbgradienten visualisiert werden.²⁶⁴

Dabei ist zu beachten, dass Korrelationen lediglich Aussagen über einen mathematischen Zusammenhang ermöglichen, jedoch keine Rückschlüsse auf einen kausalen Zusammenhang zulassen.²⁶⁵ Sofern die Datengrundlage ausreichend ist, kann mit der nächsten Phase des Vorgehens fortgeführt werden. Sollten allerdings nicht genügend Daten vorliegen, kann alternativ eine Versuchsdurchführung vorgesehen werden, um die notwendigen Daten aufzunehmen. Dabei sollten gängige Ansätze der statistischen Versuchsplanung und Modellauswahlberücksichtigt werden.^{266,267}

²⁶² Vgl. Siebertz et al. (Statistische Versuchsplanung) 2017, S. 385ff.

²⁶³ Vgl. Cohen et al. (Research methods in education) 2018, S. 746.

²⁶⁴ Vgl. Sarkar et al. (Practical Machine Learning with Python) 2018, S. 314.

²⁶⁵ Vgl. Runkler (Data Mining) 2010, S. 59.

²⁶⁶ Vgl. Siebertz et al. (Varianten der statistischen Versuchsplanung) 2017.

²⁶⁷ Vgl. Toutenburg (Versuchsplanung und Modellwahl) 1994.

4.3.2 Phase 2: Modellzuordnung und Datenmodellierung

Phase 2: Model assignment and data modelling

Die zweite Phase umfasst die Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle sowie die anschließende Datenvorbereitung, Modellierung, Training und Bewertung der jeweiligen Modelle.

Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle

Vor der Modellierung der Daten erfolgt zunächst die Zuordnung der vorhandenen Daten und extrahierten Merkmale in Teilmodelle. Dabei hängt die Anzahl der Teilmodelle von der zugrundeliegenden Modellierungsaufgabe und der dazugehörigen Datengrundlage ab. Das zentrale Ziel besteht darin, die übergeordnete Modellierungsaufgabe entsprechend der Eingangs- und Ausgangsgrößen in Teilaufgaben herunterzubrechen.²⁶⁸ Insbesondere bei komplexen Datentypen wie Texten, Bildern oder anderen digitalen Medien werden Teilmodelle benötigt, um verarbeitbare Merkmale zu extrahieren (z.B. Graustufen einer Bildaufnahme) oder die Dimensionalität der Daten zu reduzieren (z.B. die Darstellung von einzelnen Messpunkten in einer Messkurve).²⁶⁹

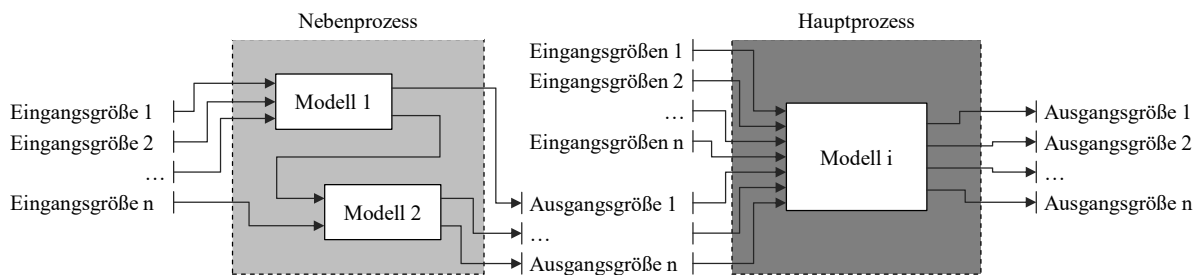


Abbildung 53: Zuordnung der identifizierten Prozesskenngrößen zu Teilmodellen

In Abbildung 53 wird eine exemplarische Zuordnung der identifizierten Prozesskenngrößen zu mehreren einzelnen Teilmodellen des maschinellen Lernens dargestellt. Dafür wird die Zuordnung der Prozesskenngrößen anhand des Parameterdiagramms detailliert, wobei entsprechende Teilmodelle ergänzt wurden. Die Teilmodelle dienen dazu, einerseits die Ausgangsgrößen der Nebenprozesse zu modellieren und andererseits die unstrukturierten Eingangsgrößen des Hauptprozesses zu operationalisieren. Es ist darauf zu achten, dass die Eingangsgrößen weiterhin als Prozesskenngrößen verstanden werden, die individuell geändert oder durch den Maschinenbediener gezielt eingestellt werden können, während die Ausgangsgrößen alle Prozesskenngrößen umfasst, die als Ergebnis eines Prozesses resultieren. Bei den Prozesskenngrößen können wie zuvor beschrieben sowohl strukturierte als auch unstrukturierte Daten als Grundlage herangezogen werden, d.h. Kombinationen aus Materialdaten (.pdf), Bildaufnahmen einer Oberflächen Inspektion (.jpg) sowie Prozessdaten (.csv), welche in Feld- und Steuerungsebene der Produktion aufgenommen werden.

²⁶⁸ Vgl. Wirth et al. (CRISP-DM: Towards a standard process model for data mining) 2000.

²⁶⁹ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 134f.

Bei der Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle steht im Fokus, repräsentative Merkmale und Attribute aus der Datengrundlage für die Eingangs- und Ausgangsgrößen zu abstrahieren. Insbesondere Bilddaten müssen durch ein entsprechendes Teilmodell operationalisiert werden. Dies kann beispielsweise anhand eines Clustering der Bilder aus der Datengrundlage in verschiedene Defekttypen oder Klassen erfolgen. Eine weitere Verwendung von Teilmodellen ist die Darstellung von Messkurven (z.B. Viskositätsfließkurven, Lade- und Entladekurven) anhand ihrer Kurvenparameter. Für einen linearen Zusammenhang können somit die einzelnen Messpunkte mit Hilfe einer Regression durch die Steigung und den Achsenabschnitt abgebildet werden. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Einbindung von Teilmodellen für die Operationalisierung unstrukturierter Daten oder für die Regression physikalischer Kausalitäten genutzt werden kann, wobei diese sich weitestgehend auf Zwischenprodukte entkoppelter Prozesse beziehen.

Während der Zuordnung der Daten in Teilmodelle können bereits mögliche Ansätze identifiziert werden, die für die dazugehörige Modellierungsaufgabe in Betracht gezogen werden. Die Datentransformation stellt eine komplexe Aufgabe in der Datenaufbereitung dar.²⁷⁰

Anschließend erfolgt neben der bereits durchgeführten Datenauswahl und Datenkonstruktion die grundlegende Datenvorbereitung, um den vorhandenen Datensatz optimal auf die entsprechende Modellierungstechnik anzupassen. Dies umfasst in der Regel einerseits eine Datenbereinigung durch Korrektur einzelner Attribute, die beispielsweise entweder falsch, verrauscht oder nicht vorhanden sind. Andererseits muss eine gewisse Datenintegration geleistet werden, da die meisten Modellierungstechniken erfordern, dass die Daten in einem einzigen Datensatz vorliegen.²⁷¹

Modellierung, Training und Bewertung der Modellgüte

Nachdem die Datengrundlage analysiert und alle Prozesskenngrößen in Teilmodelle zugeordnet wurden, folgen die Modellierung, das Training und die abschließende Bewertung der jeweiligen Teilmodelle. Diese vordefinierten Schritte sind branchenübergreifend etabliert und Bestandteil eines einheitlichen Vorgehens für Modellierungsaufgaben (siehe Abschnitt 2.4.3).

In der Modellierungsphase wird das angestrebte Modell erstellt, auf die Modellierungsaufgaben hin überprüft und anschließend trainiert. Dabei werden die folgenden Schritte durchlaufen:^{272,273}

- Auswahl einer Modellierungstechnik und Aufnahme der Prämissen: Identifikation der Algorithmen, die verwendet werden sollen (z.B. lineare Regression, neuronales Netz) und Definition der Prämissen (z.B. alle Attribute sind gleichmäßig verteilt, Klassenattribute sind symbolisch).

²⁷⁰ Vgl. Schröer et al. (A Systematic Literature Review on Applying CRISP-DM Process Model) 2021, S. 530.

²⁷¹ Vgl. Berthold et al. (Guide to Intelligent Data Analysis) 2010, S. 115ff.

²⁷² Vgl. Wirth et al. (CRISP-DM: Towards a standard process model for data mining) 2000, S. 6.

²⁷³ Vgl. Chapman et al. (CRISP-DM 1.0) 2000, S. 27ff.

- Erstellung des Validierungsplans: Beschreibung des Konzepts für das Training, das Testen und die Validierung der Modelle (z.B. Aufteilung der verfügbaren Daten in entsprechende Trainings-, Test- und Validierungssätze).
- Erstellung des Modells inklusive der Parametereinstellungen: Anwendung des Modellierungsprogramms auf den erstellten Datensatz, begründete Auswahl der Parametereinstellungen (z.B. Anzahl der Schichten und Knoten in einem neuronalen Netz) sowie Beschreibung des resultierenden Modells (z.B. Interpretierbarkeit der Modelle und mögliche Probleme).
- Beurteilung des Modells und Überarbeitung der Parametereinstellungen: Überprüfung der Genauigkeit und Generalität des Modells (z.B. Verhalten bei unterschiedlicher Datenaufteilung) und Interpretation der Modelle entsprechend dem Fachwissen sowie anschließende Anpassung der Parametereinstellung des verwendeten Modells.

Da in der Regel mehrere Modellierungstechniken für ein bestimmtes Problem in Frage kommen, müssen diese verschiedenen Ansätze bewertet und gegeneinander verglichen werden. In den meisten Fällen führt selbst ein eindeutig definiertes Ziel nicht zu einer eindeutigen Auswahl an möglichen Modellierungstechniken. Physikalische Prozesse und zugrundeliegende Gesetzmäßigkeiten lassen sich zur Beschreibung der funktionalen Abhängigkeiten zwischen den Attributen heranziehen, so dass ein Polynom bestimmten Grades oder andere Funktionen in Betracht kommen. Da viele Modellierungstechniken spezifische Anforderungen an die ihnen zugeführten Daten haben, wird die Modellierung oft iterativ in Abstimmung mit der Datenaufbereitung durchgeführt.²⁷⁴

Der Fokus bei der Auswahl einer geeigneten Modellierungstechnik sollte stets auf der zugrundeliegenden Modellierungsaufgabe liegen. In Abschnitt 2.4.2 wurde bereits eine Übersicht etablierter Modellierungstechniken sowie deren mathematische Grundlagen für das maschinelle Lernen vorgestellt, welche sich wie folgt unterscheiden lassen:²⁷⁵

- **Klassifizierung:** Zuordnung der Datenpunkte in spezifische Kategorien oder Klassen (bspw. Klassifizierung von Fehlerbildern anhand bestimmter Muster). Dabei ordnet das Modell den Datenpunkten ein Klassenlabel zu, welches der Algorithmus zuvor durch das Training mit gelabelten Trainingsdaten erlernt hat.
- **Regression:** Bestimmung eines numerischen Werts basierend auf verschiedenen Eingabedaten (bspw. Vorhersage der Produktqualität basierend auf den Prozessparametereinstellungen). Dabei lernt das Modell anhand des Trainingsdatensatzes Muster und Beziehungen zwischen den Eingabe- (Features) und Ausgabewerten (Labels) zu erkennen und diese Zusammenhänge auf neue, unbekannte Daten anzuwenden.
- **Clustering:** Bildung von Clustern oder Gruppen durch Ähnlichkeiten, latente Muster und Beziehungen zwischen den Datenpunkten (bspw. Bildung von Produktgruppen gleicher

²⁷⁴ Vgl. Schröer et al. (A Systematic Literature Review on Applying CRISP-DM Process Model) 2021, S. 527ff.

²⁷⁵ Vgl. Subasi (Practical machine learning for data analysis using Python) 2020, S. 93.

Qualität). Im Gegensatz zur Klassifizierung, werden beim Clustering nicht gelabelte Daten verarbeitet und je nach geforderter Gesamtzahl der Cluster gruppiert.

- **Anomalieerkennung:** Identifizierung von anormalen Daten oder Ausreißern innerhalb eines Datensatzes (bspw. Identifizierung von Fehlermechanismen abseits des Prozessrauschens). Dafür wird das Modell überwiegend mit typischen Datenpunkten trainiert, um für neue Daten beurteilen zu können, ob es sich um erwartete oder unerwartete Werte handelt.

Die Generalisierungseigenschaften sind für die Qualität eines Modells von entscheidender Bedeutung, da das Modell in der Regel auf der Grundlage eines Trainingsdatensatzes erstellt wird, bei dem es sich um eine kleine Teilmenge der Gesamtheit handelt. Daher wird die vorhandene Datengrundlage in einen Trainingsdatensatz und einen Testdatensatz aufgeteilt. Dadurch kann die Modellperformance sowohl hinsichtlich der Trainingsdaten als auch der Testdaten validiert werden, um eine mögliche Über- oder Unteranpassung des Modells zu vermeiden.

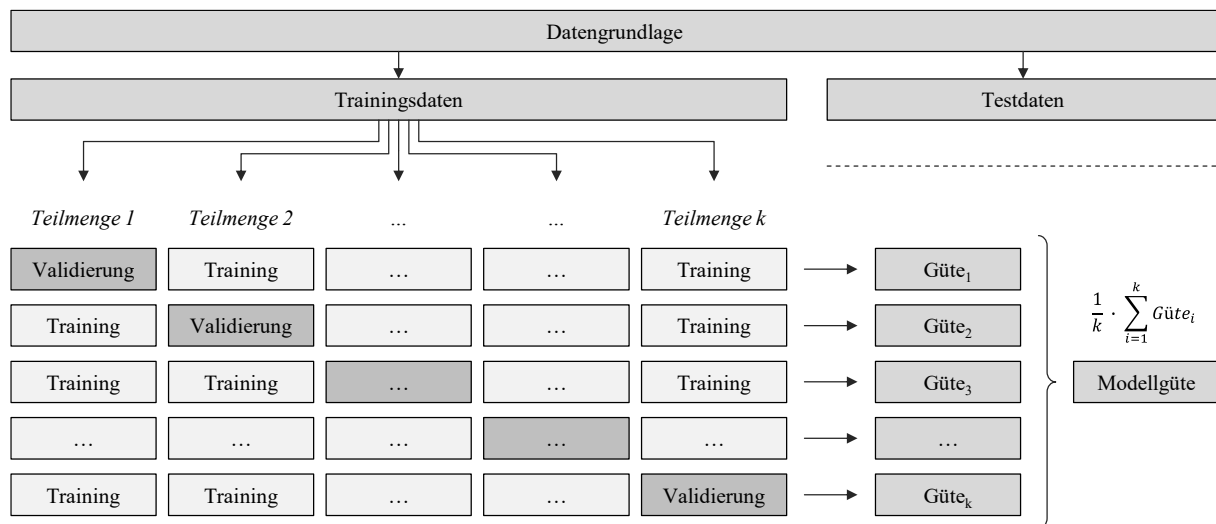


Abbildung 54: Datenaufteilung bei einer k-fachen Kreuzvalidierung²⁷⁶

In der Praxis wird dieser Prozess automatisiert wiederholt, wobei die Datengrundlage randomisiert in k gleich große Datensätze aufgeteilt. Anschließend werden $k-1$ dieser Datensätze zum Training und ein Datensatz zum Testen verwendet. Dieses Vorgehen wird als k-fache Kreuzvalidierung bezeichnet. Das zugrundeliegende Prinzip der k-fachen Kreuzvalidierung ist in Abbildung 54 abgebildet. Hierbei wird die Datengrundlage zunächst in einen Trainings- und Testdatensatz aufgeteilt. Anschließend erfolgt die Bewertung des Modells anhand der Kreuzvalidierung über k Teilmengen. Der durchschnittliche Fehler der einzelnen Teilmengen stellt dabei die zu erwartende Modellgüte in Hinblick auf bisher noch unbekannten Daten, d.h. dem Testdatensatz, dar.²⁷⁷

Die Modellgüte beschreibt die Leistungsfähigkeit eines Modells für einen bestimmten Datensatz und ergibt sich aus der Berechnung der Modellwerte unter Berücksichtigung der

²⁷⁶ Vgl. Lanquillon (Grundzüge des maschinellen Lernens) 2019, S. 121.

²⁷⁷ Vgl. Subasi (Practical machine learning for data analysis using Python) 2020, S. 14ff.

tatsächlichen Ausgangsgrößen. Für die Berechnung der Modellgüte existierten diverse vordefinierte Metriken, welche je nach Modellierungstechnik angewendet werden können. Alle Metriken folgen in der Regel der Konvention, dass höhere Rückgabewerte eine bessere Modellgüte repräsentieren als niedrigere Rückgabewerte.²⁷⁸

Bei der Parametereinstellung in der Produktion handelt es sich in erster Linie um ein Regressionsproblem, d.h. die Vorhersage der Ausgangsgrößen (Prozessergebnis) basierend auf den Eingangsgrößen (einstellbare Prozesskenngrößen). Für die Bewertung der Modellgüte von Regressionsmodellen werden vorwiegend statistische Metriken verwendet. Zu den wesentlichen Kennzahlen gehören der mittlere absolute Fehler (engl.: Mean absolute error, MAE), der mittlere absolute prozentuale Fehler (engl.: Mean absolute percentage error, MAPE), der mittlere quadratische Fehler (engl.: Root mean-squared error, RMSE) und der Determinationskoeffizient (engl.: Coefficient of determination, R^2).²⁷⁹

Für ein Modell, das für eine zugrundeliegende Datenmenge n mit den tatsächlichen Werten $a = (a_1, \dots, a_n)$ die prognostizierten Werte $p = (p_1, \dots, p_n)$ voraussagt, gilt:²⁸⁰

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n |p_i - a_i| \quad (4.8)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left| \frac{p_i - a_i}{a_i} \right| \quad (4.9)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (p_i - a_i)^2} \quad (4.10)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (p_i - a_i)^2}{\sum_{i=1}^n (a_i - \bar{a})^2} \quad (4.11)$$

p_i : prognostizierter Wert (durch das Modell)

a_i : tatsächlicher Wert (aus dem Datensatz)

$\bar{a}$: Mittelwert der tatsächlichen Werte a_i

n : Stichprobengröße (Datenmenge)

Der MAE stellt den Durchschnitt der absoluten Differenz zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Werten im Datensatz dar und beschreibt den Durchschnitt der Residuen im Datensatz. Der MAPE beschreibt die relative Abweichung zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Werten im Datensatz und eignet sich für Vorhersagemodelle, die sensitiv für

²⁷⁸ Vgl. scikit-learn (Metrics and scoring quantifying the quality of predictions) 2023.

²⁷⁹ Vgl. Subasi (Practical machine learning for data analysis using Python) 2020, S. 15f.

²⁸⁰ Vgl. Chicco et al. (The coefficient of determination R-squared) 2021, 4–5.

kleine Fehlerabweichungen sind. Der RMSE ist die Quadratwurzel aus dem Durchschnitt der quadrierten Differenz zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Werten im Datensatz und beschreibt die Standardabweichung der Residuen. Der R^2 stellt den Anteil der Varianz der abhängigen Variablen dar, der durch das lineare Regressionsmodell beschrieben wird. Während der RMSE aussagt, wie zuverlässig ein Regressionsmodell den Wert einer Antwortvariablen in absoluten Zahlen vorhersagen kann, gibt der R^2 wieder, wie zuverlässig die Vorhersagevariablen die Variation der Antwortvariablen beschreiben können. Sofern keine detaillierten Betrachtungen angestrebt werden, wird die Verwendung von R^2 zur Bewertung von Regressionsmodellen empfohlen.²⁸¹

Insbesondere bei Regressionsmodellen mit einer hohen Anzahl von Merkmalen sollte neben der Modellgüte auch die Kollinearität zwischen mehreren unabhängigen Variablen überprüft werden, da diese die Regressionsergebnisse negativ beeinflussen. Wenn eine oder mehrere Variablen durch lineare Kombination einer anderen Variablen dargestellt werden können, führt dies zu einer Überhöhung der Gewichte und reduziert so die statistische Signifikanz der unabhängigen Variablen. Um den Grad der Kollinearität zu bewerten, wird der Varianzinflationsfaktor (engl.: Variance inflation factor, VIF) genutzt:²⁸²

$$VIF = \frac{1}{1 - R_j^2} \quad (4.12)$$

R_j^2 : Bestimmtheitsmaß der Variable j in Bezug zu allen übrigen Variablen

Sofern die Variable j von allen anderen Variablen vollständig unabhängig ist, resultiert daraus ein Varianzinflationsfaktor $VIF = 1$ und es liegt somit keine Kollinearität vor. In der Praxis gilt die allgemeine Richtlinie, dass ein VIF von 5 bis 10 auf eine signifikante Multikollinearität hinweist.²⁸³ Liegt eine zu hohe Kollinearität vor, müssen mögliche Gründe für die Korrelation zwischen den Variablen im Datensatz untersucht werden. Sofern es naheliegende oder kausale Gründe für die Kollinearität in den Daten gibt, kann eine der erklärenden Variablen gestrichen werden, ohne die Erklärungskraft des Modells zu beeinträchtigen. Wird keine plausible Erklärung gefunden, ist die Kollinearität möglicherweise auf einen Zufall zurückzuführen und kann durch die Erhebung zusätzlicher Daten verringert werden.

Sofern die Vorhersagegüte des resultierenden Modells ausreichend, kann zu der nächsten Phase übergegangen werden. Andernfalls muss der Prozess aus Modellierung, Training und Bewertung solange wiederholt werden, bis eine Modellierungstechnik zum gewünschten Ergebnis führt. Allgemein ist zu empfehlen, mehr als ein Modell und Algorithmus zu trainieren, zu testen und zu bewerten, um die Ergebnisse verschiedener Modelle miteinander zu vergleichen.²⁸⁴

²⁸¹ Vgl. Chicco et al. (The coefficient of determination R-squared) 2021, 5–18.

²⁸² Vgl. Siebertz et al. (Statistische Versuchsplanung) 2017, S. 65.

²⁸³ Vgl. James et al. (An Introduction to Statistical Learning) 2021, S. 102f.

²⁸⁴ Vgl. Schröer et al. (A Systematic Literature Review on Applying CRISP-DM Process Model) 2021, S. 530.

4.3.3 Phase 3: Modellintegration und Parameteroptimierung

Phase 3: Model integration and parameter optimization

Die dritte Phase beginnt zunächst mit der Abfrage, ob die Teilmodelle wie geplant erstellt und somit alle notwendigen Informationen vorhanden sind. Anschließend erfolgt die Integration der Teilmodelle in ein übergeordnetes Gesamtmodell sowie die Optimierung und Validierung des Gesamtmodells.

Integration der Teilmodelle in ein Gesamtmodell

Nachdem alle Teilmodelle erfolgreich erstellt und auf eine ausreichende Modellgüte überprüft wurden, erfolgt die Integration aller Teilmodelle zu einem übergeordneten Gesamtmodell. Dafür wird ausgehend von der Zuordnung der Prozesskenngrößen und den vorhandenen Daten ein Modellierungsschaltbild (Abbildung 55) erstellt, in dem alle Eingangsgröße sowie die angestrebten Ausgangsgrößen für die Parametereinstellung des Hauptprozesses aufgeführt werden.

Die wesentlichen Aktivitäten zur Integration der Teilmodelle umfassen die Programmierung des Input-Arrays (Eingangsgrößen), die Einbindung der Teilmodelle über entsprechende Funktionen und Schnittstellen (z.B. Parameterübergabe) inkl. der notwendigen Eingangsgrößen sowie die Definition des Output-Arrays (Ausgangsgrößen).

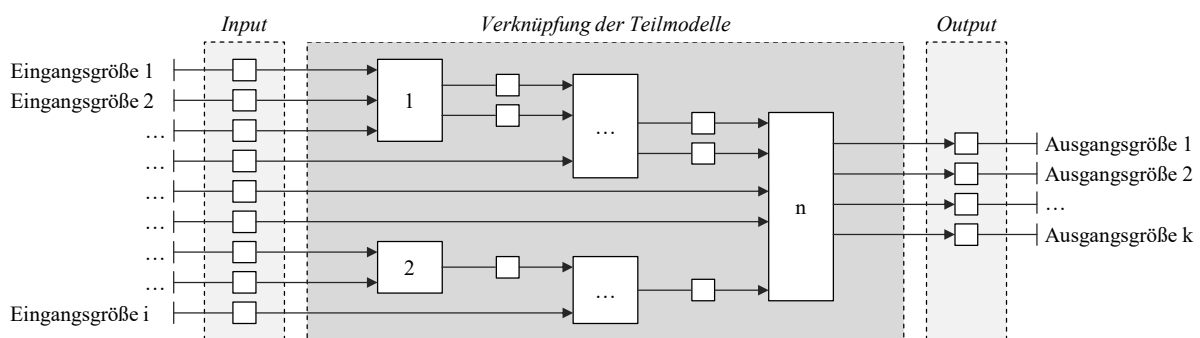


Abbildung 55: Modellierungsschaltbild zur Integration der Teilmodelle in ein Gesamtmodell

Da die Teilmodelle bereits trainiert sind, können sie als fixiert angesehen werden, woraus das übergeordnete Gesamtmodell mit i Eingangsgrößen und k Ausgangsgrößen resultiert. Dieses Gesamtmodell wird in den folgenden Schritten als Grundlage für die Parameteroptimierung herangezogen und dient als Grundlage für die Parameteroptimierung in den folgenden Schritten, um die bestmöglichen Eingangsgrößen im Hinblick auf die angestrebten Ausgangsparameter zu ermitteln.

Optimierung und Validierung des Gesamtmodells

Nachdem alle Teilmodelle über entsprechende Funktionen und Schnittstellen zu einem übergeordneten Gesamtmodell integriert wurden, erfolgt die Optimierung und Validierung des Gesamtmodells. Eine ausreichende Modellgüte der einzelnen Teilmodelle wurde bereits in Phase 2 überprüft und sichergestellt, sodass für die nachfolgende Optimierung des Gesamtmodells ein globales Maximum über alle Teilmodelle gesucht wird.

Die globale Optimierung zielt darauf ab, die optimale Lösung unter Berücksichtigung definierter Randbedingungen in nichtlinearen Entscheidungsmodellen zu finden, die häufig eine Reihe von Teillösungen (lokalen Lösungen) aufweisen. Die Randbedingungen für die Eingangsgrößen können sich aus physikalischen Beschränkungen, technischen Spezifikationen oder zur Verfügung stehenden Ressourcen ergeben. Die klassischen Optimierungsverfahren haben Schwierigkeiten im Umgang mit globalen Optimierungsproblemen. Ein effizienter und zuverlässiger Ansatz für die Lösung von globalen Optimierungsproblemen sind genetische Algorithmen, da sie in der Lage sind, Lösungen für unbegrenzte, begrenzte und generelle Optimierungsprobleme zu finden ohne vorauszusetzen, dass die zu lösenden Funktionen differenzierbar oder kontinuierlich sind.^{285,286,287}

Genetische Algorithmen gehören zu den heuristischen Blackbox-Algorithmen, die einen Hypothesenraum nach der optimalen Lösung durchsuchen, die ein vordefiniertes quantitatives Maß für die Qualität, die sogenannte Fitness, in Bezug auf das gestellte Problem maximiert. Die Kernidee besteht darin, dass genetische Algorithmen auf den Prinzipien ähnlich der natürlichen Selektion durch Rekombination, Kreuzung und Mutation von Genomen basieren.²⁸⁸

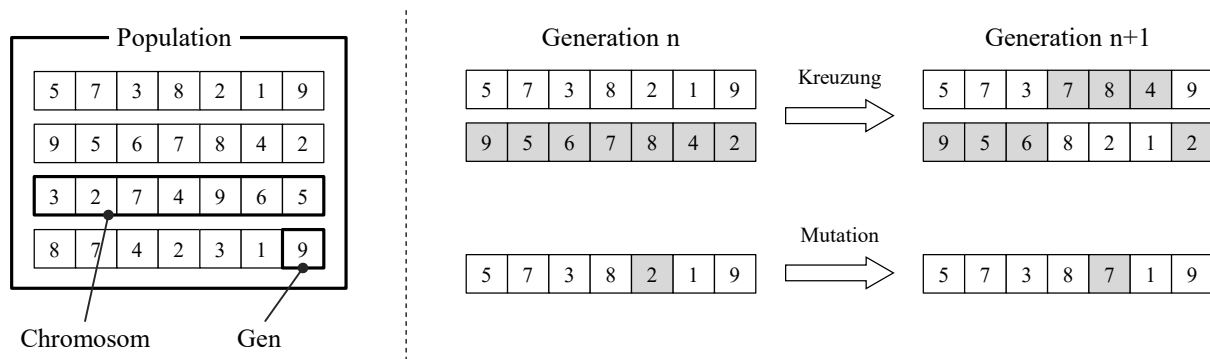


Abbildung 56: Darstellung einer Population sowie der genetischen Operatoren

Bei diesem Ansatz handelt es sich um einen populationsbasierten Suchalgorithmus. Die verwendeten Begriffe und Bezeichnungen sind aus der Genetik abgeleitet (Abbildung 56). Eine Population stellt dabei eine Sammlung möglicher Lösungen für den Hypothesenraum dar. Eine mögliche Lösung wird als Individuum oder auch Chromosom²⁸⁹ bezeichnet. Die Chromosomen repräsentieren eine Reihe von Parametern, welche als Gen bezeichnet werden. In dem Fall der Parametereinstellung stellen die identifizierten Eingangsgrößen E der Prozesse die Gene dar. Durch die Kreuzung und Mutation von Genen entstehen neue Populationen, d.h. neue Lösungshypothesen, wobei jede erzeugte Population einer Generation entspricht.^{290,291}

²⁸⁵ Vgl. Mitchell (Machine learning) 2010, S. 249ff.

²⁸⁶ Vgl. Mishra et al. (Genetic Algorithm: An Efficient Tool for Global Optimization) 2017, S. 2208.

²⁸⁷ Vgl. Painton et al. (Genetic algorithms in optimization of system reliability) 1995, S. 172.

²⁸⁸ Vgl. Mitchell (Machine learning) 2010, S. 249ff.

²⁸⁹ Die Begriffe Individuum und Chromosom werden bei der Verwendung von genetischen Algorithmen meist synonym verwendet.

²⁹⁰ Vgl. Mitchell (Machine learning) 2010, S. 249ff.

²⁹¹ Vgl. Katoch et al. (A review on genetic algorithm: past, present, and future) 2021, S. 8094f.

Eingangsgrößen E	e_1	e_2	e_3	...	...	...	...	e_k
	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
Individuum / Chromosom	Gen 1	Gen 2	Gen 3	...	...	...	...	Gen k
Phänotyp (dekodiert)*	12 μm	2,2 %	ok	...	...	...	...	...
Genotyp (kodiert)*	1100	010110	11	...	...	...	...	...

*Beispielhafte Größen

Abbildung 57: Beispielhafte Kodierung der Eingangsgrößen als Gene eines Chromosoms^{292,293}

Für die Anwendung von genetischen Algorithmen für eine Optimierung der Parametereinstellung von Prozessschritten müssen die identifizierten Eingangsgrößen $E = (e_1, \dots, e_k)$ des Gesamtmodells in ein kodiertes Chromosom, d.h. eine definierte Zeichenkette, überführt werden. Die Länge der Zeichenkette hängt sowohl von dem Wertebereich und der Auflösung der jeweiligen Eingangsgröße (Phänotyp) als auch von der Anzahl Eingangsgrößen k und dem verwendeten Kodierungsschema (Genotyp) ab, wie in Abbildung 57 dargestellt. Die binäre Kodierung ist das am meisten verwendete Kodierungsschema, da es eine schnelle Implementierung von Kreuzungs- und Mutationsoperationen ermöglicht und ideal für die Optimierung in einem diskreten Suchraum ist. Alternativ kann auch ein Wertkodierungsschema verwendet werden, bei dem das Gen durch reelle oder ganzzahlige Zahlen sowie Zeichen dargestellt wird. Diese direkte Darstellung der Variablen ist ideal für die Optimierung in einem kontinuierlichen Suchraum, benötigt allerdings spezifischen Kreuzungs- und Mutationsoperationen.²⁹⁴

Der grundlegende Ablauf eines genetischen Algorithmus ist in Abbildung 58 dargestellt. Zunächst wird eine Startpopulation $P_{i=0}$ erzeugt, wobei zufällige Werte aus dem Wertebereich der Parameter gewählt werden. Die Populationsgröße n legt fest, wie viele Individuen s pro Population generiert werden. Danach erfolgt die Berechnung des Fitnesswerts (engl.: Fitness score) über die Fitnessfunktion $F(s)$ für alle Individuen der aktuellen Population. Nach dieser Initialisierung werden die folgenden Schritte iterativ wiederholt. Zunächst erfolgt die Selektion von Lösungspaaren L anhand der berechneten Fitnesswerte, um einen neuen Chromosomensatz zu erzeugen. Dies geschieht durch die Anwendung von zwei zentralen Mechanismen: Kreuzung und Mutation. Bei der Kreuzung der Lösungspaare werden die Chromosomen in Gensequenzen unterteilt und anschließend rekombiniert. Bei der Mutation werden einzelne Gene des Chromosomensatzes zufällig verändert. Anschließend wird erneut der Fitnesswert $F(s)$ für alle Individuen s_n dieser neuen Generation P_{i+1} berechnet. Diese Iterations-schleife wird fortgesetzt, bis das Abbruchkriterium erreicht ist (z.B. Anzahl der maximalen Iterationen oder ein Schwellenwert für den Fitnesswert).^{295,296,297}

²⁹² Vgl. Garzia et al. (Energy Management Using Genetic Algorithms) 2003, S. 3.²⁹³ Vgl. Trinh et al. (A Data-Independent Genetic Algorithm Framework for Fault-Type Classification) 2020, S. 7f.²⁹⁴ Vgl. Katoch et al. (A review on genetic algorithm: past, present, and future) 2021, S. 8095ff.²⁹⁵ Vgl. Katoch et al. (A review on genetic algorithm: past, present, and future) 2021, S. 8094f.²⁹⁶ Vgl. Gad (PyGAD - Python Genetic Algorithm) 2020.²⁹⁷ Vgl. Mitchell (Machine learning) 2010, S. 250ff.

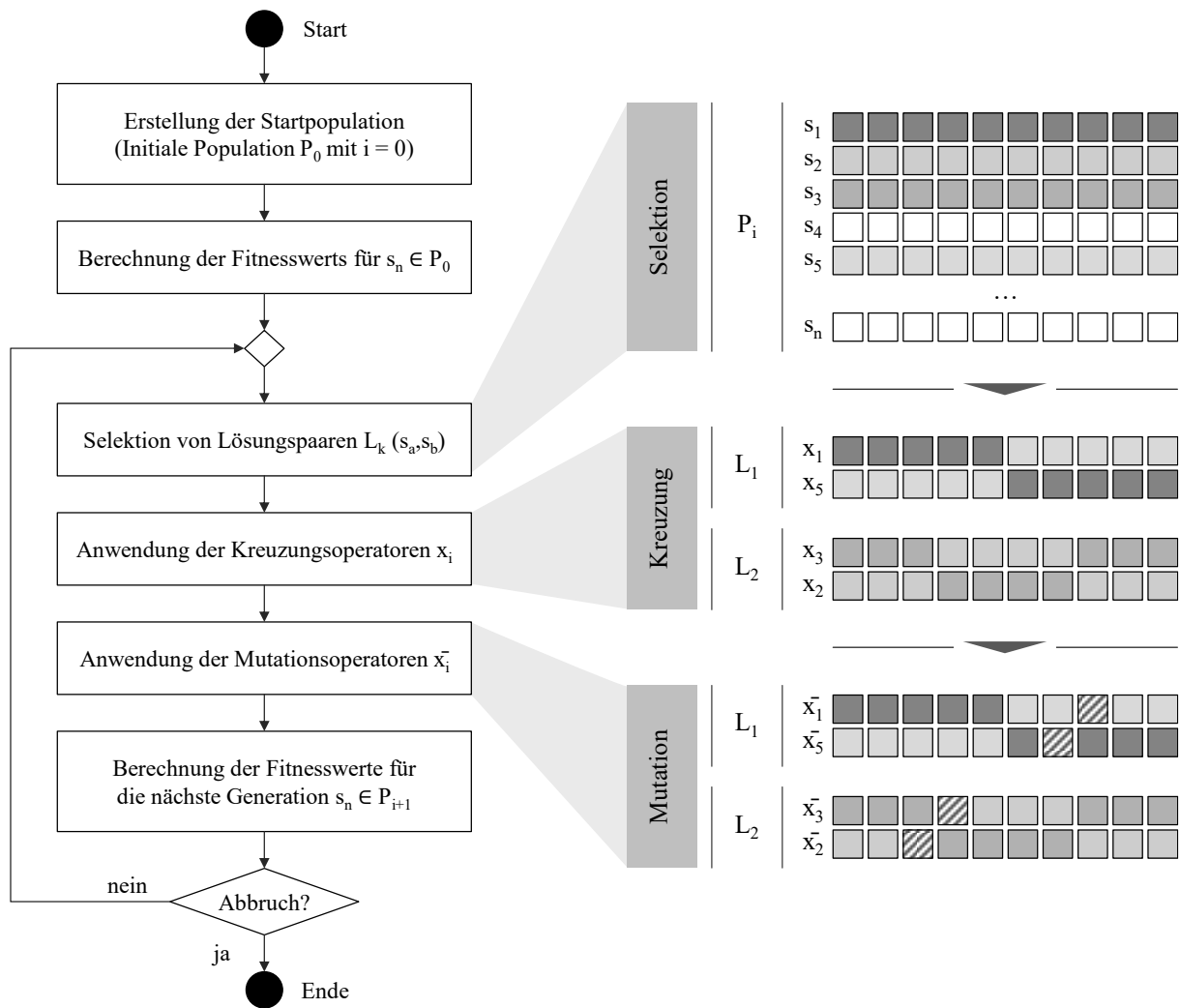


Abbildung 58: Ablauf bei der Optimierung durch einen genetischen Algorithmus²⁹⁸

Ein entscheidender Aspekt bei der Nutzung genetischer Algorithmen ist die Definition der Fitnessfunktion $F(s)$ für die Bewertung der Individuen als Lösung für das Optimierungsproblem. Allgemein lässt sich sagen, dass es keine einheitliche Vorgehensweise zur Ermittlung des Fitnesswertes gibt, sondern dieser in seiner spezifischen Definition von dem zugrundeliegenden Problem abhängt. Allgemein gilt, dass es sich bei der Fitnessfunktion um eine Maximierungsfunktion handeln muss, sodass ein hoher Fitnesswert stets bevorzugt wird.²⁹⁹

Die Operatoren des genetischen Algorithmus spielen eine zentrale Rolle bei der Optimierung der evolutionären Lösungsfindung. Sie sind Teil der Hyperparameter des genetischen Algorithmus und bestimmen die Leistungsfähigkeit, die Konvergenzgeschwindigkeit und die Anpassungsfähigkeit der Exploration eines genetischen Algorithmus an die Anforderungen des zu lösenden Optimierungsproblems. Eine Übersicht von etablierten Operatoren zur Selektion, Kreuzung und Mutation wird in Abbildung 34 gezeigt.

²⁹⁸ Vgl. Schroeders et al. (Meta-Heuristics in Short Scale Construction) 2016, 5.

²⁹⁹ Vgl. Gad (PyGAD - Python Genetic Algorithm) 2020.

