

# Schlussbericht Projekt iPMT

## Teil 1 – Kurzbericht

(wird veröffentlicht)

Vorhabenbezeichnung: 01|S21065A | iPMT | Datensynthese für Anwendungen in der intelligenten Partikelmesstechnik  
Ausführende Stelle: Universität Duisburg-Essen  
Laufzeit/Berichtszeitraum: 01.08.2021 – 31.12.2023

## 1 Aufgabenstellung

Ziel des Projektes ist die Entwicklung und Validierung von Methoden zur Synthese von Trainingsdaten für Deep-Learning-basierte Partikelmesstechnik. Dies wird exemplarisch durch bildbasierte Methoden zur Erkennung von Partikeln in (Mikroskop-) Bildern zur Bestimmung der Partikelgrößenverteilung sowie zeit- und ortsabhängige Messungen der Transmissionsspektren von Partikeldispersionen mit kommerziell verfügbaren analytischen Zentrifugen als Beispiel multimodaler Partikeleigenschaftsverteilungen dargestellt. Ergänzend dazu werden Methoden zur Quantifizierung der Qualität der generierten synthetischen Datensätze in Hinblick auf deren Eignung für maschinelles Lernen entwickelt und validiert.

## 2 Voraussetzungen

### 2.1 Fachgebiet für Nanostrukturtechnik (NST)

Das Fachgebiet für Nanostrukturtechnik (NST) und sein Vorgänger, das Institut für Prozess- und Aerosolmesstechnik der Universität Duisburg-Essen entwickelt seit 1983 Methoden im Bereich der Partikelmesstechnik. Dabei liegt der Fokus als Teil des Centers for Nanointegration Duisburg-Essen (CENIDE) primär auf Nanopartikeln und seit dem Jahre 2017 zunehmend auf KI-gestützten Methoden für die bildbasierte Partikelmesstechnik unter Verwendung synthetisierter Trainingsdaten. Das NST verwendeten Methoden von Fully Connected Neural Networks zur Klassifikation von Partikelagglomeraten und Regression von Primärpartikeldurchmessern, über Convolutional Neural Networks (CNNs) zur semantischen Segmentierung von Partikelbildern, bis zu Region-Based Convolutional Neural Networks (R-CNNs) zur Instanzsegmentierung und zusätzlichen Regression von Primärpartikeleigenschaften.

### 2.2 Lehrstuhl für Intelligente Systeme (IS)

Die Arbeitsgruppe Intelligente Systeme an der Universität Duisburg-Essen konzentriert sich vor allem auf die Forschung im Bereich des maschinellen Lernens, insbesondere des Deep Learning. Ihre Forschung umfasst verschiedene Bereiche, darunter die medizinische Bildverarbeitung, Hyperspektraldatenanalyse und Robotik.

## 3 Planung und Ablauf

Das Projekt wurde im Großen und Ganzen wie geplant durchgeführt. Die Rekrutierungs- und Einstellungsverfahren für das im Projekt benötigte Personal wurden erst nach der Mitteilung der Projektbewilligung (08/2021) angestoßen, sodass die entsprechenden Stellen erst ab 01/2022 (NST) und 12/2021 (IS) besetzt wurden. Die hieraus entstandenen Abweichungen in der Arbeits- und Zeitplanung konnten jedoch in einem angemessenen Maße durch die bisherigen Vorarbeiten kompensiert werden. Durch einen Hack der Universität Duisburg-Essen im November 2022 wurde der Fortgang des gemeinschaftlichen Projektes unweigerlich eingeschränkt. Um dennoch sämtliche Projektziele zufriedenstellend abschließen zu können, wurde eine kostenneutrale Laufzeitverlängerung um weitere fünf Monate beantragt.

## 4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

### **Konstruktionen, Verfahren, Schutzrechte**

In dem Projekt wurden keine bekannten Konstruktionen, Verfahren und Schutzrechte genutzt.

### **Fachliteratur, Informations- und Dokumentationsdienste**

Zu Beginn des Projektes und während des Projektverlaufs wurde eine umfangreiche Literaturrecherche durchgeführt.

## 5 Zusammenarbeit

Das Projekt wurde ausschließlich in Zusammenarbeit mit den Verbundpartnern durchgeführt.

## 6 Wesentliche Ergebnisse

### 6.1 Fachgebiet für Nanostrukturtechnik (NST)

Ein GitHub-Repository wurde für die Entwicklung einer Toolbox (synthPIC2) zur Erzeugung von bildbasierten Trainings- und Validierungsdaten für die Partikelmesstechnik erstellt. Die Veröffentlichung der Projektergebnisse wurde im Januar 2024 für alle kostenlos zur Verfügung gestellt.

Die Partikelbilder und zugehörigen Grundwahrheiten aus den Arbeitspaketen der Datensynthese wurden erfolgreich für das Training von auf *Region-Based Convolutional Neural Networks* (R-CNN) basierten Ansätzen verwendet. Die trainierten Modelle wurden in der Partikelmesstechnik getestet und die Partikelgrößenverteilung ausgewertet. Die Bildähnlichkeitsmetriken wurden untersucht, indem markante Bildmerkmale (Features) mit einem vortrainierten neuronalen Netz extrahiert und die Feature-Vektoren zweier Bilder mit einer Distanzmetrik verglichen wurden.

Mit Hilfe einer Gitterverzerrungsmethode wurden einzelne Bereiche eines Partikelbildes so verzerrt, dass die Partikelgröße und die Partikelform verändert wurden. Dies führt zu einer Anonymisierung und Abstraktion der Partikel Daten.

### 6.2 Lehrstuhl für Intelligente Systeme (IS)

Es wurde eine Software mit einer Befehlszeilenschnittstelle (CLI) entwickelt. Sie konzentriert sich in erster Linie auf die Synthese von Transmissionsspektren mit generativen Modellen, unterstützt aber auch Klassifikations- und Regressionsaufgaben, die für die Qualitätsmessung synthetischer Daten erforderlich sind. Für die Synthese wurden sowohl CNN- als auch RNN-basierte Ansätze konzipiert, realisiert und getestet.

Verschiedene generative Modelle wurden anhand von zwei Datensätzen (reale und simulierte Messungen) mit unterschiedlicher Komplexität verglichen. Die resultierenden synthetischen

Transmissionsspektren wurden in enger Zusammenarbeit mit unseren Projektpartnern qualitativ und quantitativ ausgewertet. Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass CNN-basierte Ansätze in der Lage sind, realistisch aussehende Transmissionsspektren zu erzeugen, während RNN-basierte Ansätze versagt haben.

---

Ort

Datum

Rechtsverbindliche Unterschrift und  
Firmenstempel

# Schlussbericht Projekt iPMT

## Teil 2 – Eingehende Darstellung

(wird veröffentlicht)

Vorhabenbezeichnung: 01|S21065A | iPMT | Datensynthese für Anwendungen in der intelligenten Partikelmesstechnik  
Ausführende Stelle: Universität Duisburg-Essen  
Laufzeit/Berichtszeitraum: 01.08.2021 – 31.12.2023

## 1 Zuwendungsverwendung und erzielte Ergebnisse

### 1.1 Fachgebiet für Nanostrukturtechnik (NST)

#### AP0 Projektmanagement

Zur Koordination des Projektes wurden Treffen einzelner Projektpartner untereinander und aller Projektpartner gemeinsam organisiert.

#### AP0.1 Externe Dokumentation

Es wurde eine gemeinsame Plattform in der Cloud für das Projekt eingerichtet, um den Datenaustausch zwischen den Partnern zu erleichtern und die erzeugten Daten gemäß den FAIR-Prinzipien (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) zu archivieren.

