



## MASTERARBEIT

# Datengetriebene Modellentwicklung für sulfuriertes Polyacrylnitril (SPAN)

In der Abteilung Computergestützte Elektrochemie werden mathematische Modelle der chemischen und physikalischen Prozesse in Batterien entwickelt, um diese mittels numerischer Simulationen zu erforschen. Hieraus sollen detaillierte Einblicke in die komplexen Multiskalenprozesse gewonnen werden, die die Optimierung des Designs hinsichtlich Leistung und Lebensdauer erlauben.

Im Rahmen dieser Masterarbeit stehen Next-Gen Lithium-Schwefel-Zellen mit sulfuriertem Polyacrylnitril (SPAN) als neuartigem Kathodenmaterial im Fokus. Obwohl diese Zellen experimentell nachweislich ein hohes Potential für Luft- und Raumfahrtanwendungen aufweisen, sind die Interaktion von Chemie und Transport auf Modellebene nur unzureichend verstanden. Zur Optimierung der Leistungsfähigkeit ist letzteres jedoch unabdingbar.

Deshalb sollen im Rahmen dieser Masterarbeit mithilfe datengetriebener Methoden optimale Transportmodelle erschlossen werden. Die inverse Modellierung wird mittels des Python Lösers Firedrake realisiert, wobei Ratentests und Impedanzmessungen der Zellen von experimentellen Projektpartnern als Datengrundlage zur Verfügung stehen. Die Masterarbeit gliedert sich in folgende Arbeitspakete:

- Literaturstudie zu datengetriebener Erschließung von Transportmodellen
- Auswahl, Implementierung und Evaluation geeigneter Ansätze
- Erarbeitung eines methodischen Workflows, der den physikalischen Informationsgehalt verschiedener Datengrundlagen zweckmäßig berücksichtigt
- Sensitivitätsanalyse hinsichtlich der Qualität der Eingangsdaten
- Validierung des optimalen Transportgleichungssatzes
- Dokumentation der Arbeit

Die Arbeit bietet die Möglichkeit, einen wichtigen Beitrag zur Weiterentwicklung von Lithium-Schwefel-Batterien als Zukunftstechnologie zu leisten, indem Synergien von klassischen Methoden und modernen datengetriebenen Ansätzen genutzt werden.

### Vorkenntnisse

- Modellierung von Transportprozessen  
Datengetriebene Methoden/Mathematik  
Python Programmierung

### Ansprechpartner

- Dr.-Ing. Max Okrashevski  
Institut für Technische Thermodynamik –  
Abteilung Computergestützte Elektrochemie  
Email: max.okrashevski@dlr.de