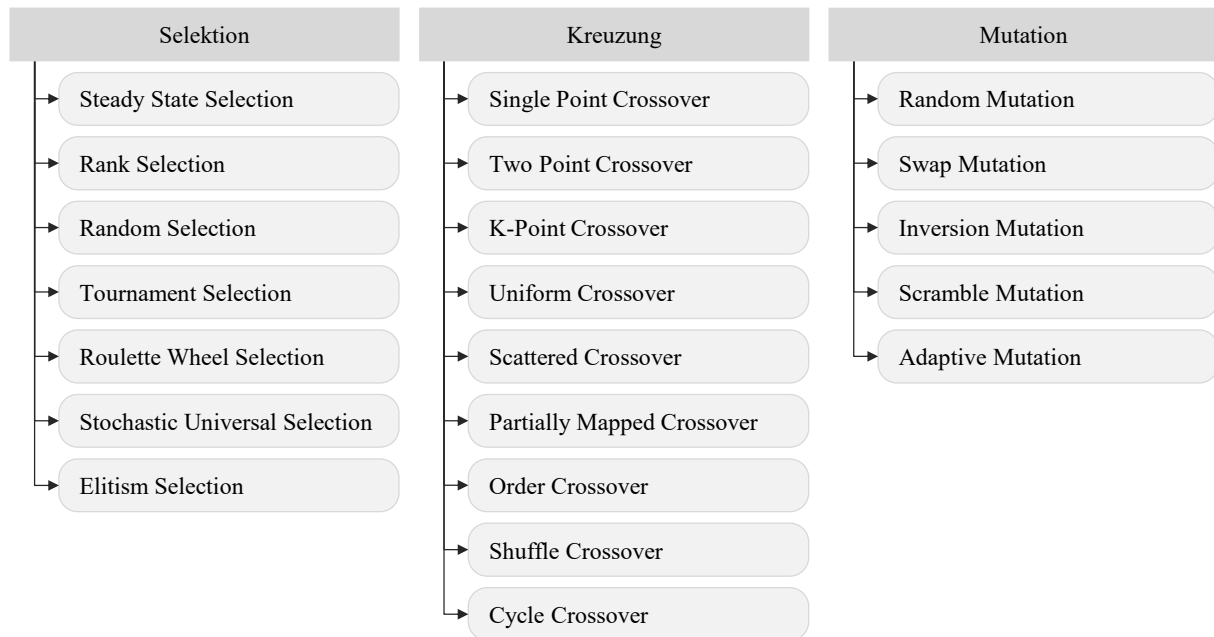


Abbildung 59: Übersicht etablierter Operatoren in genetischen Algorithmen^{300,301}

Für die Parametereinstellung im Produktionsanlauf werden die Eingangsgrößen einer Anlage, d.h. individuell änderbare oder gezielt einstellbare Kenngrößen des Prozesses, als Individuum s durch den genetischen Algorithmus in Form eines Chromosoms (Zeichenkette) generiert. Hierbei sollen die optimalen Eingangsgrößen in Hinblick auf die Ausgangsgrößen, d.h. die gewünschten Ergebnisse des Prozesses, gefunden werden. In der Regel kommt es zu konkurrierenden Teilzielen mit einer oder mehreren Nebenbedingungen. Solche Probleme werden als beschränkte multi-kriteriale Optimierung bezeichnet und lassen sich wie folgt formulieren:^{302,303}

$$\min f(x) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)]^T \quad (4.13)$$

unter den Nebenbedingungen:

$$\begin{aligned} g_j(x) &\geq 0, & j &= 1, \dots, n_g \\ h_j(x) &= 0, & j &= n_g + 1, \dots, n_g + n_h \\ x_k^U &\leq x_k \leq x_k^O, & k &= 1, \dots, n \end{aligned}$$

f_i : Zielfunktion (für das Teilmodell i)
 g_j : Ungleichheitsbedingung (für das Teilmodell i)
 h_j : Gleichheitsbedingung (für das Teilmodell i)
 x_k^U, x_k^O : untere und obere Grenzwerte für (für die Kenngröße k)

³⁰⁰ Vgl. Gad (PyGAD - Python Genetic Algorithm) 2020.

³⁰¹ Vgl. Katoch et al. (A review on genetic algorithm: past, present, and future) 2021, S. 8096ff.

³⁰² Vgl. Ma et al. (Fitness Function for Evolutionary Constrained Multiobjective Optimization) 2021, S. 5005.

³⁰³ Vgl. Coello (GA-based multiobjective optimization techniques) 2000, S. 109ff.

Bei der Lösung multi-kriterialer Optimierungen ist ein einziger Fitnesswert nicht ausreichend.³⁰⁴ Die Berechnung des Fitnesswerts kann allerdings analog zur Einzelzieloptimierung für eine multi-kriteriale Optimierung durchgeführt werden.³⁰⁵ Für anwendungsbezogene Optimierungen wird der Ansatz der Zielprogrammierung (engl.: Goal programming) herangezogen, bei dem der Zielfunktion entsprechende Zielwerte zugeordnet werden. Die Zielfunktion verfolgt dabei das Ziel, die absolute Abweichung zwischen den Ausgabewerten und den Zielwerten zu minimieren.³⁰⁶ Wird dieser Ansatz in eine Fitnessfunktion überführt, welche eine Maximierungsfunktion sein muss, ergibt sich daraus:³⁰⁷

$$F(\bar{x}) = \frac{1}{\min \sum_{i=1}^k |f(\bar{x})_i - T_i|} \quad \text{mit} \quad \bar{x} \in P \quad (4.14)$$

f_i : prognostizierte Ausgabewerte der Zielfunktion (für das Teilmodell i)
 T_i : angestrebter Zielwerte (für das Teilmodell i)
 $\bar{x}$: zulässiger Wertebereich (für die Kenngröße k)

Angestrebte Zielwerte oder Zielvorgaben können sich dabei auf konkrete technische Spezifikationen (z.B. eine Schichtdicke von 200 µm) oder eine Modellgüte (z.B. Prognosegenauigkeit von 100 %) beziehen. In der Programmierung zur Berechnung der Fitnessfunktion muss dabei lediglich der Vektor der Eingangsgrößen $\bar{x} = [x_1, x_2, \dots, x_k]^T$ sowie der zulässige Wertebereich der Kenngröße k berücksichtigt werden, sodass die Datenattribute an die entsprechenden Funktionen und Teilmodelle korrekt überführt werden.

Nachdem die Anzahl der maximalen Iterationen für den genetischen Algorithmus oder ein Grenzwert für den Fitnesswert erreicht wurde, wird die Lösung (Individuum) mit dem höchsten Fitnesswert ausgegeben. Diese letztendlich beste Lösung des genetischen Algorithmus entspricht damit den Werten für die einzustellenden Eingangsgrößen, wodurch eine Optimierung der Parametereinstellung in realer Produktionsumgebung ermöglicht wird.

Zur Validierung des übergeordneten Gesamtmodells werden die durch den genetischen Algorithmus ermittelten Eingangsgrößen auf das übergeordnete Gesamtmodell angewendet, um die Modellgüte analog zu den beschriebenen Ansätzen aus Abschnitt 4.3.2 zu bewerten.

Sofern eine ausreichende Qualität der ermittelten Lösung für die Werte der einzustellenden Eingangsgrößen gegeben ist, erfolgt die Implementierung und Anwendung des Modells im Produktionsanlauf. Eine Implementierung wird im nachfolgenden Kapitel durch einen Software-Demonstrator vorgestellt. Nach der erfolgreichen Implementierung des Modells beendet eine kontinuierliche Überwachung der Gültigkeit der Modelle das erarbeitete Vorgehen, um etwaige Anpassungen und Revisionsstrategien des Modells zu berücksichtigen.

³⁰⁴ Vgl. Snyman et al. (Solving Constrained Multi-objective Optimization Problems with Evolutionary Algorithms) 2017, S. 59.

³⁰⁵ Vgl. Sinha et al. (MCDM, EMO and Hybrid Approaches) 2022, S. 15f.

³⁰⁶ Vgl. Coello (GA-based multiobjective optimization techniques) 2000, S. 116f.

³⁰⁷ Vgl. Gad (PyGAD - Python Genetic Algorithm) 2020.

4.4 Zwischenfazit

Interim conclusion

In diesem Kapitel wurde eine Methode erarbeitet, die eine Optimierung der Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion ermöglicht. Dafür wurden die allgemeine Vorgehensweise und Lösungsbausteine vorgestellt, welche anschließend hinsichtlich ihrer Teilschritte und Annahmen detailliert wurden.

Zu Beginn der Methode wurde ein Referenzsystem für den einzustellenden Prozessschritt (Hauptprozessschritt) definiert. Dies führt zu der Beantwortung der ersten Teilfrage:

Teilfrage 1: Wie lassen sich entscheidende Prozesskenngrößen der Batteriezellproduktion systematisch erfassen und für Ansätze des maschinellen Lernens auswählen?

Eine initiale Prozessanalyse zur Bestimmung der Nebenprozesse mit Einfluss auf den ausgewählten Hauptprozessschritt wurde ergänzt durch die Verwendung eines Parameterdiagramms, worin Prozesskenngrößen differenziert betrachtet werden können. Dabei umfassen Eingangsgrößen des Prozesses alle Stoff-, Energie- und Signalgrößen, die individuell geändert oder durch den Maschinenbediener gezielt an der Anlage eingestellt werden können. Die Ausgangsgrößen umfassen alle messbaren Ergebnisse des Prozesses, welche anhand von Qualitätskontrollen oder Messungen aufgenommen werden. Die systematische Ermittlung und Auswahl der Prozesskenngrößen erfolgt anschließend durch eine qualitative Systembeschreibung anhand von Expertenwissen und Erkenntnissen aus der Literatur, um eine möglichst umfangreiche Liste aller Prozesskenngrößen zu erhalten.

Nach der Auswahl der Prozesskenngrößen erfolgt die Analyse der vorhandenen Datengrundlage, was wiederum zu der Beantwortung der zweiten Teilforschungsfrage führt:

Teilfrage 2: Wie kann eine ausreichende Datengrundlage für die Modellierung durch Methoden des maschinellen Lernens sichergestellt werden?

Die vorhandene Datengrundlage kann sich in der Produktion aus direkten und indirekten Prozess- und Messdaten zusammensetzen. Die heterogenen Daten bestehend aus strukturierten und unstrukturierten Daten müssen dafür zunächst formalisiert werden, um verwertbare Informationen oder Datenattribute zu extrahieren. Die vorhandene Datengrundlage wird anschließend hinsichtlich ihrer Eignung für den angestrebten Anwendungsfall bewertet. Dies erfolgt anhand der Dimensionen Genauigkeit, Vollständigkeit und Aktualität der Daten. Darüber hinaus wird eine explorative Datenanalyse durchgeführt, um vorherrschende Assoziationen und Korrelationen sowie potentielle Engpässe in der Datenqualität zu identifizieren. Sollte die Datengrundlage nicht ausreichend sein, müssen Versuchsdurchführungen basierend auf einer statistischen Versuchsplanung für die fehlenden Prozesskenngrößen vorgesehen werden, um die notwendigen Daten zu erheben.

Die Beantwortung der dritten Teilforschungsfrage ist unmittelbar mit der Definition des Referenzsystems, der Prozessanalyse und der Analyse der vorhandenen Datengrundlage verbunden:

Teilfrage 3: Wie können die vorhandenen Daten in prozessspezifischen Teilmodellen organisiert und anschließend in einem übergeordneten Gesamtmodell integriert werden?

Basierend auf der Auswahl der Haupt- und Nebenprozesse sowie der vorhandenen Datengrundlage werden die entsprechenden Teilmodelle zur Modellierung der Prozesskenngrößen strukturiert. Die zentrale Aufgabe besteht darin, repräsentative Merkmale und Attribute aus der Datengrundlage für die Eingangs- und Ausgangsgrößen der Prozesse zu abstrahieren. Hierbei werden Ansätze der Klassifizierung, der Regression, des Clustering und der Anomalieerkennung auf die strukturierten oder unstrukturierten Daten angewendet, um diese für die Parametereinstellung zu operationalisieren. Die Integration der trainierten und validierten Teilmodelle erfolgt über die Definition von Schnittstellfunktionen, in denen die identifizierten Eingangsgrößen an die Teilmodelle übergeben werden.

Die Teilmodelle werden für sich genommen anhand der branchenüblichen Standardprozesse zur Datenmodellierung erarbeitet und validiert. Auf dieser Grundlage folgt die Beantwortung der vierten Teilforschungsfrage:

Teilfrage 4: Welcher Optimierungsansatz eignet sich für die effiziente Vorhersage der Prozessparametereinstellung einer Prozesskette durch ein übergeordnetes Gesamtmodell?

Das zentrale Ziel der Optimierung der Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion besteht darin, die idealen Eingangsgrößen für die angestrebten und wünschenswerten Ausgangsgrößen eines Prozesses zu ermitteln. Hierfür wurden genetische Algorithmen als effizienter und zuverlässiger Ansatz für die Lösung solcher globalen Optimierungsproblemen identifiziert. Dabei handelt es sich um einen heuristischen, populationsbasierten Suchalgorithmus, der einen Hypothesenraum an Eingangsgrößen nach der optimalen Lösung für die Ausgangsgrößen durchsucht. Darüber hinaus können Randbedingungen resultierend aus physikalischen Beschränkungen, technischen Spezifikationen oder verfügbaren Ressourcen entsprechend berücksichtigt werden.

Um eine Anwendung der Parametereinstellung in realen Produktionsumgebungen zu ermöglichen, wird ein unterstützendes Softwaretool benötigt. Ein Software-Demonstrator wird im nächsten Kapitel vorgestellt.

5 Implementierung eines Software-Demonstrators

Implementation of a software demonstrator

In diesem Kapitel wird dargestellt, wie die Methode zur Optimierung der Parametereinstellung in der Produktion implementiert werden kann. Zu diesem Zweck wurde ein Software-Demonstrator entwickelt und umgesetzt, welcher über einen Webbrowser aufgerufen werden kann. Zunächst wird die Software-Architektur und die Einbindung der verwendeten Applikationen und Teilmodelle beschrieben (Abschnitt 5.1). Anschließend werden sowohl die grafische Benutzeroberfläche (Abschnitt 5.2) als auch die zugrundeliegende Datenverarbeiten (Abschnitt 5.3) detailliert vorgestellt. Abschließend erfolgt ein Zwischenfazit in Hinblick auf die Anwendung in einer realen Produktionsumgebungen (Abschnitt 5.4).

5.1 Softwarearchitektur

Software architecture

Für die Beschreibung der Architektur werden die wesentlichen Komponenten der Benutzer- und Systemebene des Software-Demonstrators näher erläutert. In Abbildung 60 werden die unterschiedlichen Komponenten sowie deren Beziehungen zueinander schematisch dargestellt. Während die Benutzerebene (engl.: Frontend) auf HTML, CSS und JavaScript basiert, wurde die Datenverarbeitung auf Systemebene (engl.: Backend) mit Hilfe von dem Open-Source Webframework Django 4.2.1 implementiert und in Python 3.11.4 umgesetzt. Um den Software-Demonstrator in der Produktionsumgebung auszuführen, wird die Webanwendung als Django-Projekt implementiert und mit Docker 24.0.6 auf einem lokalen Server ausgeführt. Docker ist eine Open-Source Anwendung für Hardware-Virtualisierung auf Betriebssystemebene, um Webanwendungen innerhalb einer kontrollierten Umgebung (Containern) bereitzustellen und auszuführen. Dies ermöglicht, dass die containerisierte Anwendung unabhängig von der zugrundeliegenden Infrastruktur immer auf die gleiche Weise ausgeführt wird.

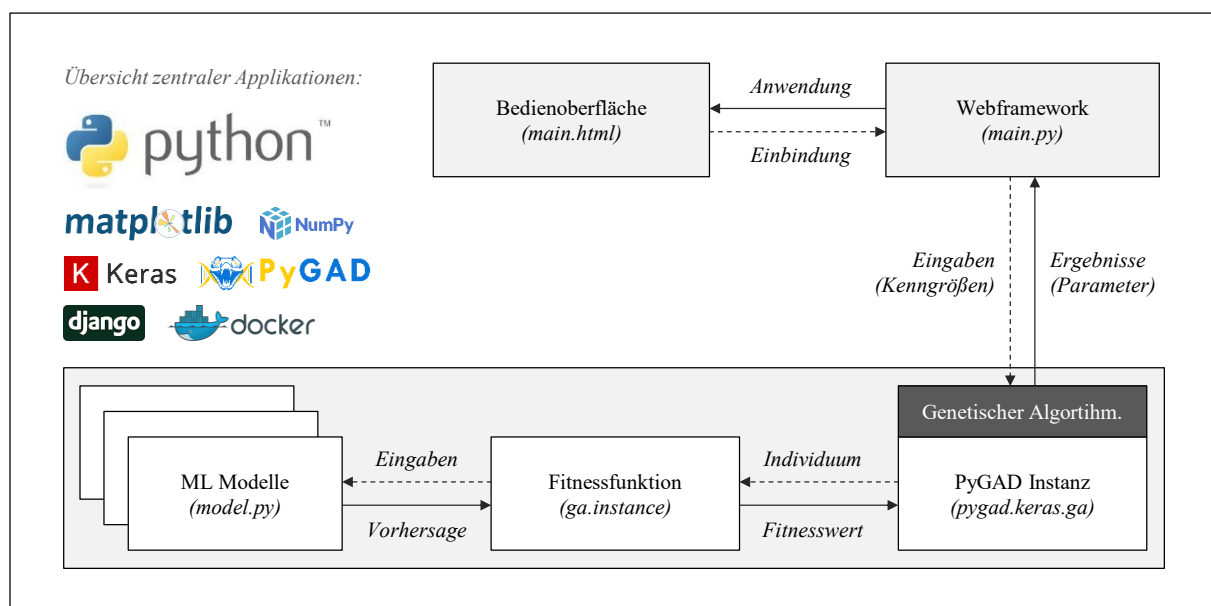


Abbildung 60: Schematische Architektur des Software-Demonstrators

5.2 Frontend: Grafische Benutzeroberfläche

Graphical user interface

Die Benutzeroberfläche des Demonstrators dient der vereinfachten Anwendung des genetischen Algorithmus durch die Spezifikation von unteren und oberen Grenzwerten für die Prozessparametersuche sowie die Definition der Zielgrößen, für die optimierte Parameter eingestellt werden sollen. Für die Entwicklung des Frontend und der Implementierung des genetischen Algorithmus in eine webbasierte Anwendung werden die Python Modelle in ein Django Framework integriert. Django folgt einem strukturierten Schema zur Abgrenzung des Datenmodells, der webbasierten Ansicht und der Datenverarbeitung. Die grafische Benutzeroberfläche zur Nutzung des genetischen Algorithmus lässt sich dadurch in spezifische Webansichten unterteilen und über die zentrale Konfiguration und Einstellungen des Django Frameworks einbinden. Durch das Django Webframework wird eine hohe Skalierbarkeit und einfache Integration von zusätzlichen Serverinstanzen ermöglicht.

The screenshot shows a web application titled "Genetic Optimizer" with three tabs: "Prozessgrenzen", "Konfiguration", and "Ergebnisse". The "Prozessgrenzen" tab is active and contains three sections: "Mischen", "Beschichten & Trocknen", and "Zielgrößen".

Mischen Section:

	Gefordert	min.	max.	
Anteil Graphit	☐	80	90	%
Anteil Silizium	☒		10	%
Anteil CMC	☐	1	3	%
Anteil SBR	☐	1	5	%
Anteil Leitruß	☐	1	2	%
Anteil Lösemittel	☒		60	%

Beschichten & Trocknen Section:

	Gefordert	min.	max.	
Bahngeschwindigkeit	☒		3	m/min
Pumpendrehzahl	☐	100	500	U/min
Schlitzdüsenabstand	☒		200	µm
Temperatur (Zone 1)	☐	100	130	°C
Temperatur (Zone 2)	☐	80	100	°C

Zielgrößen Section:

Nassschichtdicke	200	µm
Fehlerfreie Beschichtung	100	%
Vollständige Trocknung	100	%

A "Weiter >" button is located at the bottom right of the interface.

Abbildung 61: Eingabe der Grenzen für die Prozessparameter und Eingabe der Zielgrößen

Sofern vordefinierte Wertebereiche für gewisse Prozessparameter gefordert werden, können diese entsprechend ausgewählt werden (vgl. Abbildung 61). Die Grenzwerte legen den Lösungsraum für den genetischen Algorithmus fest. Das bedeutet, dass die Parameter (Gene des Individuums) sowohl bei der Initialisierung als auch beim Durchlaufen der weiteren Generationen innerhalb der Grenzen beschränkt sind. Alle Lösungen (Individuen) mit Parametern außerhalb des Lösungsraum werden von der Suche ausgeschlossen. Die Zielgrößen werden innerhalb der Fitnessfunktion ihren Zielfunktion zugeordnet. Die Fitnessfunktion und die Verknüpfung der ML-Modelle wird direkt in die Programmierung der PyGAD Instanz eingebettet, so dass von dem Benutzer keine weiteren Eingaben notwendig sind.

Genetic Optimizer x +

Prozessgrenzen **Konfiguration** Ergebnisse

Allgemeine Parameter

Populationsgröße 20
Anzahl Generationen 50

Selektion

Selektionsoperator tournament
Selektionsgröße 3
Anteil Eliten 20 %

Kreuzung

Kreuzungsoperator single-point
Anzahl der Elternpaare 2

Mutation

Mutationsoperator random
Anteil Mutationen 50 %
Min. Mutationswert 1 %
Max. Mutationswert 1 %

< Zurück **Beginne Berechnung** >

Abbildung 62: Konfiguration des genetischen Algorithmus und der Operatoren

Im nächsten Schritt erfolgt die Konfiguration des genetischen Algorithmus. Im Gegensatz zu der Definition der Prozessgrenzen, können hierbei die validierten Voreinstellungen übernommen werden (vgl. Abbildung 62). Diese Voreinstellungen sind in Hinblick auf die notwendige Rechenleistung optimiert. Je nach Anwendungsfall können über die Konfiguration allerdings höhere Populationsgrößen und Anzahl von Generationen in Betracht gezogen und die genetischen Operatoren angepasst werden.



Abbildung 63: Darstellung der Ergebnisse und Parametereinstellungen

Nachdem alle Generationen des genetischen Algorithmus durchlaufen wurden, werden die Ergebnisse auf der letzten Benutzeroberfläche dargestellt (vgl. Abbildung 63).³⁰⁸ Einerseits sind das die vorhergesagten Parametereinstellungen für die Prozesse und Anlagentechnik sowie die für diese Einstellungen erwartenden Zielgrößen. Andererseits wird der Verlauf des genetischen Algorithmus dargestellt, um die Entwicklung bei der Parametersuche zu betrachten.

5.3 Backend: Datenverarbeitung

Data processing

Der genetische Algorithmus bildet die zentrale Komponente für die Optimierung von Modellen für maschinelles Lernen und das Backend der Suche von den idealen Parametereinstellung. Für die Implementierung des genetischen Algorithmus wurde die Open-Source Bibliothek PyGAD 3.0.1 genutzt, welche diverse Kreuzungs-, Mutations- und Selektionsoperatoren unterstützt. Mit Hilfe von PyGAD können Instanzen zum Durchlaufen mehrerer Generationen erstellt werden. Gleichzeitig ermöglicht es, die Parameter einer Instanz des genetischen Algorithmus anwendungsspezifisch anzupassen (vgl. Tabelle 4).

Tabelle 4: Pseudocode für Instanz des genetischen Algorithmus

```
ga_instance = pygad.GA(num_generations=num_generations,
    num_parents_mating=num_parents_mating,
    fitness_func=fitness_function,
    sol_per_pop=sol_per_pop,
    num_genes=num_genes,
    init_range_low=init_range_low,
    init_range_high=init_range_high,
    parent_selection_type=parent_selection_type,
    keep_parents=keep_parents,
    crossover_type=crossover_type,
    mutation_type=mutation_type,
    mutation_percent_genes=mutation_percent_genes)
```

ga_instance.run(): Führe die Instanz des genetischen Algorithmus aus

Nach der Konfiguration der Parameter wird mit der Berechnung begonnen und die Instanz des genetischen Algorithmus über das Webframework initiiert. Die hinterlegten Modelle können mit Hilfe einer definierten Funktion (vgl. Tabelle 5) geladen werden. Dies ermöglicht einerseits die modulare Einbindung verschiedener Teilmodelle entlang der gesamten Prozesskette. Andererseits können verschiedene Teilmodelle flexibel angepasst und versioniert werden.

³⁰⁸ Innerhalb von PyGAD besteht die Möglichkeit, ein Abbruchkriterium für das Durchlaufen der Generationen festzulegen, z.B. wenn ein bestimmter Fitnesswert erreicht wurde oder sich der Fitnesswert über eine gewisse Anzahl von Generationen nicht verändert.

Tabelle 5: Pseudocode für das Laden der Teilmodelle

```

def load_model(directory, file_name)
    model_path = os.path.join(directory, file_name): Definiere den Pfad des trainierten Teilmodells
    model = keras.models.load_model(model_path): Lade das trainierte Teilmodell
    return model

```

Der bedeutendste Aspekt des genetischen Algorithmus ist die Fitnessfunktion (Tabelle 6). Sie stellt eine problemspezifische Funktion dar, welche für jede Instanz und Anwendung benutzerdefiniert zur Berechnung des Fitnesswerts definiert werden kann.³⁰⁹ Die Fitnessfunktion wird durch die PyGAD Instanz für jedes Individuum einer Generation aufgerufen und der entsprechende Fitnesswert zurückgeben. PyGAD speichert beim Durchlaufen der Generation jeweils das Individuum sowie dessen Wert mit dem höchsten Fitnesswert.

Tabelle 6: Pseudocode für die Fitnessfunktion

```

def fitness_function(ga_instance, solution)
    output = model.predict(solution): Berechne die Vorhersagen der hinterlegten Modelle
    for i in targets
        target_distance = np.linalg.norm(output - target): Bestimme das Distanzmaß der Zielgröße
        target_fitness = 1 / target_distance: Berechne den Fitnesswert der Zielgröße
    Berechne den Fitnesswert der aktuellen Lösung overall_fitness = np.mean(target_fitness)
    return overall_fitness

```

Für die zugrundeliegende Instanz werden die zuvor trainierten und hinterlegten Teilmodelle implementiert und in der Fitnessfunktion aufgerufen (*model.predict*). Die durch den genetischen Algorithmus erzeugten Chromosomen eines Individuums (*solution*) werden für jedes Teilmodell anhand der benötigten Eingangsgrößen der Teilmodelle einem Eingangsarray zugewiesen. Diese Zuordnung folgt der Integration der Teilmodelle. Die Teilmodelle geben die entsprechenden Vorhersagen an die Fitnessfunktion zurück. Die Fitnessfunktion ergibt eine multikriterielle Optimierung, indem die Distanz (*target_distance*) zwischen der Zielvorgabe (*target*) und der Vorhersage der hinterlegten Modelle (*output*) bestimmt wird. Dieses Distanzmaß kann je nach Anwendung für mehrere Zielvorgaben (*targets*) berechnet werden. Der Gesamtfitnesswert (*overall_fitness*) wird aus dem Mittelwert der inversen Distanzmaße berechnet, um ein Maximierungsproblem zu realisieren. Die Fitnessfunktion wird für jedes neu generierte Individuum ausgelöst und der Fitnesswert entsprechend der Fitnessfunktion berechnet. Die Fitnessfunktion dient innerhalb des genetischen Algorithmus als Belohnungsmechanismus, um Individuen mit einem höheren Fitnesswert zu bevorzugen. Dafür werden die spezifischen Lösungen an die Modelle weitergegeben und die vorhergesagte Zielgröße der Modelle als Distanzmaß der Zielfunktion ausgewertet. Dieser Vorgang wird so lange wiederholt, bis entweder ein bestimmter Fitnesswert erreicht oder die Anzahl von zu durchlaufenden Generationen erreicht wurde.

³⁰⁹ Bei der Fitnessfunktion muss ein Maximierungsproblem vorliegen, sodass Lösungen mit hoher Fitness bevorzugt werden.

5.4 Zwischenfazit

Interim conclusion

In diesem Kapitel wurde ein Demonstrator für eine Software-Lösung entwickelt und vorgestellt, die es ermöglicht optimale Parametereinstellungen für den Produktionsanlauf durch die Einbindung von Machine Learning Ensembles zu finden. Die Benutzeroberfläche ermöglicht die anwendungsspezifischen Angaben von Prozessgrenzwerten, Zielgrößen und übernimmt alle erforderlichen Anfragen und Berechnungen zur Bestimmung der Parameter.

Die verwendeten Applikationen ermöglichen es, den Demonstrator auf unterschiedlichen Betriebssystemen auszuführen und ermöglicht dadurch eine hohe Flexibilität für verschiedene Produktionsumgebungen. Neben der Umsetzung einer webbasierten Oberfläche für eine systemunabhängig Lösung lassen sich Programmierschnittstellen (engl.: Application programming interface, API) erstellen, welche eine höhere Automatisierung durch die unmittelbare Einbindung in das Produktionssteuerungssystem ermöglichen. Auf dieser Grundlage folgt die Beantwortung der fünften Teilforschungsfrage:

Teilfrage 5: Wie kann die Methode in realen Produktionsumgebungen genutzt werden?

Die Softwarearchitektur ermöglicht die Implementierung der entwickelten Methode in der Produktion und zeigt eine systemunabhängige Lösung für eine Produktionsumgebung während der Inbetriebnahme der Anlagentechnik. Die Bedienoberflächen leitet den Anwender durch die erforderlichen Schritte für die Nutzung des genetischen Algorithmus.

Im nächsten Abschnitt erfolgt die konkrete Anwendung und Validierung der Methodik anhand eines Anwendungsbeispiels und der Implementierung von prozessbezogenen Teilmodellen.

6 Anwendung und Validierung der Methodik

Application and validation of the methodology

In diesem Abschnitt soll das Konzept zur Optimierung der Parametereinstellung anhand einer beispielhaften industriellen Anwendung aus der Batteriezellproduktion dargestellt und validiert werden. Zunächst werden die Validierungsziele definiert und die verwendeten Validierungstechniken (Abschnitt 6.1) dargestellt. Danach wird das Anwendungsbeispiel aus der Batteriezellproduktion (Abschnitt 6.2) vorgestellt und die Methodik angewendet. Im Anschluss erfolgen ein abschließendes Fazit und eine Reflektion der Ergebnisse (Abschnitt 6.3).

6.1 Definition und verwendete Validierungstechniken

Definition and applied validation techniques

Für die Validierung der entwickelten Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung werden zunächst die Ziele definiert und anschließend sowohl für die Vorgehensweise als auch für den Demonstrator in den Kontext dieser Arbeit übertragen.³¹⁰ Zu Beginn werden die grundlegenden Begriffe der Verifizierung und Validierung im Zusammenhang von Modellen und Simulationen definiert.

Im Allgemeinen sind die Verifizierung und Validierung der formale Prozess, um die Zuverlässigkeit eines Systems zu überprüfen. Während die Verifizierung sich auf die Durchführung und Korrektheit des Entwicklungsprozesses konzentriert, zielt die Validierung darauf ab zu überprüfen, ob sämtliche Anforderungen im Hinblick auf den Verwendungszweck umgesetzt und erfüllt wurden.³¹¹ In Bezug auf das Anwendungsfeld haben sich verschiedene Sichtweisen und formale Definitionen der Begriffe Verifizierung und Validierung etabliert. Im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens (engl.: Scientific computing) wurden die grundlegenden Prinzipien zur Verifizierung und Validierung von Modellen und Simulationen von Oberkampff und Roy erörtert und vorgestellt:³¹²

- **Verifizierung:** Nachweis, ob ein computergestütztes Modell das zugrundeliegende mathematische Modell und dessen Lösung korrekt wiedergibt.
- **Validierung:** Nachweis, inwiefern ein Modell ein zutreffendes Abbild der realen Welt aus der Perspektive der beabsichtigten Verwendung des Modells ist.

Beide Begriffsdefinitionen basieren auf der *American Society of Mechanical Engineers*. Da die Validierung im Kontext des maschinellen Lernens der Vergleich von Berechnungsergebnissen mit experimentellen Daten ist, werden diese beide Begriffe in Anlehnung an das *American Institute of Aeronautics and Astronautics* durch den Begriff der Vorhersage ergänzt:³¹³

³¹⁰ Die Validierung erfolgt in Anlehnung an Kostyszyn (Statistisches Test auf ausreichende Regelkartenleistungen) 2021, S. 107ff.

³¹¹ Vgl. Taylor (Methods and Procedures for the Verification and Validation of Artificial Neural Networks) 2006, S. 10f.

³¹² Vgl. Oberkampff et al. (Verification and validation in scientific computing) 2010, S. 21ff.

³¹³ Vgl. Oberkampff et al. (Verification and validation in scientific computing) 2010, S. 28.

- **Vorhersage:** Verwendung eines Berechnungsmodells zur Vorhersage des Verhaltens eines physikalischen Systems unter Bedingungen, für die das Modell noch nicht validiert wurde.

Aus diesen Begriffsdefinitionen ergibt sich für die Validierung der vorliegenden Arbeit das Ziel, zu ermitteln, inwiefern sich entwickelte Methode zur Ermittlung der Parametereinstellung durch den Einsatz von Modellensembles eignet. Dabei werden sowohl die erstellten Teilmodelle als auch deren Implementierung in den genetischen Algorithmus verifiziert und validiert. Für die Validierung werden bestehenden Validierungstechniken genutzt. Eine Übersicht von produktionsrelevanten Validierungstechniken wird in Tabelle 7 dargestellt und nach dem Grad ihrer Subjektivität geordnet. Für die nachfolgende Validierung werden sowohl Ansätze mit einem hohen Grad der Subjektivität als auch mit einem geringen Grad der Subjektivität für die Untersuchung des Verhaltens und der Ergebnisse des Modells verfolgt.

Tabelle 7: Grad der Subjektivität und Auswahl bestehender Validierungstechniken^{314,315}

	Grad der Subjektivität			Angewendet
	hoch		gering	
Animation				
Begutachtung				
Schreibtischtest				✓
Strukturiertes Durchgehen				
Test von Teilmodellen				✓
Validierung im Dialog				✓
Monitoring				
Trace-Analyse				
Turing-Test				
Sensitivitätsanalyse				✓
Vergleich mit anderen Modellen				
Festwerttest				
Grenzwerttest				
Ursache-Wirkungs-Graph				
Validierung von Vorhersagen				
Vergleich mit aufgezeichneten Daten				✓
Dimensionstest				
Ereignis Validitätstest				
Statistische Techniken				
Test der internen Validität				✓

Um sicherzustellen, dass die trainierten und anschließend verwendeten ML-Modelle eine ausreichende Modellgüte vorweisen, werden sie jeweils als Teilmodelle getestet. Der Test von Teilmodellen beinhaltet die Überprüfung der Übereinstimmung zwischen den einzelnen

³¹⁴ Vgl. Rabe et al. (Verifikation und Validierung für die Simulation in Produktion und Logistik) 2008, S. 116.

³¹⁵ Vgl. Kostyszyn (Statistisches Testen auf ausreichende Regelkartenleistungen) 2021, S. 108.

Komponenten des Modells und den entsprechenden Teilen des realen Systems, wenn das Modell hierarchisch in Teilmodelle strukturiert ist. Diese Technik ermöglicht die Verifizierung und Validierung der Teilmodelle vor ihrer Integration in das Gesamtmodell und ergänzt somit den Validierungsprozess. Die Vergleichsanalyse mit aufgezeichneten Daten umfasst die Verwendung von Ein- und Ausgabedaten eines bestehenden realen Systems, um das Modell zu testen und zu validieren. Dabei werden die Ergebnisse des Modells mit den aufgezeichneten Daten abgeglichen, um ihre Übereinstimmung zu überprüfen. Gegebenenfalls werden Anpassungen am Modell vorgenommen. Durch die Kreuzvalidierung während des Trainings der Teilmodelle, werden die historischen Daten in einen Trainingsdatensatz und einen Testdatensatz aufgeteilt, wodurch der Abgleich mit dem realen System inhärent gegeben ist.³¹⁶

Für die Validierung des genetischen Algorithmus und der Einbindung der Teilmodelle, werden verschiedene Grenzwerte für die Prozessparameter getestet. Diese Sensitivitätsanalyse beinhaltet die Variation von Eingabeparametern eines Modells, um die Auswirkungen auf die Ausgabeparameter zu bestimmen und sicherzustellen, dass die beobachteten Veränderungen mit den realen Beobachtungen übereinstimmen. Besondere Aufmerksamkeit wird den sensitiven Parametern geschenkt, bei denen geringfügige Änderungen starke Schwankungen in den Ergebnissen verursachen können (z.B. Bahngeschwindigkeit, Anteil von Binder). Darüber hinaus wird geprüft, inwiefern der genetische Algorithmus bei der Parametersuche zu den gleichen Lösungswerten gelangt. Der Test der internen Validität beinhaltet die Durchführung mehrerer Simulationsläufe mit identischen Parameterkonstellationen und unterschiedlichen Startwerten³¹⁷, um statistische Unsicherheiten zu untersuchen und festzustellen, ob die Abweichungen der Ergebnisgrößen zwischen den Läufen auf Modellfehler oder akzeptable Schwankungen im Verhalten des realen Systems zurückzuführen sind.³¹⁸

6.2 Anwendungsbeispiel aus der Batteriezellproduktion

Use case in battery cell production

Für die Validierung der Methode wird die Optimierung der Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion anhand eines Beispielschritts durchgeführt und angewendet. Zunächst wird das entsprechende Referenzsystem definiert (Abschnitt 6.2.1) und die zu berücksichtigenden Prozesskenngrößen ausgewählt (Abschnitt 6.2.2). Die Versuchsdurchführung wird beschrieben (Abschnitt 6.2.3) und die vorhandene Datengrundlage den Teilmodellen zugeordnet (Abschnitt 6.2.4). Anschließend erfolgen die Modellierung der Teilmodelle (Abschnitt 6.2.5 und 6.2.6) sowie deren Integration in das Gesamtmodell (Abschnitt 6.2.7). Abschließend wird das übergeordnete Gesamtmodell validiert (Abschnitt 6.2.8).

³¹⁶ Vgl. Rabe et al. (Verifikation und Validierung für die Simulation in Produktion und Logistik) 2008, S. 95ff.

³¹⁷ Die Startwerte beziehen sich auf die Initialisierung der 0. Generation, bei der ein Zufallszahlengenerator die Parameterwerte erzeugt.

³¹⁸ Vgl. Rabe et al. (Verifikation und Validierung für die Simulation in Produktion und Logistik) 2008, S. 95ff.

6.2.1 Definition des Referenzsystems

Definition of the reference system

Die Validierung der vorgestellten Methode zur Optimierung der Parametereinstellung wurde mit Hilfe der Anlagentechnik einer Pilotzellfertigung für Pouchzellen durchgeführt. Die dazugehörige Prozesskette wird in Abbildung 64 dargestellt.

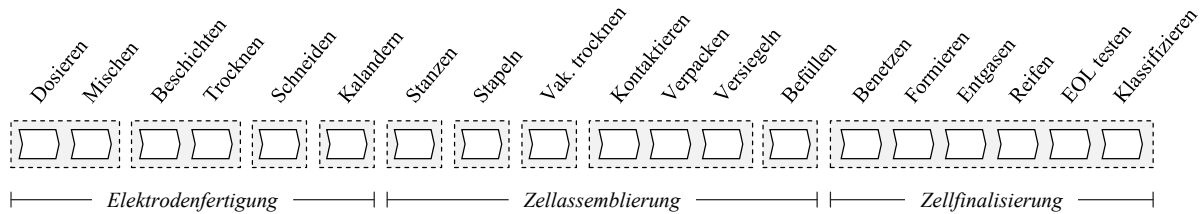


Abbildung 64: Prozesskette der Batteriezellproduktion für Pouchzellen

Die Elektrodenherstellung und insbesondere der Beschichtungsprozess haben einen hohen Einfluss auf den Ausschuss innerhalb der Batteriezellproduktion.³¹⁹ Daher soll in dem Anwendungsbeispiel der Methode der Beschichtungsprozess mit Schlitzdüse betrachtet werden und eine Parametereinstellung umgesetzt werden. Da die Beschaffenheit und Rheologie des Slurries einen wesentlichen Einfluss auf das Beschichtungsergebnis und dessen Stabilität hat, wird hierzu neben dem Hauptprozess, dem Beschichten, der vorgelagerte Nebenprozess, das Mischen, hinzugezogen. Das Referenzsystems wird in Abbildung 65 schematisch dargestellt.