#### AP0.2 Verbundinternes Daten- und Softwaremanagement

Ein GitHub-Repository wurde für die Entwicklung einer Toolbox zur Erzeugung von bildbasierten Trainings- und Validierungsdaten für die Partikelmesstechnik erstellt. Dies ermöglicht kollaborative Programmierung und Versionierung. Die Veröffentlichung der Projektergebnisse wurde im Januar 2024 für alle kostenlos zur Verfügung gestellt.

#### AP0.3 Kommunikation und Öffentlichkeitsarbeit

Die Kommunikation zwischen den Projektbeteiligten, zum Austausch von Informationen, Ergebnissen und des Projektfortschritts wurde angestoßen. Dazu wurden mehrere Zoomtreffen organisiert, unter anderem zum Thema Modellsystem und zum Thema Software. Zwei vor-Ort Treffen wurden vom Projektpartner Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg im Jahr 2023 organisiert. Die Projektergebnisse wurden auf den DECHEMA-Tagungen Partikelmesstechnik 2022 und 2023 sowie auf den internationalen Konferenzen „World Congress on Particle Technology (WCPT)“ 2022 und PARTEC 2023 präsentiert und in zwei Fachzeitschriften veröffentlicht.

#### AP1 3D-Objekte und 2D-Bilder

Im ersten Arbeitspaket wurde Software für a) die parameter-basierte Synthese von Partikelbildern auf der Basis von 3D-Modellen; b) die Synthese von Partikelbildern ohne Parameter mittels künstlicher

Intelligenz; c) die hybride Synthese von Partikelbildern (Mischung aus a und b) implementiert und validiert; d) die Methoden für die Qualitätsmessung der erzeugten Bilder; und e) die Methoden zur Anonymisierung und Abstraktion geheimhaltungswürdiger Partikelbilder entwickelt.

Die Arbeiten zur parametrischen, hybriden und parameterfreien Bildsynthese (AP1.2 und 1.3), zum Test der synthetischen Daten auf KI-Algorithmen (AP1.4) und zur Anonymisierung und Abstraktion (AP1.6) wurden über die gesamte Projektlaufzeit in enger Zusammenarbeit mit der SOPAT GmbH durchgeführt.

#### AP1.1 Systemanalyse zur nachhaltigen Software-Entwicklung

Die Systemanalyse wurde parallel zur Entwicklung stets aktualisiert und fortgeführt, z.B. um bereits für AP1.2 erarbeitete Konzepte auf AP1.3 übertragen zu können.

#### AP1.2 Parameter-basierte Datensynthese

Die in AP1.2 entwickelte Toolbox zur parameter-basierten Synthese von Partikelbildern wurde unter der offenen GNU General Public License (GPL) veröffentlicht.

##### AP1.2a 3D-Modellierung

Die Ziele und Vorgehensweise bei der Generierung von 3D-Modellen umfassen die schnelle Erstellung vielfältiger Bilder für das Training neuronaler Netze, die Abbildung physikalischer Eigenschaften für realistische Bilder und die parameterbasierte Modellgenerierung, um aus einem Grundmodell durch Variation des Random Seed unendlich viele Varianten zu erzeugen.

##### AP1.2b Rendering

Bei der parameter-basierten Datensynthese von 2D-Bildern wurden zunächst 3D-Partikelmodelle erstellt, auf deren Basis anschließend die benötigten Partikelbilder inklusive der dazugehörigen Grundwahrheiten gerendert werden können.

#### AP1.3 KI-gestützte Bildsynthese

Die zur Herstellung synthetischer Bilder benötigten Partikelgeometrie-, Material- und Messtechnik-Modelle werden im Falle der KI-gestützten Bildsynthese nicht mehr durch die Anwender:innen durchgeführt, sondern stückweise durch maschinelle Optimierung ersetzt, welche geeignete Modelle anhand realer Referenzdaten erlernt. Dadurch lassen sich erhebliche Zeitersparnisse realisieren und es kann die benötigte Qualifikation der Anwender reduziert werden.

##### AP1.3.a Hybride Bildsynthese

Der ursprüngliche Ansatz mit CycleGAN zur Umwandlung von Partikelbildern in realistische Bilder erwies sich als problematisch, da er den Bildinhalt verfälschte und für neuronale Netzwerke unbrauchbare Ergebnisse lieferte. Als Alternative basiert der neue Ansatz auf klassischem Rendering, wobei Bilder aus 3D-Geometrie und optimierten Parametern berechnet werden. Ein GAN, bestehend aus Generator und Diskriminator, optimiert diese Parameter, um die geometrischen Informationen und die inhaltliche Integrität der Bilder zu bewahren. Bereits ein funktionsfähiger Prototyp dieser Methode wurde entwickelt.

##### AP1.3.b Parameter-freie Bildsynthese


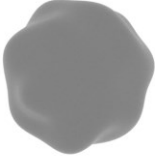
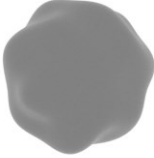

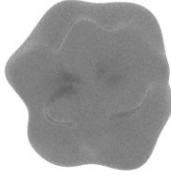
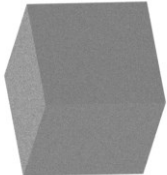
Die in AP1.3.a entwickelte Methode zur hybriden Bildsynthese ermöglicht die Optimierung von optischen Material- und Beleuchtungsparametern für eine vorgegebene, fixe Geometrie, die zuvor parameterbasiert von Anwendern generiert werden muss. Zur Automatisierung der Geometriesynthese wurden zwei Prototypen implementiert und evaluiert, wobei Qualität, Nutzerfreundlichkeit und

technisches Risiko berücksichtigt wurden. Basierend auf der Evaluation wurde ein Prototyp ausgewählt, der vollständig zur Weiterentwicklung in ein nutzbares Produkt geeignet ist.

*Prototyp 1: Geometrieoptimierung*

Der erste Prototyp zielt darauf ab, die Partikelgeometrie direkt zu optimieren. Dabei startet der Prozess mit allen Partikeln als gleich groß und perfekt rund. Das Ziel ist es, das erzeugte Bild so nah wie möglich an ein Referenzbild anzupassen. Aufgrund der Unbekanntheit der 3D-Geometrie bei realen Messdaten erfolgt kein direkter Vergleich der Geometrien, sondern lediglich ein bildbasierter Vergleich. Dies stellt ein hohes technisches Risiko dar, da die Konvergenz des Optimierungsprozesses nicht garantiert werden kann. Das größte Potenzial dieser Methode liegt in der Generierung von Bildern mit variabler Partikelgeometrie sowie der Möglichkeit, partikelspezifische Strukturparameter zu erlernen, die Aufschluss über die Partikelgrößen- und Formverteilung geben können.

Abbildung 1 zeigt zwei Geometrieoptimierungsbeispiele mit unterschiedlichen Zielvorgaben. Während unregelmäßige Partikel (Beispiel 1) gut reproduziert werden können, stellen eckige Partikel (Beispiel 2) eine Herausforderung dar. Der Umriss der Partikelgeometrie wird angenähert, was zu einer Annäherung der Bildähnlichkeit führt, jedoch wird die Geometrie nicht sinnvoll reproduziert. Prototyp 1 bietet zudem nur begrenzte Kontrollmöglichkeiten. Aufgrund dieser Einschränkungen wurde Prototyp 2 bevorzugt. Prototyp 1 wird nicht als dysfunktional betrachtet, sondern seine Weiterentwicklung wurde als zu aufwändig für das aktuelle Projekt eingeschätzt. Eine Entwicklung in einem eigenständigen, zukünftigen Projekt erscheint vielversprechend.