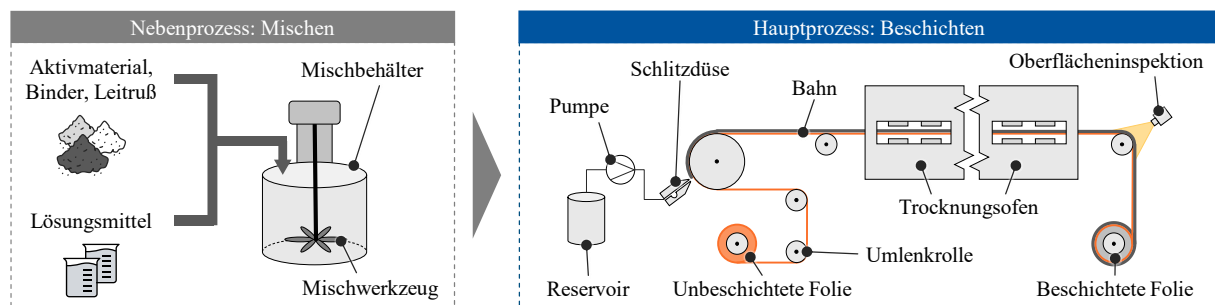


Abbildung 65: Schematische Darstellung des Referenzsystems (mit Haupt- und Nebenprozess)³²⁰

Das übergeordnete Ziel ist, ein Modell zu erstellen, das basierend auf der Materialzusammensetzung des Slurries und des geforderten Prozessdurchsatzes die optimalen Werte der anderen Parameter und Komponenten für ein optimales Beschichtungsergebnis vorhersagt. Die Oberflächenqualität wird durch die Aufnahme von Beschichtungsbildern ermittelt. Der Modellumfang wird daher auf den Prozess von der Vermischung der Eingangsmaterialien bis zur Beschichtung des Slurries auf die unbeschichtete Folie festgelegt und schließt Effekte der Trocknung vorerst nicht ein.

³¹⁹ Vgl. Kehrner et al. (Analysis of Possible Reductions of Rejects in Battery Cell Production) 2021.

³²⁰ Die zugrundeliegende Anlagentechnik entstammt der Batteriezellpilotproduktion des eLab der RWTH Aachen University. Dabei handelt es sich um den Mischer der Firma Eirich vom Typ EL 1 und der Beschichtungsanlage der Firma Bürkle mit Schlitzdüsenauflage. Eine Übersicht der Anlagentechnik wird im Anhang aufgeführt.

6.2.2 Ermittlung und Auswahl der Prozesskenngrößen

Identification and selection of process parameters

Zur Identifizierung und Beurteilung geeigneter Prozessmerkmale und -parameter werden zunächst Untersuchungen und Erkenntnisse aus der Literatur herangezogen. Dabei werden insbesondere Faktoren zur Bewertung der Beschichtungsqualität betrachtet und untersucht, welche Auswirkungen die Prozessparameter auf die Prozessqualität haben. Eine detaillierte Beschreibung des Misch- und Beschichtungsprozesses sowie der Qualitätsmerkmale in der Elektrodenfertigung ist bereits in Abschnitt 2.2.1 erfolgt. In Tabelle 8 werden die identifizierten Prozesskenngrößen für die weitere Betrachtung einer Modellierung aufgeführt.

Tabelle 8: Liste der Prozesskenngrößen und Auswahl der betrachteten Merkmale

Prozesskenngröße	Prozess	Einheit	Erfassung	Gefordert?	Relevant?
Massenanteile (trocken)	Mischen	wt. %	Präzisionswaage		✓
Massenanteile (nass)	Mischen	wt. %	Präzisionswaage		✓
Mischdrehzahl	Mischen	U/min	Anlageneinstellung		
Mischdauer	Mischen	min	Anlageneinstellung		
Viskosität (Slurry)	Mischen	mPas	Rheometer		✓
Partikelgröße (Slurry)	Mischen	µm	Grindometer		
Schlitzdüsenabstand	Beschichten	µm	Messlehre		
Schlitzdüsenpalt	Beschichten	mm	Werkzeuggröße		
Pumpendrehzahl	Beschichten	U/min	Anlageneinstellung		✓
Bahngeschwindigkeit	Beschichten	m/min	Anlageneinstellung		✓
Bahnspannung	Beschichten	N/mm ²	Anlageneinstellung		
Nassschichtdicke	Beschichten	µm	Messlehre	✓	✓
Trocknungstemperatur	Beschichten	°C	Anlageneinstellung		
Oberflächenqualität	Beschichten	/	Kameraaufnahme	✓	✓

Für den Beschichtungsprozess sind insbesondere die Bahngeschwindigkeit, die Durchflussrate und die Viskosität des Slurries von Bedeutung. In dem zugrundeliegenden Referenzsystem kann die Bahngeschwindigkeit unmittelbar über die Anlage eingestellt werden. Die Durchflussrate wird über die Pumpendrehzahl der Zahnradpumpe vorgegeben. Eine Analyse der Prozessfenster für die Beschichtung zeigt, dass die Viskosität des Slurries den größten Einfluss auf die Stabilität des Beschichtungsprozesses hat. Die Viskosität hängt in erster Linie von der Zusammensetzung des Slurries und den Massenanteilen der Eingangsmaterialien ab. Insbesondere der Bindemittelgehalt beeinflusst die Rheologie des Slurries und resultiert in der Regel zu einem nicht-newtonschen Fließverhalten führt.

Somit besteht die Modellierung aus zwei Teilschritten: Modellierung der Prozesskenngrößen beim Mischen und Modellierung der Prozesskenngrößen beim Beschichten. Die zentrale Fragestellung, die anhand der Daten für den Mischprozess beantwortet werden soll, ist, wie die Viskosität des Slurries von der Zusammensetzung abhängt. Nach dem Mischvorgang wird der vorbereitete Slurry im Beschichtungsprozess auf die Elektrodenfolie aufgebracht. Daher folgt die übergeordnete Zielsetzung für den Beschichtungsprozess, welche die Oberflächenqualität

der beschichteten Elektrode basierend auf den Maschinenparametern und dem Fließverhalten des Slurries zugrunde legt.

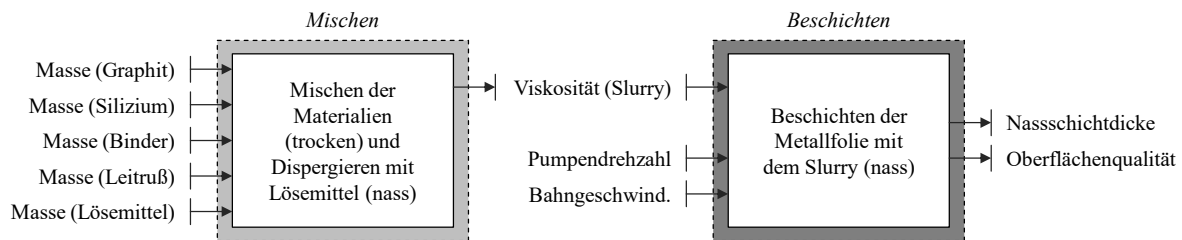


Abbildung 66: Parameterdiagramm für die Prozesse Mischen und Beschichten

Die Prozesskenngrößen für die Modellierungsaufgabe lassen sich somit anhand der beiden Prozess Mischen und Beschichten auswählen (vgl. Abbildung 66). Als Zielgrößen der Prozessparameteroptimierung dienen die Nassschichtdicke sowie die Oberflächenqualität der Beschichtung. Darüber hinaus werden für das Beschichten die Prozessparameter Bahngeschwindigkeit und Pumpendrehzahl als direkte Eingangsgrößen sowie die Viskosität des Slurries als indirekte Eingangsgrößen über die Form der Fließkurve herangezogen. In einem vorgelagerten Teilmodell werden dafür die relativen Mengenverhältnisse der Materialbestandteile (Graphit, Silizium, Binder, Leitruß sowie Lösemittel) als Eingangsgrößen genutzt, um die Form der Fließkurve, d.h. den Achsenabschnitt und Kurvenverlauf, vorherzusagen.

6.2.3 Analyse der vorhandenen Daten und Versuchsdurchführung

Analysis of existing data and experimental trials

Für die Modellierung der Prozesskenngrößen wird zunächst die verfügbare Datengrundlage analysiert. Allerdings verfügt die beschriebene Pilotzellerfertigung über keine systematische Datenaufzeichnung, da sich der Produktionsbetrieb einerseits durch experimentelle Forschung charakterisiert und andererseits die Anlagentechnik in keine zentrale Leitebene eingebunden ist. Um dennoch die erforderlichen Daten zu erheben, werden alternative Versuchsdurchführungen geplant, die Methoden der statistischen Versuchsplanung einbezieht. Diese Versuchsplanung ermöglicht es, die relevanten Prozesskenngrößen und deren Einfluss auf die Ausgangsgrößen zu bestimmen und daraus eine Modellierung abzuleiten. Nachfolgend werden die Erhebung der Slurry- und Materialdaten sowie der Beschichtungs- und Bilddaten detailliert vorgestellt. Abschließend erfolgt eine Zwischenfazit, ob eine ausreichende Datengrundlage vorliegt und mit der Modellierung fortgesetzt werden kann.

Versuchsdurchführung für Slurry- und Materialdaten

Um die möglichen Auswirkungen auf die Viskosität der Slurry zu bewerten, wurden Versuche mit verschiedenen Kompositionen der Eingangsmaterialien durchgeführt. Die Slurries wurden aus einer Mischung aus sphäroidischem Graphit und Silizium als Aktivmaterial, einer Mischung aus CMC und SBR als Bindemittel und geringen Mengen an Leitruß (Carbon Black) hergestellt. Das Verhältnis von CMC und SBR wurde konstant bei 2:3 gehalten, entsprechend

den Empfehlungen aus der Literatur für eine optimale elektrochemische Leistung.³²¹ Eine Übersicht der variierten Materialmengen wird in Tabelle 9 als prozentualer Anteil des Trockengewichts der aktiven Materialien dargestellt.

Tabelle 9: Prozentualer Anteil des Trockengewichts der Eingangsmaterialien

Komponente	Min. Wert	Max. Wert	Schrittgröße
Graphite (SG3)	75,0 %	95,0 %	1,0 %
Silizium	0,0 %	3,0 %	2,5 %
Binder (CMC und SBR)	2,0 %	12,0 %	1,0 %
Leitruß (Carbon Black)	2,0 %	3,0 %	1,0 %

Anhand der festgelegten prozentualen Anteile und der Schrittgrößen (Tabelle 9) wurde ein Mischversuchsplan für verschiedene Materialzusammensetzungen erstellt. Für alle Slurries wurde das Verhältnis von Feststoffgehalt zu Lösemittel (destilliertem Wasser) konstant bei 2:3 gehalten. Die Slurries wurden mit einem VMA Dispermat CA Dispergierer hergestellt. Für jede Zusammensetzung wurden 50 ml Slurry angesetzt. Zunächst wurden die Eingangsmaterialien mit Hilfe einer Präzisionswaage eingewogen und in einem Becherglas vermischt, um später eine homogene Verteilung der Bestandteile in dem Slurry sicherzustellen. Das SBR wurde als wässrige Lösung in destilliertem Wasser (40 %) zugeführt und im Dispergierer 5 Minuten bei 500 U/min vermischt. Danach wurden die vorgemischten Eingangsmaterialien nach und nach in die Lösung gegeben, um Agglomeratbildung zu vermeiden. Die Suspension wurde anschließend 20 Minuten mit dem Dispergierer bei 2000 U/min gemischt. Anschließend wurde das fertige Slurry für kurze Zeit ruhen gelassen, um eine Entspannung und Abkühlung der Flüssigkeit vor der Viskositätsmessung zu ermöglichen. Die Viskosität der Slurries wurde mit einem Anton Paar MCR 72 Rotationsrheometer bestimmt. Für die Viskositätsmessung wird die Probe auf eine Temperatur von 25 °C erwärmt. Das Rotationsviskosimeter wurde mit logarithmisch ansteigenden Scherraten zwischen 1 und 1000 s⁻¹ eingestellt und die Viskosität an 21 Punkten gemessen. Es wurden insgesamt 44 Zusammensetzungen (Slurries) und die dazugehörigen

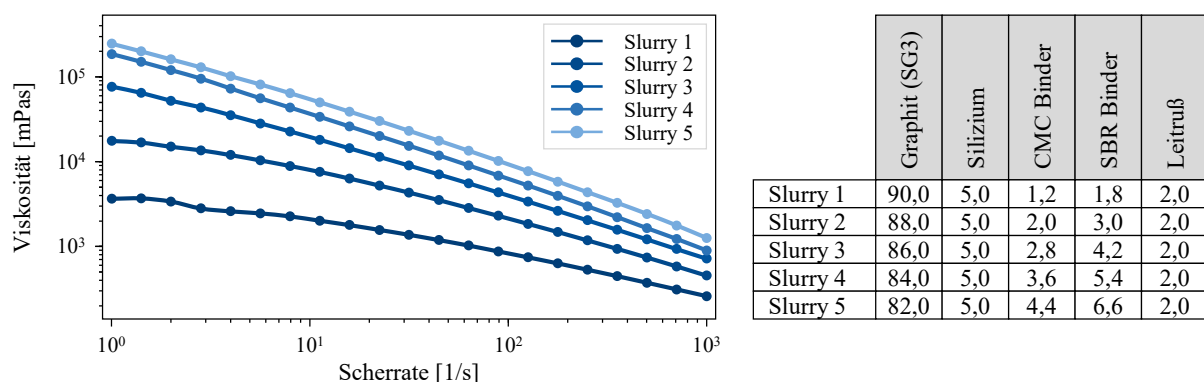


Abbildung 67: Auszug der Fließkurvenmessungen mit variierten Bindemittelgehalten

³²¹ Vgl. Zheng et al. (Optimization of Ratio and Amount of CMC/SBR Binder for a Graphite Anode) 2010, S. 200.

Fließkurven erstellt. Die Viskositäten der Slurries reichen von 184,3 mPas bis 627.370,0 mPas. Die Fließkurven zusammen mit den zugrundeliegenden Materialzusammensetzungen der Slurries bilden damit die Grundlage für die Produktionsdaten für das Referenzsystem Mischen.

Ein Auszug der experimentell ermittelten Fließkurven ist in Abbildung 67 dargestellt. Die Daten wurden auf doppelt logarithmischen Achsen aufgetragen. Es wird deutlich, dass die Viskosität ab einer bestimmten Schergeschwindigkeit nahezu linear ist. In den dargestellten Slurries wird mit steigendem Index die Menge an Graphit zunehmend durch Bindemittel ersetzt, was erwartungsgemäß zu einer insgesamt steigenden Viskosität, aber auch zu einem leicht erhöhten Scherverdünnungsverhalten führt.

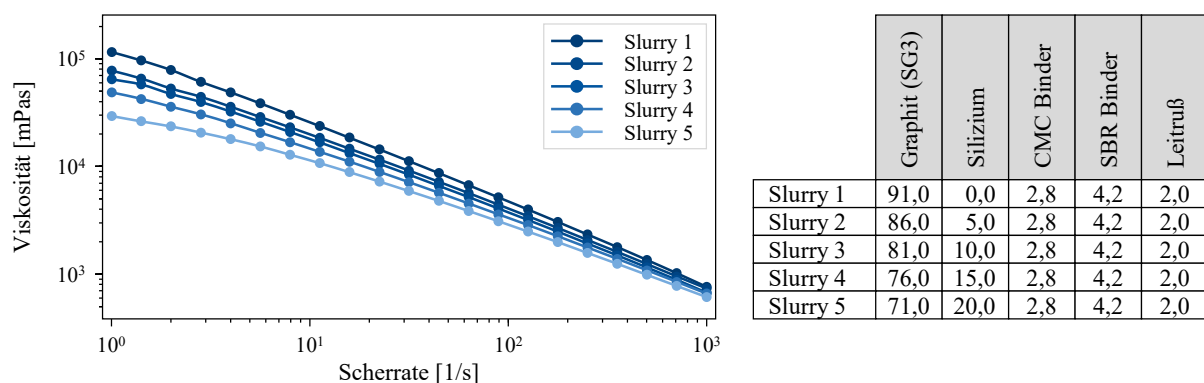


Abbildung 68: Auszug der Fließkurvenmessungen mit variierten Graphit-Silizium Verhältnissen

In Abbildung 68 sind die Fließkurven verschiedener Slurries dargestellt, in denen unterschiedliche Mengen an Graphit durch Silizium ersetzt wurden. Steigende Siliziumgehalte führen zu stetig sinkenden Viskositäten. Der Effekt ist bei niedrigeren Schergeschwindigkeiten stärker ausgeprägt und gleicht sich zu hohen Schergeschwindigkeiten hin an.

Versuchsdurchführung für Beschichtungs- und Bilddaten

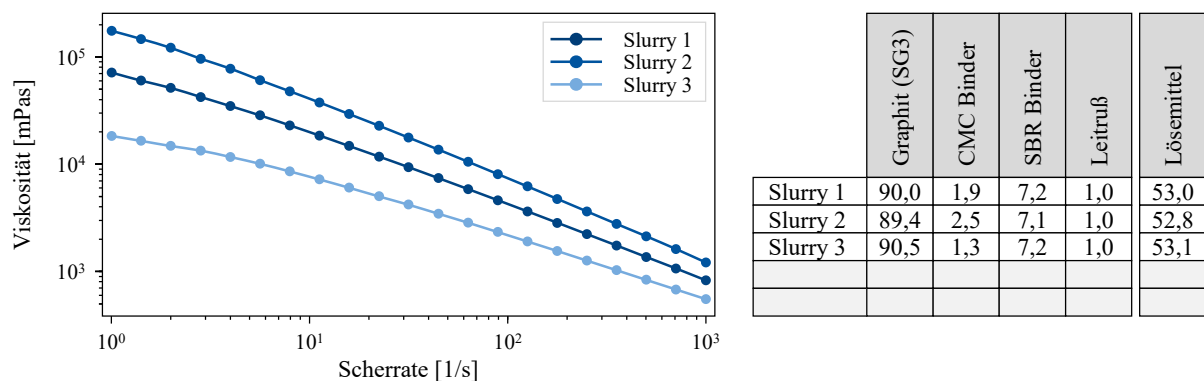
Um Daten für das Training und die Auswertung der Modelle zu generieren, wurden Beschichtungsversuche auf einer Bürkle 2000K1 Beschichtungsanlage mit Schlitzdüse durchgeführt. Die Beschichtungsbreite der Schlitzdüse betrug 250 mm und die Breite des Beschichtungsspalts war mit 200 µm eingestellt. Die Durchflussmenge wurde mit einer Scherzinger Zahnradpumpe mit einem Fördervolumen von 0,16 ml pro Umdrehung geregelt. Die Beschichtung wurde auf eine 300 mm breite Kupferfolie mit einer Foliendicke von 10 µm aufgetragen. Die beschichtete Folie wurde anschließend in einem Konvektionstrockner getrocknet. Anschließend wurden Bilder der trockenen Beschichtung mit einer Cognex Kamera mit einer Auflösung von 2448 Pixeln über die Breite der Folie aufgenommen. Danach wurde die beschichtete Folie zur Lagerung aufgerollt, um sie für weitere Versuche zu verwenden oder zu recyceln.

Die Beschichtungsversuche fanden an drei Tagen statt, wobei an jedem Tag ein unterschiedliches Slurry vorbereitet und unmittelbar verarbeitet wurde. Nach jedem Versuchstag wurden die Anlagen gründlich gereinigt, um eine Verunreinigung des Materials zu vermeiden. Die Slurries wurden mit Graphit, Leitruß und Binder in destilliertem Wasser als Lösungsmittel hergestellt. Die Zusammensetzungen der Slurries sind in Tabelle 10 aufgeführt.

Tabelle 10: Massenanteile und Zusammensetzungen der verwendeten Slurries

Komponente	Slurry 1	Slurry 2	Slurry 3
Graphite (SG3)	564,00 g	562,30 g	565,70 g
Leitruß (Carbon Black)	6,00 g	5,98 g	6,02 g
CMC Binder	12,00 g	16,00 g	8,00 g
SBR Binder	45,00 g	44,87 g	45,14 g
Lösemittel (Dest. Wasser)	706,00 g	703,85 g	708,14 g

Das rheologische Verhalten der Slurries wurde mit der zuvor beschriebenen Methode der Viskositätsmessung bestimmt. Die resultierenden Fließkurven sind in Abbildung 69 dargestellt, wobei das Verhältnis der trockenen Bestandteile zueinander und das Verhältnis des Lösungsmittels zur Trockenmenge aufgeführt ist.

**Abbildung 69: Fließkurven der verwendeten Slurries für die Beschichtungsversuche**

Die Slurries verhielten sich im Hinblick auf die Variation der CMC-Menge wie erwartet. Das Slurry 2 war zähflüssiger als Slurry 1. Das Slurry 3 war insgesamt weniger viskos. Bei höheren Schergeschwindigkeiten zeigten alle Slurries ein typisches Scherverdünnungsverhalten. Da bei dem Beschichtungsprozess mit Schlitzdüse vor allem die höheren Scherraten relevant sind, können die Fließkurven für die Modellierung verwendet werden.

Tabelle 11: Prozessparameter für die Beschichtungsversuche

Parameter	Min. Wert	Max. Wert	Schrittgröße
Bahngeschwindigkeit (m/min)	0,5 (0,5)	1,5 (2,0)	0,5 (0,5)
Pumpendrehzahl (U/min)	100 (50)	200 (375)	50 (25)

An den ersten beiden Versuchstagen wurden 12 Parameterkombinationen für Slurry 1 und Slurry 2 getestet. Am dritten Tag wurden 24 Kombinationen für Slurry 3 verwendet, darunter die 12 der vorangegangenen Tage sowie Kombinationen mit höheren Bahngeschwindigkeiten und einer größeren Bandbreite an Durchflussraten. Eine Übersicht der variierten Prozessparameter wird in Tabelle 11 dargestellt.

Während der Versuche wurden 1582 Bilder der trockenen Beschichtung aufgenommen. Für jedes der Bilder wurden anhand des Bildzeitstempels und des Parameterprotokolls die für die Beschichtung verwendeten Parameter ermittelt. Einige der Bilder konnten nicht eindeutig einem Parametersatz zugeordnet werden oder zeigten den Übergang zwischen zwei

Parametersätzen. Da die Gesamtzahl der Bilder pro Satz groß genug war, wurden die fraglichen Bilder aussortiert. Durch diese Filterung verblieben 1413 Bilder mit ihren jeweiligen Produktionsparametern im Datensatz. Ein Auszug von charakteristischen Bildern aus den Beschichtungsversuchen wird in Abbildung 70 dargestellt.

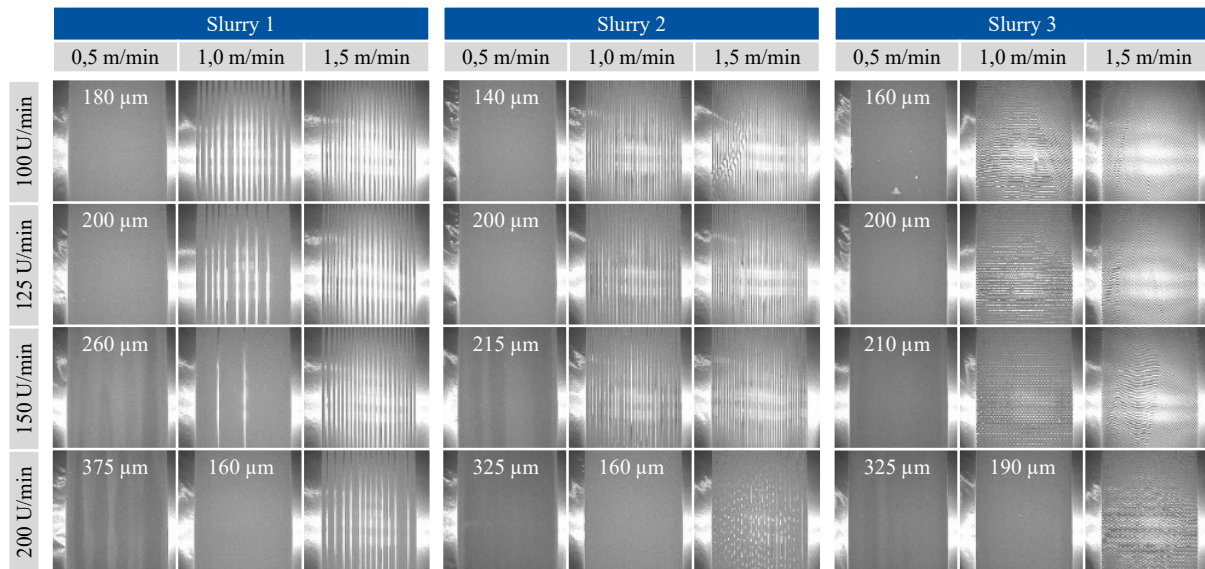


Abbildung 70: Auszug der Bildaufnahmen aus den Beschichtungsversuchen inkl. Nassschichtdicke

Um ein Modell zu trainieren, das die Qualität der Beschichtung vorhersagt, muss aus diesen Bildern eine Qualitätsmetrik abgeleitet werden, da sie in der gegebenen Prozesskonfiguration die einzige verfügbare Qualitätsmessung darstellen. Für die Skalierbarkeit der anschließenden Modellierung muss die Erkennung der Defekte automatisiert werden. Die Schritte zur Erreichung dieses Ziels umfassen die Vorverarbeitung der Bilder, die Extraktion relevanter Merkmale aus den Bildern und schließlich die Klassifizierung der Bilder anhand der aus ihnen extrahierten Merkmale.

Zwischenfazit und Bewertung der Datengrundlage

Basierend auf den durchgeführten Versuchsreihen und der systematischen Versuchsplanung lässt sich zusammenfassen, dass eine ausreichende und geeignete Datengrundlage geschaffen wurde, welche den zuvor definierten Kriterien gerecht wird:

Genauigkeit: In den durchgeführten Versuchen wurden kalibrierte Sensoren und Messgeräte verwendet, die eine hohe Präzision aufweisen und die Messwerte digital aufnehmen und anzeigen, um manuelle Messfehler auszuschließen. Außerdem wurden durch die Versuchsplanung eine hohe Plausibilität und Validität der Ergebnisse gewährleistet, indem systematische Fehler minimiert und zufällige Fehler kontrolliert werden. Diese Vorgehensweise führte zu einer hohen Genauigkeit der erhobenen Daten.

Vollständigkeit: In den durchgeführten Versuchsreihen wurden alle relevanten Prozesskenngrößen berücksichtigt und erfasst. Auch wurden Zeitreihendaten unterschiedlicher Datenquellen in der Auswertung berücksichtigt und miteinander synchronisiert. Diese Vorgehensweise ermöglichte es, eine vollständige Datengrundlage zu schaffen, die für eine aussagekräftige Modellierung der Prozesskenngrößen notwendig ist.

Aktualität: Während der Versuchsdurchführung wurde stets darauf geachtet, möglichst aktuelle Daten zu erheben und zu dokumentieren. Beispielsweise wurden Messungen unmittelbar nach dem Versuch durchgeführt, um einen aktuellen und unverfälschten Datenbestand zu erhalten (z.B. die Messung der Viskosität des Slurries mit dem Rheometer), wodurch eine aktuelle und repräsentative Datengrundlage geschaffen wurde.

Nachdem eine ausreichende Datengrundlage geschaffen wurde kann anschließend mit der Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle und der Modellierung fortgeführt werden. Um ein tiefes Verständnis der Prozesskenngrößen zu gewinnen, werden die Daten vor der eigentlichen Modellierung analysiert und vorbereitet.

6.2.4 Zuordnung der vorhandenen Daten in Teilmodelle

Assignment of the available data into submodels

Die Zuordnung der vorhandenen Daten in entsprechende Teilmodelle erfolgt basierend auf dem erstellten Parameterdiagramm. Als Zielgrößen für die Parametereinstellung wurden in Abschnitt 6.2.2 sowohl die Nassschichtdicke als auch die Oberflächenqualität der Beschichtung gefordert und definiert. Neben der Bahngeschwindigkeit und der Pumpendrehzahl beeinflusst die Viskosität des Slurry diese Zielgrößen. Die Daten für die Viskosität liegen als doppellogarithmische Fließkurven über die Scherrate vor. Für die Viskosität als Eingangsgröße werden die einzelnen Datenpunkte der Fließkurve als Parameter des Fließgesetz nach Ostwald-de-Wa-ele (vgl. Abschnitt 6.2.3) modelliert. Dies dient als Näherungsansatz zur Beschreibung des Verhaltens von nicht-newtonsche Flüssigkeiten. Somit wird jeweils ein Teilmodell für die Modellierung der Nassschichtdicke und der Oberflächengüte sowie für die Modellierung der Viskosität des Slurry benötigt.

Die vorhandene Datengrundlage aus den Beschichtungsversuchen erlaubt für jede Bildaufnahme sowohl die Einstellung der Bahngeschwindigkeit und der Pumpendrehzahl als auch die verwendete Materialzusammensetzung des Slurry zu auszulesen. Um die Bildaufnahmen zu operationalisieren wird vor Modellierung der Oberflächenqualität ein Clustering der Bilder vorgenommen.

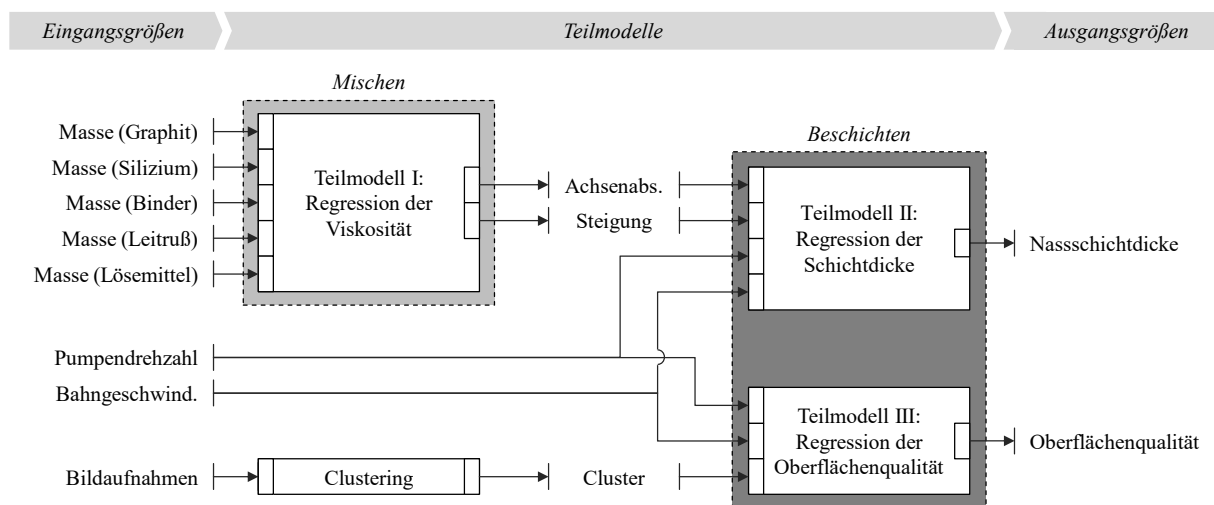


Abbildung 71: Zuordnung der Daten in Teilmodelle

Für das betrachtete Anwendungsbeispiel ergibt sich daraus wie in Abbildung 71 dargestellt die Zuordnung der vorhandenen Daten zu den drei Teilmodellen für die Regression der Viskosität, der Schichtdicke und der Oberflächenqualität, sowie dem vorgeschalteten Clustering.

Datenvorbereitung der Slurry- und Materialdaten

Um eine unabhängige Verteilung der Komponenten sicherzustellen, wurden die Pearson-Korrelationskoeffizienten zwischen den Bestandteilen aller Proben berechnet (Tabelle 12). CMC und SBR haben eine perfekt positive Korrelation, da ihr Verhältnis für alle Slurries konstant gehalten wurde. Daher sollte nur eine der beiden Binder als unabhängige Variable in der Modellierungsphase verwendet werden. Darüber hinaus besteht eine starke negative Korrelation zwischen dem Silizium- und dem Graphitgehalt, da die Änderungen durch den Austausch von Graphit durch Silizium erreicht wurden.

Tabelle 12: Korrelationsmatrix der Komponenten für die Slurries

	Graphit	Silizium	CMC	SBR	Leitruß
Graphit	1,000	-0,902	-0,391	-0,391	0,216
Silizium	-0,902	1,000	-0,040	-0,040	-0,253
CMC	-0,391	-0,040	1,000	1,000	-0,109
SBR	-0,391	-0,040	1,000	1,000	-0,109
Leitruß	0,216	-0,253	-0,109	-0,109	1,000

Da einige der Zusammensetzungsdaten absolute und nicht relative Mengen der Bestandteile enthalten, besteht der erste Schritt bei der Aufbereitung der Daten darin, die Gehalte zu normalisieren, indem sie durch die Gesamtmenge der trockenen Bestandteile dividiert werden.

Anschließend werden die Viskositätsmessungen vorbereitet. Ziel ist es, später die Kennlinie vorherzusagen, die das Verhalten der Slurry bei verschiedenen Schergeschwindigkeiten beschreibt. Daher werden die Ostwald-de-Waele Koeffizienten für jedes Slurry berechnet. Wie aus den vorangegangenen Beispielen für Viskositätsdaten hervorgeht, verhalten sich die Slurries jedoch erst ab einer bestimmten kritischen Scherrate nach diesem Prinzip. Es muss ein Kompromiss zwischen der Einbeziehung aller relevanten Scherraten und dem Erreichen einer guten Kurvenanpassung gefunden werden.

Die bei der Schlitzdüsenbeschichtung auftretenden Scherraten hängen von den Prozessparametern und der Düsengeometrie ab. Die in der Literatur angegebenen Werte liegen im Bereich von 50 bis 3000 s⁻¹ für Beschichtungen mit Schlitzdüse.^{322,323} Darüber hinaus können die relativen Scherraten aus dem Strömungsprofil im Schlitzdüsenkörper abgeleitet werden. Nach geeigneter Näherung³²⁴ entstehen unter Vernachlässigung von Wirbeln die in Abbildung 72 dargestellten Strömungsprofile.

³²² Vgl. Kaiser et al. (Prozess- und Produktentwicklung von Elektroden für Li-Ionen-Zellen) 2014, S. 699.

³²³ Vgl. Chu et al. (The effect of inorganic particles on slot die coating) 2006, S. 220.

³²⁴ Vgl. Khandavalli et al. (The effect of shear-thickening on the stability of slot-die coating) 2016, S. 4541.

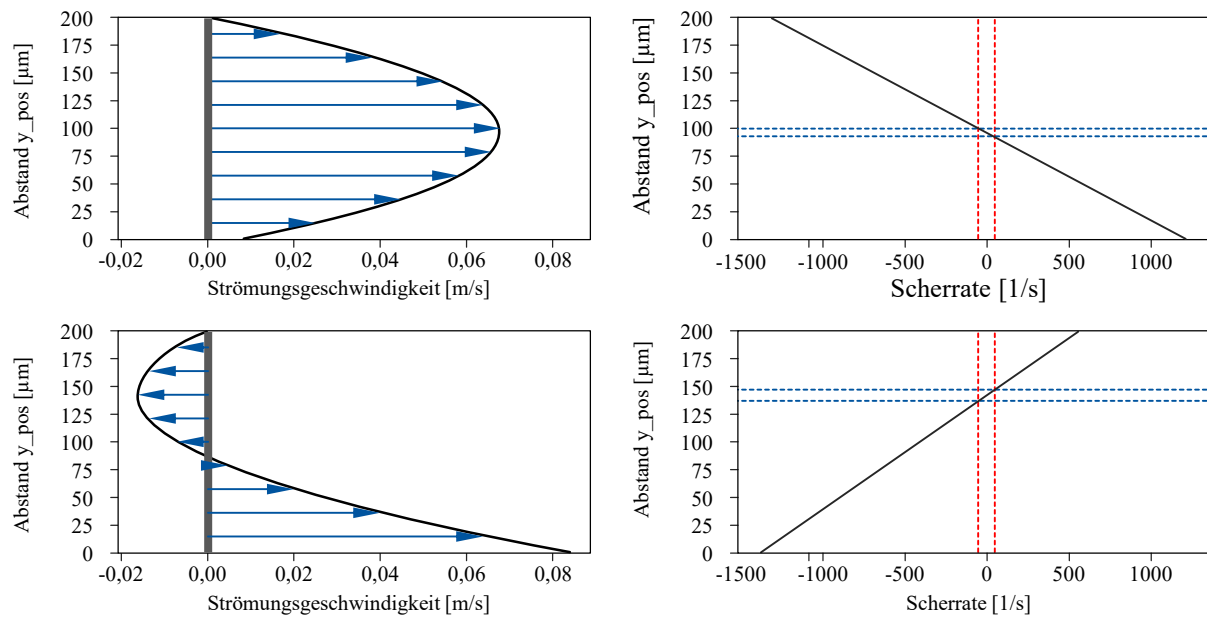


Abbildung 72: Strömungsprofil und Scherraten bei hoher (oben) und niedriger Ausbringung (unten)³²⁵

In der Literatur lassen sich ähnliche Strömungsprofile finden, wobei das unten abgebildete Strömungsprofil bei der Beschichtung mit Schlitzdüsen typischerweise vorkommt.³²⁶ Es ist zu erkennen, dass außerhalb einer kleinen neutralen Zone in der Mitte des Beschichtungsspalts die Scherraten relativ hoch sind. Die gestrichelten Linien in Abbildung 72 zeigen lediglich einen schmalen Bereich, in der Scherraten unter 50 s^{-1} beobachtet werden. In Anbetracht dieser Ergebnisse und der in der Literatur berichteten relevanten Schergeschwindigkeiten wird dieser Wert als minimale Schergeschwindigkeit angesehen.

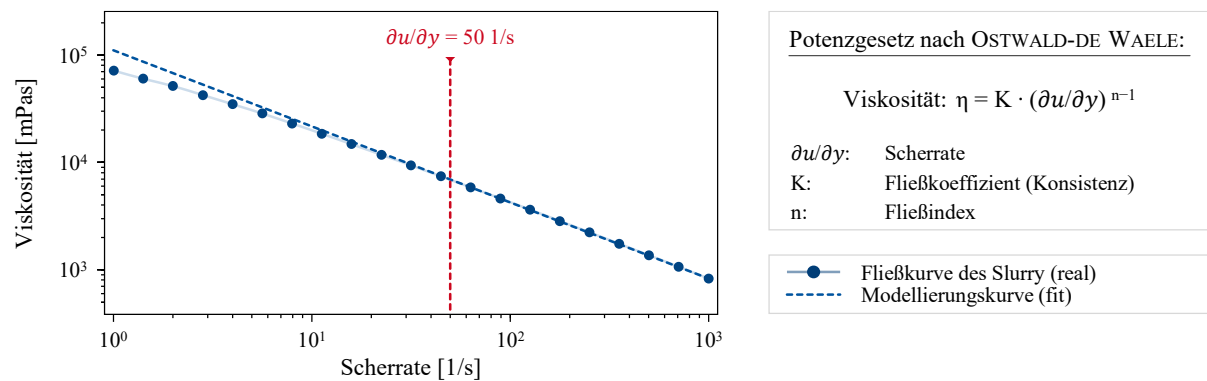


Abbildung 73: Angepasste Modellierungskurve für die Viskosität

Für alle Slurries wird ein Bestimmtheitsmaß von über 99 % beim Fitting der Fließkurven erreicht, wenn eine minimale Schergeschwindigkeit von 50 s^{-1} als Grenzwert für die Schergeschwindigkeit gewählt wird. Daher ist der Fit der Kurve angemessen und die minimale Scherrate muss nicht weiter erhöht werden. Ein Beispiel für eine angepasste Modellierungskurve und

³²⁵ Für die Berechnung der Strömungsprofile und der lokalen Scherraten wurden beispielhaft die Parameter $Q = 100 \text{ ml/h}$, $v = 0,5 \text{ m/min}$ für eine hohe Ausbringungsrates und $Q = 20 \text{ ml/h}$, $v = 5 \text{ m/min}$ für eine niedrige Ausbringungsrates gewählt.

³²⁶ Vgl. Khayat et al. (Coating Flow Near Channel Exit) 2020, S. 6.

die zugrunde liegenden Messungen ist in Abbildung 73 dargestellt. Bei der weiteren Modellierung der Fließkurven werden zur einfacheren Visualisierung die zwei Kurvenkoeffizienten Steigung und Achsenabschnitt für die Modellierungskurve verwendet. Diese können jeweils aus den Ostwald-de-Waele Koeffizienten ermittelt werden, wobei die Steigung $n-1$ und der Achsenabschnitt $\log(K)$ ist.

Datenvorbereitung der Beschichtungs- und Bilddaten

Für die Beschichtungsversuche wurde unterschiedliche Materialzusammensetzungen verarbeitet. Die Parameter der Fließkurven der verwendeten Slurries für die Beschichtungsversuche sind gemäß dem Ostwald-de-Waele Gesetz analog zu dem Vorgehen aus Abschnitt 6.2.3 in Tabelle 13 angegeben.