	<b>Ausgangsgeometrie</b>	<b>Optimierungsergebnis</b>	<b>Zielvorgabe</b>
<b>Beispiel 1</b>			
<b>Beispiel 2</b>			

*Abbildung 1: Beispiele für den Prototyp der Geometrieoptimierung*

*Prototyp 2: Automatische Geometrieauswahl aus einer Bibliothek*

Ziel der parameter-freien Bildsynthese ist es, eine Erleichterung für *End-Anwender*:innen zu erreichen. Es ist also nicht nötig, dass die Geometriegenerierung autonom erfolgt. Stattdessen basiert Prototyp 2 auf einer Bibliothek von Partikelgeometrien, welche durch fortgeschrittene Anwender:innen vorbereitet wurde und aus der für die Endanwendung vollautomatisch geeignete Geometrien ausgewählt und mit vorinitialisierten Material- und Beleuchtungsparametern versehen. Auswahl und Initialisierung erfolgen dabei anhand der Bildähnlichkeit.

Die parameterfreie Toolbox für die Partikelbildsynthese wurde basierend auf den letzten Schritten der Initialisierung des hybriden Bildsynthesemodells weiterentwickelt. Der Trainings-, Vorhersage- und

Auswahlprozess (siehe Abbildung 2) wurde in der Initialisierungsphase angewendet. Abbildung 3 zeigt synthetische Beispielbilder, die mit der parameterfreien Toolbox erzeugt wurden.

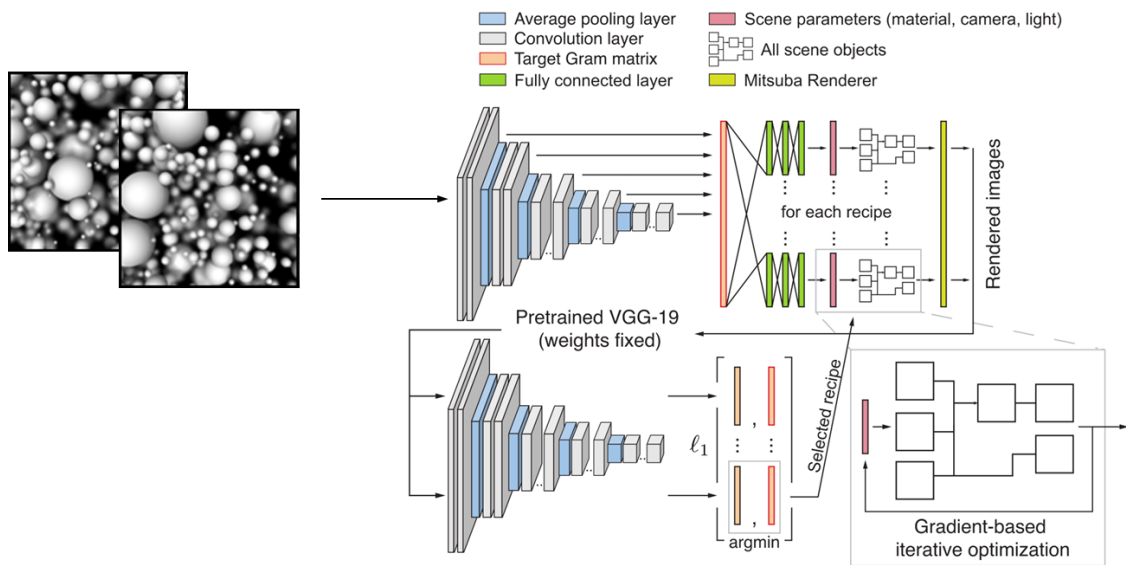


Abbildung 2: Trainings-, Vorhersage- und Auswahl-Pipeline der parameterfreien Toolbox. Für ein eingegebenes Zielbild wird ein Texturdeskriptor mit Hilfe eines vortrainierten VGG-Netzwerks berechnet. Für jedes prozedurale Material in der Bibliothek wird ein Parametervorhersage-Netzwerk trainiert, indem vollständig verbundene Schichten an diesen Texturdeskriptor angehängt werden. Diese Modelle werden verwendet, um die Knotenparameter des Zielbildes für jeden Materialgraphen vorherzusagen. Es werden Bilder von Mitsuba gerendert, die entsprechenden Texturdeskriptoren berechnet und die drei besten Materialgraphen mit der geringsten  $\ell_1$ -Texturdeskriptordifferenz für die Eingabe ausgewählt. Schließlich werden die vorhergesagten Knotenparameter mit Hilfe einer gradientenbasierten Optimierung mit den differentiellen Knotengraphen verfeinert, um die Übereinstimmung mit dem Zielbild zu verbessern. Der Materialgraph mit dem besten Ergebnis wird als Endergebnis ausgegeben.

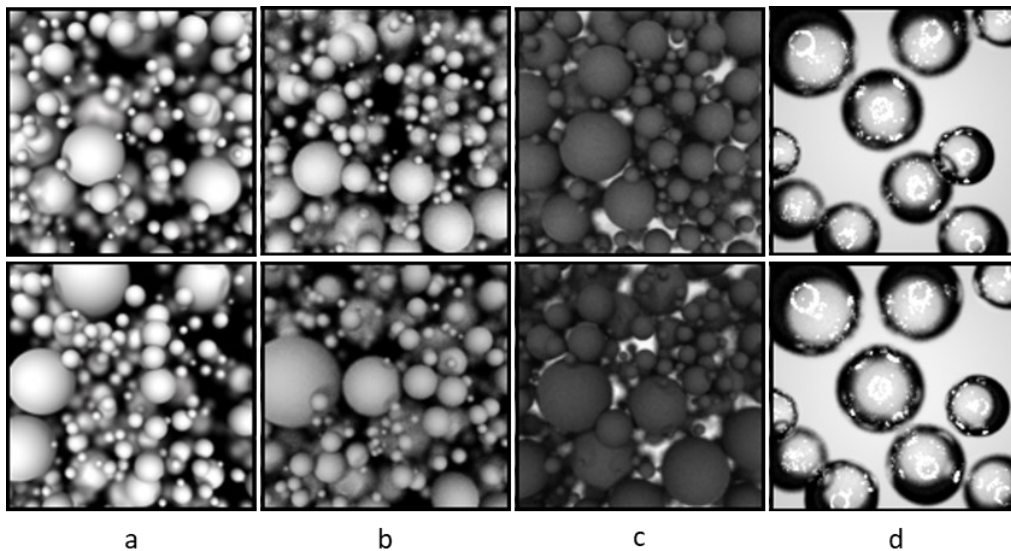


Abbildung 3: Beispielbilder einer Initialisierung. a - Eingabe von synthetischen Partikelbildern aus synthPIC2; bcd - Ausgabe von synthetischen Partikelbildern aus den drei verschiedenen Rezepten der parameterfreien Toolbox und b als bestes Ergebnis ausgewählt.