Tabelle 13: Kurvenparameter der verwendeten Slurries für die Beschichtungsversuche

	Slurry 1	Slurry 2	Slurry 3
Steigung	-0,3645	-0,4034	-0,2371
Achsenabschnitt	9,1345	9,6081	7,7035

Für jedes Slurry wurden die entsprechenden Prozess- und Prüfparameter tabellarisch erfasst und gespeichert. Daraus lassen sich für jede Bildaufnahme die verwendete Materialzusammensetzung und die entsprechenden Einstellungen der Anlage zurückverfolgen und ablesen. Die Beschichtungs- und Bilddaten stehen als CSV-Datei für die Modellierung zur Verfügung.

Verschiedene Beschichtungsdefekte können zu makroskopischen Defektmustern führen und somit die Qualität der Elektrode beeinträchtigen. Diese Defekte lassen sich auf Bildaufnahmen der Beschichtung erkennen. Der wichtigste Schritt bei der Datenaufbereitung besteht darin, diese Defekte in den verfügbaren Bildern zu erkennen.

Der erste Schritt in der Vorverarbeitung der Bilder ist die Skalierung von der ursprünglichen Auflösung auf 224·224 Pixel. Dies ermöglicht eine schnellere Vorverarbeitung und insbesondere eine schnellere Merkmalsextraktion. Diese Auflösung ist der Standard für viele moderne Bilderkennungsmodelle. Da die zu erkennenden Defekte groß sind, sollte die reduzierte Auflösung diesem Zweck nicht schaden. Im zweiten Schritt werden die Bilder zugeschnitten, um die unbeschichteten Ränder der Folie sowie die Kanten abzuschneiden, an denen sich die Stützwalze von der Kamera krümmt und Schatten auf dem Bild hinterlässt. Schließlich werden die RGB-Farbkanäle des Bildes in Bezug auf das üblicherweise verwendete ImageNet-Trainingsset nullzentriert. Dies ermöglicht die Verwendung von Modellen, die zuvor auf diesem Datensatz trainiert wurden, um später für die Merkmalsextraktion verwendet zu werden. Das Ergebnis der Vorverarbeitung ist in Abbildung 74 zu sehen.

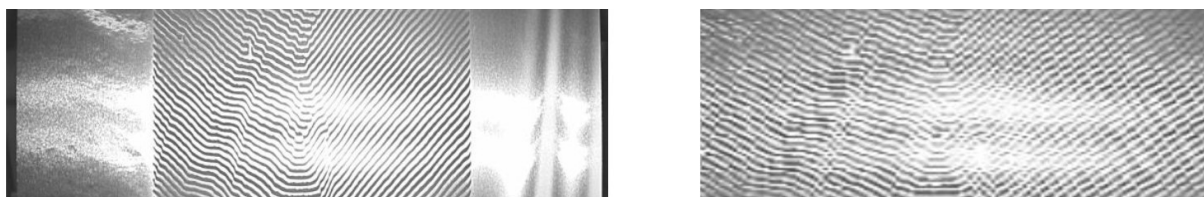


Abbildung 74: Beschichtungsbild vor (links) und nach der Vorverarbeitung (rechts)

Zur Extraktion von Merkmalen aus den verarbeiteten Bildern wird ein CNN verwendet. Da zunächst nur allgemeine Merkmale ohne eine problemspezifische Klassifizierung extrahiert werden, kann Transfer Learning unter Verwendung eines vortrainierten Netzwerks angewendet werden. Zu diesem Zweck wird ein hochmodernes VGG16 Netzwerk vom Typ D verwendet, das auf dem ImageNet-Datensatz vortrainiert wurde.³²⁷ Das Netzwerk besteht aus einer großen Anzahl von Convolutional und Pooling Layern. Die genaue Architektur kann in der Referenz nachgelesen werden. Das Modell ist so vortrainiert, dass es die 1000 Klassen des ImageNet-Datensatzes unterscheiden kann. Um es für die Merkmalsextraktion zu verwenden, werden die letzten beiden Dense Layer entfernt, die für die Klassifizierung verwendet würden. Es verbleibt ein Netz mit 14,7 Millionen vortrainierten Parametern, das einen Vektor von 25088 Fließkommazahlen ausgibt, die die Merkmale des Eingabebildes beschreiben.

Das VGG16 Netzwerk wird auf alle vorverarbeiteten Bilddaten angewendet, um Merkmalsvektoren zu erzeugen. Im nächsten Schritt werden diese Merkmale zur Klassifizierung der Bilder verwendet. Um die manuelle Beschriftung der Bilder zu vermeiden und potenziell neue Erkenntnisse über unterscheidbare Klassen zu gewinnen, wird das unüberwachte Lernverfahren K-Means Clustering auf die Merkmalsvektoren angewendet. Um eine sinnvolle Anzahl von Clustern zu bestimmen, wird der Algorithmus für eine unterschiedliche Anzahl von Clustern ausgeführt. Anschließend wird die Kohärenz der Cluster analysiert, indem sowohl Bilder innerhalb eines Clusters als auch ihre Abgrenzung zu anderen Clustern optisch verglichen werden. Außerdem wird die sich ergebende Änderung der Quadratsumme innerhalb eines Clusters (engl.: within-cluster sum of square) beim Hinzufügen weiterer Cluster untersucht.

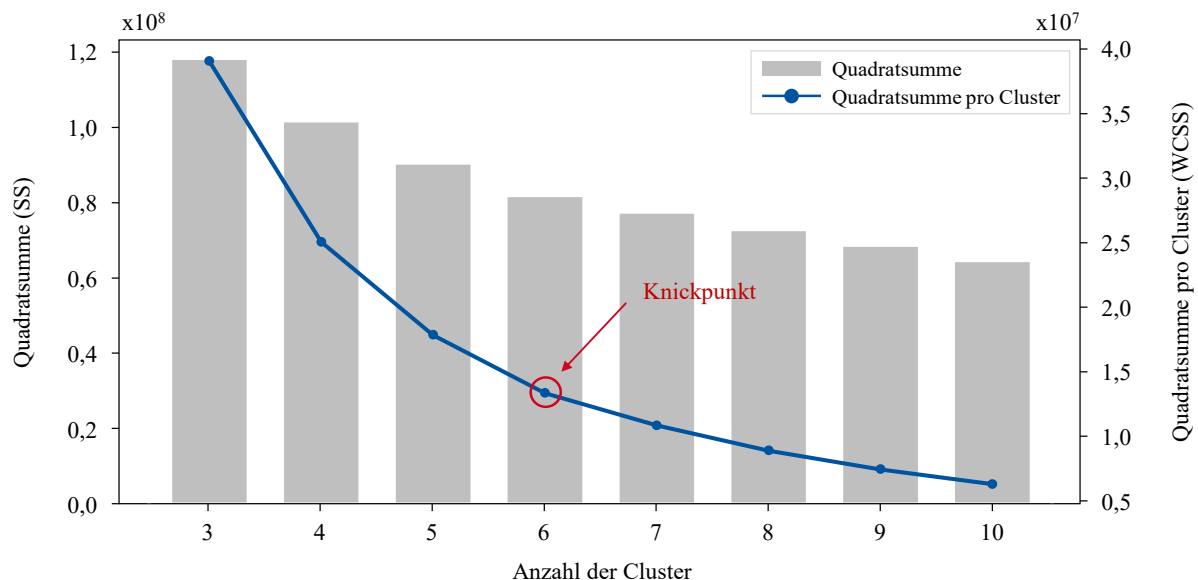


Abbildung 75: Trägheit für verschiedene Anzahlen von Clustern

Das Ergänzen weiterer Cluster verringert die Quadratsumme kontinuierlich. Der Knickpunkt kennzeichnet die ideale Clusteranzahl (vgl. Abbildung 75). Außerdem zeigt eine manuelle

³²⁷ Vgl. Simonyan et al. (Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition) 2014, S. 3.

Überprüfung der Klassifizierung, dass Bildaufnahmen bei bis zu sechs Clustern deutlich unterscheidbar sind.

In Abbildung 76 sind charakteristische Beschichtungsbilder der sechs Cluster zu sehen. Die Cluster zeigen (0) Rattern, (1) feine Streifenbildung, (2) vollständige Beschichtung, (3) breite Streifenbildung, (4) vereinzelte Streifenbildung und (5) Luftpinschlüsse oder einen Übergangszustand zwischen Rattern und Streifenbildung. Bei mehr als sechs Clustern sind neu hinzukommende Cluster nur leichte Variationen der bereits identifizierten Cluster. Dies könnte bereits für Cluster 1 und Cluster 3 argumentiert werden, jedoch sind diese Cluster so markant, dass sie bereits bei der Bestimmung von fünf Clustern vorliegen. Der vom Algorithmus hinzugefügte Cluster 4 besteht aus Bildern, die zuvor in Cluster 2 als fehlerfrei eingestuft wurden. Da es keine weiteren Bilder gibt, die als fehlerfrei eingestuft werden, und bei einer visuellen Inspektion keine offensichtlichen neuen Fehlerklassen in den Daten verbleiben, wird die Clustering in sechs als akzeptabel erachtet. Die daraus resultierende Klassifizierung der Bilder ist als Qualitätsmaßstab für die Modellierung ausreichend. Die Clusternummern werden zu den jeweiligen Parametern im Datensatz als Klasse hinzugefügt und dienen als Qualitätsdaten für die Bewertung der Beschichtungsqualität.

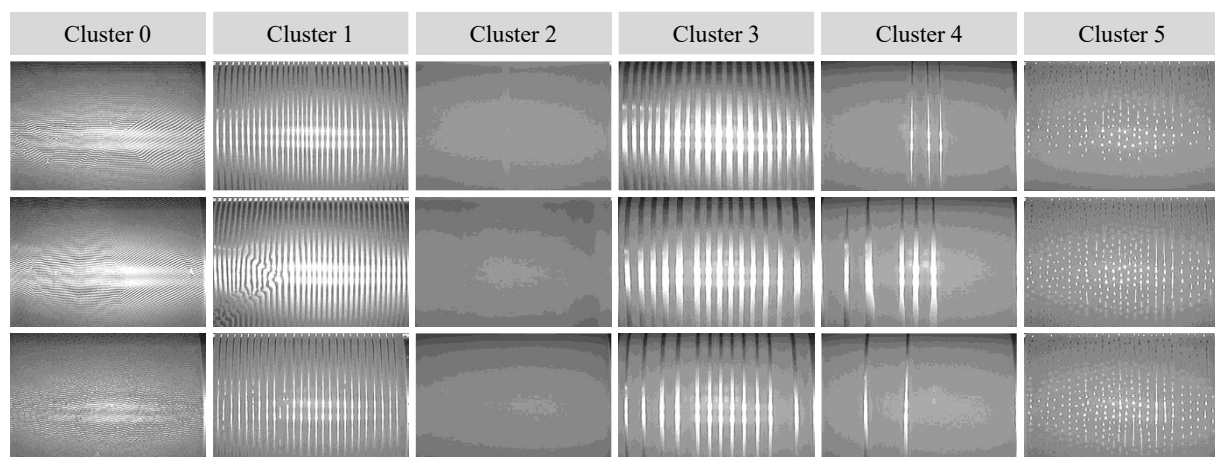


Abbildung 76: Charakteristische Beschichtungsbilder aus jedem der identifizierten Cluster

Für die Klassifizierung kann die Qualitätsmetrik der Cluster auf zwei Arten verwendet werden. Einerseits können die Cluster direkt verwendet werden, was den Vorteil hat, dass die Kenntnis der relativen Positionen der Cluster dem Agenten des Modells helfen kann, später effiziente Optimierungsstrategien zu finden. Andererseits kann die Klassifizierung auch auf eine binäre Klassifizierung reduziert werden, indem Cluster 2 als akzeptabel und alle anderen als fehlerhaft eingestuft werden, was den Vorteil hat, dass die Klassifizierungsaufgabe durch die Reduzierung der Anzahl der Cluster weniger komplex wird. Beide Strategien werden nachfolgend für die Modellierung betrachtet.

Nachdem die Qualitätsdaten generiert wurden, werden die Daten schließlich für die Modellierungsphase vorbereitet. Die Werte der einzelnen Parameter werden erneut nullzentriert und auf den Bereich $[-1; 1]$ skaliert, um die späteren Trainingsergebnisse zu verbessern. Außerdem werden die Klassifizierungswerte in eine einstellige Kodierung umgewandelt. Das heißt, es wird ein binärer Code mit der gleichen Anzahl von Ziffern und Klassen erstellt, wobei eine richtige Klassifizierung durch den Wert 1 und alle anderen durch den Wert 0 dargestellt werden.

Schließlich werden die Daten in einen Trainings- und einen Testdatensatz aufgeteilt, wobei von den Daten 80 % den Trainingsdaten und 20 % den Testdaten zugeordnet werden. erfolgt die Aufteilung nicht zufällig, sondern basierend auf den individuellen Dateneinträgen von Pumpendrehzahl, Bahngeschwindigkeit und Viskosität. Anschließend werden die Dateneinträge, die zu jedem Parametersatz gehören, dem jeweiligen Datensatz zugeordnet. Es wird darauf geachtet, eine Aufteilung zu finden, bei der sowohl der Trainings- als auch der Testdatensatz ähnliche relative Häufigkeiten der einzelnen Klassen enthält (vgl. Tabelle 14). Da Cluster 5 nur bei einem einzigen Parametersatz vorkommt, konnte dieser innerhalb der Aufteilung nicht ausgeglichen werden. Die resultierende Aufteilung enthält 1100 Einträge in den Trainingsdaten und 179 Einträge in den Testdaten, da die Anzahl der Stichproben pro Parameterkombination unterschiedlich ist.

Tabelle 14: Relative Klassenhäufigkeiten in der Datenaufteilung

	Cluster 0	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5
Trainingsdatensatz	0,17	0,13	0,42	0,15	0,07	0,06
Testdatensatz	0,06	0,11	0,47	0,26	0,09	0,00

Die Daten enthalten für einige Parametersätze inkonsistente Stichproben, d.h. unterschiedliche Klassifizierungen für dieselbe Parameterkombination. Dies schränkt die maximale Genauigkeit ein, die ein Vorhersagemodell erreichen kann. Die maximalen Genauigkeiten können berechnet werden, indem man annimmt, dass das perfekte Modell immer die häufigste Klasse für jeden Parametersatz vorhersagt. Während der Testsatz konsistent ist, beträgt die maximale Genauigkeit auf dem Trainingssatz 98 %, was bei der Bewertung der Modelle berücksichtigt werden muss. Sie sollte das Training nicht behindern, da die meisten Modelle in der Lage sind, die Wahrscheinlichkeiten der Klassen aus inkonsistenten Daten zu lernen.

6.2.5 Modellierung der Prozesskenngrößen beim Mischen

Modelling the process parameters for mixing

Auf der Grundlage der aufbereiteten Slurry- und Materialdaten soll ein Modell ermittelt werden, das das rheologische Verhalten des Slurries in Abhängigkeit von seiner Materialzusammensetzung abbildet. Das Hauptziel ist die Vorhersage der Viskositäten bei verschiedenen Schergeschwindigkeiten. Die Daten aus den Mischversuchen wurden nach dem Zufallsprinzip in einen Test- und einen Trainingssatz mit jeweils der Hälfte der Stichproben aufgeteilt. Es wurden mehrere zufällige Aufteilungen erzeugt und eine ausgewählt, bei der die Trainingsdaten Werte aus dem gesamten Wertebereich für jede Materialkombination enthielten, damit die trainierten Modelle auf einen möglichst großen Bereich von Zusammensetzungen anwendbar sind.

Da es sich aufgrund der Beschaffenheit der Daten um ein Regressionsproblem handelt, wird zunächst die Verwendung einer multiplen linearen Regression untersucht. Anschließend wird als Alternative zur linearen Regression ein ANN ermittelt, um die Parameter der Fließkurve auf der Grundlage der Materialzusammensetzung vorherzusagen.

Modellierung mit multipler linearer Regression

Um zu ermitteln, welche Variablen in der linearen Regression verwendet werden sollen, wird der Grad der Multikollinearität zwischen den Variablen durch Berechnung der VIFs für potenzielle Variablensätze bestimmt. In diesen Variablensätzen werden immer sowohl der Graphit- als auch der CMC-Gehalt aufgenommen, da sie quantitativ am relevantesten für die Viskosität sind. Der SBR-Gehalt wird bereits durch die Einbeziehung des CMC-Gehalts berücksichtigt, da sie linear voneinander abhängig sind. Es stellt sich daher die Frage, ob der Leitruf- und der Siliziumgehalt einbezogen werden sollen. Bei ausschließlicher Verwendung von CMC und Graphit als unabhängige Variablen beträgt der VIF bei einem Wert von 5,5. Die Grenzen für akzeptierte VIF Werte liegen zwischen 5 bis 10.³²⁸ Durch die Einbeziehung von Silizium erhöht sich der maximale VIF auf 5,8, während die Einbeziehung von Leitruf den VIF auf 27,96 erhöht. Die Daten zeigen, dass es eine starke Kollinearität zwischen dem Leitruf- und dem Graphitanteil gibt. Eine hohe Kollinearität der unabhängigen Variablen mindert jedoch nicht die Qualität der Regression, sondern erschwert nur die Bestimmung der spezifischen Einflüsse der einzelnen unabhängigen Variablen. Da es hier nicht darum geht, den Einfluss der einzelnen Variablen zu bestimmen, sondern eine genaue Vorhersage der abhängigen Variablen zu generieren, wird keine der unabhängigen Variablen aufgrund der Kollinearität ausgeschlossen. Stattdessen kann dies später erneut überprüft werden, um eine Überanpassung zu vermeiden.

Tabelle 15: Koeffizienten für eine multiple lineare Regression

	Graphit	Silizium	CMC	Leitruf
Steigung	-1,29	-0,61	-29,07	6,61
Achsenabschnitt	21,69	17,27	340,76	-26,72

Das erste angewandte Modell ist eine multiple lineare Regression, in der die relativen Mengenteile der einzelnen Komponenten nur als lineare Terme erscheinen. Die sich daraus ergebenden Modellkoeffizienten sind in Tabelle 15 dargestellt.

Wie erwartet, hat der CMC-Gehalt den stärksten Einfluss auf das rheologische Verhalten, indem er den Achsenabschnitt vergrößert und die negative Steigung steiler werden lässt. Vergleicht man Graphit mit Silizium, so stellt man fest, dass Graphit den Achsenabschnitt stärker erhöht, aber auch die Steigung steiler werden lässt, was die Angleichung von Slurries mit und ohne Silizium bei hohen Scherraten erklärt. Höhere Leitruf-Gehalte führen zu einer niedrigeren Anfangsviskosität und einer geringeren Steigung. Die Koeffizienten für Leitruf sind möglicherweise überhöht, und zwar sowohl wegen des geringen Gehalts als auch wegen der geringen Varianz im Trainingssatz und der hohen Kollinearität mit den anderen Variablen.

Als Metrik zur Bewertung der Qualität der Regression auf dem Datensatz wurde der Bestimmungskoeffizient verwendet. Auf dem Trainingsset erreicht dieses erste Modell ein R^2 von 0,899 für den Steigungskoeffizienten und 0,932 für den Achsenabschnitt. Auf dem Trainingsset liegen die Koeffizienten bei 0,863 und 0,902. Diese Ergebnisse zeigen, dass das Modell in der

³²⁸ Vgl. James et al. (An Introduction to Statistical Learning) 2021, S. 101.

Lage ist, eine ausreichende Menge an nützlichen Informationen über die Viskositätskurve aus der Materialzusammensetzung zu ziehen. Um das Verhalten des Modells zu veranschaulichen und weiteres Potenzial zu ermitteln, sind die ursprünglichen und prognostizierten Werte für den Trainings- und Testdatensatz in Abbildung 77 dargestellt.

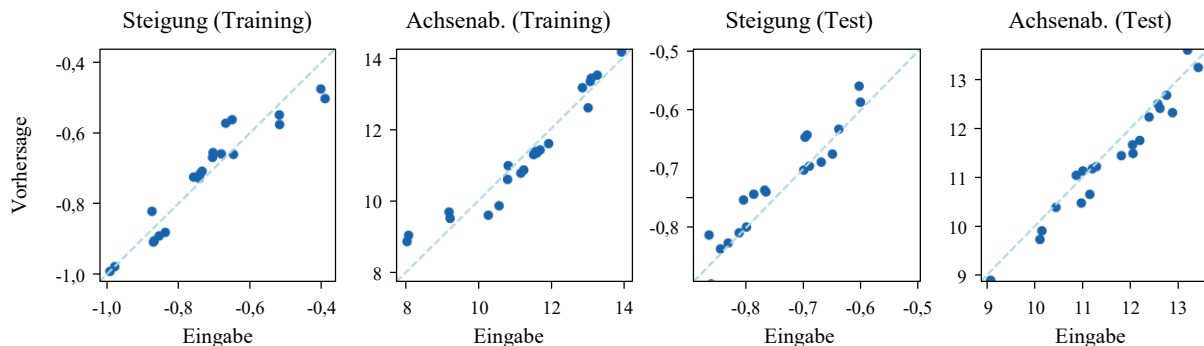


Abbildung 77: Vergleich von Vorhersage und Eingabe für das lineare Modell

Sowohl aus dem R^2 -Wert als auch aus der graphischen Überprüfung des Modellverhaltens geht hervor, dass das lineare Modell die Kurvenparameter ohne offensichtliche systematische Verzerrung bestimmt, da die Stichproben zufällig um die Linie mit der Steigung 1 verstreut sind. Dennoch zeigt das R^2 , dass die Vorhersagequalität hauptsächlich durch die Verzerrung des Modells begrenzt wird, da die Leistung im Trainingsatz nicht optimal und die Varianz nicht übermäßig hoch ist. Dies zeigt sich daran, dass die Leistung im Testdatensatz ähnlich zur Leistung im Trainingsdatensatz ist.

Um die Verzerrung des Modells zu reduzieren, werden nicht-lineare Basisfunktionen innerhalb der linearen Regression verwendet. Da bei der Vorhersage keine systematische Verzerrung erkennbar ist, werden als Naive Ansatz quadratische Basisfunktionen einschließlich Interaktionsterme verwendet. Da die Wechselwirkungen zwischen den Materialbestandteilen besonders interessant sein können, wird auch ein Modell ermittelt, das zusätzlich zu den linearen Termen auch die Bias-Terme erster Ordnung enthält (quadratisch). Zusätzlich wird ein Modell mit polynomialen Termen dritter Ordnung getestet. Die sich daraus ergebenden Bestimmungskoeffizienten sind in Tabelle 16 aufgeführt.

Tabelle 16: R^2 -Werte für lineare Regressionen mit verschiedenen Basisfunktionen

	Trainingsdatensatz		Testdatensatz	
	Steigung	Abschnitt	Steigung	Abschnitt
Linear	0,899	0,932	0,863	0,902
Quadratisch	0,939	0,971	0,895	0,933
– mit Bias-Term	0,939	0,971	0,895	0,933
Polynomial (kubisch)	0,983	0,992	0,815	0,882
– mit Bias-Term	0,966	0,983	0,881	0,934

Das Modell mit quadratischen Haupteffekten schneidet fast identisch ab wie das Modell, das nur Bias-Terme enthält, was bedeutet, dass aus den quadratischen Einflüssen der Variablen keine nützlichen Informationen gewonnen werden können. Dies ist bei dem kubischen Modell nicht der Fall. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass der Einfluss der Materialanteil

stetig ist und die quadratischen Terme diese Eigenschaft nicht erfüllen würden und daher beim Training ignoriert werden. Wie erwartet, nimmt die Genauigkeit der Modelle auf dem Trainingsatz mit zunehmender Anzahl von Termen zu, da die Verzerrung abnimmt. Ab den kubischen Basisfunktionen sinkt jedoch die Performance auf der Testmenge. Dies bedeutet, dass es zu einer Überanpassung der Trainingsdaten durch das Modell kommt.

Während des Trainingsprozesses ist auch zu beobachten, dass die Performance des Modells in Abhängigkeit von der Aufteilung zwischen Trainings- und Testdaten variiert. Dieses Verhalten ist bei den komplexeren Basisfunktionen stärker ausgeprägt. Um die Auswirkungen dieses Verhaltens auf die durchschnittliche Performance der Modelle für zukünftige Datensätze zu bewerten, werden die Modelle auf 1000 verschiedenen zufälligen Datensplits trainiert und der durchschnittliche R^2 -Wert sowohl für den Trainings- als auch für den Testdatensatz berechnet. Die Ergebnisse der Auswertung sind in Abbildung 78 als Histogramme dargestellt.

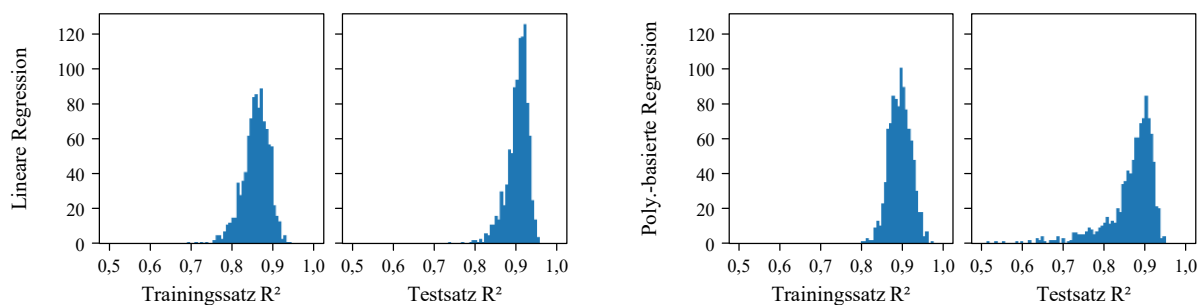


Abbildung 78: Performance von linearer und Polynom-basierter Regression bei 1000 Datensplits

Das Modell mit der polynomialen Basisfunktion schneidet bei den Trainingsdaten mit einem durchschnittlichen R^2 von 0,88 besser ab als das lineare Modell mit einem Durchschnitt von 0,86, was angesichts der höheren Anzahl von Parametern und der geringeren Verzerrung des polynomialen Modells zu erwarten ist. Bei den Testdaten schneidet das polynomiale Basismodell jedoch schlechter ab als das lineare Modell. Während die meisten Modelle für beide Basisfunktionen eine Leistung von etwa 0,82 erreichen, bewirkt die polynomiale Basis eine viel höhere Varianz in der Performance-Metrik. Dies ist ein typischer Fall von Überanpassung.

In Anbetracht dieser Beobachtungen ist es nicht von Vorteil, polynomiale Terme in das Modell aufzunehmen. Angesichts der unzureichenden Anpassung an die Trainingsmenge könnte es jedoch noch Raum für Verbesserungen geben. Daher wird ein alternatives Modell, das nicht auf linearer Regression basiert, auf das Modellierungsproblem angewendet.

Modellierung mit neuronalen Netzen

Als Alternative zur linearen Regression wurde ein neuronales Netz (ANN) erstellt, um die Parameter der Fließkurve auf der Grundlage der Materialzusammensetzung vorherzusagen. Der Vorteil des ANN ist, dass es jede Art von nicht linearem Verhalten modellieren kann, wenn es genügend Schichten und Knoten hat. Allerdings verfügt es auch über mehr Parameter, die eine Feinabstimmung zwischen Varianz und Bias erfordern. Die Komplexität des Modells wird maßgeblich durch die Anzahl der Schichten und Knoten pro Schicht bestimmt. Außerdem können in den verborgenen Schichten (engl.: Hidden Layer) verschiedene Aktivierungsfunktionen

verwendet werden. Um eine Überanpassung zu vermeiden, kann die Modellkomplexität reduziert werden, oder es können Regularisierungsterme zu den Schichten hinzugefügt werden.

Alle aufgestellten ANNs zeigen ähnliche Merkmale. Die erste Schicht jedes Netzes ist eine Normalisierungsschicht, die jede Eingabe so umwandelt, dass der Mittelwert der Eingabe 0 und die Standardabweichung 1 ist. Dies ist für die Leistungsfähigkeit des Netzes während des Trainings von Vorteil, da auf diese Weise die Variationen der einzelnen Merkmale skaliert werden. Dies gestattet vergleichbare Einflüsse auf die Ausgabe des Netzes, unabhängig von der typischen Größenordnung der Eingangswerte.³²⁹

Die Ausgabeschicht für jedes der Netze hat zwei Ausgänge mit einer linearen Aktivierungsfunktion. Auf diese Weise kann das Netz jeden realen Wert erzeugen und die Verwendung einer verzerrten Ausgangsfunktion wird vermieden. Die Verwendung einer Rectified Linear Unit (ReLU) Aktivierungsfunktion verhindert zum Beispiel negative Werte. Dies ist allerdings als problematisch anzusehen, da die Steigung der Viskositätskurve im Allgemeinen negativ ist.

Die für alle Netze verwendete Verlustfunktion ist der mittlere absolute Fehler in Prozent. Der Gesamtverlust wird als Mittelwert der Differenz zwischen der Vorhersage für jeden der Kurvenparameter und dem tatsächlichen Wert berechnet, der dann durch den tatsächlichen Wert geteilt wird, um einen relativen Fehler zu erhalten. Diese Methode bietet den Vorteil, dass sie die Auswirkungen der beiden Kurvenparameter, die unterschiedliche Durchschnittswerte aufweisen, normalisiert. Dies ist von Bedeutung, da der in der Rückkopplung (Backpropagation) verwendete Gesamtverlust des Netzes als Summe der Verluste für jeden der Ausgänge berechnet wird.

Die Netze unterscheiden sich in der Anzahl der Hidden Layer. Alle diese Netzwerke bestehen aus vollständig verbundenen Schichten (engl.: Dense Layer), wobei jeder Knoten mit jedem Knoten der vorherigen und nächsten Schicht verbunden ist. Die Netze weisen außerdem unterschiedliche Tiefen und Breiten auf, indem die Anzahl der Hidden Layer und die Anzahl der Knoten in jeder Schicht variiert wurde. Es wurden verschiedene Aktivierungsfunktionen untersucht, aber die einzige, die mit den Kurvenparametern kontinuierlich Konvergenz auf dem Datensatz erzielte, war die *tanh*-Funktion. Nach dem explorativen Training zahlreicher Modelle mit diesen allgemeinen Spezifikationen führte die kontinuierliche Anpassung dazu, dass fünf Architekturen, die konvergierten und bei den Trainings- und Testdaten eine gute Performance erzielten, für die weitere Analyse ausgewählt wurden. Von diesen Modellen wurden drei ohne Einbeziehung des Leitruß als Input entworfen. Ein Modell hingegen enthält alle sechs Komponenten des Slurry als Eingaben, um es mit zukünftigen Trainingsdaten kompatibel zu machen, die hinsichtlich des SBR- und Wassergehalts stärker variieren. Zwei der Netze enthielten eine L2- Regularisierungsfunktion, die hohen Gewichtungen in den Hidden Layer bestraft und dadurch die Überanpassung verringern kann.

³²⁹ Vgl. Bishop (Neural networks for pattern recognition) 2010, S. 298f.

Die ausgewählten Architekturen sind in Tabelle 17 aufgeführt, wobei jedes Model aus einem Inputlayer zuzüglich einem Normalisierungslayer, der Anzahl Hidden Layer und einem Output Layer besteht.

Tabelle 17: Architekturen der trainierten ANNs

Modell	Inputs	Layer	Knoten	Outputs	Parameter	Regularisierung
ANN-1	3	5	5	2	164	/
ANN-2	3	3	5	2	104	/
ANN-3	6	4	6	2	224	/
ANN-4	3	4	3	2	68	L2
ANN-5	4	4	3	2	79	L2

Der Verlauf des Trainings von ANN-2 ist in Abbildung 79 beispielhaft dargestellt. Während des Trainings zeigt das Netz in den ersten 250 Epochen eine hohe Leistungsverbesserung. Anschließend stagniert die Performance mit einer verhältnismäßig kleinen Verbesserung nach etwa 1300 Epochen.

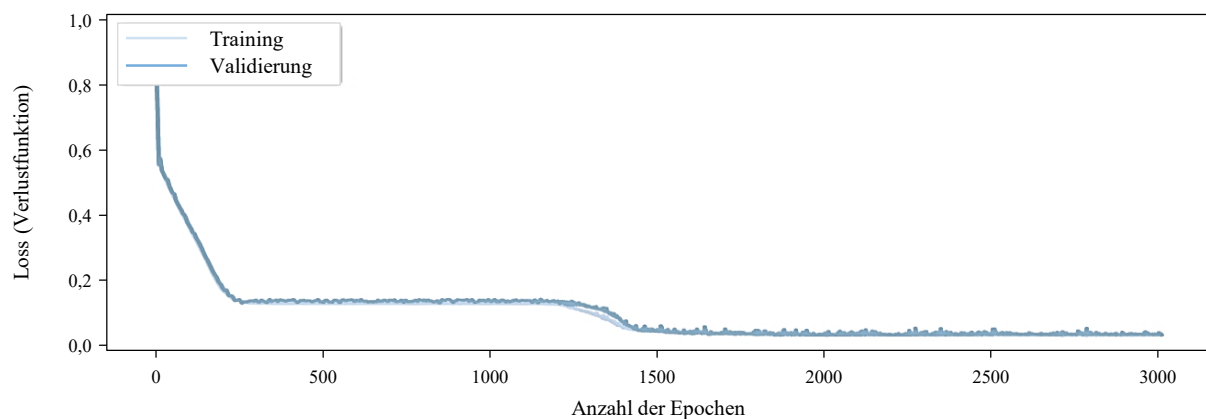


Abbildung 79: Trainingsverlauf über die Verlustfunktion von ANN-2

An diesem Punkt stützt das Netz seine Vorhersage ausschließlich auf die Ausgabedaten, zieht aber keine sinnvollen Schlüsse aus den Eingabedaten. Das Ergebnis ist, dass das Netz kontinuierlich den Mittelwert der Ausgabewerte ausgibt. Viele der Netze, die trainiert und dann wegen schlechter Leistung verworfen wurden, blieben in diesem Zustand stecken. Bei den hier vorgestellten Modellen wurde dieses lokale Verlustminimum jedoch überwunden, und die Leistung verbesserte sich weiter. Dies geschah unregelmäßig nach 100 bis 2000 Epochen des Trainings. Es wurde versucht, das lokale Minimum zu überwinden, indem man den Optimierer von ADAM auf SGD umstellte, die Lernrate veränderte oder lange mit unterschiedlichen Losgrößen trainierte. Es kann keine allgemeine Lösung für dieses Problem gegeben werden, aber solange die Netzarchitektur in der Lage ist, einige der Korrelationen innerhalb der Daten abzubilden, sollte sie diesen Schritt schließlich überwinden. Daher wurde eine anhaltende Stagnation als Indikator für eine Änderung der Netzarchitektur verwendet, die zu den oben aufgeführten Architekturen führte.

Jedes der Modelle wurde so lange trainiert, bis der Verlust bei einem neuen Minimum stagnierte oder der Validierungsverlust zu steigen begann, was auf eine Überanpassung hindeutet. Die Modellgüte der trainierten Modelle ist in Tabelle 18 aufgeführt.

Tabelle 18: R²-Werte für verschiedene neuronale Netze

	Trainingsdatensatz		Testdatensatz	
	Steigung	Abschnitt	Steigung	Abschnitt
ANN-1	0,942	0,944	0,859	0,926
ANN-2	0,873	0,943	0,829	0,940
ANN-3	0,950	0,910	0,966	0,981
ANN-4	0,971	0,990	0,936	0,965
ANN-5	0,933	0,961	0,956	0,957

Die Performance der ANN Modelle auf dem Trainingsdatensatz ist im Allgemeinen gleichwertig mit der Performance der linearen Regression mit quadratischer Basisfunktion. Allerdings zeigen die ANNs eine bessere Generalisierung auf den Testdatensatz; einige von ihnen erzielen sogar bessere Ergebnisse im Testdatensatz. ANN-2 scheint mit nur drei Layer zu flach zu sein und erreicht eine vergleichsweise niedrige Genauigkeit bei den Trainingsdaten. ANN-1 beschreibt zwar die Trainingsdaten relativ zuverlässig, erzielt aber bei den Testdaten keine zufriedenstellende Genauigkeit. ANN-4, das im Vergleich zu ANN-1 eine geringere Komplexität aufweist und Regularisierungsterme in den versteckten Schichten enthält, erreicht eine bessere Performance als ANN-1 in den Trainingsdaten und erzielt auch gute Ergebnisse in den Testdaten. Bei ANN-5 führt das Hinzufügen des Leitrußgehalts als vierter Parameter nicht zu einem eindeutigen Vorteil gegenüber ANN-4. Die beste Performance wird von ANN-3 erzielt. Dies kann jedoch mit anderen Effekten zusammenfallen. Zum Beispiel kann das Netz nach dem Training zufällig einen vorteilhaften Endzustand erreicht haben. Die zusätzlichen Inputs erhöhen auch die Anzahl der trainierbaren Parameter des Netzes, was eine bessere Anpassung an die Trainingsmenge ermöglicht, aber auch seine Varianz erhöhen kann. Daher werden in der abschließenden Bewertung sowohl ANN-3 als auch ANN-4 auf mehreren zufällig ausgewählten Testsätzen bewertet.

Evaluierung der Modellierung von Fließkurven

Nachdem die Modelle erstellt, trainiert und auf ihre Güte hin bewertet wurden, wird nun der Nutzen dieser Modelle für die Vorhersage des Prozesses bewertet. Zu diesem Zweck werden die Viskositätsvorhersagen bei verschiedenen Schergeschwindigkeiten mit den tatsächlichen Werten verglichen, die sich aus den Fließkurven ergeben. Die Viskositätswerte, die mit Hilfe der aus den Viskositätsmessungen generierten Kurvenparameter berechnet werden, werden anstelle der direkten Messungen verwendet. Da die Messungen nicht kontinuierlich sind und in leicht unterschiedlichen Schergeschwindigkeitsintervallen gemessen wurden, wäre ein direkter Vergleich mit den Modellvorhersagen schwierig. Aufgrund der hohen Abgrenzung der Kurvenanpassung ist der zusätzliche Fehler, der auf diese Weise entsteht, im Vergleich zu den Fehlern der Vorhersagemodelle gering. Außerdem ist der Fehler für alle Modelle gleich, so dass er den relativen Vergleich in keiner Weise beeinträchtigt.

Um jeglichen Einfluss von Vorteilen auf bestimmte Testsätze zu eliminieren, werden alle Modelle auf 100 zufällig generierten Testsätzen bewertet. Die Modelle werden bei zehn logarithmisch verteilten Scherraten zwischen 50 und 1000 s^{-1} bewertet. Der Fehler der Vorhersage relativ zum wahren Wert wird berechnet und über alle Scherraten gemittelt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 19 dargestellt.

Tabelle 19: Mittlerer Fehler und Standardabweichung der Modellabweichung

	Multiple lineare Regression			Neuronales Netz	
	Linear	Quadratisch	Quadratisch‘	ANN-3	ANN-4
Mittlerer Fehler	0,115	0,087	0,122	0,087	0,074
Standardabweichung	0,016	0,013	0,024	0,018	0,011

Die neuronalen Netze ANN-3 und ANN-4 zeigen eine gute Performance, wie es die Ergebnisse während des Entwurfsprozesses erwarten ließen. Modell ANN-4 zeigt eine etwas bessere Vorhersagegüte und geringe Streuung. Die lineare Regression mit quadratischer Basisfunktion zeigt ebenfalls eine gute Performance. Aber wie bereits erwähnt, ist die Modellvarianz hoch und hängt stark davon ab, dass sie auf einem dem Modell günstigen Trainingssatz trainiert wird. Die Werte bei einer ungünstigen Aufteilung (Quadratisch‘) wurden ebenfalls durch die Verwendung eines Modells mit quadratischer Basisfunktion generiert. Es wird verdeutlicht, dass die hohe Modellvarianz einen hohen Einfluss auf die Performance des Modells auf den Testdaten hat. Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass es möglich ist, Modelle zu trainieren, die die Viskosität über den gesamten Schergeschwindigkeitsbereich mit einer Fehlermarge von weniger als 10 % vorhersagen, wobei nur 22 Trainingsmuster verwendet werden.

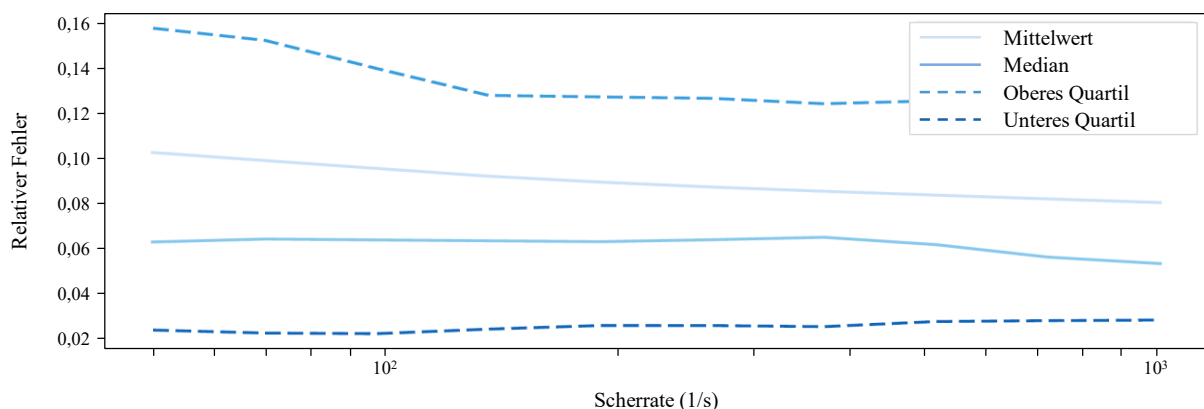


Abbildung 80: Verteilung des relativen Fehlers von ANN-4 auf dem Testdatensatz

In Abbildung 80 ist eine weitere Analyse der relativen Fehler von ANN-4 dargestellt. Die Abbildung zeigt den mittleren und medianen Fehler sowie das obere und untere Quartil über den Scherbereich von 50 bis 1000 s^{-1} für mehrere Slurries. Bei dieser Auswertung wurde nur der Testdatensatz verwendet, der zuvor beim Training des Netzes nicht genutzt wurde. Daraus geht hervor, dass das Modell die Viskosität für zuvor ungesehene Daten mit einem durchschnittlichen Fehler von etwa 10 % vorhersagen kann. Für mehr als 50 % der Slurries wird die Viskosität über den gesamten Scherbereich mit weniger als 7 % Fehler bestimmt. Selbst in ungünstigen Fällen bleibt die Vorhersage innerhalb von etwa 15 % des tatsächlichen Wertes. Die

Tatsache, dass der Fehler über die Scherbereiche in etwa konstant bleibt, zeigt, dass sowohl die Steigung als auch der Achsenabschnitt mit angemessener Genauigkeit vorhergesagt wurden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das angestrebte Ziel, die Viskosität der Slurries (basierend auf den Graphit-, Silizium- und CMC-Anteilen) über den gesamten Schergeschwindigkeitsbereich vorherzusagen, erreicht wurde. Außerdem konnte gezeigt werden, dass für neuartige Slurries mit variierenden CMC/SBR-Verhältnissen, höheren Variationen des Leitrüßanteils oder variierenden Wassermengen alternative Modelle erstellt und trainiert werden können, um eine ähnliche Genauigkeit zu erreichen. Aus den vorgestellten Modellen weist ANN-4 die höchste Eignung für die Modellierungsaufgabe auf.

6.2.6 Modellierung der Prozesskenngrößen beim Beschichten

Modelling the process parameters for coating

Das Beschichtungsmodell zielt darauf ab, die zu erwartende Nassschichtdicke und die Wahrscheinlichkeit einer einwandfreien Beschichtung vorherzusagen. Dafür werden sowohl die Parametereinstellungen als auch die Bildaufnahmen der Beschichtung herangezogen. Um ein passendes Modellierungsverfahren zu wählen, werden die zugrundeliegenden Prozesskenngrößen betrachtet, aus denen die Daten generiert wurden.

Die Prozessparameter zeigen kohärente Cluster, in denen entweder kein Fehler oder eine bestimmte Art Fehlerbild auftritt. Für diese Art von kohärenten Clustern mit meist deutlichen Grenzen ist die SVM in hohem Maße geeignet und sollte ausgezeichnete Ergebnisse erzielen. Sofern allerdings die theoretischen und experimentellen Grenzen aus der Literatur in Betracht gezogen werden, sollten potenziell nichtlineare Kernel verwendet werden. Eine Möglichkeit wäre die Verwendung eines ANN, um eine Klassifizierung von nichtlinearen Clusterformen zu adressieren. In Anbetracht der vielversprechenden Klassifikationsleistung der SVM und der Nichtlinearität der ANN im größeren Rahmen werden beide Ansätze verfolgt. Sofern es für die Entscheidung über das weitere Modelldesign notwendig ist, werden Teile der Evaluation bereits in dieser Phase durchgeführt.

Modellierung mit Support Vector Machine

Um zunächst einen visuellen Eindruck von den Ergebnissen zu erhalten, die eine SVM auf dem Datensatz erzeugt, wird die Viskosität der Proben vernachlässigt und die SVM nur mit der Bahngeschwindigkeit und der Pumpendrehzahl für die Zuführung des Slurries trainiert. Dieses initiale Modell ermöglicht eine einfache grafische Darstellung der Entscheidungsgrenzen. Die Entscheidungsgrenzen werden visualisiert, indem das Modell auf einem Gitter von Parameterkombinationen ausgewertet wird, was zu der Darstellung in Abbildung 81 führt. Es wurde eine lineare Kernel-Funktion und ein Regularisierungsfaktor mit $C = 10$ gewählt.

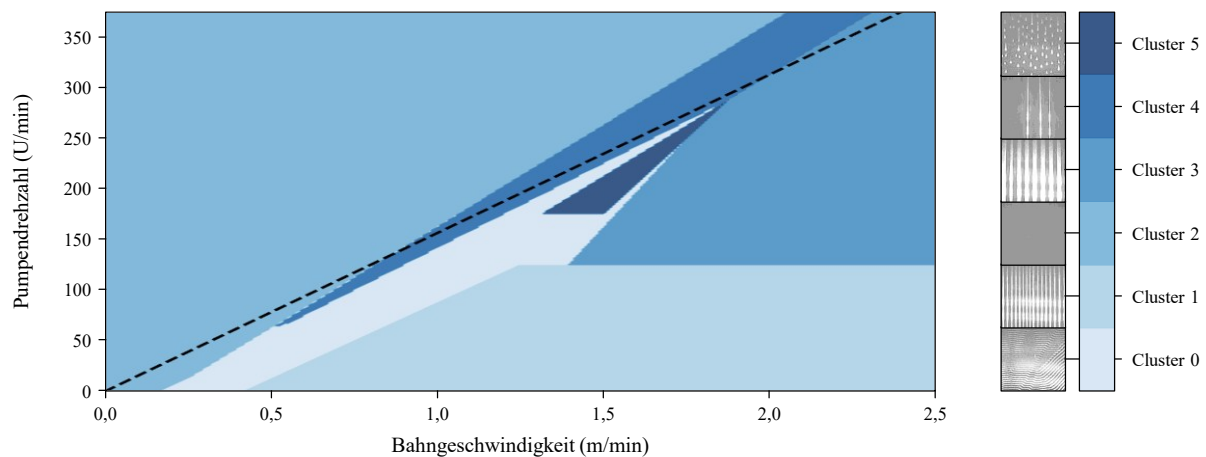


Abbildung 81: Entscheidungsgrenzen der SVM für zwei Parameter

Die gestrichelte Linie stellt hierbei und in den folgenden Diagrammen die Schichtdickengrenze des viskosen Modells bei $t = 0,5 \cdot h$ dar. Das initiale Modell erreicht eine Genauigkeit von 72,5 % im Trainingsdatensatz und 63,7 % im Testdatensatz. Das Modell erreicht bei der Klassifizierung von Beschichtungen als fehlerhaft oder fehlerfrei eine gute Vorhersageleistung, wie aus der Konfusionsmatrix in Tabelle 20 ersichtlich ist.

Tabelle 20: Konfusionsmatrix für die Vorhersage auf dem Testsatz

	Cluster 0	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5
Cluster 0	0	0	0	0	0	0
Cluster 1	20	0	0	0	0	0
Cluster 2	0	0	84	0	0	0
Cluster 3	17	0	0	30	0	0
Cluster 4	17	0	0	0	0	0
Cluster 5	0	0	0	0	0	0

Das Modell ist jedoch nicht in der Lage, zwischen den anderen Clustern zu unterscheiden. Sie werden größtenteils als Cluster 0 eingestuft, während Daten des Cluster 0 als Cluster 3 vorhergesagt werden. Dieses Verhalten ist zu erwarten, da die verschiedenen Fehlertypen von der Viskosität abhängen und sich bei Vernachlässigung dieser Parameterdimension überschneiden. Bemerkenswert ist, dass die Performance in den Trainingsdaten nahezu die maximal mögliche von 73,7 % erreicht, wenn die Viskosität nicht berücksichtigt wird. Dies deutet darauf hin, dass die SVM mit einem linearen Kernel ausreichend zuverlässig ist, um die Clustergrenzen darzustellen.

Nach diesem ersten explorativen Modell werden weitere Modelle trainiert, die die Viskosität des Slurries als Parameter enthalten. Als Kenngröße für die Viskosität des Slurries wird die Viskosität bei einer Scherrate von 1000 s^{-1} verwendet, die aus der Interpolationskurve berechnet wird. Ein Auszug aus der verschiedenen Konfigurationen für die Modellparameter der SVMs ist in Tabelle 21 dargestellt. Für die linearen Kernel-Mehrklassenmodelle mit einer OVR-Entscheidungsfunktion sind die Einflüsse verschiedener Regularisierungsfaktoren angegeben. Da der Einfluss der Regularisierungsfaktoren bei den anderen Konfigurationen qualitativ ähnlich ist, wird für diese nur das Modell mit der besten Modellgüte angegeben.

Tabelle 21: Auswahl der relevanten Konfigurationen der SVM-Modelle

Modell	SVM 1	SVM 2	SVM 3	SVM 4	SVM 5	SVM 6	SVM 7	SVM 8
Binary	nein	nein	nein	nein	nein	nein	nein	Ja
C	0,1	1	10	100	10	1	1	0,1
Funktion	OVR	OVR	OVR	OVR	OVO	OVR	OVR	/
Kernel	linear	linear	linear	linear	linear	quadr.	kubisch	linear

Die Performance der Modelle ist in Tabelle 22 dargestellt. Es wurde sowohl die Genauigkeit bei der Klassifizierung der Daten in alle sechs Cluster als auch die Genauigkeit bei der Klassifizierung zwischen fehlerhaft und fehlerfrei erfasst. Die linearen Kernelmodelle zeigen eine sehr gute Performance. Ihre Genauigkeit nimmt bei höheren Regularisierungsfaktoren zu und erreicht ihr Optimum bei $C = 1$, während sie sich bei größeren Faktoren nicht verändert. Dies ist plausibel, da zu diesem Zeitpunkt kaum noch Daten in der Trainingsmenge falsch klassifiziert werden, so dass sich eine Regularisierung erübrigt. Die Performance in der Trainingsmenge erreicht die maximal erreichbare Genauigkeit. Die Einfachheit des linearen Kernels verhindert zudem erfolgreich eine Überanpassung (engl.: Overfitting). Dadurch erreicht das Modell auch auf der Testmenge ein perfektes Klassifizierungsergebnis.

Tabelle 22: Modellgüte der evaluierten SVMs auf den Trainings- und Testdatensätzen

Modell	Einteilung in Cluster		Einteilung in ok / nok (binär)	
	Trainingsdaten	Testdaten	Trainingsdaten	Testdaten
SVM 1	0,914	0,793	0,936	0,793
SVM 2	0,956	0,905	0,972	1,000
SVM 3	0,980	1,000	0,982	1,000
SVM 4	0,980	1,000	0,982	1,000
SVM 5	0,980	1,000	0,982	1,000
SVM 6	0,890	0,799	0,890	0,894
SVM 7	0,929	0,771	0,931	0,866
SVM 8	/	/	0,932	0,955

Die Änderung der Form der Entscheidungsfunktion von OVR zu OVO hat keinen Einfluss auf das Ergebnis, da der Unterschied hier hauptsächlich in der Art und Weise liegt, wie die Klassenwahrscheinlichkeiten berechnet werden. Die nichtlinearen Kernelmodelle sechs und sieben erzielen schlechtere Ergebnisse als das lineare Modell. Beide Modelle schaffen es nicht, bei starker Regularisierung eine gute Anpassung zu erreichen, und passen die Daten bei geringerer Regularisierung zu stark an. Aber selbst dann ist ihre Genauigkeit auf der Trainingsmenge immer noch geringer als die des linearen Kernelmodells. Andere nicht-lineare Kernel zeigten die gleichen Resultate. Schließlich wurde ein lineares Modell auf der Grundlage einer binären Kennzeichnung der Daten (defekt/nicht defekt) trainiert, wobei die Unterscheidung zwischen den fünf Defekttypen-Clustern vollständig ignoriert wurde. Interessanterweise erzielt es, obwohl es für diese Aufgabe trainiert wurde, bei der binären Klassifizierung schlechtere Ergebnisse als die Modelle, die mit den unterschiedlichen Clustern trainiert wurden. Der Grund dafür ist die höhere Komplexität der nicht-binären Modelle. Die Art und Weise, wie die SVM bei diesen Klassifizierungsaufgaben generiert wird, ermöglicht die Grenzen aus linearen

Funktionen zusammensetzen. Die zusätzlichen Informationen darüber, wo sich die verschiedenen Cluster befinden, führen zu unterschiedlichen Richtungen der Grenzflächen an verschiedenen Stellen im Parameterraum. Das auf binären Daten trainierte Modell kann dagegen nur eine flache Grenzebene setzen.

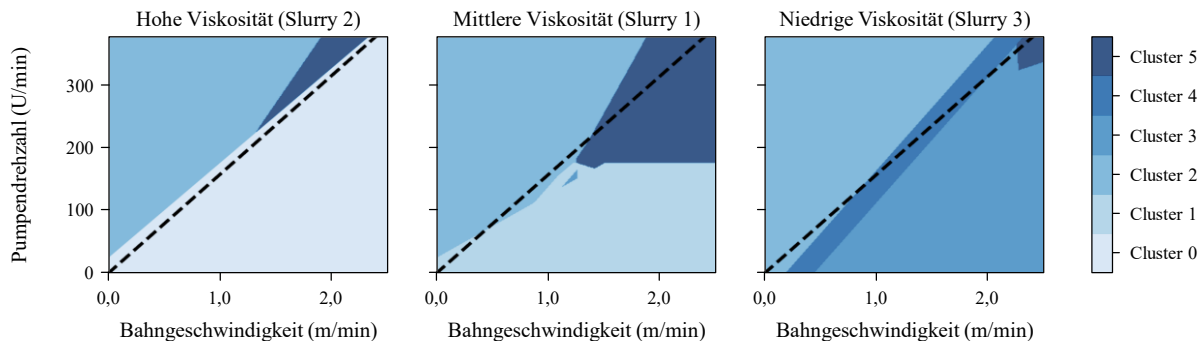


Abbildung 82: Entscheidungsbereiche der linearen Kernel-SVM

Die Entscheidungsbereiche, die durch Anwendung der linearen Kernel-SVM auf ein Parameternetz bei den Viskositäten der Slurries 1 bis 3 erzeugt wurden, sind in Abbildung 82 dargestellt. Die Diagramme sind nach abnehmender Viskosität der Slurries geordnet.

Alle Entscheidungsbereiche umfassen einen Bereich oben links, in dem die Aufnahmen als fehlerfrei vorhergesagt werden. Dieser Bereich verschiebt sich bei abnehmender Viskosität nach rechts unten, was bedeutet, dass die Aufnahmen für höhere Bahngeschwindigkeiten und niedrigere Pumpraten als fehlerfrei vorhergesagt werden. Bei der niedrigsten Viskosität wird dieses Muster jedoch durch das zusätzliche Auftreten von Cluster 4 konterkariert. Da Cluster 4 im Datensatz nur bei Slurry 3 auftritt, ist diese Vorhersage bei niedrigeren Viskositäten stärker ausgeprägt. Dass das Vorhersageprofil nicht vollständig mit den theoretischen Erwartungen übereinstimmt, kann auf die geringe Auflösung des Parameterwerterasters zurückgeführt werden, auf dem die Versuchsreihe basiert. Die durch Viskositätsänderungen verursachte Verschiebung der Prozessgrenze ist subtil, und die genaue Grenze liegt zwischen den verfügbaren Datenproben. Daher kann die SVM die Grenze beliebig zwischen diesen Messwerten platzieren und dennoch eine optimale Genauigkeit erreichen. Mehr Versuchsdaten in Nähe der Grenze könnten eine genauere Festlegung der Grenze ermöglichen, so dass sie den theoretischen Erwartungen entspricht.

Trotz der optimalen Klassifizierungsergebnisse der SVM ist ein ANN so konzipiert, dass ein einziges Modell sowohl für die Vorhersage der Viskosität als auch der Beschichtungsqualität verwendet werden kann, wodurch eine einfache Kopplung und Optimierung in einem einzigen Schritt möglich ist.

Modellierung mit neuronalen Netzen

Um wiederum einen ersten Überblick über die Resultate eines ANN bei dieser Art von Klassifizierungsproblem zu bekommen, wird ein Modell trainiert, das die Viskosität vernachlässigt und versucht, die Daten ausschließlich anhand der Bahngeschwindigkeit und der Pumpendrehzahl zu klassifizieren.

Der Aufbau der ANNs muss an die jeweilige Klassifizierungsaufgabe angepasst werden. Da es sich bei dem Problem um eine Mehrklassen-Klassifikation handelt, ist es naheliegend, die letzte Schicht des ANNs als vollständig verknüpfte Layer mit ebenso vielen Knoten wie Clustern und einer Softmax-Aktivierungsfunktion zu gestalten. Dies ist besonders nützlich, da einige der Proben ungleichmäßig sind und die SoftMax-Funktion Wahrscheinlichkeiten für jede Klasse anstelle von rein diskreten Klassifizierungen ausgibt. Dies ermöglicht auch die Verwendung der kategorialen Kreuzentropie als Verlustfunktion.

Da das initiale Modell nur als explorative Orientierungshilfe dient, sollen diese allgemeinen Entwurfsregeln für alle ANN dieser Aufgabe gelten. Das ANN wird so konzipiert, dass es fünf vollständig verknüpfte Hidden Layers mit jeweils sechs Knoten hat, die ReLU-Aktivierungsfunktionen und eine L2-Regularisierung verwenden. Das Netz wird anschließend über 100 Epochen trainiert. Dabei werden Genauigkeiten erreicht, die um 70 % in dem Trainingsdatensatz und 65 % in dem Testdatensatz schwanken. Die Entscheidungsgrenzen werden wiederum durch Auswertung des Modells auf einem Parametergitter aufgetragen. Abbildung 83 zeigt die resultierende Darstellung.

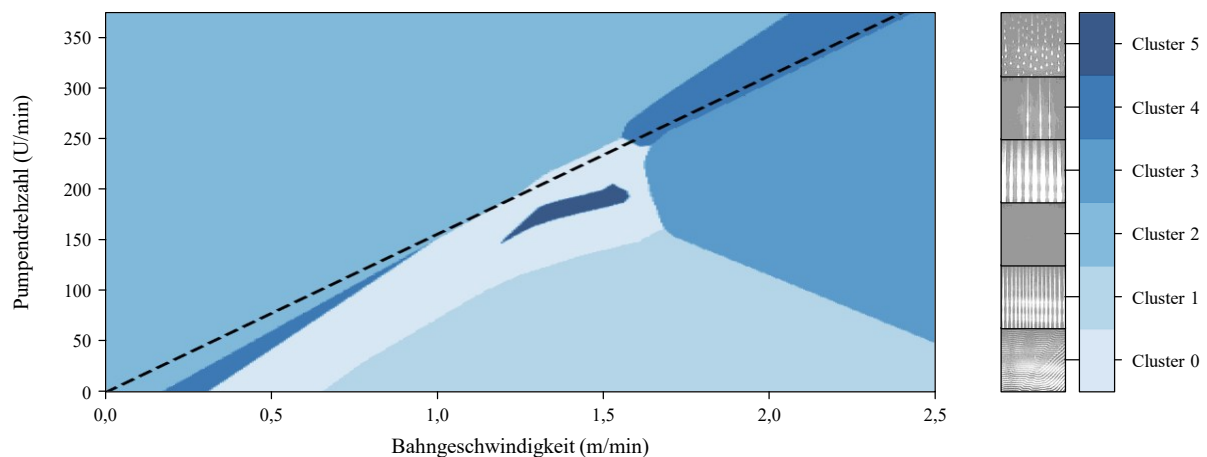


Abbildung 83: Entscheidungsgrenzen des ANN für zwei Parameter

Makroskopisch betrachtet identifiziert das Modell die Entscheidungsregionen ähnlich wie die von der SVM erzeugten Grenzen (Abbildung 81). Allerdings unterscheiden sich die Größe und die genaue Lage der Bereiche. Der augenfälligste Unterschied ist, dass die ANN-Grenzen nicht linear sind, was zu Bereichen mit komplexer Form in der Darstellung führt. Die von der ANN identifizierten Regionen müssen auch nicht zwingend kohärent sein, wie bei Cluster 4 zu sehen.

Tabelle 23: ANN-Konfigurationen für die Klassifizierungsaufgabe

Modell	Inputs	Layer	Knoten	Outputs	Parameter	Regularisierung
ANN-1	3	5	6	6	234	L2
ANN-2	3	3	3	6	60	L2

Nachdem ein Überblick über das Verhalten der ANN bei dieser Klassifizierungsaufgabe gewonnen wurde, werden die Modelle mit drei Eingabeparametern entworfen. Da die SVM mit linearem Kernel bei dieser Klassifizierungsaufgabe bereits eine sehr gute Performance aufweist, werden nur zwei ANNs trainiert. Dabei werden ein kleineres Netz und ein größeres Netz

erstellt, wie in Tabelle 23 zu sehen. Beide ANNs folgen dem bereits skizzierten grundlegenden Aufbau.

Die Modelle werden über 30 Epochen mit dem Adam-Optimierer trainiert. Beide Modelle erreichen nach dem relativ kurzen Trainingsprozess innerhalb kürzester Zeit die maximal möglichen Genauigkeiten von 98 % bis 100 % auf dem Trainings- und Testdatensatz. Obwohl beide Modelle bei der Aufgabe gleichermaßen gut agieren, gibt es erhebliche Unterschiede in der Form ihrer Entscheidungsgrenzen. Die Entscheidungsgrenzen sind in Abbildung 84 dargestellt, wobei die Viskositäten der Slurries in abnehmender Viskosität geordnet sind.

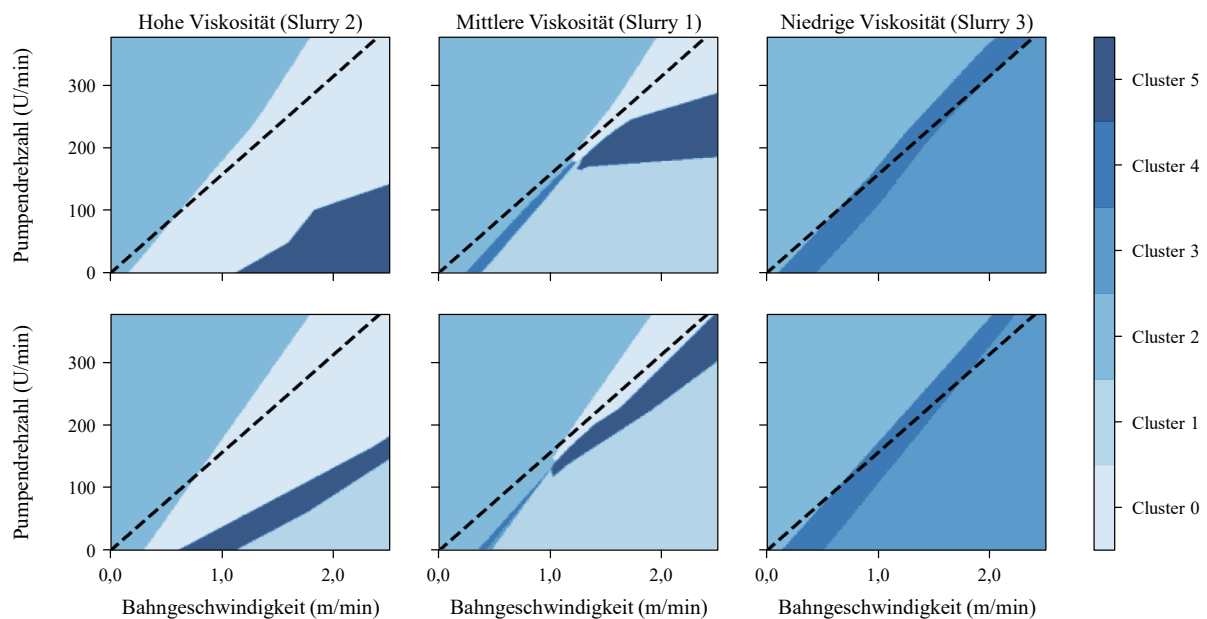


Abbildung 84: Entscheidungsbereiche von ANN-1 (oben) und ANN-2 (unten)

Während die Entscheidungsbereiche im Allgemeinen recht ähnlich sind, sind die Grenzen des größeren Modells weniger linear und ändern häufiger ihre Ausrichtung. Beide Modelle wie auch die SVM erzeugen eine diagonale Entscheidungsgrenze zwischen den fehlerhaften und fehlerfreien Clustern. Mit abnehmender Viskosität verschiebt sich diese Trennlinie zunächst in Richtung der unteren rechten Ebene, wodurch Aufnahmen mit höheren Bahngeschwindigkeiten als fehlerfrei vorhergesagt werden, was mit den theoretischen Erwartungen übereinstimmt. Bei den niedrigsten Viskositäten tritt derselbe Effekt im Zusammenhang mit Cluster 4 auf, wie bereits zuvor für das SVM Modell beschrieben.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die ANNs ebenso wie die SVM auf den Trainingsdaten eine optimale Performance zeigt und gut auf den Testdatensatz generalisiert. Ob diese Leistung auch auf zukünftige Versuchsdaten übertragbar ist, wird in der Auswertung untersucht.

Evaluierung der Modellierung der Beschichtungsqualität

Sowohl die SVMs als auch die ANNs waren in der Lage, die bereitgestellten Daten optimal zu interpretieren. Im Rahmen der Evaluierung wird untersucht, wie sich die Modelle auf unterschiedliche Daten verhalten.

Beim Training der Klassifizierungsmodelle wurde berücksichtigt, dass die Daten in ausgewogene Datensätze mit ähnlichen Verteilungen der Klassenhäufigkeiten aufgeteilt werden. In der Praxis kann jedoch nicht immer sichergestellt werden, dass die Klassenverteilung für zukünftige Anwendungen weitgehend konstant bleibt. Die Auswertung der Slurry-Modelle hat gezeigt, dass die Datenaufteilung einen großen Einfluss auf die Leistung eines Modells haben kann. Aufgrund der sehr kurzen Trainingszeiten von wenigen Sekunden kann die SVM auf eine große Anzahl von zufälligen Datensplits trainiert und die Leistung statistisch ausgewertet werden. Ein SVM mit $C = 10$ und einem linearen Kernel wird auf 200 zufällig generierten Datensplits trainiert. Bei den Trainingsdaten ist die Performance mit einer durchschnittlichen Genauigkeit von $0,983 \pm 0,006$ konstant hoch. Der Durchschnitt sinkt jedoch auf $0,840 \pm 0,124$ bei den Testdaten. Dies weist darauf hin, dass einige der Datensätze von der SVM nicht effizient verarbeitet werden. Diese Beobachtung deutet darauf hin, dass Überanpassung möglicherweise ein Problem darstellt. In diesem Zusammenhang kann ein SVM trotz der Ineffizienz interessant sein, da das Training ausschließlich auf binären Daten basiert und dadurch dazu beitragen könnte, Überanpassung zu vermeiden. Wird nur die binäre Einordnung der Fehlerbilder betrachtet, erreicht die zuvor diskutierte SVM eine mittlere Genauigkeit von $0,985 \pm 0,006$ auf dem Trainingsdatensatz und eine mittlere Genauigkeit von $0,913 \pm 0,097$ auf dem Testdatensatz. Die nur auf binäre Daten trainierte SVM erzielt mit einer Genauigkeit von $0,931 \pm 0,012$ im Durchschnitt eine schlechtere Performance auf dem Trainingssatz, verallgemeinert aber geringfügig besser und zuverlässiger mit einer mittleren Genauigkeit von $0,923 \pm 0,048$. Daher könnte die Verwendung des einfacheren, binär trainierten Modells sinnvoll sein, wenn wenig Informationen über die zu erwartenden zukünftigen Daten vorliegen. Eine Kombination beider Modelle in Form einer Kreuzvalidierung könnte ebenfalls eine Option darstellen.

Eine weitere Alternative ist die Verwendung des ANN. Die ebenfalls recht kurzen Trainingszeiten von wenigen Minuten für das kleine Netz erlauben es, zwei Modelle mit der Architektur von ANN-2 auf unausgewogenen Datensplits zu trainieren. Die Daten werden so gewählt, dass sich die relativen Häufigkeiten der Cluster zwischen Trainings- und Testdaten stark unterscheiden (Tabelle 24). Allerdings werden Splits vermieden, in denen Cluster des Testdatensatzes in den Trainingsdaten nicht vorkommen, da diese die maximale Leistung des Modells begrenzen würden.

Tabelle 24: Relative Häufigkeiten der Klassen in den unausgewogenen Datensätzen

	Cluster	0	1	2	3	4	5
Datensplit 1	Trainingsdaten	0,195	0,103	0,429	0,167	0,053	0,052
	Testdaten	0,230	0,428	0,175	0,167	0,000	0,000
Datensplit 2	Trainingsdaten	0,148	0,171	0,327	0,211	0,088	0,055
	Testdaten	0,172	0,000	0,748	0,036	0,045	0,000

Die Vorhersagequalität auf Basis der unausgewogenen Datensätze sind in Tabelle 25 aufgeführt. Die SVM erreicht bei der Verallgemeinerung zwischen den unausgewogenen Datensätzen für keinen der Testsätze eine Genauigkeit von über 90 %. Das ANN hingegen erreicht für jeden Datensatz eine bessere Genauigkeit, auch wenn es länger zum Trainieren braucht als bei

der zuvor verwendeten Datenaufteilung. Hier sind bis zu 250 Epochen erforderlich, bevor gute Vorhersageergebnisse erzielt werden.

Tabelle 25: Modellgüte der Modelle bei unterschiedlicher Datenaufteilung

	SVM-3		ANN-2	
	Trainingsdaten	Testdaten	Trainingsdaten	Testdaten
Standardsplit	0,980	1,000	0,980	1,000
Datensplit 1	0,981	0,803	0,980	0,918
Datensplit 2	0,969	0,880	0,978	0,923

Die Ergebnisse zeigen, dass das ANN besser verallgemeinern kann, wenn es große Unterschiede in der Clusterverteilung zwischen den Trainingsdaten und den Daten gibt, auf die das Modell angewendet wird. Zusätzlich zur gezielten Auswahl der Trainingsdaten muss auf eine adäquate Datenvorbereitung geachtet werden. Ein wichtiger Schritt bei der Datenvorbereitung war die Normalisierung der Inputdaten. Einige SVMs und ANNs wurden experimentell ohne den Normalisierungsschritt trainiert und erzielten wesentlich schlechtere Ergebnisse, die nur selten und geringfügig über der naiven Vorhersage der häufigsten Klasse im Trainingssatz lagen.

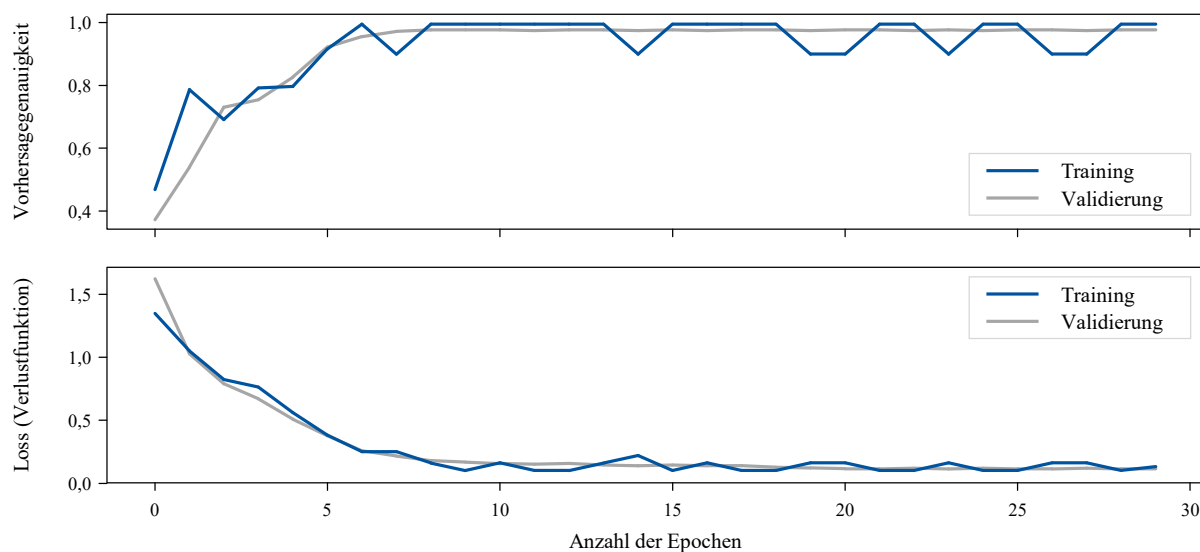


Abbildung 85: Trainingsverlauf von ANN-2 für den balancierten Datensplit

Der Trainingsverlauf von ANN-2 auf dem ausgewogenen Datensplit in Abbildung 85 verdeutlicht eine Schwierigkeit bei der ANN-Klassifikation, die in ähnlicher Weise bei allen anderen trainierten ANN-Klassifikationsmodellen auftritt.

Etwa in der Epoche 10 erreicht das Modell seine maximale Performance. Zu diesem Zeitpunkt werden nur noch geringfügige Änderungen an der Entscheidungsfunktion vorgenommen, um die Verlustfunktion weiter zu reduzieren, was die Zuverlässigkeit der Vorhersage auf der Trainingsmenge erhöht, aber keinen Einfluss mehr auf die Genauigkeit hat. Hier wird eine negative Eigenschaft des ANN deutlich. Da das ANN seine Verlustfunktion nicht durch die Platzierung von Grenzen mit einer großen Bandbreite verringert, sondern nur durch die richtige Klassifizierung, hat es keinen Anreiz, dies zu tun. Dies bedeutet jedoch, dass die Grenzen sehr nahe an

den Probepunkten liegen, was wiederum schnell zu falschen Klassifikationen führt, sobald sich die Grenzen leicht verschieben. Nach 10 Epochen ist in der Trainingshistorie zu beobachten, dass die Genauigkeit zwischen 91 % und 100 % oszilliert, obwohl sich der Verlust nur geringfügig ändert und insgesamt abnimmt. Bei der SVM ist dies weniger ein Problem, da sie von vornherein die Entscheidungsgrenzen mit dem größtmöglichen Spielraum setzt. Wenn neue Datensätze Messpunkte enthalten, die sich sehr nah an bereits klassifizierten Bereichen befinden, aber knapp außerhalb der engen Entscheidungsgrenze des ANN liegen, könnte dies potenziell zu einer Herausforderung für das ANN werden. Solche Punkte würden immer noch innerhalb des größeren Spielraums liegen, der von der SVM erzeugt wird, und daher korrekt klassifiziert werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die SVM aufgrund ihrer konzeptionellen Eigenschaften für die spezifische Aufgabe gut geeignet ist und bei einem sorgfältig vorbereiteten Datensatz optimale Ergebnisse erzielt, aber mit Ungleichgewichten zwischen den Trainings- und Testdaten Schwierigkeiten hat. Die ANN hingegen kommt mit solchen Ungleichgewichten gut zurecht und erzielt bei allen Datensätzen, die aus den verfügbaren Daten generiert werden, eine optimale Performance. Es ist jedoch nicht sehr widerstandsfähig gegenüber geringfügigen Änderungen in den Daten und könnte bei neuen Daten mit einer dichteren Auflösung an den Übergängen zwischen fehlerfreien und fehlerhaften Parameterkombinationen nicht so gut abschneiden. Die Einbeziehung der Viskosität als Eingangsvariable für das Modell ermöglichte eine verbesserte Vorhersagegenauigkeit des Modells. Da es jedoch nur drei verschiedene Viskositäten gab, diente sie hauptsächlich als qualitativer Indikator dafür, aus welcher Versuchsreihe die Probe stammte. Ob die quantitative Unterscheidung der Viskosität eine genaue Vorhersage der Prozessgrenzverschiebungen ermöglicht, muss in zukünftigen Experimenten mit mehr Slurries, idealerweise mit stark variierenden Viskositäten, untersucht werden. Die Einbeziehung der verschiedenen Defektcluster ermöglichte es den Modellen, genauere Vorhersagen für diesen Datensatz zu treffen. Abschließend bleibt ein großer Vorteil des ANN seine Integrierbarkeit mit anderen ANNs, um schließlich ein Modell des gesamten Batterieherstellungsprozesses zu erstellen, auf das die Optimierung basierend auf Gradienten auf die gesamte Modellkette angewendet werden kann.

6.2.7 Integration der Teilmodelle in ein Gesamtmodell

Integration of the submodels into an overall model

Nachdem eine ausreichende Modellgüte für alle Teilmodelle erreicht werden konnte, folgt die Integration dieser Teilmodelle zu einem Gesamtmodell. Als Grundgerüst der Integration dient der genetische Algorithmus (Tabelle 26), der den Rahmen um das Modellensemble der Teilmodelle bildet. Die Parametersuche mit genetischen Algorithmen kann unabhängig von den verwendeten Modellen und für die Kombination mehrerer Modelle genutzt werden.

Hierfür werden die ermittelten Parameter sowie deren Restriktionen dem Algorithmus übergeben. Die Parameter stellen die Gene und die Restriktionen den Raum für die genetische

Evolution dar. Darüber hinaus werden die grundlegenden Einstellungen und Hyperparameter³³⁰ des genetischen Algorithmus definiert, insbesondere die Anzahl der Generationen und die Populationsgröße³³¹.

Tabelle 26: Pseudocode für den genetischen Algorithmus

```

def run_genetic_algorithm(parameters, constraints)
    num_genes = len(parameters): Definiere die Anzahl an Genen
    gene_space = constraints: Definiere die Grenzwerte für die Gene
    selection_type = "steady_state_selection"
    crossover_type = "single_point"
    mutation_type = "random"
    ga_instance = pygad.GA(num_genes,
                           gene_space,
                           num_generations,
                           population_size,
                           selection_type,
                           crossover_type,
                           mutation_type,
                           fitness_function,
                           stop_criteria)
    ga_instance.run(): Führe den genetischen Algorithmus aus
    best_solution, best_solution_fitness = ga_instance.best_solution(): Gebe beste Lösung zurück
    return output

```

Da der Speicherbedarf der gegebenen Parameteroptimierung gering ist, werden eine große Populationsgröße und eine vergleichsweise geringe Anzahl von Generationen gewählt. Die gewählten Operatoren des genetischen Algorithmus, welche die Selektion, die Kreuzung und die Mutation der Gene beschreiben, erfüllen folgende Eigenschaften:

- **Selektion:** Die *Steady-state-selection* eignet sich für schnelle Konvergenz und begrenzte Ressourcen, wobei die Vielfalt der Individuen erhalten bleibt und die Suche nach Lösungen insbesondere in Umgebungen mit lokalen Optima intensiviert wird.
- **Mutation:** Die *Random-mutation* ermöglicht vielfältige Modifikationen und die Exploration verschiedener Lösungen innerhalb eines weiten Lösungsraums.
- **Kreuzung:** Der *Single-point-crossover* erzeugt neue Individuen durch die Kreuzung von genetischem Material über einen einzigen Kreuzungspunkt, was besonders effektiv für weniger komplexe Lösungsräume ist.

Neben den genetischen Operatoren bildet die Fitnessfunktion einen zentralen Bestandteil des genetischen Algorithmus. Die Fitnessfunktion beschreibt inwiefern ein generiertes Individuum

³³⁰ Eine Übersicht aller Module, Operatoren und Hyperparameter wird in der Dokumentation der PyGAD Bibliothek detailliert beschrieben.