#### AP1.4 Tests synthetischer Daten an KI-Algorithmen

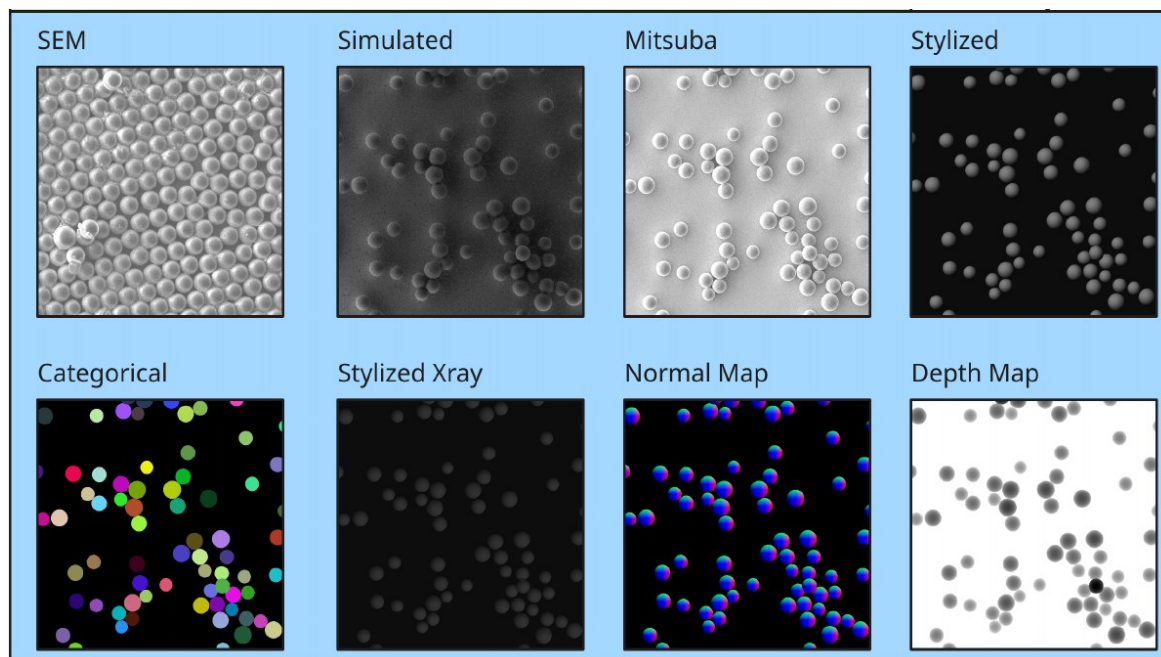
Bei der Bewertung synthetischer Daten für KI-Algorithmen wurden synthetische Bilder aus zwei Arbeitspaketen (AP1.2 und AP1.3) mittels Mask R-CNN zur Partikeldetektion getestet. Die Partikelgrößenverteilungen wurden anhand der Detektionsergebnisse auf realen Referenzbildern

analysiert. Die Datensätzen wurden mit Mask R-CNN trainiert und ihre Qualität im Vergleich zu echten Daten bewertet. Die Tests bestätigten die Nutzbarkeit der parameterbasierten synthetischen Partikelbilder.

#### AP1.5 Methoden zur Qualitätsmessung synthetischer Partikelbilder

Ein potenzieller Fallstrick bei der Erzeugung synthetischer Bilder besteht darin, dass Algorithmen häufig auf ästhetische und realistische Effekte für Menschen optimiert werden, anstatt auf die optimale Nutzung für das Training neuronaler Netze. Zur objektiven Bewertung solcher Einschätzungen können Metriken entwickelt werden, die die Qualität synthetischer Partikelbilder anhand ihres Stils im Vergleich zu einem Referenzdatensatz realer Bilder messen. Hierbei extrahieren vortrainierte neuronale Netzwerke charakteristische Merkmale der Bilder und vergleichen sie anhand ihrer Vektordarstellung.

Um die entwickelte Metrik zu testen, wurden geeignete Testdatensätze erhoben oder synthetisiert (siehe Abbildung 4). Als realer Validierungsdatensatz dienten manuell annotierte Rasterelektronenmikroskopiebilder (SEM) des Modellsystems (siehe Abbildung 4, SEM). Zur Bewertung der Ergebnisse ohne Bildsynthese wurde ein kleiner Teil der manuell annotierten Realdaten aus dem Validierungsdatensatz für das Training verwendet, obwohl diese weniger Trainingsdaten bieten als die synthetischen Datensätze. Die synthetischen Testdatensätze lassen sich in sieben Datensätze (siehe Abbildung 4) unterteilen.



*Abbildung 4: Beispielbilder der Datensätze zum Test der entwickelten Ähnlichkeitsmetrik.*

Eine gute Ähnlichkeitsmetrik sollte vorhersagen können, wie gut sich Objekterkennungsnetzwerke mit synthetischen Daten trainieren lassen, gemessen anhand der mean Average Precision (mAP). Abbildung 5 die mAPs der verschiedenen Trainingsdatensätze. Dabei zeigt sich, dass die erzielbaren mAPs ähnlich sind: Die realistisch aussehenden Datensätze (Mitsuba und Simulated) erreichen gute Ergebnisse, werden jedoch teilweise von einfacheren Datensätzen (Categorical) übertroffen. Die menschlich wahrgenommene Ähnlichkeit der synthetischen zu realen Daten ist ein guter Indikator, aber nicht zwingend erforderlich. Besonders hervorzuheben ist, dass der reale Trainingsdatensatz (SEM) aufgrund des hohen Aufwands für die manuelle Annotation schlechter abschneidet und weniger umfangreich ist. Die Bildsynthese bietet daher auch bei suboptimalem Realitätsgrad Vorteile gegenüber annotierten Realdaten, wenn diese nicht ausreichend verfügbar sind.

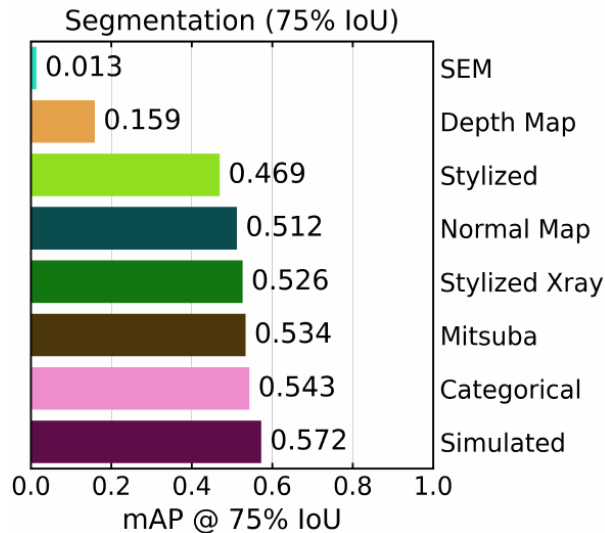


Abbildung 5: Mean Average Precision (mAP), welche mit unterschiedlichen Trainingsdatensätzen erzielt werden konnte (größer ist besser).

Abbildung 6 zeigt die Ergebnisse des Vergleichs anhand der vier Gütekriterien: Jenson-Shannon-Divergenz (JS Divergence, kleiner ist besser), prozentualer Fehler des mittleren geometrischen Partikeldurchmessers, prozentualer Fehler der geometrischen Standardabweichung der Partikelgrößenverteilung und prozentualer Fehler der Anzahl detektierter Partikel. Analog zur mAP erzielen die realistisch aussehenden Datensätze (Simulated und Mitsuba) sowie der einfach herzustellende Categorical-Datensatz die besten Ergebnisse. Der manuell annotierte Realdatensatz (SEM) schneidet erneut deutlich schlechter ab als die synthetischen Datensätze.

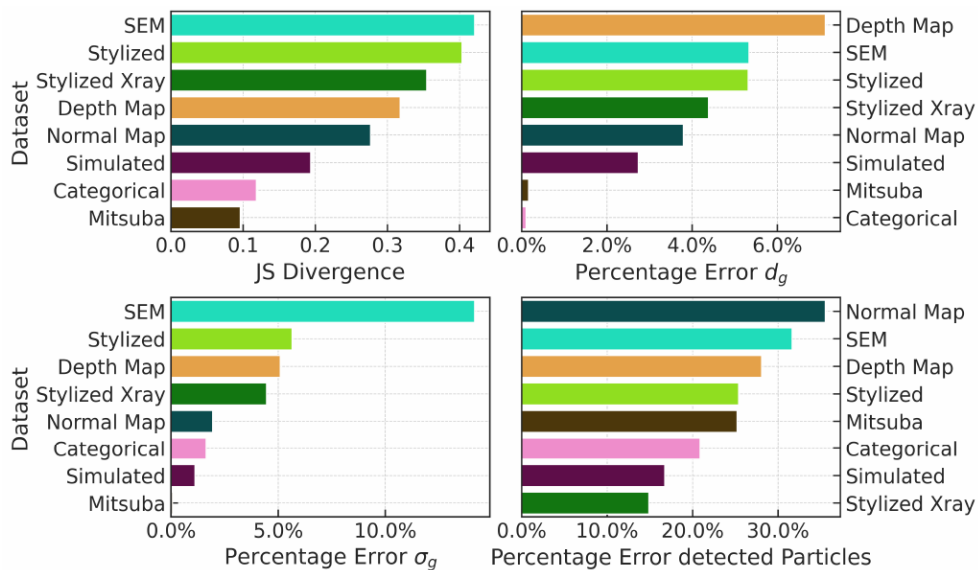


Abbildung 6: Fehler bei der Messung der Partikelgrößenverteilung im Vergleich zur manuell bestimmten wahren Partikelgrößenverteilung, wenn die unterschiedlichen synthetischen Datensätze für das Training von Partikeldetektionsnetzwerken verwendet wurden.