³³¹ Die Wahl der Populationsgröße und Anzahl der Generationen beeinflusst die Leistung und den Ressourcenbedarf des genetischen Algorithmus signifikant. Eine hohe Populationsgröße verbessert die Leistung, aber auch den Speicherbedarf. Andererseits wird die Leistung durch zu wenig Generationen negativ beeinflusst. Eine optimale Abstimmung ist entscheidend.

das Problem löst und wird automatisch nach jeder Generation für jedes Individuum einer Population ausgeführt. Die Fitnessfunktion ist individuell auf das zugrundeliegende Problem anzupassen. In Tabelle 27 wird der schematische Aufbau der Fitnessfunktion für die Optimierung der Parametereinstellung dargestellt. Hierbei wird der Fitnesswert durch die Zielfunktion als Abstand zwischen Vorhersage und Zielwert definiert, gemäß dem Ansatz für der Zielwertprogrammierung.

Tabelle 27: Pseudocode für Berechnung der Fitnesswerte

```

def fitness_modell (solution)
    if check_constraints (solution)
        return fitness = 0
    process_targets: Definiere die Zielgrößen für die Vorhersage des Modells
    model_inputs = solution[x1, ..., xn]: Definiere die Eingangsgrößen aus der aktuellen Lösung
    output = model_predictions (model_inputs): Berechne die Ausgangsgrößen des Modells
    fitness_value = 1 / np.linalg.norm (output – process_targets): Berechne den Fitnesswert
    return fitness_value

```

Zunächst wird innerhalb der Fitnessfunktion überprüft, ob die mutierten Gene innerhalb der zuvor definierten Restriktionen liegen. Sofern dies nicht der Fall ist, wird der Wert 0 zurückgegeben. Der grundlegende Aufbau zur Überprüfung der Restriktion wird in Tabelle 28 dargestellt.

Tabelle 28: Pseudocode für die Überprüfung der Restriktionen und Randbedingungen

```

def check_constraints (solution, constraints)
    for Prüfe die Restriktionen constraints für jede Kenngröße solution(key)
        if (Kenngröße vorhanden in Restriktion) and (Wert liegt außerhalb der Restriktion)
            return False
    return True

```

Anschließend werden sowohl die Zielgrößen für die Modellvorhersage als auch die spezifischen Eingangsgrößen des Teilmodells definiert. Unter Verwendung einer Stützfunktion können die jeweiligen Teilmodelle und ihre Speicherorte definiert und die entsprechenden Eingangsgrößen zur Vorhersage der Ausgangsgrößen verwendet werden (Tabelle 29). Das Stützmodell gibt jeweils die prognostizierte Ausgangsgröße eines Teilmodells zurück.

Tabelle 29: Pseudocode für die Stützfunktionen der Teilmodell

```

def model_predictions (model_inputs)
    path = os.path.join(directory, model_name): Definiere das trainierte Teilmodell
    model = submodel.get_model(path): Lade das trainierte Teilmodell
    output = model.predict (model_inputs): Berechne die Ausgabe für das Modell
    return output

```

Durch diesen modularen Aufbau lassen sich die erstellten Teilmodelle entsprechend ihrer Korrelationen miteinander verbinden und zu einem Gesamtmodell integrieren. In Abbildung 86 wird das integrierte Gesamtmodell für den Anwendungsfall der Parametereinstellung für den Beschichtungsprozess dargestellt. Hierbei werden die Materialanteile als Eingangsgröße für das

Teilmodell I genutzt, um die Viskosität anhand ihrer Fließkurvenparameter zu prognostizieren. Sowohl die Fließkurvenparameter als auch die Pumpendrehzahl und Bahngeschwindigkeit dienen als Eingangsgröße für Teilmodell II (Vorhersage der Nassschichtdicke) und Teilmodell III (Vorhersage der Wahrscheinlichkeit einer einwandfreien Beschichtung).

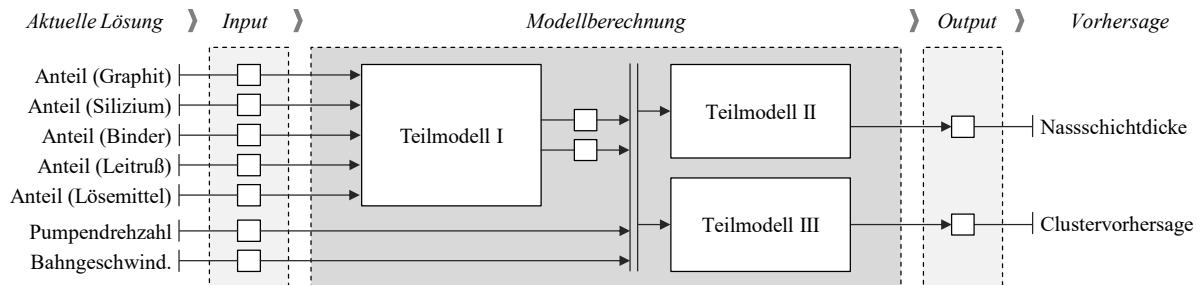


Abbildung 86: Integriertes Gesamtmodell aus den Misch- und Beschichtungsmodellen

Dieses Gesamtmodell dient als Berechnungsgrundlage für die Fitnessfunktion des genetischen Algorithmus und die Optimierung der Parametereinstellung.

6.2.8 Validierung und Optimierung des Gesamtmodells

Validation and optimization of the overall model

Zur Validierung und Optimierung des Gesamtmodells wird die Anwendung des genetischen Algorithmus sowohl hinsichtlich der Reproduzierbarkeit der Vorhersagen bei gleichen Parametervorgaben als auch hinsichtlich der Konvergenz des Fitnesswerts während der Exploration des Lösungsraum untersucht. Abschließend erfolgt eine Analyse der Parametersensitivität des Gesamtmodells, um das Systemverhalten zu überprüfen.

Validierung der Reproduzierbarkeit

Für die Überprüfung der Reproduzierbarkeit wird die interne Validität des Gesamtmodells untersucht. Dies beinhaltet die Durchführung mehrerer Berechnungsdurchläufe mit identischen Parameterkonstellationen. Der genetische Algorithmus erzeugt basierend auf den definierten Parameterräumen unterschiedliche Startwerte. Dadurch können die statistischen Unsicherheiten untersucht und festgestellt werden, ob die Abweichungen der Ergebnisgrößen zwischen den Läufen auf Modellfehler oder akzeptable Schwankungen im Verhalten des realen Systems zurückzuführen sind.

Als Berechnungsszenario wurde eine Parametereinstellung gewählt, bei der zwei Eingangsgrößen bereits durch Anforderungen vordefiniert wurden. Dies ist einerseits die Bahngeschwindigkeit für den Beschichtungsprozess und andererseits der Silizium- und Lösemittelanteil in der Zusammensetzung während des Mischens. Die verbleibenden Parameter wurden entsprechend produktionsnaher Wertebereiche eingegrenzt. Als Zielgröße für Vorhersagen dienen die Nassschichtdicke und die Wahrscheinlichkeit einer optimalen Beschichtung (Clustervorhersage). Anschließend wurde der genetische Algorithmus in mehreren Durchläufen ($n = 330$) ausgeführt und jeweils die ermittelten Eingangsgrößen und prognostizierten Zielgrößen aufgezeichnet.

In Abbildung 87 werden die identifizierte Parametereinstellungen dargestellt. Für die Massenanteile von Graphit, CMC, SBR und Leitruf ergibt sich eine vergleichsweise geringe Varianz (0,02 bis 0,44) und niedrige Standardabweichung (0,14 bis 0,67), während Graphit die höchste Varianz und Standardabweichung zeigt. Die Pumpendrehzahl weist mit einer Standardabweichung von 4,24 und einer Varianz von 17,98 eine größere Streuung im Vergleich zu den übrigen Parametern auf. Die relative Abweichung beläuft sich allerdings auf lediglich 1,96 % für die niedrigste und auf 2,43 % für die höchste Parametervorhersage. Insgesamt unterstreicht die Analyse der einzelnen Eingangsgrößen die spezifischen Charakteristiken und Einstellungen der Parameter. Die insgesamt geringe Varianz und die geringe relative Abweichung zeigen eine konsistente und reproduzierbare Verteilung der Parametereinstellungen.

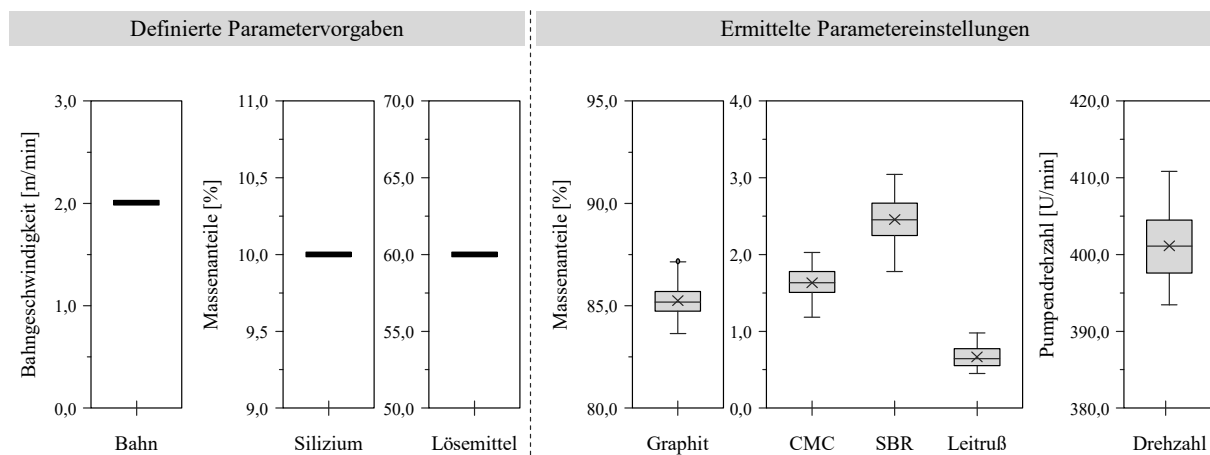


Abbildung 87: Identifizierte Parametereinstellungen innerhalb des vordefinierten Prozessbereichs

In Abbildung 88 werden resultierende Vorhersagen für die identifizierten Parametereinstellungen dargestellt. Dies beinhaltet einerseits die Fließkurvenparameter der Viskosität, die durch ihre Steigung und ihren Achsenabschnitt dargestellt werden. Andererseits beinhaltet es die Zielgrößen für das Beschichten in Form der Nassschichtdicke und der Clustervorhersage.

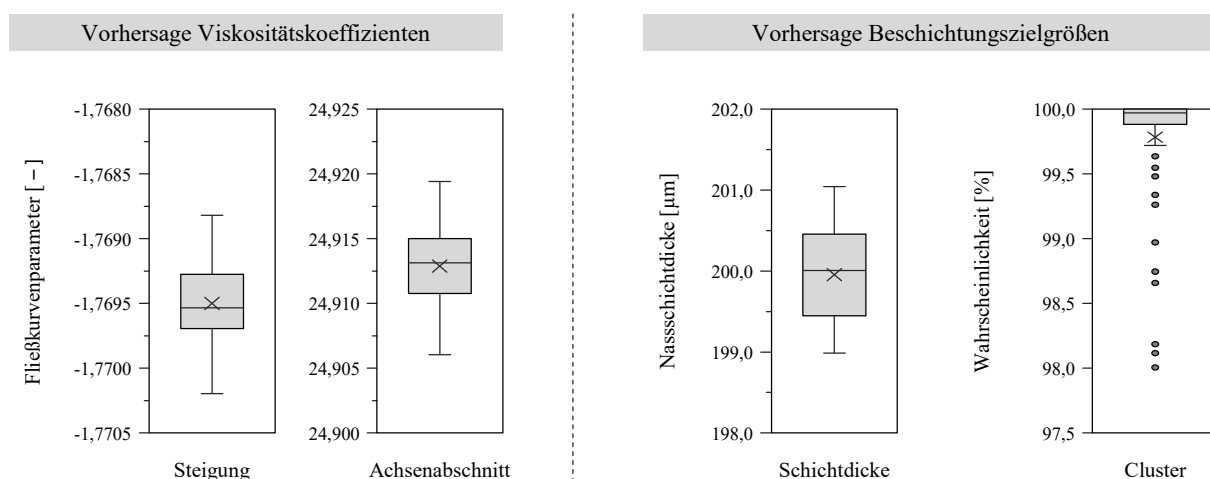


Abbildung 88: Resultierende Vorhersagen für die identifizierten Parametereinstellungen

Die Vorhersagegenauigkeit der Viskositätskoeffizienten besitzt eine relative Fehlerabweichung von 0,04 % für die Steigung und 0,03 % für den Achsenabschnitt. Für die Nassschichtdicke entspricht die relative Abweichung von 0,51 % einer Toleranz von $\pm 1 \mu\text{m}$, was üblichen

Produktionsanforderungen aus der Praxis entspricht. Die geringe Varianz von 0,35 und die geringe Standardabweichung von 0,59 verdeutlichen, dass der genetische Algorithmus zuverlässig zu einer geeigneten Lösung gelangt. Dies wird ebenfalls durch die Clustervorhersage einer optimalen Beschichtung gezeigt. Für 301 der 330 Durchläufe konnte eine Vorhersagewahrscheinlichkeit von über 99 % erzielt werden.

Zusammenfassend konnte die Reproduzierbarkeit des genetischen Algorithmus durch mehrfache Berechnungsdurchläufe evaluiert werden. Eine niedrige Varianz und eine geringe Standardabweichung der Eingangs- und Zielgrößen, unterstützt durch hohe Vorhersagewahrscheinlichkeiten, deuten auf konsistente, reproduzierbare Ergebnisse hin.

Validierung der Konvergenz

In diesem Abschnitt wird die Fähigkeit und Effizienz des genetischen Algorithmus untersucht, eine entsprechende Lösung für die Parametereinstellungen zu ermitteln. Dafür wird zunächst die Konvergenz des Fitnesswerts über mehrere Generationen des genetischen Algorithmus untersucht. Hierfür wurden die Aufzeichnung der Fitnesswerte für die 330 Berechnungsdurchläufe aus der Validierung der Reproduzierbarkeit analysiert.

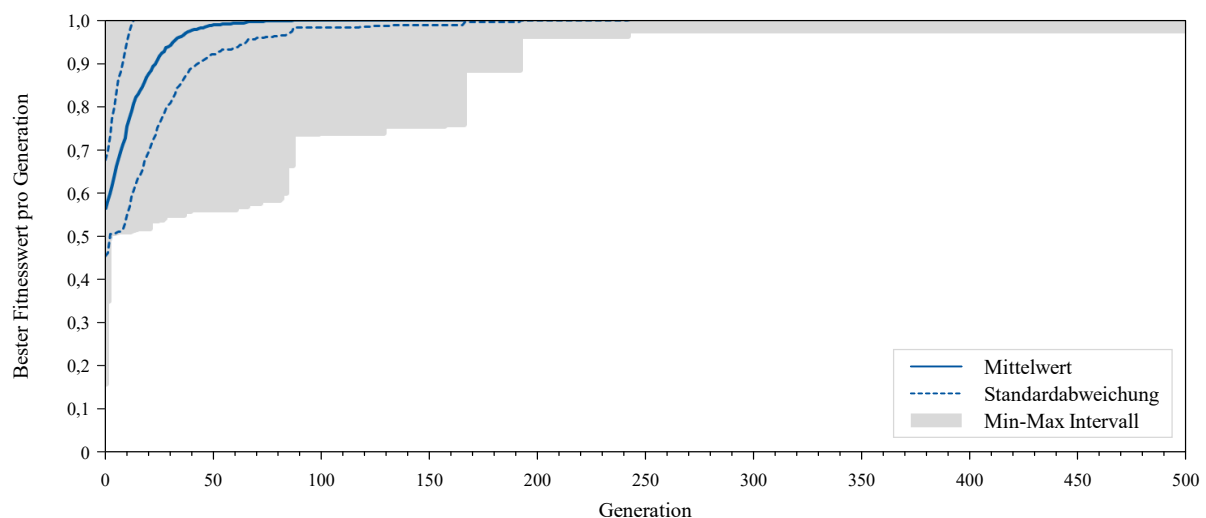


Abbildung 89: Konvergenz des Fitnesswerts über mehrere Generationen

Die Auswertung der Fitnesskurven wird in Abbildung 89 dargestellt. Der graue Bereich zeigt den Bereich zwischen dem minimalen und maximalen Fitnesswert einer jeder Generation. Die Linien repräsentieren den jeweiligen Mittelwert und die Standardabweichung über alle Fitnesskurven. Aus der Darstellung ist ersichtlich, dass bereits nach 10 Generation ein Fitnesswert von 0,75 und nach 20 Generation ein Fitnesswert von 0,80 erreicht wurde.³³² Bereits nach 100 Generationen zeigt sich eine Konvergenz im mittleren Fitnessverlauf. Nach 200 Generationen verbleiben lediglich vereinzelte Durchläufe im Bereich von etwa 0,9 bis 1,0 in Hinblick auf den Fitnesswert.

³³² Dies entspricht Genauigkeit von $\pm 1,25$ hinsichtlich der geforderten Zielgrößen. Für die Nassschichtdicke ergibt sich daraus beispielsweise ein Konfidenzbereich von 198,75 – 201,25 μm in Hinblick auf die geforderte Zielgröße von 200 μm .

Um die Effizienz des genetischen Algorithmus hinsichtlich der Rechenleistung zu optimieren, wird außerdem die Verteilung der notwendigen Anzahl an Generationen bis zum Erreichen des angestrebten Fitnesswerts untersucht. Abbildung 90 zeigt die Verteilung der Durchläufe, bei denen der Fitnesswert bereits nach einer gewissen Anzahl an Generation konvergiert. Für die Validierung wurde die maximale Anzahl der Generationen initial auf 500 Generationen festgelegt. Die Auswertung zeigt jedoch, dass bereits nach 50 Generationen etwa 94 % Durchläufe und nach 100 Generation etwa 99 % Durchläufe konvergieren.

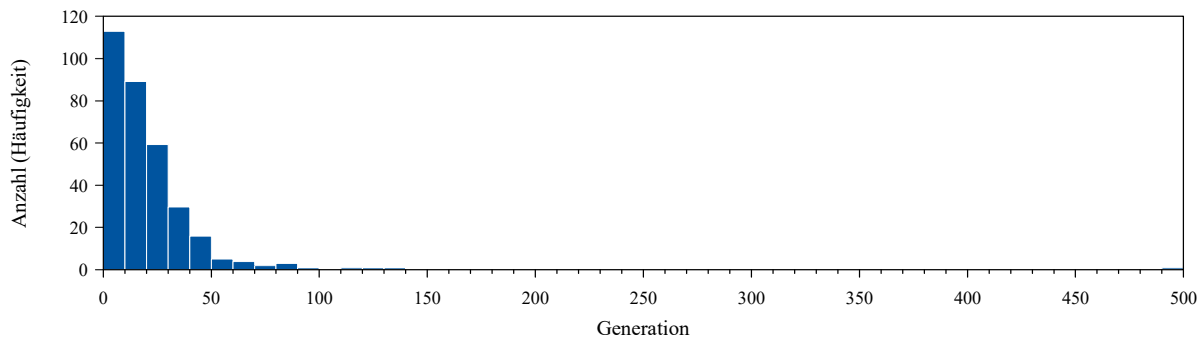


Abbildung 90: Histogramm der Generationen bis zum Erreichen des angestrebten Fitnesswerts

Zusammenfassend konnte gezeigt werden, dass eine klare Konvergenz vorhanden ist und der genetische Algorithmus den Fitnesswert für die Parametereinstellung systematisch optimiert. Die Auswertung erlaubt, die maximale Anzahl von Generationen für den genetischen Algorithmus von 500 auf 100 Generationen zu reduzieren und somit den erforderlichen Rechenaufwands zu minimieren.

Validierung der Parametersensitivität

Um das Verhalten des genetischen Algorithmus und der Einbindung der Teilmodelle zu validieren, wird Sensitivität des Gesamtmodells in Hinblick auf verschiedene Grenzwerte für die Prozessparameter getestet. Dafür werden spezifische Variationen der Eingangsgrößen des Modells evaluiert, um die Auswirkungen auf die Prognosefähigkeit des Modells zu bestimmen und sicherzustellen.

Im ersten Schritt werden die Korrelationskoeffizienten zwischen den Eingangs- und Zielgrößen ermittelt und in einer Korrelationsmatrix dargestellt (Abbildung 91). Die Korrelationsmatrix zeigt hohe Korrelationen zwischen den Massenanteilen der Materialien, was aufgrund ihres relativen Verhältnisses in der Slurryzusammensetzung naheliegend ist. Die hohe Korrelation zwischen CMC und SBR zeigt, dass sie sich in ihrer Variation nahezu identisch verhalten und deutet darauf hin, dass diese beiden Variablen abhängig voneinander gewählt wurden. Sowohl CMC als auch SBR haben eine vergleichsweise hohe positive Korrelation (0,132) mit der Clustervorhersage. Dies weist darauf hin, dass die Verwendung von Binder mit einer erhöhten Wahrscheinlichkeit einer optimalen Beschichtung zusammenhängt. Insgesamt zeigen die meisten Korrelationskoeffizienten eine geringe bis keine Korrelation zwischen den Variablen, was darauf hindeutet, dass keine starken linearen Beziehungen zwischen den Variablen vorliegen. Daraus ergibt sich, dass das Gesamtmodell weniger anfällig für Multikollinearität ist, was die Genauigkeit der Vorhersagen verbessert.

	Anteil Graphit	Anteil Silizium	Anteil CMC-Binder	Anteil SBR-Binder	Anteil Leitruß	Anteil Lösemittel	Bahngeschwindigkeit	Pumpendrehzahl	Nassschichtdicke	Clustervorhersage
Anteil Graphit	1,000	-0,914	-0,320	-0,320	-0,055	-0,165	-0,062	0,002	0,057	-0,049
Anteil Silizium	-0,914	1,000	-0,049	-0,049	-0,144	0,072	0,020	-0,152	-0,030	-0,005
Anteil CMC-Binder	-0,320	-0,049	1,000	1,000	0,164	-0,328	0,036	0,111	-0,049	0,132
Anteil SBR-Binder	-0,320	-0,049	1,000	1,000	0,164	-0,328	0,036	0,111	-0,049	0,132
Anteil Leitruß	-0,055	-0,144	0,164	0,164	1,000	0,142	-0,054	-0,156	0,010	0,125
Anteil Lösemittel	-0,165	0,072	-0,328	-0,328	0,142	1,000	-0,106	0,105	-0,011	-0,054
Bahngeschwindigkeit	-0,062	0,020	0,036	0,036	-0,054	-0,106	1,000	0,822	-0,041	-0,237
Pumpendrehzahl	0,002	-0,152	0,111	0,111	-0,156	0,105	0,822	1,000	-0,045	-0,078
Nassschichtdicke	0,057	-0,030	-0,049	-0,049	0,010	-0,011	-0,041	-0,045	1,000	0,057
Clustervorhersage	-0,049	-0,005	0,132	0,132	0,125	-0,054	-0,237	-0,078	0,057	1,000

Abbildung 91: Korrelationsmatrix der Eingangs- und Zielgrößen des genetischen Algorithmus

Im zweiten Schritt wurden für die höchsten Korrelationskoeffizienten vertiefende Analysen durchgeführt. Hierzu zählt die Korrelation zwischen Graphit und der Pumpendrehzahl in Zusammenhang mit Silizium (Abbildung 92). Dafür wurden drei Validierungsszenarien mit unterschiedlichen Parameterbereichen für Silizium in jeweils 50 Durchläufen durchgeführt.

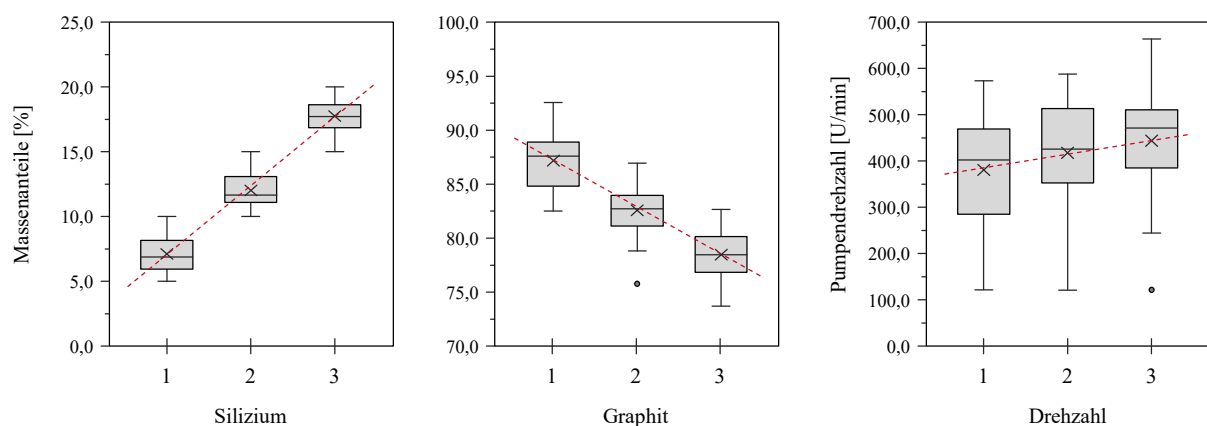


Abbildung 92: Sensitivität von Graphit und der Pumpendrehzahl gegenüber Silizium

Diese starke negative Korrelation zwischen Silizium und Graphit zeigt eine starke invers proportionale Beziehung zwischen ihren Massenanteilen. Diese Beziehung resultiert aus dem Umstand, dass Silizium und Graphit die Hauptbestandteile der Materialzusammensetzung darstellen und sich somit gegenseitig einschränken. Die Erhöhung des einen Stoffs führt zu einer Verringerung des anderen. Wenn der Siliziumgehalt steigt, tendiert der Graphitgehalt dazu, zu sinken, und umgekehrt. Die Korrelation zwischen Silizium und der Pumpendrehzahl ist auffällig, aber vergleichsweise gering. Allerdings wird durch die Parametersensitivität deutlich, dass die Pumpendrehzahl mit steigendem Siliziumanteil konstant steigt und in der Parametereinstellung durch den genetischen Algorithmus berücksichtigt wird.

Außerdem wird die Korrelation zwischen der Pumpendrehzahl und der Clustervorhersage gegenüber der Bahngeschwindigkeit betrachtet (Abbildung 93). Auch hierfür wurden jeweils drei

Validierungsszenarien mit unterschiedlichen Parameterbereichen für die Bahngeschwindigkeit in jeweils 50 Durchläufen durchgeführt.

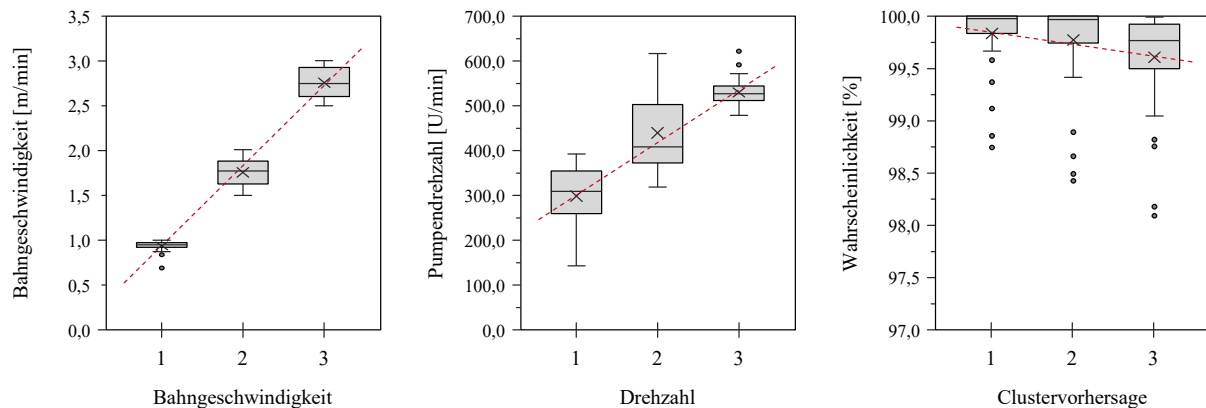


Abbildung 93: Sensitivität von Drehzahl und Clustervorhersage gegenüber der Bahngeschwindigkeit

Die starke positive Korrelation zwischen der Bahngeschwindigkeit und der Pumpendrehzahl unterstreicht die Abhängigkeit der beiden Parameter hinsichtlich der Zielgrößen. Bei einer höheren Bahngeschwindigkeit muss für eine gleichbleibende Nassschichtdicke mehr Material aufgetragen werden, was in einer höheren Pumpendrehzahl resultiert. Wenn die Bahngeschwindigkeit erhöht wird, steigt auch die Pumpendrehzahl und umgekehrt. Die moderate negative Korrelation zwischen Bahngeschwindigkeit und der Clustervorhersage legt nahe, dass eine niedrigere Bahngeschwindigkeit eine höhere Wahrscheinlichkeit für eine erfolgreiche Beschichtung mit sich bringt. Dies deutet darauf hin, dass zukünftige Untersuchungen die Auswirkungen höherer Bahngeschwindigkeiten auf die Beschichtungsqualität in Betracht ziehen sollten.

6.3 Zwischenfazit und kritische Reflexion

Interim conclusion and review of the results

Die folgenden Abschnitte reflektieren die Validierungsergebnisse und überprüfen die Anforderungen an die Methodik. Zunächst werden die Validierungsergebnisse der Modellierung und Integration von Teilmodellen analysiert (Abschnitt 6.3.1), wobei insbesondere auf die Effektivität der angewandten neuronalen Netze und des genetischen Algorithmus eingegangen wird. Anschließend wird die Einhaltung und Erfüllung der inhaltlichen und formalen Anforderungen an die Methodik (Abschnitt 6.3.2) eingehend betrachtet.

6.3.1 Reflexion der Validierungsergebnisse

Reflection on the validation results

Die Anwendung und Validierung der Methodik zielt darauf ab, die Optimierung der Parametereinstellung anhand des Misch- und Beschichtungsprozesses zu evaluieren. Die Modellierung berücksichtigt zentrale Prozessparameter der Elektrodenherstellung wie Bahngeschwindigkeit, Pumpendrehzahl, Materialzusammensetzung und die Viskosität des Slurry. Die Viskosität ist von entscheidender Bedeutung für die Beschichtungsstabilität und wird stark durch die Materialzusammensetzung beeinflusst. Die Zielsetzung, optimale Parameter und

Eingangsmaterialien für ein zuvor definiertes Beschichtungsergebnis vorherzusagen, wurde systematisch verfolgt. Ein mehrstufiger Ansatz wurde angewandt, beginnend mit der Datenvorbereitung, gefolgt von der Modellierung der einzelnen Prozessaspekte und schließlich der Integration der Teilmodelle in ein übergeordnetes Gesamtmodell. Für die Teilmodelle zur Vorhersage der Nassschichtdicke, der Oberflächenqualität und der Viskosität wurde eine umfassende Datenanalyse durchgeführt, wobei sowohl lineare Regression als auch neuronale Netzwerke (ANN) zur Vorhersage berücksichtigt wurden. Die Datenvorbereitung umfasste komplexe Schritte wie die Merkmalsextraktion mittels VGG16 und K-means Clustering zur Prognose von Beschichtungsdefekten. Das rheologische Verhalten der Slurries basierend auf den Materialanteilen vorherzusagen konnte erfolgreich modelliert werden. Die Integration der Teilmodelle erfolgt über einen genetischen Algorithmus zur Optimierung der Parametereinstellung. In Verbindung mit einem Optimierungsalgorithmus können die Prozessgrenzen der einzelnen Parameter eingestellt werden, um die definierten Zielgrößen der Nassschichtdicke und der Oberflächenqualität zu erreichen.

Die Validierung liefert den Nachweis zur Modellierung der Misch- und Beschichtungsprozesse. Obwohl die gewählten neuronalen Netze geeignete Ergebnisse liefern, können sie anfällig für eine Überanpassung sein, insbesondere wenn die Datenmenge begrenzt ist. Die angewandte Datenvorbereitung ist umfangreich und präzise, jedoch könnten Unsicherheiten in der weiteren Skalierung die Modellgenauigkeit beeinträchtigen. Die Auswahl einer geeigneten Netzarchitektur und geeigneter Hyperparameter der neuronalen Netze ist entscheidend und sollte in zukünftigen Modellierungen reflektiert werden.

Die Integration der Teilmodelle durch einen genetischen Algorithmus zur Parametereinstellungsoptimierung ist innovativ und ermöglicht, Trainingsdaten prozessspezifischen einzubinden. Die Reproduzierbarkeit, die Konvergenz und die Parametersensitivität wurden sorgfältig evaluiert, wodurch die grundlegende Validität des Gesamtmodells bestätigt werden konnte. Die Validierung des Gesamtmodells sollte in einem erweiterten Datensatz und unter seriennahen Produktionsbedingungen in Erwägung gezogen werden, um die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf verschiedene Skalierungsebenen sicherzustellen. Die Anwendung des genetischen Algorithmus zur Optimierung von Parametereinstellungen konnte demonstriert werden. Durch Anpassungen der Hyperparametern konnte die Effizienz des genetischen Algorithmus gesteigert werden, um den Anforderungen der Modell und Prozessgrenzen für das Anwendungsbeispiel gerecht zu werden. Die Wahl der Zielgrößen und die Definition der Parameterräume haben einen signifikanten Einfluss auf die Leistung des Algorithmus. Die Komplexität des Algorithmus kann zu erhöhtem Rechenaufwand führen, insbesondere bei großen Parameterräumen, was bei der praktischen Anwendung berücksichtigt werden muss.

6.3.2 Überprüfung der Anforderungen an die Methodik

Review of the methodology requirements

Die Methodik erfüllt die gestellten inhaltlichen Anforderungen an die Methodik auf mehreren Ebenen. Beginnend mit der Auswahl relevanter Prozesskenngrößen für das maschinelle Lernen werden zentrale Parameter (z.B. Bahngeschwindigkeit und Materialzusammensetzung) berücksichtigt. Die modulare Integration der Teilmodelle in einen übergeordneten Optimierungsansatz

reduziert die Komplexität der Modellierung und ermöglicht eine systematische Verbindung der Teilmodelle. Durch die Zuordnung bestehender Produktionsdaten kann die Vorhersage von Parametereinstellungen in prozessspezifische Teilmodelle präzise durchgeführt werden. Die Beschleunigung des Produktionsanlaufs und die optimierte Einstellung von Prozessparametern werden durch den Einsatz eines genetischen Algorithmus adressiert. Eine Multikriterienanalyse zur Optimierung verschiedener Zielvorgaben wird durch die Zielsetzung (z.B. das Beschichtungsergebnis) definiert. Durch die Methodik werden datenbasierte Modellierungsansätze, einschließlich neuronaler Netzwerke, umfassend berücksichtigt und können systematisch umgesetzt werden.

Auch die formalen Anforderungen werden durch die vorgestellte Methodik umfassend berücksichtigt. Hinsichtlich der Handhabbarkeit ermöglicht der systematische Ansatz eine effiziente Durchführung. Die Nachvollziehbarkeit wird durch die transparente Dokumentation und den logischen Ablauf gewährleistet, was eine breite Akzeptanz bei der Anwendung fördert. Die Allgemeingültigkeit der Methodik zeigt sich in ihrer Übertragbarkeit auf verschiedene Bereiche und Anlagen, da sie unabhängig von spezifischen Technologien oder Produktionsprozessen ist. Wiederverwendbarkeit wird durch die Konsistenz der Ergebnisse und die Mehrfachanwendbarkeit unter ähnlichen Bedingungen sichergestellt. Schließlich zielt die Methodik darauf ab, zweckbezogene Antworten auf problemspezifische Anforderungen zu liefern, wodurch sie einen Mehrwert bietet und effektive Lösungen ermöglicht.

Die vorliegende Arbeit präsentiert einen Ansatz zur Optimierung der Batteriezellproduktion, die den Einsatz eines genetischen Algorithmus und die Modellierung von Daten mittels maschinellen Lernens umfasst. Die Kombination aus Datenanalyse, Teilmodellbildung und der Integration über einen genetischen Algorithmus bietet eine Grundlage für die Prozessverbesserung entlang aller Prozessschritte. Zukünftige Forschung könnte die Erweiterung der Methodik auf weitere Produktionsabschnitte evaluieren und alternative Optimierungsalgorithmen in Betracht ziehen, um einen breiteren Anwendungsbereich zu gewährleisten.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Summary and Outlook

Die steigende Nachfrage nach Batteriezellen infolge der Elektrifizierung der Automobilindustrie stellt die Batteriezellhersteller vor Herausforderungen. Der Anlauf einer Batteriezellproduktion erstreckt sich über mehrere Jahre. Auch bei den etablierten Herstellern erreichen die Produktionslinien nach dieser Anlaufphase nur eine OEE von 65 % mit einer Ausschussrate von 10 % des Produktionsvolumens. Daraus wird deutlich, dass die Vorgehensweise bei der Parametereinstellung im Produktionsanlauf ineffizient ist und hohen Optimierungsbedarf hat. Die Komplexität der Batteriezellproduktion und die vielfältigen Einflussfaktoren auf die Produktqualität machen eine systematische Optimierung der Produktionsprozesse schwierig. Derzeit ähnelt die Batteriezellproduktion in Bezug auf Effizienz und Ressourcenverbrauch der Automobilindustrie der 1960er Jahre, da sie weitestgehend auf einem Trial-and-Error-Ansatz beruht. Diese Arbeit untersucht die Parametereinstellung im Produktionsanlauf der Batteriezellproduktion und eine systematische Optimierung mithilfe von künstlicher Intelligenz unter Einbeziehung von Bestandsdaten aus der Produktion. In diesem Zusammenhang werden genetische Algorithmen und maschinelles Lernen als vielversprechende Ansätze zur Verbesserung der Parametereinstellung eingeführt. Ziel der Arbeit ist es, durch die Einbindung von Bestandsdaten aus der Produktion und den Einsatz von maschinellem Lernen die Anlaufphase der Batteriezellproduktion zu optimieren und zu beschleunigen.

In **Kapitel 2** wird der Stand der Technik in der Batteriezellproduktion von Lithium-Ionen-Batterien vorgestellt. Es werden die Grundlagen einschließlich des Aufbaus von Batteriezellen, der Prozessschritte in der Produktion, der Produktionsanlauf und die Inbetriebnahme von Produktionssystemen sowie der Einsatz von Digitalisierung und künstlicher Intelligenz erläutert. Der Fokus liegt insbesondere auf den Herausforderungen bei der Produktgestaltung, der technologischen Komplexität der Prozesskette und den Prozess- und Produktwechselwirkungen. Anschließend werden die Potenziale datenbasierter Ansätze für die Prozessoptimierung diskutiert. Insbesondere wird der Handlungsbedarf an effizienten Methoden zur Parametereinstellung dargestellt und die Notwendigkeit eines tiefgreifenden Verständnisses der Wechselwirkungen zwischen Prozessparametern und Produktmerkmalen adressiert, um die Fertigungsanlagen ideal einzustellen. Der Einsatz künstlicher Intelligenz kann dabei unterstützen, den Produktionsanlauf zu optimieren und zu beschleunigen, indem Wissen über Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge geniert und optimale Prozessparameter vorhersagt werden.

In **Kapitel 3** werden bestehender Ansätze im Kontext der Batteriezellproduktion und dem daraus abgeleiteten Forschungsbedarf betrachtet. Es werden drei Hauptthemen identifiziert: Batteriezellenproduktion, Produktionsanlauf und Datenanalyse. Eine eingehende Untersuchung zeigt, dass trotz des Einsatzes von maschinellem Lernen und Datenanalyse noch erheblicher Forschungsbedarf besteht, insbesondere im Hinblick auf die systematische Verknüpfung prozessspezifischer Teilmodelle und die Integration in einen übergeordneten Optimierungsansatz. Die Literaturrecherche verdeutlicht zudem, dass viele bestehende Ansätze sich hauptsächlich auf die Modellierung von Produkteigenschaften konzentrieren und die Prognose der optimalen Prozessparameter vernachlässigen. Die Ableitung des methodischen Lösungsansatzes erfolgt

durch die Formulierung von Teilforschungsfragen, die eine schrittweise Strukturierung des Lösungsvorgehens ermöglichen. Dabei wird betont, dass die Integration der Teilmodelle in einen übergeordneten Optimierungsansatz eine flexible Anwendung und effiziente Prognose von Prozessparametern ermöglicht. Insgesamt strebt der Lösungsansatz eine praxisnahe Lösung an, um die Herausforderungen in der Batteriezellproduktion zu bewältigen und die Gesamteffektivität der Anlagen zu maximieren.

In **Kapitel 4** wird die Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung in der Batteriezellproduktion durch die Integration von Machine Learning Modellen erläutert. Zunächst wird die allgemeine Vorgehensweise und die Lösungsbausteine vorgestellt. Das Vorgehen ist in drei Phasen unterteilt. In der ersten Phase wird das Referenzsystem definiert und die relevanten Prozesskenngrößen identifiziert. Dies geschieht durch eine Prozessanalyse sowie die Bewertung der vorhandenen Datengrundlage. Die zweite Phase beinhaltet die Modellzuordnung und Datenmodellierung. Hier werden die vorhandenen Daten in Teilmodelle strukturiert und aufbereitet. Anschließend erfolgt die Modellierung, das Training und die Bewertung der einzelnen Modelle. In der dritten Phase werden die Teilmodelle in ein übergeordnetes Gesamtmodell integriert. Dabei werden Schnittstellfunktionen definiert, um die Eingangsgrößen an die Teilmodelle zu übergeben. Die Optimierung der Parametereinstellung erfolgt mithilfe genetischer Algorithmen. Die Methodik ermöglicht eine beschleunigte Anlaufphase in der Batteriezellproduktion, indem sie die Parameter für eine Vielzahl von Prozessen basierend auf vorläufigen Produktionsdaten identifiziert und als globales Optimierungsproblem betrachtet.

In **Kapitel 5** wird die Implementierung eines Software-Demonstrators zur Optimierung von Parametereinstellungen in der Produktion vorgestellt. Die Softwarearchitektur des Demonstrators setzt sich aus einer Benutzer- und einer Systemebene zusammen. Das Frontend bietet eine grafische Benutzeroberfläche zur intuitiven Nutzung des genetischen Algorithmus, einschließlich der Festlegung von Grenzwerten und Zielgrößen, die Konfiguration des Algorithmus und die Darstellung der Ergebnisse. Im Backend wird der genetische Algorithmus mit Hilfe der PyGAD-Bibliothek implementiert, die verschiedene genetische Operatoren unterstützt. Die Fitnessfunktion spielt eine zentrale Rolle und ermöglicht die Optimierung der Parameter anhand von prozessspezifischen Zielvorgaben und Produktanforderungen. Die Implementierung und Integration von Teilmodellen zur Vorhersage der Zielgrößen ist zentraler Bestandteil des flexiblen und anpassbaren Software-Demonstrators, um eine systemunabhängige Lösung für die Parameteroptimierung in Produktionsumgebungen zu bieten. Die Möglichkeit der Integration in die Steuerungssysteme und die potenzielle Automatisierung eines Regelkreises durch Programmierschnittstellen werden hervorgehoben.

In **Kapitel 6** wird die Anwendung und Validierung der entwickelten Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung in der Batteriezellproduktion gezeigt. Zunächst werden die Validierungsziele definiert und die verwendeten Validierungstechniken erläutert. Darauf folgt die Vorstellung des Anwendungsbeispiels aus der Batteriezellproduktion, bei dem die Methodik angewendet wird. Dabei werden die relevanten Prozessparameter definiert und die Durchführung der Versuche beschrieben. Die Teilmodelle zur Vorhersage von Nassschichtdicke, Oberflächenqualität und Viskosität werden modelliert und in das Gesamtmodell integriert. Die Validierung erfolgt durch die Überprüfung der Reproduzierbarkeit, Konvergenz und Parameter-

sensitivität des Gesamtmodells. Dabei wird unter anderem die interne Validität des Gesamtmodells untersucht, indem mehrere Berechnungsdurchläufe mit identischen Parameterkonstellationen durchgeführt werden. Zusätzlich wird die Fähigkeit und Effizienz des genetischen Algorithmus zur Ermittlung der Parametereinstellungen untersucht, indem die Konvergenz des Fitnesswerts über mehrere Generationen analysiert wird. Die Ergebnisse zeigen, dass das Gesamtmodell reproduzierbare und konvergente Ergebnisse liefert. Die Parametersensitivität des Modells wird ebenfalls überprüft, indem die Korrelationen zwischen den Eingangs- und Zielgrößen analysiert werden. Insgesamt konnte die Validierung der Methodik durch das Anwendungsbeispiel aus der Batteriezellproduktion erfolgreich durchgeführt werden. Die Ergebnisse liefern wichtige Erkenntnisse für die Optimierung der Parametereinstellung in der Batteriezellproduktion und bieten eine Grundlage für zukünftige Forschung und Anwendungen in diesem Bereich.

Die entwickelte Methodik zur Optimierung der Parametereinstellung in der Batteriezellproduktion durch die Integration von Machine Learning Modellen bietet sowohl einen bedeutenden wissenschaftlichen als auch industriellen Mehrwert. Auf wissenschaftlicher Ebene adressiert die Arbeit eine wesentliche Lücke in der Produktionsforschung, indem sie eine ganzheitliche Methodik bereitstellt, die die Produktions- und Datenwissenschaften miteinander verknüpft. Industriell gesehen ermöglicht die Methodik produzierenden Unternehmen eine frühzeitige Identifikation potenzieller Parametergrenzen während des Produktionsanlaufs. Die Optimierung der Parametereinstellung führt zu einer beschleunigten Anlaufphase in der Batteriezellproduktion, indem sie die Prozessparameter basierend auf vorläufigen Produktionsdaten identifiziert, was wiederum zur Verbesserung der Ausschussraten und der Gesamteffektivität der Anlagen beiträgt. Insgesamt bietet die entwickelte Methodik einen Beitrag zur Bewältigung der Herausforderungen in der Batteriezellproduktion und zeigt auf, wie künstliche Intelligenz und Datenanalyse dazu beitragen können, die Produktionsprozesse zu optimieren und zu beschleunigen. Durch ihre Flexibilität und Anpassbarkeit ist die Methodik nicht nur für aktuelle, sondern auch für zukünftige Produktionslinien anwendbar, was sie zu einem wertvollen Instrument für die Industrie macht.

Diese interdisziplinäre Herangehensweise wird in Zukunft an Relevanz gewinnen und die Grundlage für weiterführende Forschung legen. Ein wichtiger Ansatzpunkt für zukünftige Untersuchungen besteht in der Adaption der entwickelten Methodik auf andere Batteriezellen, Formate, Materialkombinationen und Prozessketten. Die Allgemeingültigkeit der Methodik könnte durch die Anwendung auf verschiedene Produktionsumgebungen empirisch bestätigt werden. Eine kontinuierliche Erweiterung und Verbesserung der Datenanalysemethoden ist entscheidend, um die Effizienz und Genauigkeit der Prognosen zu verbessern. Ein weiterer Schwerpunkt könnte in der Umsetzung und Anwendung der Methodik in realen Produktionsumgebungen liegen. Die Validierung im Rahmen einer tatsächlichen Anlaufphase in der industriellen Batteriezellproduktion würde die Übertragbarkeit der Ergebnisse bestätigen. Die Schaffung einer übergeordneten Datenbank, die von Forschung und Industrie gemeinsam genutzt wird, könnte die Entwicklung und Modellierung von Teilmodellen unterstützen. Insgesamt bieten die Ergebnisse dieser Dissertation eine Basis für weitere Untersuchungen zur Optimierung der Batteriezellproduktion.

8 Literaturverzeichnis

References

Ahmed, S; Nelson, P. A; Gallagher, K. G; Dees, D. W. (Energy impact of cathode drying and solvent recovery):

Energy impact of cathode drying and solvent recovery during lithium-ion battery manufacturing. In: Journal of Power Sources, Jg. 322, 2016, Nr. 22, S. 169–178

Baazouzi, S; Feistel, N; Wanner, J; Landwehr, I; Fill, A; Birke, K. P. (Design, Properties, and Manufacturing of Cylindrical Li-Ion Battery Cells):

Design, Properties, and Manufacturing of Cylindrical Li-Ion Battery Cells—A Generic Overview. In: Batteries, Jg. 9, 2023, Nr. 6

Bernhart, W. (How to manage supply chain risk for lithium-ion batteries):

Digging deeper: How to manage supply chain risk for lithium-ion batteries, 2022

Bernhart, W; Gabaldon, D; Zheng, R; Schmitt, P; Hotz, T; Braun, S; Kampker, A; Offermanns, C; Krämer, S. (Rising opportunities for battery equipment manufacturers):

Rising opportunities for battery equipment manufacturers. Boom in electric cars and li-ion batteries shifts manufacturing equipment into overdrive, 2020

Berthold, M. R; Borgelt, C; Höppner, F; Klawonn, F. (Hrsg.) (Guide to Intelligent Data Analysis):

Guide to Intelligent Data Analysis. Texts in Computer Science, London: Springer London, 2010

Bishop, C. M. (Neural networks for pattern recognition):

Neural networks for pattern recognition. Reprinted. Aufl. Oxford: Oxford University Press, 2010

Brodd, R. J; Helou, C. (Cost comparison of producing high-performance Li-ion):

Cost comparison of producing high-performance Li-ion batteries in the U.S. and in China. In: Journal of Power Sources, Jg. 231, 2013, S. 293–300

Bruns, M. (Systemtechnik):

Systemtechnik. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1991

Campbell, C; Ying, Y. (Learning with Support Vector Machines):

Learning with Support Vector Machines. In: Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning, Jg. 5, 2011, Nr. 1, S. 1–95

Chapman, P; Clinton, J; Kerber, R; Khabaza, T; Reinartz, T; Shearer, C; Wirth, R. (CRISP-DM 1.0):

CRISP-DM 1.0. Step-by-step data mining guide, 2000

Chapman, P; Clinton, J; Kerber, R; Khabaza, T; Reinartz, T; Shearer, C; Wirth, R. (CRISP-DM):

CRISP-DM 1.0. Step-by-step data mining guide, 2000

Chicco, D; Warrens, M. J; Jurman, G. (The coefficient of determination R-squared):

The coefficient of determination R-squared is more informative than SMAPE, MAE, MAPE, MSE and RMSE in regression analysis evaluation, Jg. 7, 2021

Chu, W.-B; Yang, J.-W; Wang, Y.-C; Liu, T.-J; Tiu, C; Guo, J. (The effect of inorganic particles on slot die coating):

The effect of inorganic particles on slot die coating of poly(vinyl alcohol) solutions. In: Journal of colloid and interface science, Jg. 297, 2006, Nr. 1, S. 215–225

Coello, C. A. (GA-based multiobjective optimization techniques):

An updated survey of GA-based multiobjective optimization techniques. In: ACM Comput. Surv., Jg. 32, 2000, Nr. 2, S. 109–143

Cohen, L; Manion, L; Morrison, K. (Research methods in education):

Research methods in education. eighth edition Aufl. London, New York: Routledge, 2018

Cumming, B. S. (Innovation overview and future challenges):

Innovation overview and future challenges. In: European Journal of Innovation Management, Jg. 1, 1998, Nr. 1, S. 21–29

Doltsinis, S; Ferreira, P; Lohse, N. Reinforcement Learning for Production Ramp-Up:

Reinforcement Learning for Production Ramp-Up: A Q-Batch Learning Approach: 2012 11th International Conference on Machine Learning and Applications. 2012 Eleventh International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA): IEEE 2012, S. 610–615

Doltsinis, S; Ferreira, P; Lohse, N. (An MDP Model-Based Reinforcement Learning Approach for Production Station Ramp-Up Optimization):

An MDP Model-Based Reinforcement Learning Approach for Production Station Ramp-Up Optimization: Q-Learning Analysis. In: IEEE Trans. Syst. Man Cybern, Syst., Jg. 44, 2014, Nr. 9, S. 1125–1138

Doltsinis, S; Ferreira, P; Mabkhot, M. M; Lohse, N. (A Decision Support System for rapid ramp-up of industry 4.0 enabled production systems):

A Decision Support System for rapid ramp-up of industry 4.0 enabled production systems. In: Computers in Industry, Jg. 116, 2020, S. 103190

Dorrmann, L; Sann-Ferro, K; Heininger, P; Mähliß, J. D. (Compendium Li-ion batteries):

Compendium: Li-ion batteries. Principles, characteristics, laws and standards (VDE study). Frankfurt am Main: VDE Verband der Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik e. V, October 2021

Drakopoulos, S. X; Gholamipour-Shirazi, A; MacDonald, P; Parini, R. C; Reynolds, C. D; Burnett, D. L; Pye, B; O'Regan, K. B; Wang, G; Whitehead, T. M; Conduit, G. J; Cazacu, A; Kendrick, E. (Formulation and manufacturing optimization of lithium-ion graphite-based electrodes):

Formulation and manufacturing optimization of lithium-ion graphite-based electrodes via machine learning. In: Cell Reports Physical Science, Jg. 2, 2021, Nr. 12, S. 100683

Draux, H. (Visualization of Research Metrics):

Visualization of Research Metrics. In: Ball, R. (Hrsg.): Handbook Bibliometrics De Gruyter, 2021, S. 365–376

Duquesnoy, M; Boyano, I; Ganborena, L; Cereijo, P; Ayerbe, E; Franco, A. A. (Machine learning-based assessment of electrode heterogeneity):

Machine learning-based assessment of the impact of the manufacturing process on battery electrode heterogeneity. In: Energy and AI, Jg. 5, 2021, Nr. 229361, S. 100090

Duquesnoy, M; Lombardo, T; Chouchane, M; Primo, E. N; Franco, A. A. (Data-driven assessment of electrode calendaring):

Data-driven assessment of electrode calendaring process by combining experimental results, in silico mesostructures generation and machine learning. In: Journal of Power Sources, Jg. 480, 2020, Nr. 1, S. 229103

Dyckhoff, H; Müser, M; Renner, T. (Ansätze einer Produktionstheorie des Serienanlaufs):

Ansätze einer Produktionstheorie des Serienanlaufs. In: Z Betriebswirtsch, Jg. 82, 2012, Nr. 12, S. 1427–1456

Eberendu, A. C. (Unstructured Data: an overview of the data of Big Data):

Unstructured Data: an overview of the data of Big Data. In: IJCTT, Jg. 38, 2016, Nr. 1, S. 46–50

Europäische Kommission (Unionsrahmen für staatliche Beihilfen zur Förderung von Forschung, Entwicklung und Innovation):

Unionsrahmen für staatliche Beihilfen zur Förderung von Forschung, Entwicklung und Innovation. 2014/C 198/01, 2014

Fayyad, U; Piatetsky-Shapiro, G; Smyth, P. (The KDD process for extracting knowledge from data):

The KDD process for extracting useful knowledge from volumes of data. In: Commun. ACM, Jg. 39, 1996, Nr. 11, S. 27–34

Filz, M.-A; Gellrich, S; Turetskyy, A; Wessel, J; Herrmann, C; Thiede, S. (Virtual Quality Gates in Manufacturing Systems):

Virtual Quality Gates in Manufacturing Systems: Framework, Implementation and Potential. In: JMMP, Jg. 4, 2020, Nr. 4, S. 106

Financial Times (Visual vocabulary - Designing with data):

Visual vocabulary - Designing with data. <https://ft-interactive.github.io/visual-vocabulary/>. Abruf 15.02.2023

Francis, C. F. J; Kyratzis, I. L; Best, A. S. (Lithium-Ion Battery Separators for Ionic-Liquid Electrolytes):

- Lithium-Ion Battery Separators for Ionic-Liquid Electrolytes: A Review*. In: Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.), Jg. 32, 2020, Nr. 18, e1904205
- Franco, A. A; Rucci, A; Brandell, D; Frayret, C; Gaberscek, M; Jankowski, P; Johansson, P. (Boosting Rechargeable Batteries R&D by Multiscale Modeling):**
Boosting Rechargeable Batteries R&D by Multiscale Modeling: Myth or Reality? In: Chemical reviews, Jg. 119, 2019, Nr. 7, S. 4569–4627
- Frith, J. T; Lacey, M. J; Ulissi, U. (A non-academic perspective on the future of lithium-based batteries):**
A non-academic perspective on the future of lithium-based batteries. In: Nature communications, Jg. 14, 2023, Nr. 1
- Fritzsche, R. (Erstellung von Parameter-Diagrammen in der Automobilindustrie):**
Erstellung von Parameter-Diagrammen in der Automobilindustrie. In: ATZ Automobiltech Z, Jg. 108, 2006, Nr. 6, S. 492–497
- Fuhrmann, M. (Qualitätsorientierte modellbasierte Prozessparameteroptimierung für das Fused Deposition Modeling):**
Qualitätsorientierte modellbasierte Prozessparameteroptimierung für das Fused Deposition Modeling. Dissertation, 2018
- Gad, A. F. (PyGAD - Python Genetic Algorithm):**
PyGAD - Python Genetic Algorithm. <https://pygad.readthedocs.io>. Abruf 28.02.2023
- Gao, J; Shi, S.-Q; Li, H. (Brief overview of electrochemical potential in lithium ion batteries):**
Brief overview of electrochemical potential in lithium ion batteries. In: Chinese Phys. B, Jg. 25, 2016, Nr. 1, S. 18210
- Garzia, F; Flamingo, F; Veca, G. (Energy Management Using Genetic Algorithms):**
Energy Management Using Genetic Algorithms. In: WIT Transactions on Ecology and the Environment 2003, Nr. 62
- Gethmann, C. F; Buxmann, P; Distelrath, J; Humm, B. G; Lingner, S; Nitsch, V; Schmidt, J. C; Spiecker genannt Döhmann, I. (Künstliche Intelligenz in der Forschung):**
Künstliche Intelligenz in der Forschung. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2022
- Ghosh, G; Mandal, P; Mondal, S. C. (Modeling and optimization of surface roughness in keyway milling):**
Modeling and optimization of surface roughness in keyway milling using ANN, genetic algorithm, and particle swarm optimization. In: Int J Adv Manuf Technol, Jg. 100, 2019, Nr. 5-8Nr. , S. 1223–1242
- Gillhuber, A; Kauermann, G; Hauner, W. (Künstliche Intelligenz und Data Science in Theorie und Praxis):**

- Künstliche Intelligenz und Data Science in Theorie und Praxis*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2023
- Greiner, R; Berger, D; Böck, M. (Analytics und Artificial Intelligence):**
Analytics und Artificial Intelligence. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2022
- Günter, F. J; Rössler, S; Schulz, M; Braunwarth, W; Gilles, R; Reinhart, G. (Influence of the Cell Format on the Electrolyte Filling Process of Lithium-Ion Cells):**
Influence of the Cell Format on the Electrolyte Filling Process of Lithium-Ion Cells. In: Energy Technol., Jg. 8, 2020, Nr. 2
- Haberfellner, R; Weck, O. L. de; Fricke, E; Vössner, S. (Systems Engineering):**
Systems Engineering. Fundamentals and Applications (Springer eBook Collection). Cham: Birkhäuser, 2019
- Hackmann, M. (Outlook on the battery manufacturing equipment industry):**
Outlook on the battery manufacturing equipment industry. How to meet the European market demands and technology needs. Aachen, 25.10.2023
- Hagemeister, J; Stock, S; Linke, M; Fischer, M; Drees, R; Kurrat, M; Daub, R. (Lean Cell Finalization in Lithium-Ion Battery Production):**
Lean Cell Finalization in Lithium-Ion Battery Production: Determining the Required Electrolyte Wetting Degree to Begin the Formation. In: Energy Technol., Jg. 11, 2023, Nr. 5
- Haghi, S; Hidalgo, M. F. V; Niri, M. F; Daub, R; Marco, J. (Machine Learning in Lithium-Ion Battery Cell Production):**
Machine Learning in Lithium-Ion Battery Cell Production: A Comprehensive Mapping Study. In: Batteries & Supercaps, Jg. 6, 2023, Nr. 7
- Hartnig, C; Schmidt, M. (Elektrolyte und Leitsalze):**
Elektrolyte und Leitsalze. In: Korthauer, R. (Hrsg.): Handbuch Lithium-Ionen-Batterien Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 61–77
- Heimes, H. H. (Methodik zur Auswahl von Fertigungsressourcen in der Batterieproduktion):**
Methodik zur Auswahl von Fertigungsressourcen in der Batterieproduktion (Edition Wissenschaft Apprimus, 2014,41). 1. Aufl. Aufl. Aachen: Apprimus-Verl., 2014. Zugl.: Aachen, Techn. Hochsch., Diss., 2014
- Heimes, H. H; Dorn, B; Locke, M; Wennemar, S; Ludwigs, R; Plocher, L; Voß, S. (Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen):**
Produktionsverfahren von Batteriezellen und -systemen. In: Kampker, A; Heimes, H. H. (Hrsg.): Elektromobilität Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2024, S. 259–273
- Heimes, H. H; Kampker, A; Dorn, B; Kraus, A; Nankemann, M. (Vom Prototypen zur Serienfertigung):**
Vom Prototypen zur Serienfertigung. In: Kampker, A; Heimes, H. H. (Hrsg.): Elektromobilität Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2024, S. 217–225

- Heimes, H. H; Kampker, A; Hemdt, A. von; Kreisköther, K. D; Michaelis, S; Rahimzei, E. (Komponentenherstellung einer Lithium-Ionen-Batteriezele):**
Komponentenherstellung einer Lithium-Ionen-Batteriezele 2019.
- Heimes, H. H; Kampker, A; Offermanns, C; Vienenkötter, J; Frank, M; Robben, T; Klohs, D; Cattani, N. S; Lackner, N; Christen, N; Kreisköther, K; Deutsdens, C; Kreisköther, K; Fluchs, S. (Elektromobilität als Schlüsseltechnologie der Mobilitäts-wende):**
Elektromobilität als Schlüsseltechnologie der Mobilitätswende. In: Kampker, A; Heimes, H. H. (Hrsg.): *Elektromobilität* Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2024, S. 39–62
- Heimes, H. H; Kampker, A; Wennemar, S; Plocher, L; Bockey, G. (Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezele):**
Produktionsprozess einer Lithium-Ionen-Batteriezele. 4. Auflage Aufl., 2023
- Huber, S; Wiemer, H; Schneider, D; Ihlenfeldt, S. (Data mining methodology for engi-neering applications):**
DMME: Data mining methodology for engineering applications – a holistic extension to the CRISP-DM model. In: *Procedia CIRP*, Jg. 79, 2019, Nr. 4, S. 403–408
- Husseini, K; Schmidgruber, N; Weinmann, H. W; Maibaum, K; Ruhland, J; Fleischer, J. (Development of a Digital Twin for Improved Ramp-Up Processes in Li-Ion-Bat-tery-Cell-Stack-Formation):**
Development of a Digital Twin for Improved Ramp-Up Processes in the Context of Li-Ion-Battery-Cell-Stack-Formation. In: *Procedia CIRP*, Jg. 106, 2022, Nr. 35, S. 27–32
- Ismail, A; Truong, H.-L; Kastner, W. (Manufacturing process data analysis pipelines: a requirements analysis and survey):**
Manufacturing process data analysis pipelines: a requirements analysis and survey. In: *J Big Data*, Jg. 6, 2019, Nr. 1
- James, G; Witten, D; Hastie, T; Tibshirani, R. (An Introduction to Statistical Learning):**
An Introduction to Statistical Learning. New York, NY: Springer US, 2021
- Joos, J; Buchele, A; Schmidt, A; Weber, A; Ivers-Tiffée, E. (Virtual Electrode Design for Lithium-Ion Battery Cathodes):**
Virtual Electrode Design for Lithium-Ion Battery Cathodes. In: *Energy Technol.*, Jg. 9, 2021, Nr. 6
- Jung, A. (Machine Learning):**
Machine Learning. Singapore: Springer Nature Singapore, 2022
- Kaiser, J; Wenzel, V; Nirschl, H; Bitsch, B; Willenbacher, N; Baunach, M; Schmitt, M; Jaiser, S; Scharfer, P; Schabel, W. (Prozess- und Produktentwicklung von Elektroden für Li-Ionen-Zellen):**
Prozess- und Produktentwicklung von Elektroden für Li-Ionen-Zellen. In: *Chemie Ingeni-eur Technik*, Jg. 86, 2014, Nr. 5, S. 695–706

Kampker, A. (Elektromobilproduktion):

Elektromobilproduktion. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014

Kampker, A; Heimes, H; Dorn, B; Clever, H; Scheibe, A. (Potentials and Implementation Strategies For Flexible Battery Cell Production):

Potentials and Implementation Strategies For Flexible Battery Cell Production: Hannover publish-Ing, 2023

Kampker, A; Heimes, H; Dorn, B; Offermanns, C; Friege, M; Wennemar, S; Neb, D; Kisseler, N; Drescher, M; Gorsch, J; Späth, B; Lackner, N; Bernhart, W; Hasenberg, J.-P; Hotz, T; Gallus, D; Knoche, K; Demir, I; Achmadeev, T. (Battery Monitor 2023):

Battery Monitor 2023. The value chain between economy and ecology, 2023

Kampker, A; Heimes, H; Offermanns, C; Wennemar, S; Robben, T; Lackner, N. (Optimizing the Cell Finishing Process):

Optimizing the Cell Finishing Process: An Overview of Steps, Technologies, and Trends. In: WEVJ, Jg. 14, 2023, Nr. 4

Karamitsos, I; Albarhami, S; Apostolopoulos, C. (Applying DevOps Practices of Continuous Automation for Machine Learning):

Applying DevOps Practices of Continuous Automation for Machine Learning. In: Information, Jg. 11, 2020, Nr. 7, S. 1–15

Katoch, S; Chauhan, S. S; Kumar, V. (A review on genetic algorithm: past, present, and future):

A review on genetic algorithm: past, present, and future. In: Multimedia tools and applications, Jg. 80, 2021, Nr. 5, S. 8091–8126

Kehrer, M. (Methodik zur Gestaltung des Wiederanlaufs der Lithium-Ionen-Batterie-zellproduktion):

Methodik zur Gestaltung des Wiederanlaufs der Lithium-Ionen-Batteriezellproduktion. Dissertation

Kehrer, M; Locke, M; Offermanns, C; Heimes, H; Kampker, A. (Analysis of Possible Reductions of Rejects in Battery Cell Production):

Analysis of Possible Reductions of Rejects in Battery Cell Production during Switch-On and Operating Processes. In: Energy Technol. 2021.

Kersting, K; Lampert, C; Rothkopf, C. (Wie Maschinen lernen):

Wie Maschinen lernen. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2019

Khandavalli, S; Rothstein, J. P. (The effect of shear-thickening on the stability of slot-die coating):

The effect of shear-thickening on the stability of slot-die coating. In: AIChE J., Jg. 62, 2016, Nr. 12, S. 4536–4547

Khayat, R. E; Hossain, M. T. (Coating Flow Near Channel Exit):

Coating Flow Near Channel Exit. A Theoretical Perspective. In: Fluids, Jg. 5, 2020, Nr. 4

- Kirchhof, M; Haas, K; Kornas, T; Thiede, S; Hirz, M; Herrmann, C. (Failure Analysis in Lithium-Ion Battery Production with FMEA-Based Large-Scale Bayesian Network):**
Failure Analysis in Lithium-Ion Battery Production with FMEA-Based Large-Scale Bayesian Network, 2020
- Kornas, T; Daub, R; Karamat, M. Z; Thiede, S; Herrmann, C. Data-and Expert-Driven Analysis of Cause-Effect Relationships in Lithium-Ion Batterie Production:**
Data-and Expert-Driven Analysis of Cause-Effect Relationships in the Production of Lithium-Ion Batteries: 2019 IEEE 15th International Conference on Automation Science and Engineering (CASE). 2019 IEEE 15th International Conference on Automation Science and Engineering (CASE): IEEE 2019, S. 380–385
- Kornas, T; Wittmann, D; Daub, R; Meyer, O; Weihs, C; Thiede, S; Herrmann, C. (Multi-Criteria Optimization in the Production of Lithium-Ion Batteries):**
Multi-Criteria Optimization in the Production of Lithium-Ion Batteries. In: *Procedia Manufacturing*, Jg. 43, 2020, S. 720–727
- Kornmesser, S; Büttemeyer, W. (Wissenschaftstheorie):**
Wissenschaftstheorie. Stuttgart: J.B. Metzler, 2020
- Kostyszyn, K. N. (Statistisches Testen auf ausreichende Regelkartenleistungen):**
Statistisches Testen auf ausreichende Regelkartenleistungen basierend auf Kleinserien und gemischten Kleinserien: RWTH Aachen University, 2021
- Kraus, A. (Anwendungsorientierte Methodik zur frühzeitigen Integration datenbasierter Ansätze):**
Anwendungsorientierte Methodik zur frühzeitigen Integration datenbasierter Ansätze in die Anlaufphase disruptiver Produkte: RWTH Aachen University, 2023
- Krauß, J; Ackermann, T; Kies, A. D; Roth, D; Mitterfellner, M. (Virtual Experiments for a Sustainable Battery Cell Production):**
Virtual Experiments for a Sustainable Battery Cell Production. In: Kohl, H; Seliger, G; Dietrich, F. (Hrsg.): *Manufacturing Driving Circular Economy* (Reihe: *Lecture Notes in Mechanical Engineering*). Cham: Springer International Publishing, 2023, S. 585–594
- Kubicek, H. (Heuristische Bezugsrahmen und heuristisch angelegte Forschungsdesign):**
Heuristische Bezugsrahmen und heuristisch angelegte Forschungsdesign als Elemente einer Konstruktionsstrategie empirischer Forschung (Arbeitspapier / Institut für Unternehmensführung im Fachbereich Wirtschaftswissenschaften der Freien Universität Berlin, 16). Berlin: Inst. für Unternehmensführung, 1976
- Kwade, A; Haselrieder, W; Leithoff, R; Modlinger, A; Dietrich, F; Droeder, K. (Current status and challenges for automotive battery production technologies):**
Current status and challenges for automotive battery production technologies. In: *Nat Energy*, Jg. 3, 2018, Nr. 4, S. 290–300

Lanquillon, C. (Grundzüge des maschinellen Lernens):

Grundzüge des maschinellen Lernens. In: Schacht, S; Lanquillon, C. (Hrsg.): Blockchain und maschinelles Lernen Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2019, S. 89–142

Lanquillon, C; Schacht, S. (Knowledge Science):

Knowledge Science. Grundlagen. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2023

Lensch-Franzen, C; Gohl, M; Schmalz, M; Doguer, T. (Different Cell Formats and their System Integration):

From Cell to Battery System - Different Cell Formats and their System Integration. In: MTZ Worldw, Jg. 81, 2020, Nr. 11, S. 68–73

Leuthner, S. (Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien):

Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien. In: Korthauer, R. (Hrsg.): Handbuch Lithium-Ionen-Batterien Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 13–19

Li, J; Fleetwood, J; Hawley, W. B; Kays, W. (From Materials to Cell):

From Materials to Cell. State-of-the-Art and Prospective Technologies for Lithium-Ion Battery Electrode Processing. In: Chemical reviews, Jg. 122, 2022, Nr. 1, S. 903–956

Liu, K; Wei, Z; Yang, Z; Li, K. (Mass load prediction for lithium-ion battery electrode clean production):

Mass load prediction for lithium-ion battery electrode clean production: A machine learning approach. In: Journal of Cleaner Production, Jg. 289, 2021, Nr. 1, S. 125159

Ma, Z; Wang, Y; Song, W. (Fitness Function for Evolutionary Constrained Multiobjective Optimization):

A New Fitness Function With Two Rankings for Evolutionary Constrained Multiobjective Optimization. In: IEEE Trans. Syst. Man Cybern, Syst., Jg. 51, 2021, Nr. 8, S. 5005–5016

Martinez, I; Viles, E; G. Olaizola, I. (Data Science Methodologies):

Data Science Methodologies. Current Challenges and Future Approaches. In: Big Data Research, Jg. 24, 2021

Martinez-Plumed, F; Contreras-Ochando, L; Ferri, C; Hernandez-Orallo, J; Kull, M; Lachiche, N; Ramirez-Quintana, M. J; Flach, P. (CRISP-DM Twenty Years Later):

CRISP-DM Twenty Years Later: From Data Mining Processes to Data Science Trajectories. In: IEEE Trans. Knowl. Data Eng., Jg. 33, 2021, Nr. 8, S. 3048–3061

Meling, F. (Methodik für die Rekombination von Anlagentechnik):

Methodik für die Rekombination von Anlagentechnik. München, Technische Universität München, Diss., 2012. München, 2012

Michaelis, S; Schütrumpf, J; Kampker, A; Heimes, H; Dorn, B; Wennemar, S; Scheibe, A; Wolf, S; Smulka, M; Ingendoh, B; Thielmann, A; Neef, C; Wicke, T; Kwade, A; Gottschalk, L; von Boeselager, C; Blömeke, S; Diener, A; von Horstig, M.-W; Husmann, J; Kouli, M; Mund, M; Ventura Silva, G; Weber, M; Podbreznik, M; Schmetz, A. (Roadmap Batterie-Produktionsmittel 2030):

Roadmap Batterie-Produktionsmittel 2030, 2023

Mishra, S; Sahoo, S; Das, M. (Genetic Algorithm: An Efficient Tool for Global Optimization):

Genetic Algorithm: An Efficient Tool for Global Optimization. In: Advances in Computational Sciences and Technology 2017, Nr. Volume 10, Number 8Nr. , S. 2201–2211

Mitchell, T. M. (Machine learning):

Machine learning (McGraw-Hill series in computer science). International ed., [Reprint.] Aufl. New York, NY: McGraw-Hill, 2010

Mockenhaupt, A. (Hrsg.) (Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion):

Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in der Produktion, Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2021

Mok, S. L; Kwong, C. K; Lau, W. S. (Approach to the Determination of Initial Process Parameters for Injection Moulding):

A Hybrid Neural Network and Genetic Algorithm Approach to the Determination of Initial Process Parameters for Injection Moulding. In: Int J Adv Manuf Technol, Jg. 18, 2001, Nr. 6, S. 404–409

Monconduit, L; Croguennec, L; Dedryvere, R. (Electrodes for Li-ion Batteries):

Electrodes for Li-ion Batteries. Materials, Mechanisms and Performance. 1., Auflage Aufl. New York, NY: John Wiley & Sons, 2015

Nakajima, H; Kitahara, T; Higashinaka, Y; Nagata, Y. (Effect of Electrode Mixing Conditions on the Performance of Lithium-Ion Batteries):

Effect of Electrode Mixing Conditions on the Performance of Lithium-Ion Batteries Analyzed by Fast Fourier Transform Electrochemical Impedance Spectroscopy. In: ECS Trans., Jg. 64, 2015, Nr. 22, S. 87–95

Neef, C; Link, S; Wicke, T; Hettesheimer, T; Diehl, M; Krätzig, O; Degen, F; Klein, F; Fanz, P; Burgard, M; Kleinert, R. (Development perspectives for lithium-ion battery cell formats):

Development perspectives for lithium-ion battery cell formats, 2022

Ngo, Q. H; Schmitt, S; Ellerich, M; Schmitt, R. H. (Artificial intelligence based decision model for a quality oriented production ramp-up):

Artificial intelligence based decision model for a quality oriented production ramp-up. In: Procedia CIRP, Jg. 88, 2020, Nr. 10, S. 521–526

Nuzzo, R. L. (Histograms: A Useful Data Analysis Visualization):

Histograms: A Useful Data Analysis Visualization. In: PM & R the journal of injury, function, and rehabilitation, Jg. 11, 2019, Nr. 3, S. 309–312

Oberkampff, W. L; Roy, C. J. (Verification and validation in scientific computing):

Verification and validation in scientific computing. [Elektronische Ressource] Aufl. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010

Obermaier, R. (Handbuch Industrie 4.0 und Digitale Transformation):

Handbuch Industrie 4.0 und Digitale Transformation. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2019

Painton, L; Campbell, J. (Genetic algorithms in optimization of system reliability):

Genetic algorithms in optimization of system reliability. In: IEEE Trans. Rel., Jg. 44, 1995, Nr. 2, S. 172–178

Pantoja, W; Perez-Taborda, J. A; Avila, A. (Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies):

Tug-of-War in the Selection of Materials for Battery Technologies. In: Batteries, Jg. 8, 2022, Nr. 9

Panwar, V; Kumar Sharma, D; Pradeep Kumar, K. V; Jain, A; Thakar, C. (Experimental investigations and optimization of surface roughness in turning):

Experimental investigations and optimization of surface roughness in turning of en 36 alloy steel using response surface methodology and genetic algorithm. In: Materials Today: Proceedings, Jg. 46, 2021, Nr. 2013, S. 6474–6481

Patzak, G. (Systemtechnik):

Systemtechnik. Planung komplexer innovativer Systeme. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1982

Pistorius, J. (Industrie 4.0 – Schlüsseltechnologien für die Produktion):

Industrie 4.0 – Schlüsseltechnologien für die Produktion. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2020

Plumeyer, J. F; Menebröcker, N; Clever, H; Kokozinski, L; Wessel, S; Heimes, H. H; Kampker, A. (A Review of Process Innovations in the Cell Finishing of Lithium-Ion Batteries):

A Review of Process Innovations in the Cell Finishing of Lithium-Ion Batteries in Large-Scale Production: Hannover publish-Ing, 2023

Qin, S. J. (Process data analytics in the era of big data):

Process data analytics in the era of big data. In: AIChE J., Jg. 60, 2014, Nr. 9, S. 3092–3100

Rabe, M; Spieckermann, S; Wenzel, S. (Verifikation und Validierung für die Simulation in Produktion und Logistik):

Verifikation und Validierung für die Simulation in Produktion und Logistik. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008

Rohkohl, E; Schönemann, M; Bodrov, Y; Herrmann, C. (A data mining approach for continuous battery cell manufacturing processes):

A data mining approach for continuous battery cell manufacturing processes from development towards production. In: Advances in Industrial and Manufacturing Engineering, Jg. 4, 2022, Nr. 3, S. 100078

- R-Smith, N. A.-Z; Ragulskis, M; Kasper, M; Wagner, S; Pumsleitner, J; Zollo, B; Groebmeyer, A; Kienberger, F. (Li-Ion Cell Measurements Including Internal Resistance for Quality Inspection and Classification):**
Multiplexed 16 × 16 Li-Ion Cell Measurements Including Internal Resistance for Quality Inspection and Classification. In: IEEE Trans. Instrum. Meas., Jg. 70, 2021, S. 1–9
- Runkler, T. A. (Data Mining):**
Data Mining. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2010
- Russell, S. J; Norvig, P. (Artificial intelligence):**
Artificial intelligence. A modern approach (Pearson series in artificial intelligence). Fourth edition, global edition Aufl. Harlow: Pearson, 2022
- Rynne, O; Dubarry, M; Molson, C; Nicolas, E; Lepage, D; Prébé, A; Aymé-Perrot, D; Rochefort, D; Dollé, M. (Li-Ion Battery Electrode Formulation Optimization Study):**
Exploiting Materials to Their Full Potential, a Li-Ion Battery Electrode Formulation Optimization Study. In: ACS Appl. Energy Mater., Jg. 3, 2020, Nr. 3, S. 2935–2948
- Saigal, P. (Support-Vector Machines):**
Support-Vector Machines (Computer Science, Technology and Applications Ser). New York: Nova Science Publishers Incorporated, 2020
- Sarkar, D; Bali, R; Sharma, T. (Practical Machine Learning with Python):**
Practical Machine Learning with Python. Berkeley, CA: Apress, 2018
- Schier, A. L. (Iteratives Vorgehen im operativen Anlauf disruptiver Produkte):**
Iteratives Vorgehen im operativen Anlauf disruptiver Produkte am Beispiel der Produktion von Elektromotoren, 2023
- Schmidt, O; Thomitzek, M; Röder, F; Thiede, S; Herrmann, C; Krewer, U. (Modeling the Impact of Manufacturing Uncertainties on Lithium-Ion Batteries):**
Modeling the Impact of Manufacturing Uncertainties on Lithium-Ion Batteries. In: J. Electrochem. Soc., Jg. 167, 2020, Nr. 6, S. 60501
- Schmitt, M; Baunach, M; Wengeler, L; Peters, K; Junges, P; Scharfer, P; Schabel, W. (Slot-die processing of lithium-ion battery electrodes):**
Slot-die processing of lithium-ion battery electrodes—Coating window characterization. In: Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, Jg. 68, 2013, Nr. 4–5Nr., S. 32–37
- Schnell, J; Nentwich, C; Endres, F; Kollenda, A; Distel, F; Knoche, T; Reinhart, G. (Data mining in lithium-ion battery cell production):**
Data mining in lithium-ion battery cell production. In: Journal of Power Sources, Jg. 413, 2019, S. 360–366
- Schönemann, M; Bockholt, H; Thiede, S; Kwade, A; Herrmann, C. (Multiscale simulation approach for production systems):**
Multiscale simulation approach for production systems. In: Int J Adv Manuf Technol, Jg. 102, 2019, Nr. 5–8Nr., S. 1373–1390