Es wurden drei Bildähnlichkeitsmetriken untersucht: Fréchet Inception Distance (FID), CLIP-Score (Contrastive Language-Image Pre-training) und Style Loss Score. Abbildung 7 zeigt die Spearman-Korrelationen zwischen diesen Metriken und den Gütekriterien der mit synthetischen Daten trainierten neuronalen Netzwerke. Diese Korrelationen verdeutlichen die Vorhersagefähigkeit der Metriken für die Netzwerkqualität. Die FID zeigt dabei die besten Ergebnisse, mit starken Korrelationen zur

geometrischen Standardabweichung und Jenson-Shannon-Divergenz sowie moderaten Korrelationen zum geometrischen Mittelwert des Durchmessers und zur mAP.

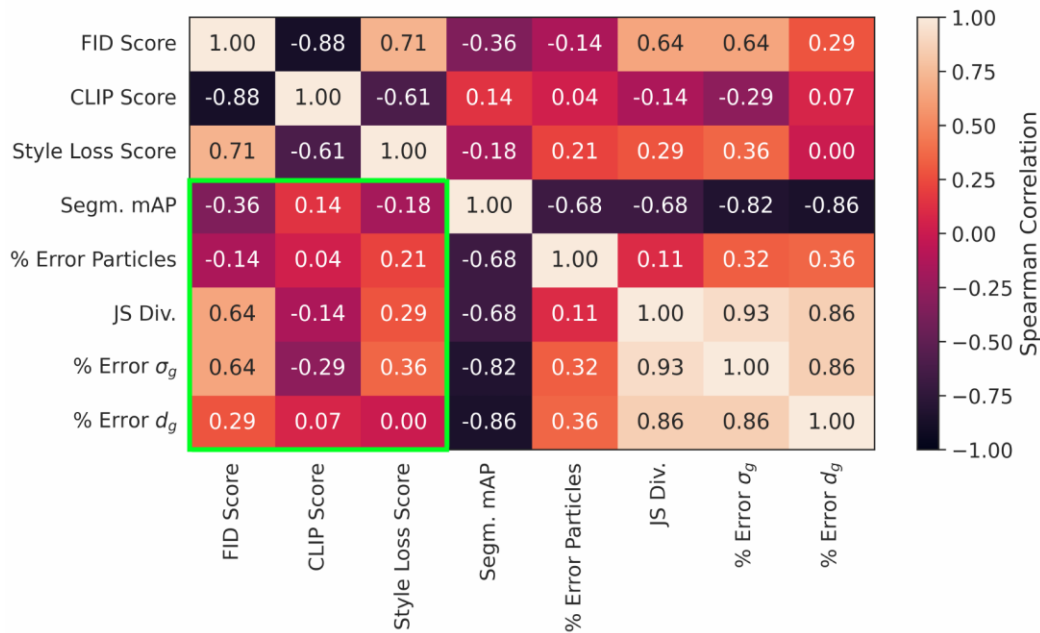


Abbildung 7: Spearman-Korrelationen zwischen den untersuchten Ähnlichkeitsmetriken (Scores) und den Gütekriterien der mit synthetischen Daten trainierten neuronalen Netzwerke.

#### API.6 Anonymisierung und Abstraktion

Um sensible Partikelbilder zu anonymisieren, sollten vertrauliche Informationen wie die Partikelgrößenverteilung und -morphologie verschleiert werden. Ein Ansatz besteht darin, die Eingabebilder und die benötigten Grundwahrheiten durch Augmentation zu verfremden. Hierbei wurden zwei Methoden zur Veränderung der Partikelform (Gitterverzerrung und stückweise Affinität) sowie eine Methode zur Veränderung der Partikelgröße (Skalierung mit einem zufälligen Faktor) auf die Eingabebilder angewendet. Ein Vergleich zwischen dem ursprünglichen und dem augmentierten Partikelbild ist in Abbildung 8 gezeigt.

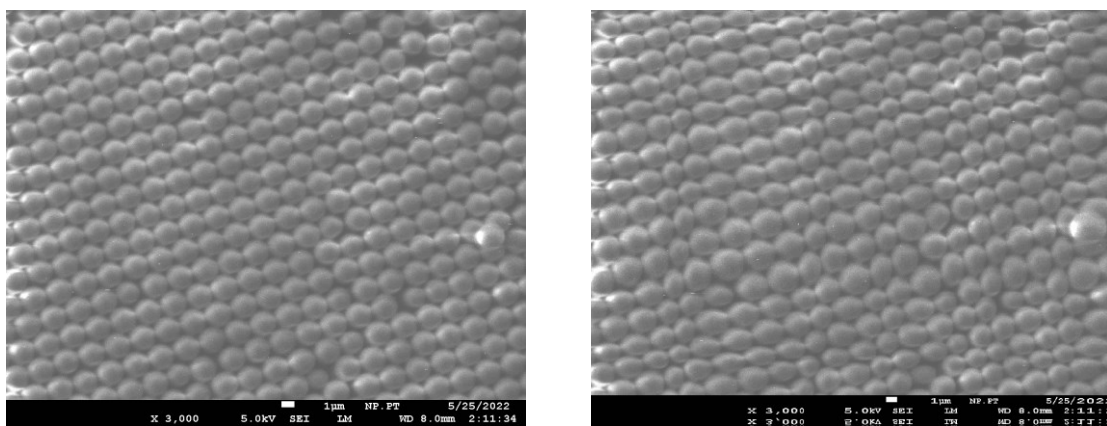


Abbildung 8: Beispielbilder zur Augmentation. Links- Originales REM-Bild aus Polystyrol Modellsystem; Rechts- Augmentiertes REM-Bild durch Gitterverzerrung

Eine Auswertung der Partikelgrößenverteilung ist in Abbildung 9 dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Methode der Gitterverzerrung die korrekten Informationen über Partikelgeometrie und -größe erfolgreich verändert und wichtige Informationen abgedeckt hat.

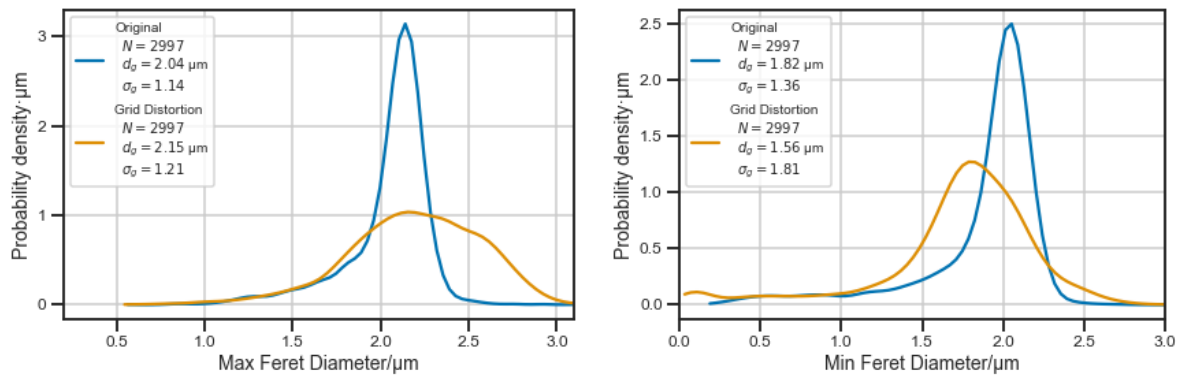


Abbildung 9: Auswertungen der Partikelgrößenverteilung zwischen REM-Bilder ohne Augmentation und der Bilder mit Augmentation bezogen auf maximalen Feret-Durchmesser (links); minimalen Feret-Durchmesse (rechts)

### AP2 Transmissionsspektren von Sedimentationsanalysen im Gravitations- und Zentrifugalfeld

Es wurden keine Personalstunden bei NST eingeplant, sondern bei den Projektpartnern LUM, LFG, ZISC und IS.

### AP3 Demonstration: Kombination von 2D-Bildern und Sedimentationseigenschaften für die Analyse der Eigenschaften und der Agglomerationsgrade von 3D-Objekten mittels KI

Um zu demonstrieren, dass die entwickelten Methoden auch tatsächlich einen praktischen Nutzen haben, werden diese an realen Modellsystemen getestet, indem diese mit Methoden analysiert werden, welche mit synthetischen Daten trainiert wurden. Dabei wird zunächst ein einfaches Modellsystem mit wohl definierten Eigenschaften verwendet, um anschließend mit einem komplexeren System mit mehr Industrierelevanz überzugehen, welches vom assoziierten Partner BASF bereitgestellt wird.

#### AP3.1 Erzeugung realer Messdaten

Zur Demonstration der neu entwickelten KI-basierten Verfahren zur Analyse partikulärer Systeme wurden industrierelevante Stoffsysteme herangezogen. Auf der Grundlage ausgewählter Modellsysteme wurden mit den klassischen Messverfahren Daten erhoben, die als Referenzdatensätze dienen und daher nach ausgewählten Kriterien analysiert sowie anschließend annotiert wurden.

##### AP3.1.a Formulierung Modellsystem: Dispersion in verschiedenen Aggregationszuständen

Es sind keine Personalstunden bei NST geplant, sondern bei den Projektpartnern LFG, LUM, SOPAT und BASF.

##### AP3.1.b Analyse des Modellsystems (Elektronenmikroskopie)

In Absprache mit den Verbundpartnern wurde das Carbonyl-Eisenpulver-Modellsystem der BASF beim Projektpartner LFG mittels Rasterelektronenmikroskopie (REM) aufgenommen. Die Proben wurden unter vier verschiedenen Medien (trockenes Pulver, Pulver in Zuckerlösung, Pulver in reinem Wasser und Pulver in Wasser 1: 100 verdünnt) spezifiziert und die REM-Bilder zur Verfügung gestellt. Zur weiteren wurden NST die Informationen über die Größe und Form von Partikeln auf der REM-Bilder manuell annotiert und analysiert.

##### AP3.2 Auswertung erhobener Realdaten mit klassischen Verfahren

Die klassische Methode zur Auswertung von REM-Bildern, vor allem bei unregelmäßiger Partikelmorphologie, ist nach wie vor die manuelle Annotation. In Vorbereitung auf die manuelle Analyse des komplexeren Modellsystems, wurden anhand des einfachen Modellsystems Arbeitsabläufe erstellt, die sich anschließend übertragen lassen, um schneller zu Ergebnissen zu kommen. Anschließend wurde die Partikelgrößenverteilung für die nicht-aggregierten und die aggregierten

Partikel unter Angabe der Materialdichte aus den unterschiedlichen Medien bestimmt (siehe Abbildung 10).

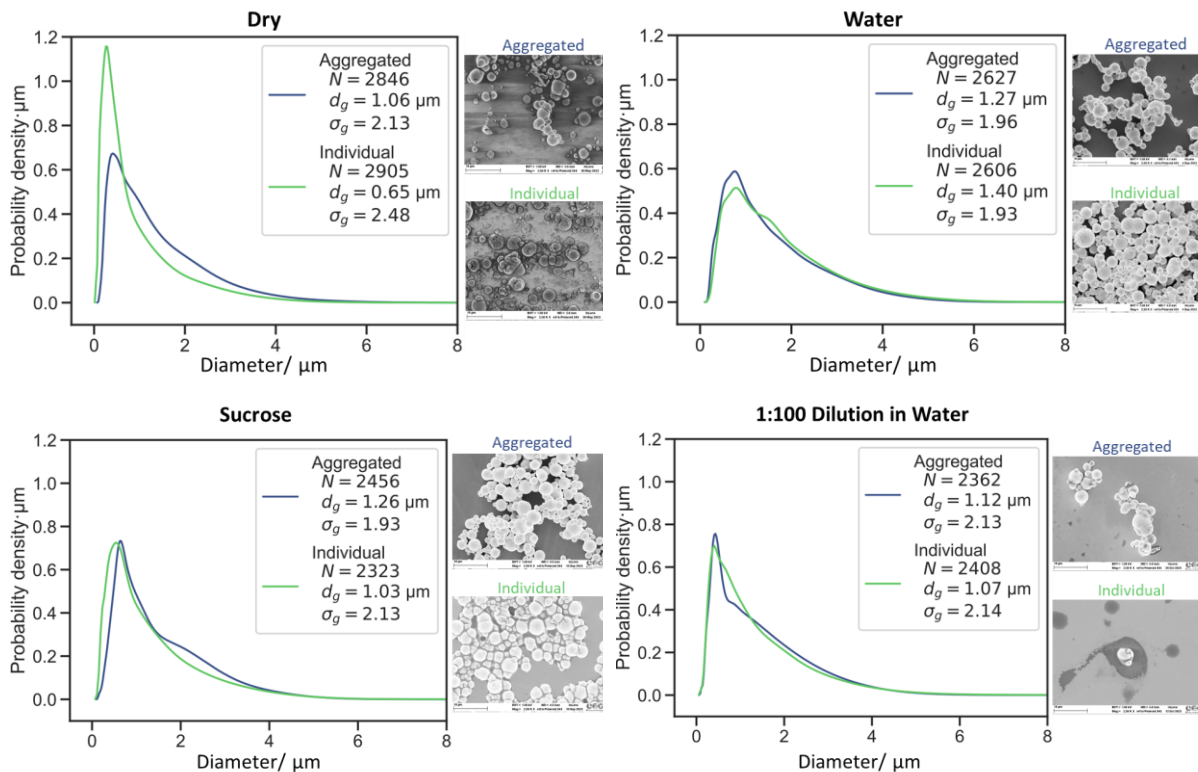


Abbildung 10: Ergebnisse der Auswertung der Partikelgrößenverteilung aus den vier manuell annotierten Datensätzen

### AP3.3 Studie des Einflusses von Agglomeration auf die Sedimentationseigenschaften mittels an synthetischen Daten trainierter, KI-basierter Messtechnik und Vergleich mit klassischen Methoden

Die in AP1 entwickelte Toolbox synthPIC2 wurde im Rahmen von AP3.1 auf das vermessene Modellsystem angewendet. Dabei wurden synthetische Bilder von Partikelagglomerationen und die zugehörigen Grundwahrheiten der Primärpartikel erzeugt. Diese Datensätze dienen der Schulung und Auswertung von Partikelbildanalysen mittels der KI-Methode Mask R-CNN.