- Schönherr, R; Burseg, L; Knaller, M. (Erfolgreiche Anlaufgestaltung mittels selbstlerner automatisierter Montagesysteme):**
Erfolgreiche Anlaufgestaltung mittels selbstlernender automatisierter Montagesysteme. In: Zeitschrift für wirtschaftlichen Fabrikbetrieb, Jg. 113, 2018, Nr. 7-8Nr. , S. 484–488
- Schroeders, U; Wilhelm, O; Olaru, G. (Meta-Heuristics in Short Scale Construction):**
Meta-Heuristics in Short Scale Construction: Ant Colony Optimization and Genetic Algorithm. In: PloS one, Jg. 11, 2016, Nr. 11
- Schröer, C; Kruse, F; Gómez, J. M. (A Systematic Literature Review on Applying CRISP-DM Process Model):**
A Systematic Literature Review on Applying CRISP-DM Process Model. In: Procedia Computer Science, Jg. 181, 2021, S. 526–534
- Schuh, G. (Hrsg.) (Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen):**
Anlaufmanagement in der Automobilindustrie erfolgreich umsetzen. Ein Leitfaden für die Praxis. VDI-/Buch], Berlin, Heidelberg: Springer, 2008
- scikit-learn (Metrics and scoring quantifying the quality of predictions):**
Metrics and scoring quantifying the quality of predictions. https://scikit-learn.org/stable/modules/model_evaluation.html#scoring-parameter. Abruf 18.02.2023
- Self, J; Aiken, C. P; Petibon, R; Dahn, J. R. (Survey of Gas Expansion in Li-Ion NMC Pouch Cells):**
Survey of Gas Expansion in Li-Ion NMC Pouch Cells. In: J. Electrochem. Soc., Jg. 162, 2015, Nr. 6, A796-A802
- Sette, S; Boullart, L; van Langenhove, L. (Optimising a production process by a neural network and genetic algorithm approach):**
Optimising a production process by a neural network/genetic algorithm approach. In: Engineering Applications of Artificial Intelligence, Jg. 9, 1996, Nr. 6, S. 681–689
- Shen, X; Zhang, X.-Q; Ding, F; Huang, J.-Q; Xu, R; Chen, X; Yan, C; Su, F.-Y; Chen, C.-M; Liu, X; Zhang, Q. (Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries):**
Advanced Electrode Materials in Lithium Batteries. Retrospect and Prospect. In: Energy Material Advances, Jg. 2021, 2021, S. 1–15
- Siebertz, K; van Bebber, D; Hochkirchen, T. (Hrsg.) (Statistische Versuchsplanung):**
Statistische Versuchsplanung, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017
- Siebertz, K; van Bebber, D; Hochkirchen, T. (Varianten der statistischen Versuchsplanung):**
Varianten der statistischen Versuchsplanung. In: Siebertz, K; van Bebber, D; Hochkirchen, T. (Hrsg.): Statistische Versuchsplanung Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017, S. 139–158
- Simonyan, K; Zisserman, A. (Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition):**
Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition: arXiv, 2014

Singh, M. (Am Vorabend der vierten industriellen Revolution):

Am Vorabend der vierten industriellen Revolution. In: Control Manag Rev, Jg. 59, 2015, Nr. 5, S. 6–15

Singh, S; Wanner, J; Weeber, M. (Modeling and Simulation in Battery Cell Manufacturing):

Modeling and Simulation in Battery Cell Manufacturing — Concepts and Applications. In: Birke, K. P; Weeber, M; Oberle, M. (Hrsg.): Handbook on Smart Battery Cell Manufacturing WORLD SCIENTIFIC, 2022, S. 75–119

Sinha, A; Wallenius, J. (MCDM, EMO and Hybrid Approaches):

MCDM, EMO and Hybrid Approaches: Tutorial and Review. In: MCA, Jg. 27, 2022, Nr. 6

Snyman, F; Helbig, M. (Solving Constrained Multi-objective Optimization Problems with Evolutionary Algorithms):

Solving Constrained Multi-objective Optimization Problems with Evolutionary Algorithms. In: Tan, Y; Takagi, H; Shi, Y; Niu, B. (Hrsg.): Advances in Swarm Intelligence (Reihe: Lecture Notes in Computer Science). Cham: Springer International Publishing, 2017, S. 57–66

Stachowiak, H. (Allgemeine Modelltheorie):

Allgemeine Modelltheorie. Wien, New York: Springer, 1973

Subasi, A. (Practical machine learning for data analysis using Python):

Practical machine learning for data analysis using Python. London, San Diego, CA, Cambridge, MA, Kidlington, Oxford: Academic Press an imprint of Elsevier, 2020

Syarif, I; Prugel-Bennett, A; Wills, G. (SVM Parameter Optimization using Grid Search and Genetic Algorithm):

SVM Parameter Optimization using Grid Search and Genetic Algorithm to Improve Classification Performance. In: TELKOMNIKA, Jg. 14, 2016, Nr. 4, S. 1502

Tagawa, K; Brodd, R. J. (Production Processes for Fabrication of Lithium-Ion Batteries):

Production Processes for Fabrication of Lithium-Ion Batteries. In: Yoshio, M; Brodd, R. J; Kozawa, A. (Hrsg.): Lithium-Ion Batteries New York, NY: Springer New York, 2009

Taylor, B. J. (Methods and Procedures for the Verification and Validation of Artificial Neural Networks):

Methods and Procedures for the Verification and Validation of Artificial Neural Networks (SpringerLink Bücher). Boston, MA: Springer Science+Business Media Inc, 2006

Tercan, H; Meisen, T. (Machine learning and deep learning based predictive quality in manufacturing):

Machine learning and deep learning based predictive quality in manufacturing: a systematic review. In: J Intell Manuf, Jg. 33, 2022, Nr. 7, S. 1879–1905

Terwiesch, C; E. Bohn, R. (Learning and process improvement during production ramp-up):

- Learning and process improvement during production ramp-up.* In: International Journal of Production Economics, Jg. 70, 2001, Nr. 1, S. 1–19
- Terwiesch, C; Xu, Y. (The Copy-Exactly Ramp-Up Strategy: Trading-Off Learning With Process Change):**
The Copy-Exactly Ramp-Up Strategy: Trading-Off Learning With Process Change. In: IEEE Trans. Eng. Manage., Jg. 51, 2004, Nr. 1, S. 70–84
- Thiede, S; Turetskyy, A; Kwade, A; Kara, S; Herrmann, C. (Data mining in battery production chains towards multi-criterial quality prediction):**
Data mining in battery production chains towards multi-criterial quality prediction. In: CIRP Annals, Jg. 68, 2019, Nr. 1, S. 463–466
- Thiede, S; Turetskyy, A; Loellhoeffel, T; Kwade, A; Kara, S; Herrmann, C. (Machine learning approach for systematic analysis of energy efficiency potentials):**
Machine learning approach for systematic analysis of energy efficiency potentials in manufacturing processes: A case of battery production. In: CIRP Annals, Jg. 69, 2020, Nr. 1, S. 21–24
- Thielmann, A; Wietschel, M; Funke, S. Á; Grimm, A; Hettesheimer, T; Langkau, S; Loibl, A; Moll, C; Neef, C; Plötz, P; Sievers, L; Tercero Espinoza, Luis A; Edler, J. (Batterien für Elektroautos: Faktencheck und Handlungsbedarf):**
Batterien für Elektroautos: Faktencheck und Handlungsbedarf. Fraunhofer-Gesellschaft, 2020
- Thomitzek, M; Schmidt, O; Röder, F; Krewer, U; Herrmann, C; Thiede, S. (Simulating Process-Product Interdependencies in Battery Production Systems):**
Simulating Process-Product Interdependencies in Battery Production Systems. In: Procedia CIRP, Jg. 72, 2018, Nr. 1, S. 346–351
- Toutenburg, H. (Versuchsplanung und Modellwahl):**
Versuchsplanung und Modellwahl. Heidelberg: Physica-Verlag HD, 1994
- Trinh, H.-C; Kwon, Y.-K. (A Data-Independent Genetic Algorithm Framework for Fault-Type Classification):**
A Data-Independent Genetic Algorithm Framework for Fault-Type Classification and Remaining Useful Life Prediction. In: Applied Sciences, Jg. 10, 2020, Nr. 1
- Turetskyy, A. (Data analytics in battery production systems):**
Data analytics in battery production systems. Dissertation
- Turetskyy, A; Thiede, S; Thomitzek, M; Drachenfels, N. von; Pape, T; Herrmann, C. (Toward Data-Driven Applications in Lithium-Ion Battery Cell Manufacturing):**
Toward Data-Driven Applications in Lithium-Ion Battery Cell Manufacturing. In: Energy Technol., Jg. 8, 2020, Nr. 2, S. 1
- Turetskyy, A; Wessel, J; Herrmann, C; Thiede, S. (Data-driven cyber-physical System for Quality Gates in Lithium-ion Battery Cell Manufacturing):**

Data-driven cyber-physical System for Quality Gates in Lithium-ion Battery Cell Manufacturing. In: Procedia CIRP, Jg. 93, 2020, Nr. 4, S. 168–173

Turetskyy, A; Wessel, J; Herrmann, C; Thiede, S. (Battery production design using multi-output machine learning models):

Battery production design using multi-output machine learning models. In: Energy Storage Materials, Jg. 38, 2021, Nr. 4, S. 93–112

Ulrich, P; Hill, W. (Wissenschaftstheoretische Grundlagen der Betriebswirtschaftslehre):

Wissenschaftstheoretische Grundlagen der Betriebswirtschaftslehre. In: Wirtschaftswissenschaftliches Studium 1976.

Vajna, S; Weber, C; Zeman, K; Hehenberger, P; Gerhard, D; Wartzack, S. (Grundlagen der Modellbildung):

CAX für Ingenieure. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2018

Venkatesan, D; Kannan, K; Saravanan, R. (A genetic algorithm-based neural network model for the optimization of machining processes):

A genetic algorithm-based artificial neural network model for the optimization of machining processes. In: Neural Comput & Applic, Jg. 18, 2009, Nr. 2, S. 135–140

Ventura Silva, G; Heckmann, T; Abraham, T; Scharfer, P; Schabel, W; Herrmann, C. (Model-based process design considering production performance for battery cell production):

Model-based process design under consideration of production performance for battery cell production: A coating and drying study. In: Procedia CIRP, Jg. 120, 2023, S. 780–785

Ventura Silva, G; Thomitzek, M; Lippke, M; Heckmann, T; Karaki, H; Lischka, C; Möhlen, F; Mayer, D; Hagemeister, J; Daub, R; Fleischer, J; Nirschl, H; Schröder, D; Scharfer, P; Schabel, W; Kwade, A; Herrmann, C. (Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production):

Digitalization Platform for Sustainable Battery Cell Production: Coupling of Process, Production, and Product Models. In: Energy Technol., Jg. 11, 2023, Nr. 5, S. 227

Vuorilehto, K. (Materialien und Funktion):

Materialien und Funktion. In: Korthauer, R. (Hrsg.): Handbuch Lithium-Ionen-Batterien Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 21–29

Wang, P. (On Defining Artificial Intelligence):

On Defining Artificial Intelligence. In: Journal of Artificial General Intelligence, Jg. 10, 2019, Nr. 2, S. 1–37

Wang, S; Dong, L; Hua, H. (Parameter optimization of support vector machine based on improved grid algorithm):

Parameter optimization of support vector machine based on improved grid algorithm. In: J. Phys.: Conf. Ser., Jg. 1693, 2020, Nr. 1, S. 12108

Weber, C. J; Roth, M. (Separatoren):

Separatoren. In: Korthauer, R. (Hrsg.): Handbuch Lithium-Ionen-Batterien Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 79–93

Weber, F. (Künstliche Intelligenz für Business Analytics):

Künstliche Intelligenz für Business Analytics. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2020

Weber, K. H. (Aufgaben, Schnittstellen und Spezifik der Inbetriebnahme):

Aufgaben, Schnittstellen und Spezifik der Inbetriebnahme. In: Weber, K. H. (Hrsg.): Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016, S. 1–44

Weber, K. H. (Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen):

Inbetriebnahme verfahrenstechnischer Anlagen. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016

Weik, H. (Pressemitteilung - Handbook on Smart Battery Cell Manufacturing):

Handbook on Smart Battery Cell Manufacturing. Mit Digitalisierung Ressourcen schonen, 2022

Wentker, M; Greenwood, M; Leker, J. (A Bottom-Up Approach to Lithium-Ion Battery Cost Modeling):

A Bottom-Up Approach to Lithium-Ion Battery Cost Modeling with a Focus on Cathode Active Materials. In: Energies, Jg. 12, 2019, Nr. 3

Werdich, M. (FMEA – Einführung und Moderation):

FMEA – Einführung und Moderation. Durch systematische Entwicklung zur übersichtlichen Risikominimierung (inkl. Methoden im Umfeld) (SpringerLink Bücher). Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2011

Werwitzke, C. (Gotion High-Tech bereitet Fertigung von LMFP-Zellen vor):

Gotion High-Tech bereitet Fertigung von LMFP-Zellen vor.
<https://www.electrive.net/2023/05/22/gotion-high-tech-bereitet-fertigung-von-lmfp-zellen-vor/>. Abruf 05.12.2023

Westermeier, M. (Qualitätsorientierte Analyse komplexer Prozessketten):

Qualitätsorientierte Analyse komplexer Prozessketten am Beispiel der Herstellung von Batteriezellen. Dissertation

Westermeier, M; Reinhart, G; Steber, M. (Complexity Management for the Start-up in Lithium-ion Cell Production):

Complexity Management for the Start-up in Lithium-ion Cell Production. In: Procedia CIRP, Jg. 20, 2014, Nr. 3, S. 13–19

Wiemer, H; Drowatzky, L; Ihlenfeldt, S. (Data Mining Methodology for Engineering Applications):

Data Mining Methodology for Engineering Applications (DMME)—A Holistic Extension to the CRISP-DM Model. In: Applied Sciences, Jg. 9, 2019, Nr. 12

Winkler, H; Heins, M; Nyhuis, P. (A controlling system based on cause–effect relationships for the ramp-up of production systems):

A controlling system based on cause–effect relationships for the ramp-up of production systems. In: Prod. Eng. Res. Devel., Jg. 1, 2007, Nr. 1, S. 103–111

Wirth, R; Hipp, J. (CRISP-DM: Towards a stanard provess model for data mining):

CRISP-DM: Towards a stanard provess model for data mining: Proceedings of the Fourth International Conference on the Practical Application of Knowledge Discovery and Data Mining: 11th - 13th April 2000, Crowne Plaza Midland Hotel, Manchester, UK Blackpool, Lancashire: Practical Application Company, 2000

Wood, D. L; Li, J; Daniel, C. (Prospects for reducing the processing cost of lithium ion batteries):

Prospects for reducing the processing cost of lithium ion batteries. In: Journal of Power Sources, Jg. 275, 2015, S. 234–242

Wu, F; Maier, J; Yu, Y. (Guidelines and trends for next-generation rechargeable lithium-ion batteries):

Guidelines and trends for next-generation rechargeable lithium and lithium-ion batteries. In: Chemical Society reviews, Jg. 49, 2020, Nr. 5, S. 1569–1614

Yao, A. (The Li(ttle) ion that could):

The Li(ttle) ion that could. The weight of the world on the lightest metal. <https://honestenergy.substack.com/p/the-little-ion-that-could>. Abruf 24.04.2022

Zheng, H; Liu, G; Song, X; Ridgway, P; Battaglia, V. (Optimization of Ratio and Amount of CMC/SBR Binder for a Graphite Anode):

Optimization of Ratio and Amount of CMC/SBR Binder for a Graphite Anode. In: Meet. Abstr., Jg. MA2010-02, 2010, Nr. 4, S. 200

9 Anhang

Appendix

9.1 Maschinen und Anlagen der Validierungsversuche

Machines and equipment for validation runs

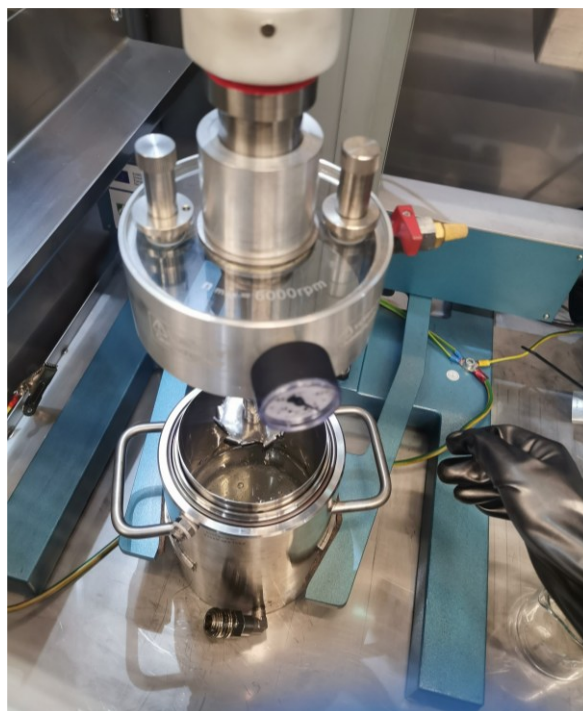


Abbildung 94: Präzisionswaage (links) und Mischer der Firma Eirich Typ EL 1 (rechts)

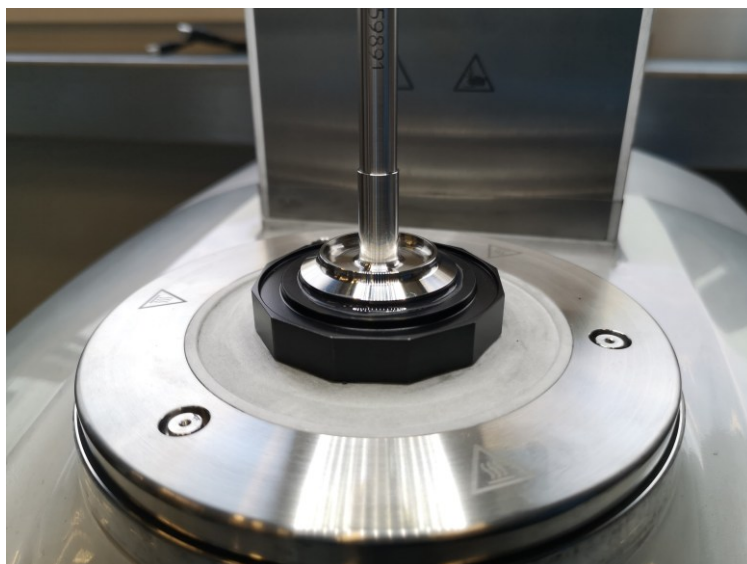
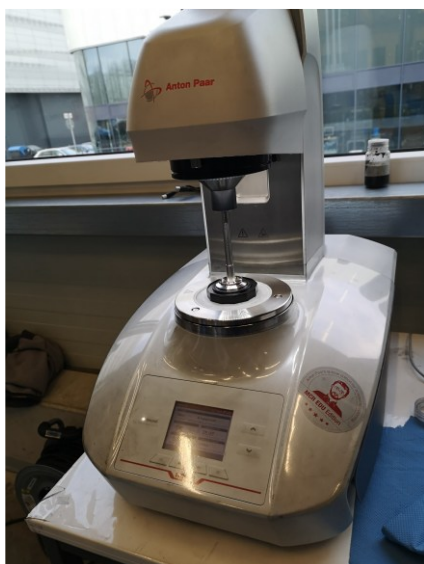


Abbildung 95: Rotationsviskosimeter (links) und Viskositätsmessung (rechts)

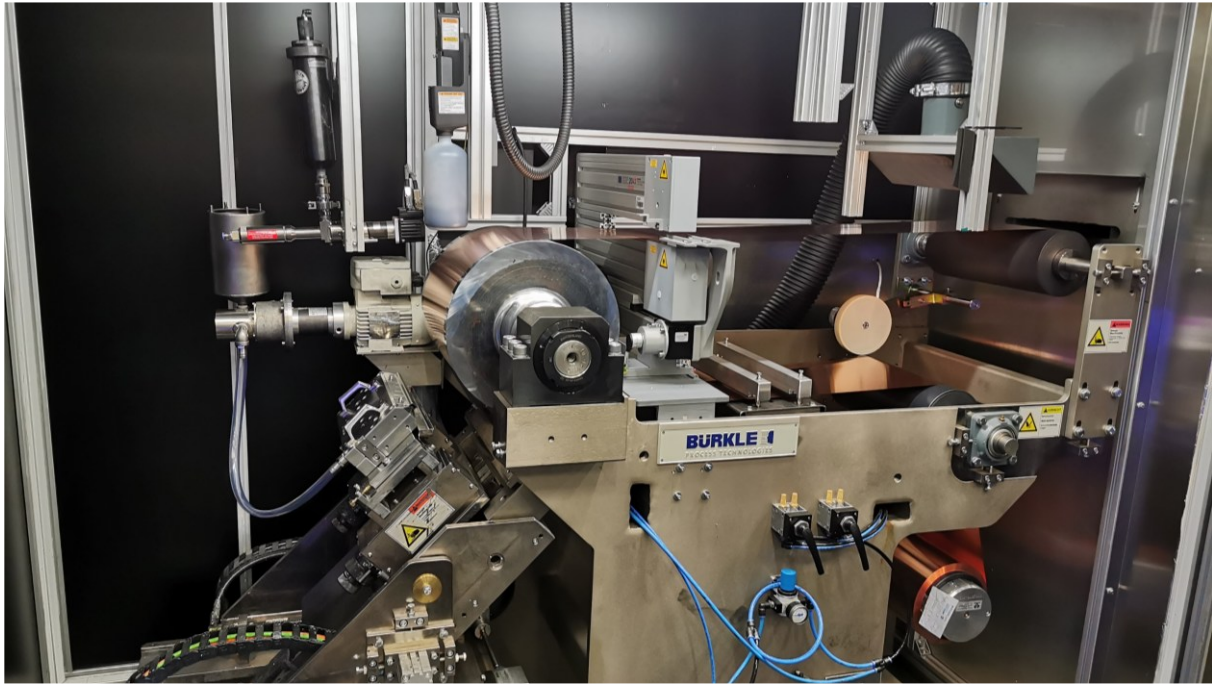


Abbildung 96: Beschichtungsanlage der Firma Bürkle 2000K1



Abbildung 97: Schichtauftrag mit Schlitzdüse (links) und Kamera der Firma Cognex (rechts)

9.2 Programmcode der Prozessmodellierung

Program code for process modeling

```
[ ]: import os
import sys
import json
import pygad.kerasga
import numpy as np
import pandas as pd
import tensorflow as tf

[ ]: def define_chromosome():
    chromosome = [
        'Graphite', 'Silicon', 'CMC', 'SBR', 'Carbonblack', 'Solvent',
        'Web speed', 'Feed rate'
    ]
    return chromosome

[ ]: def define_constraints():
    graphite = [70.00, 100.00] # percentage of solid content
    silicon = [5.00, 10.00] # percentage of solid content
    cmc_binder = [0.00, 3.00] # percentage of solid content
    sbr_binder = [0.00, 4.50] # percentage of solid content
    carbonblack = [0.00, 3.00] # percentage of solid content
    solvent = [50.00, 70.00] # percentage of slurry content
    web_speed = [0.0, 3.0] # m/min for coating speed
    feed_rate = [100, 700] # U/min for feed pump

    constraints = {
        'Graphite': (np.array(graphite)[0], np.array(graphite)[1]),
        'Silicon': (np.array(silicon)[0], np.array(silicon)[1]),
        'CMC': (np.array(cmc_binder)[0], np.array(cmc_binder)[1]),
        'SBR': (np.array(sbr_binder)[0], np.array(sbr_binder)[1]),
        'Carbonblack': (np.array(carbonblack)[0], np.array(carbonblack)[1]),
        'Solvent': (np.array(solvent)[0], np.array(solvent)[1]),
        'Web speed': (np.array(web_speed)[0], np.array(web_speed)[1]),
        'Feed rate': (np.array(feed_rate)[0], np.array(feed_rate)[1])
    }
    return constraints

[ ]: def define_targets():
    cluster_target = {'Cluster 3': 99} # in %
    coating_target = {'Thickness': 200} # in um
    return cluster_target, coating_target

[ ]: def check_constraints(solution, constraints):
    for key, value in zip(chromosome, solution):
        if constraints[key][0] is not None and value < constraints[key][0]:
            return False
        if constraints[key][1] is not None and value > constraints[key][1]:
            return False
    return True

[ ]: def load_models():
    visc_model = tf.keras.models.load_model(visc_model_path)
    cluster_model = tf.keras.models.load_model(cluster_model_path)
    coating_model = tf.keras.models.load_model(coating_model_path)
    return visc_model, cluster_model, coating_model

[ ]: def calculate_predictions(solution):
    solution[:5] *= (100 - solution[5]) / np.sum(solution[:5])
    visc_inputs = solution[0, 1, 2, 4]
    visc_outputs = visc_model.predict(visc_inputs / 100)

    cluster_inputs = solution[6, 7]
    cluster_inputs = np.concatenate((visc_outputs.astype(np.float64).reshape((1, 2)), cluster_inputs.reshape((1, 2))), axis=0).reshape((4,))
    cluster_outputs = cluster_model.predict(cluster_inputs)

    coating_inputs = solution[6, 7]
    coating_inputs = np.concatenate((visc_outputs.astype(np.float64).reshape((1, 2)), coating_inputs.reshape((1, 2))), axis=0).reshape((4,))
    coating_outputs = coating_model.predict(coating_inputs)
    solution[:5] *= 100 / np.sum(solution[:5])

    return cluster_outputs, coating_outputs

[ ]: def define_gene_space(constraints):
    gene_space = []
    for gene_name, gene_range in constraints.items():
        gene_space.append({'low': gene_range[0], 'high': gene_range[1]})
    return gene_space

[ ]: def fitness_function(ga_instance, solution, solution_idx):
    solution[3] = 3/2 * solution[2]
    if not check_constraints(solution, constraints):
        overall_fitness = 1e-8
        return overall_fitness

    cluster_outputs, coating_outputs = calculate_predictions(solution)
    cluster_distance = np.linalg.norm(cluster_outputs[0, 3]*100 - cluster_target['Cluster 3'])
    coating_distance = np.linalg.norm(np.abs(np.mean(coating_outputs) - coating_target['Thickness']))

    cluster_fitness = min(1, (1 / cluster_distance))
    coating_fitness = min(1, (1 / coating_distance))
    overall_fitness = np.mean([coating_fitness, cluster_fitness])

    return overall_fitness
```

Abbildung 98: Programmcode des genetischen Algorithmus, 1/2

```
[ ]: def run_genetic_algorithm(chromosome, constraints, i):
    num_genes = len(chromosome)
    gene_type = float

    num_generations = 500
    population_size = 20
    num_parents_mating = 2

    gene_space = define_gene_space(constraints)
    crossover_type = "single_point"
    parent_selection_type = "tournament"
    tournament_size = 3
    mutation_type = "random"
    mutation_num_genes = int(0.5 * num_genes)
    random_mutation_min_val = -0.01
    random_mutation_max_val = 0.01
    num_elites = int(0.2 * population_size)

    ga_instance = pygad.GA(num_generations=num_generations,
                           num_parents_mating=num_parents_mating,
                           fitness_func=fitness_function,
                           sol_per_pop=population_size,
                           num_genes=num_genes,
                           # allow_duplicate_genes=False,
                           gene_type=gene_type,
                           gene_space=gene_space,
                           mutation_type=mutation_type,
                           mutation_num_genes=mutation_num_genes,
                           random_mutation_min_val=random_mutation_min_val,
                           random_mutation_max_val=random_mutation_max_val,
                           crossover_type=crossover_type,
                           parent_selection_type=parent_selection_type,
                           K_tournament = tournament_size,
                           keep_elitism=num_elites,
                           on_generation=generation_counter,
                           save_solutions=True,
                           stop_criteria="reach_1"
                           )

    ga_instance.run()
    best_solution, best_solution_fitness, x = ga_instance.best_solution()
    cluster_outputs, coating_outputs = calculate_predictions(best_solution)
    best_generation = ga_instance.best_solution_generation

    return best_solution, best_solution_fitness, best_generation
```

Abbildung 99: Programmcode des genetischen Algorithmus, 2/2

```
[ ]: import os
import sys
import random
import pandas as pd
import numpy as np
import tensorflow as tf
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.cm as cm
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from statsmodels.stats.outliers_influence import variance_inflation_factor
from keras import backend as K

[ ]: def import_training_data():
    file_path = "viscosity_model/production_data/slurry_viscosity_data.xlsx"

    composition_data = pd.read_excel(file_path, usecols=range(1,7))
    composition_data.columns = ['Graphit', 'Silicon', 'CMC', 'SBR', 'Carbonblack', 'Solvent']
    composition_data['Total'] = composition_data.sum(axis=1)

    composition_data = composition_data.div(composition_data['Total'], axis=0)
    viscosity_data = pd.read_excel(file_path, usecols=range(8,29))

    return composition_data, viscosity_data

[ ]: def get_regression_features(composition_data):
    regression_features = composition_data[['Graphit', 'Silicon', 'CMC', 'Carbonblack']]
    return regression_features

[ ]: def check_collinearity(composition_data):
    regression_features = get_regression_features(composition_data)

    vif_scores = pd.DataFrame()
    vif_scores["VIF"] = [variance_inflation_factor(regression_features.values, i) for i in range(regression_features.shape[1])]
    vif_scores.index = regression_features.columns

    max_vif = np.round(max(vif_scores["VIF"]),4)
    return vif_scores

[ ]: def fit_linear_visc_curve(viscosity_data):
    min_shear_rate = 50 #[1/s]
    viscosity_data = viscosity_data.loc[:, viscosity_data.columns >= min_shear_rate]

    slopes = []
    intercepts = []

    for i in range(viscosity_data.shape[0]):
        x = np.array(viscosity_data.columns).reshape(-1, 1)
        y = np.array(viscosity_data.iloc[i, :])
        linear_curve = LinearRegression().fit(np.log(x), np.log(y))
        slopes.append(linear_curve.coef_[0])
        intercepts.append(linear_curve.intercept_)

    visc_slope = np.array(slopes)
    visc_intercept = np.array(intercepts)
    visc_curve_parameters = pd.DataFrame({'Slope': visc_slope, 'Intercept': visc_intercept})

    return visc_curve_parameters
```

Abbildung 100: Programmcode der Prozessmodellierung Mischen, 1/2

```
[ ]: def train_neural_network(composition_data, visc_curve_parameters):
    regression_features = get_regression_features(composition_data)
    output_labels = visc_curve_parameters
    training_data = pd.concat([regression_features, output_labels], axis=1)

    number_inputs = regression_features.shape[1]
    number_outputs = output_labels.shape[1]

    x = training_data.iloc[:, :number_inputs]
    y = training_data.iloc[:, number_inputs:]
    x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.3, random_state=1000)

    epochs = 10000
    learning_rate = 0.005
    hidden_activation = "ReLU"
    normalizer = tf.keras.layers.Normalization(axis=-1, input_shape = (x_train.shape[1],))
    normalizer.adapt(x_train)

    model = tf.keras.models.Sequential([normalizer,
        tf.keras.layers.Dense(number_inputs, activation = hidden_activation),
        tf.keras.layers.Dense(5, activation = hidden_activation),
        tf.keras.layers.Dense(5, activation = hidden_activation),
        tf.keras.layers.Dense(5, activation = hidden_activation),
        tf.keras.layers.Dense(number_outputs, activation = "linear")
    ])

    model.compile(
        optimizer=tf.keras.optimizers.Adam(learning_rate=learning_rate, epsilon = 1e-10),
        loss="mse", metrics=[tf.keras.metrics.RootMeanSquaredError()])

    history = model.fit(x_train, y_train, batch_size=10, epochs=epochs, validation_data=(x_test,y_test)) #, verbose=0)
    plt.figure()
    plt.plot(history.history['loss'])
    plt.plot(history.history['val_loss'])

    return model

[ ]: def predict_viscosity(x):
    model = load_model()

    regression_features = get_regression_features(composition_data)
    x_input = x[regression_features.columns]

    predictions = model.predict(x_input)
    predictions = pd.DataFrame(predictions, columns=['Slope', 'Intercept'])
    predictions = pd.concat([x, predictions], axis=1)
    print(np.round(predictions, 2))

    return predictions
```

Abbildung 101: Programmcode der Prozessmodellierung Mischen, 2/2

```
[ ]: import sys
import os
import joblib
import pandas as pd
import numpy as np
import tensorflow as tf
import seaborn as sns
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
import matplotlib.pyplot as plt
from viscosity_model_rev6 import get_regression_features

[ ]: def import_training_data():
    file_path = "coating_model/production_data/coating_data.xlsx"

    composition_data = pd.read_excel(file_path, usecols="B:G")
    composition_data.columns= ['Graphit', 'Silicon', 'CMC', 'SBR', 'Carbonblack', 'Solvent']
    composition_data['Total'] = composition_data.sum(axis=1)
    composition_data = composition_data.div(composition_data['Total'], axis=0)
    visc_prediction= predict_visc(composition_data)
    composition_data = pd.concat([composition_data, visc_prediction], axis=1)

    process_settings = pd.read_excel(file_path, usecols="H:K")
    process_settings.columns= ['Web speed', 'Feed rate', 'Heatzone 1', 'Heatzone 2']

    image_list = pd.read_excel(file_path, usecols="A")
    image_list.columns= ['Image']

    coating_data = pd.read_excel(file_path, usecols="L:N")
    coating_data.columns= ['Thickness min', 'Thickness max', 'Cluster']
    coating_data = pd.concat([coating_data, image_list], axis=1)
    cluster_labels = load_cluster_labels()
    coating_data['Cluster'] = coating_data['Image'].map(cluster_labels.set_index('File names')['Cluster labels'])

    return composition_data, process_settings, coating_data

[ ]: def load_visc_model():
    filename = "ANN-5"
    saving_path = "viscosity_model"
    model_path = os.path.join(saving_path, filename)
    model = tf.keras.models.load_model(model_path)
    return model

[ ]: def predict_visc(composition_data):
    regression_features = get_regression_features(composition_data)
    x_input = composition_data[regression_features.columns]

    model = load_visc_model()
    visc_prediction = model.predict(x_input)
    visc_prediction = pd.DataFrame(visc_prediction, columns=['Slope', 'Intercept'])

    return visc_prediction
```

Abbildung 102: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 1/3

```
[ ]: def load_cluster_labels():
    file_path = "coating_model/production_data/image_labels.joblib"
    cluster_labels = joblib.load(file_path)
    return cluster_labels

[ ]: def prepare_clustering_data(composition_data, process_settings, coating_data):
    merged_data = pd.concat([composition_data, process_settings, coating_data], axis=1)
    merged_data = merged_data.drop(merged_data[merged_data['Cluster'] == 6].index)
    merged_data = merged_data.dropna(subset=process_settings.columns)
    merged_data[coating_data.columns] = merged_data[coating_data.columns].fillna(99)

    composition_data = merged_data[composition_data.columns]
    process_settings = merged_data[process_settings.columns]
    coating_data = merged_data[coating_data.columns]

    return composition_data, process_settings, coating_data

[ ]: def train_new_cluster_model():
    composition_data, process_settings, coating_data = import_training_data()
    composition_data, process_settings, coating_data = prepare_clustering_data(composition_data, process_settings, coating_data)
    viscosity_data = composition_data[['Slope', 'Intercept']]
    process_settings = process_settings[['Web speed', 'Feed rate']] # 'Heatzone 1', 'Heatzone 2'
    num_clusters = coating_data['Cluster'].nunique()

    X_cluster = pd.concat([viscosity_data, process_settings], axis=1)
    y_cluster = coating_data['Cluster']
    encoder = OneHotEncoder(sparse=False)
    y_cluster_encoded = encoder.fit_transform(y_cluster.values.reshape(-1, 1))

    X_cluster_train, X_cluster_test, y_cluster_train, y_cluster_test = train_test_split(X_cluster, y_cluster_encoded, test_size=0.4, random_state=42)

    n_nodes = 5
    n_layers = 5
    num_outputs = num_clusters

    normalizer = tf.keras.layers.Normalization(axis=-1, input_shape = (X_cluster_train.shape[1],))
    normalizer.adapt(X_cluster_train)
    model = tf.keras.models.Sequential()
    model.add(normalizer)
    for i in range(n_layers):
        model.add(
            tf.keras.layers.Dense(
                n_nodes,
                activation = "relu",
                kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.L2(l2=1e-3)
            )
        )
    model.add(tf.keras.layers.Dense(num_outputs, activation = "softmax"))

    model.compile(optimizer="adam", loss="categorical_crossentropy", metrics=["accuracy"])
    history = model.fit(X_cluster_train, y_cluster_train, epochs=500, batch_size=10)
    cluster_model = model

    return cluster_model

[ ]: def predict_cluster(random_input, plot=False):
    cluster_model = load_cluster_model()
    model_input = random_input[['Slope', 'Intercept', 'Web speed', 'Feed rate']] # 'Heatzone 1', 'Heatzone 2'
    cluster_predictions = cluster_model.predict(model_input)
    return cluster_predictions

[ ]: def load_coating_model():
    filename = 'Coating-ANN-2'
    saving_path = "code/coating_model"
    model_path = os.path.join(saving_path, filename)
    coating_model = tf.keras.models.load_model(model_path)
    return coating_model

[ ]: def prepare_prediction_data(composition_data, process_settings, coating_data):
    merged_data = pd.concat([composition_data, process_settings, coating_data], axis=1)
    merged_data = merged_data.drop(merged_data[merged_data['Cluster'] == 6].index)
    merged_data = merged_data.dropna(subset=process_settings.columns)
    merged_data[coating_data.columns] = merged_data[coating_data.columns].fillna(99)

    composition_data = merged_data[composition_data.columns]
    process_settings = merged_data[process_settings.columns]
    coating_data = merged_data[coating_data.columns]

    return composition_data, process_settings, coating_data
```

Abbildung 103: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 2/3

```
[ ]: def train_new_coating_model():
    composition_data, process_settings, coating_data = import_training_data()
    composition_data, process_settings, coating_data = prepare_prediction_data(composition_data, process_settings, coating_data)
    viscosity_data = composition_data[['Slope', 'Intercept']]
    process_settings = process_settings[['Web speed', 'Feed rate']]

    thickness_data = coating_data[['Thickness min', 'Thickness max']]
    X_thickness = pd.concat([viscosity_data, process_settings], axis=1)
    y_thickness = thickness_data

    X_thickness_train, X_thickness_test, y_thickness_train, y_thickness_test = train_test_split(X_thickness, y_thickness, test_size=0.2, random_state=42)

    n_nodes = 5
    n_layers = 5
    num_outputs = y_thickness.shape[1]

    normalizer = tf.keras.layers.Normalization(axis=-1, input_shape = (X_thickness_train.shape[1],))
    normalizer.adapt(X_thickness_train)
    model = tf.keras.models.Sequential()
    model.add(normalizer)
    for i in range(n_layers):
        model.add(
            tf.keras.layers.Dense(
                n_nodes,
                activation = "relu",
                kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.L2(l2=1e-3)
            )
        )
    model.add(tf.keras.layers.Dense(num_outputs, activation = "linear"))

    model.compile(optimizer="adam", loss="mean_squared_error", metrics=["mae"])
    history = model.fit(X_thickness_train, y_thickness_train, epochs=500, batch_size=10,
                        validation_data=(X_thickness_test, y_thickness_test))
    coating_model = model

    return coating_model

[ ]: def predict_coating(random_input, plot=False):
    coating_model = load_coating_model()
    model_input = random_input[['Slope', 'Intercept', 'Web speed', 'Feed rate']]
    thickness_predictions = coating_model.predict(model_input)
    return thickness_predictions
```

Abbildung 104: Programmcode der Prozessmodellierung Beschichten, 3/3