#### AP3.3.a Herstellung eines synthetischen Bilddatensatzes zum Training von KI-Methoden

Um eine realistische Agglomeration zu modellieren, wurde eine neue Partikelgeometrie in Form einer *Metallball* erstellt und ein entsprechendes Bildmaterial entwickelt. Mithilfe der Toolbox synthPIC2 zur parameterbasierten Datensynthese wurden Agglomerationsbilder erzeugt, einschließlich der zugehörigen Grundwahrheiten der Primärpartikeln. Diese wurden für das Training eines Mask R-CNN verwendet.

#### AP3.3.b Bildbasierte Analyse der Partikelmorphologie realer Bilder mittels KI und Validierung durch den Vergleich mit klassischen Verfahren

Die synthetische Partikelbilder der Agglomeration (siehe Abbildung 11) aus AP3.3a wurden mittels Mask R-CNN trainiert. Ihre Qualität im Vergleich zu echten Daten mit manuell annotierte Partikelgrößen bewertet. Die Tests bestätigten die Nutzbarkeit der parameterbasierten synthetischen Partikelbilder.

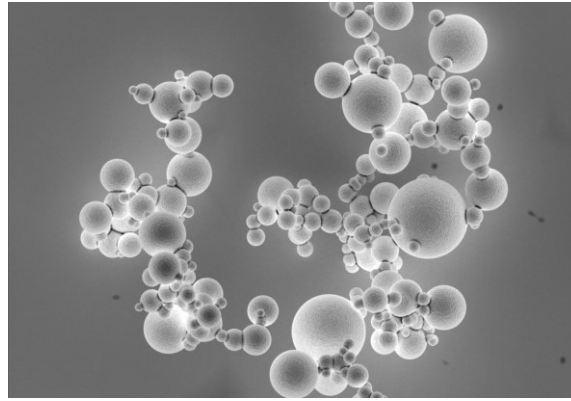


Abbildung 11: Beispielbild für die synthetische Bild von Agglomerationen.

### AP3.3.c Synthese von Transmissionsspektren anhand der Erkenntnisse der bildbasierten Messungen zum Training von KI-Methoden

Es sind keine Personalstunden bei NST geplant, sondern bei den Projektpartnern IS, LUM, ZISC und LFG

### AP3.3.d Analyse realer Transmissionsspektren (Gravitation, Zentrifugation) mittels KI und Validierung durch den Vergleich mit klassischen Verfahren

Es sind keine Personalstunden bei NST geplant, sondern bei den Projektpartnern IS, LUM, LFG.

## 1.2 Lehrstuhl für Intelligente Systeme (IS)

### AP2.3 Parameter-freie Datensynthese

Zu Beginn des Projekts wurde eine Software mit einer Befehlszeilenschnittstelle (CLI) entwickelt, die nicht nur die Hauptaufgabe der parameterfreien Datensynthese (AP2.3), sondern auch die zusätzlichen Klassifikations- und Regressionsaufgaben unterstützt, die für die Auswertung der synthetischen Ergebnisse in AP2.5 erforderlich sind. Die Software enthält alle notwendigen Funktionen für die bild- und sequenzbasierten Ansätze, wie z.B. das Laden von Daten, das Training von Modellen, das Speichern von Ergebnissen, die Visualisierung und andere. Eine der Hauptanforderungen war die Unterstützung sowohl CNN-basierter (AP2.3.a) als auch RNN-basierter (AP2.3.b) Syntheseansätze.

LUM GmbH stellte den ersten Datensatz zur Verfügung, der 313 Messungen nach dem Verfahren der Analytischen Ultrazentrifugation (AUC) enthält. Jeder Messwert enthält eine Klasse und eine Unterklasse als Grundwahrheit (Ground Truth). Es gibt vier Klassen mit der folgenden Datenverteilung: Sedimentation (175) – 55.9%; Aufrahmung (111) – 35.5% Kombiniert (13) – 4.1%; Sonstige (14) – 4.5%. Die bereitgestellten Daten sind jedoch unausgewogen und enthalten vorwiegend Messungen für die ersten beiden Klassen. Ein solches Ungleichgewicht könnte zu einer einseitigen Ausrichtung der Generation auf die Mehrheitsklassen (Sedimentation und Aufrahmung) führen. Nach der Untersuchung des Datensatzes wurde die Klassenbezeichnung als geeigneter konditionaler Prior gewählt. Die Klassenbezeichnungen steuern also den Syntheseprozess und definieren die Klasse, zu der die synthetischen Daten gehören sollen.

### AP2.3.a Indirekte Synthese durch CNN-basierte Architekturen

Im weiteren Verlauf des Projekts lieferte die LUM GmbH zusätzliche 150 experimentelle Messungen. Dadurch wurde jedoch die Anzahl der Messungen für die letzten beiden Klassen nicht ausgeglichen und das Problem der Unausgewogenheit verschärfte sich noch weiter: Sedimentation (275) – 59.4%; Aufrahmung (125) – 27.0%; Kombiniert (49) – 10.6%; Sonstige (14) – 3.0%. Einfachheit halber wird dieser Datensatz im Folgenden als LUM-Datensatz bezeichnet.

Andererseits stellten die LFG-Partner einen simulierten Datensatz zur Verfügung, der 201 Messungen (nur für die Klasse Sedimentation) mit entsprechenden Sedimentationskoeffizienten (zwischen 0 und 100 000 mit einem Schritt von 500) als Ground-Truth-Label umfasst. Dieser Koeffizient wurde dann als geeigneter konditionaler Prior ausgewählt. Der Kürze halber wird dieser Datensatz im Folgenden als LFG-Datensatz bezeichnet.

Während jede Messung im LUM-Datensatz in einer einzigen CSV-Datei mit einer unterschiedlichen Anzahl von Zeilen (radiale Positionen) und Spalten (Zeitstempel) gespeichert wurde, wurde jede Messung im LFG-Datensatz als eine Reihe separater zeitdiskreter Messungen (oder Profile) für 120 verschiedene Zeitpunkte bereitgestellt. Jeder Messvektor hatte die gleiche Länge von 280, was die radialen Positionen zwischen 6,0 mm und 7,2 mm kodiert. Im Gegensatz dazu liegen die radialen Positionen des LUM-Datensatzes hauptsächlich zwischen 104 mm und 130 mm. Außerdem stellen die Messungen im LFG-Datensatz Absorptionswerte dar, während die Messungen im LUM-Datensatz Transmissionswerte darstellen. Es wurde beschlossen, den LFG-Datensatz umzuwandeln und in einer ähnlichen Darstellung (Transmissionen in einer einzigen CSV-Datei) wie im LUM-Datensatz zu speichern.

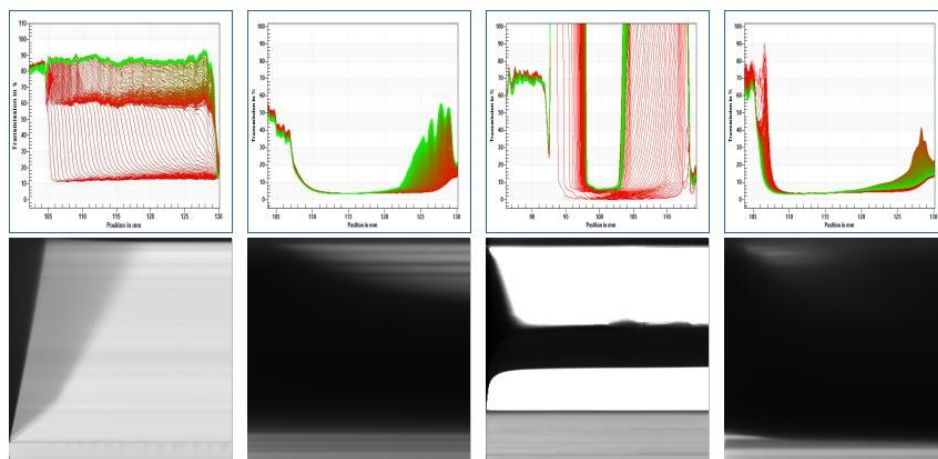


Abbildung 12: SEP-Bilder aus dem LUM-Datensatz (erste Reihe) und ihre entsprechenden Graustufenabbildungen (zweite Reihe). Grundwahrheits-Klassenbezeichnungen von links nach rechts: Sedimentation, Aufräumung, Kombiniert und Sonstige.

Wie bereits in der Projektbeschreibung erwähnt, gibt es zwei mögliche Darstellungen von Transmissionsspektren. Eine mögliche Bilddarstellung ist das SEP-Bild, wie in der oberen Reihe in Abbildung 12 dargestellt. Hier werden die Transmission (y-Achse) und die radiale Position (x-Achse) als Koordinatenachsen betrachtet, wobei die Zeit durch einen Farbverlauf (von rot nach grün) dargestellt wird. Eine alternative Darstellung ist in Abbildung 12 in der unteren Reihe zu sehen, ein Graustufenbild, in dem die Koordinatenachsen durch die radiale Position (y-Achse) und die Zeit (x-Achse) definiert sind und der Grauwert die Transmission darstellt. Während die LUM-Daten SEP-Bilder enthalten, die von der internen Software des Unternehmens generiert wurden, gibt es für LFG keine solchen Bildern. Daher wurde ein ähnliches Skript zur Erstellung von ähnlichen SEP-Bildern reproduziert/implementiert und für LFG-Daten verwendet.

Für das Training und nachfolgende Synthese wurde zunächst ein einfaches Generative Adversarial Network (GAN) implementiert und getestet. GAN ist ein generatives Modell, das in der Lage ist, neue, ungesehene Daten aus einem Rauschvektor zu synthetisieren. Es besteht aus einem Generator- (G) und einem Diskriminator-Netzwerk (D), die iterativ über einen kontradiktorischen (engl. adversarial) Ansatz lernen. Die Netze haben also entgegengesetzte Ziele und konkurrieren miteinander. Während der Generator lernt, realistisch aussehende gefälschte Bilder zu erzeugen, die den Trainingsdaten (oder echten Daten) ähneln, lernt der Diskriminator, zwischen echten und gefälschten Daten zu unterscheiden.

Während des Lernprozesses lernt der Diskriminator, den gefälschten Daten den Wert 0 und den echten Daten den Wert 1 zuzuordnen. Im Gegensatz dazu lernt der Generator, realistisch aussehende Bilder so zu erzeugen, dass denen der Diskriminator fälschlicherweise den Wert 1 zuordnet. Im Idealfall ist der Trainingsprozess abgeschlossen, wenn die Diskriminator-Netzwerke zufällig raten und daher nicht mehr zwischen echten und gefälschten Daten unterscheiden können.

GANs leiden in der Regel unter dem „Mode-Collapse“-Problem, d. h. der Generator bricht zusammen und erzeugt ähnlich aussehende Bilder für verschiedene Zufallsrauschvektoren. Eine mögliche Lösung zur Behebung dieses Problems ist die Verwendung der Earth Mover- oder Wasserstein-1-Distanz in den Verlustfunktionen beider Netze, wodurch die Rolle des binären Diskriminators (der entweder 0 oder 1 ausgibt) durch den Critic (C) ersetzt wird, der echte kontinuierliche Werte ausgibt, die den Grad der Realitätsnähe darstellen. Das daraus resultierende Wasserstein-GAN (WGAN) milderte das „Mode-Collapse“-Problem teilweise ab; die erzeugten Bilder sahen jedoch immer noch nicht realistisch genug aus. Daher waren sie nicht brauchbar.

Als weitere Maßnahme wurde das Wasserstein-GAN zum bedingten (engl. conditional) WGAN (cWGAN) erweitert, indem der bedingte Prior als zusätzliche Eingabe für Generator- und Diskriminatornetzwerke integriert wurde. Diese Modifikation ermöglichte die Kontrolle des Syntheseprozesses. Der bedingte Prior in LUM-Daten (Klassenlabel) wurde zunächst in einen One-Hot-Codierungsvektor (engl. one-hot encoding) mit einer Länge von 4 umgewandelt und dann zu einem Rauschvektor konkateniert. Im Gegensatz dazu musste der bedingte Prior für LFG nicht transformiert werden. Während das Hinzufügen dieser bedingten Information zum Generator einfach ist, ist dies für den Diskriminator nicht der Fall, da er 2D-Daten als Eingabe erwartet. Daher wurde der bedingte Prior an die Eingabedaten in der Kanaldimension angehängt (oder verkettet). Darüber hinaus wurden verschiedene Gradient-Bestrafung-Techniken, wie die in WGAN-GP (Gulrajani et al. "Improved Training of Wasserstein GANs") und WGAN-DIV (Wu et al. "Wasserstein divergence for GANs"), implementiert und getestet, um die Ergebnisse weiter zu verbessern.

Beide in Abbildung 12 gezeigten Bilddarstellungen wurden während des iterativen Implementierungsprozesses der GANs verwendet. Die generativen Modelle wurden zunächst mit SEP-Bildern trainiert, beginnend mit einer niedrigen Auflösung von 128x128 px und ansteigend auf 512x512 px. Obwohl plausible Ergebnisse erzielt wurden, wie in Abbildung 13 gezeigt, sehen die generierten Ergebnisse im Vergleich zu den realen Messungen in Abbildung 12 (erste Zeile) verrauscht aus.

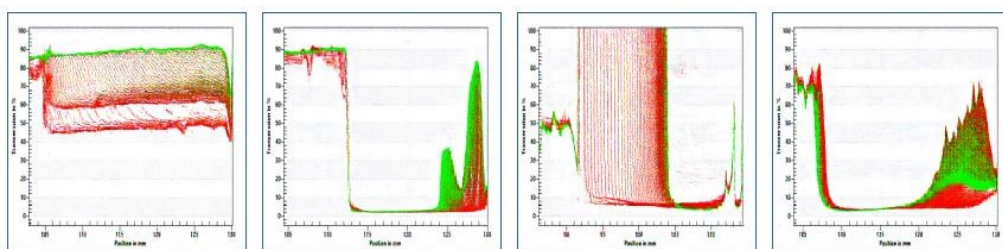


Abbildung 13: Synthetische SEP-Bilder (512 px x 512 px) für den LUM-Datensatz unter Verwendung von cWGAN-DIV aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben. Die bedingten Eingaben von links nach rechts: Sedimentation, Aufräumung, Kombiniert und Sonstige.

Erstens sind die Hintergrundinformationen schlecht synthetisiert, was bedeutet, dass die abwechselnd grauen und weißen Bereiche nicht homogen sind. Zweitens sind die einzelnen farbigen Linien (oder Profile) nicht immer kontinuierlich, wie sie sein sollten. Drittens handelt es sich bei den erzeugten Bildern um RGB-Bilder in Form von Diagrammen (mit Achsentiteln), was bedeutet, dass es unmöglich ist, sie nachzubearbeiten und zu versuchen, die beiden zuvor genannten Probleme zu lösen. Daher ist eine analytische Bewertung dieser synthetischen Transmissionsspektren nicht möglich.

Die in Abbildung 14 dargestellten Ergebnisse wurden mit der gleichen Architektur für LFG-Daten erzielt. Diese Ergebnisse weisen die gleichen Nachteile auf, die bereits für die LUM-Ergebnisse erwähnt wurden. Während die erzeugten Bilder aus physikalischer Sicht plausibel erscheinen, insbesondere für größere Sedimentationskoeffizienten, verschlechtert sich die Qualität mit abnehmendem Koeffizienten aufgrund zu dichter Profile. Der größte Nachteil besteht darin, dass diese Bilder nicht für die analytische Ableitung des Sedimentationskoeffizienten verwendet werden können.

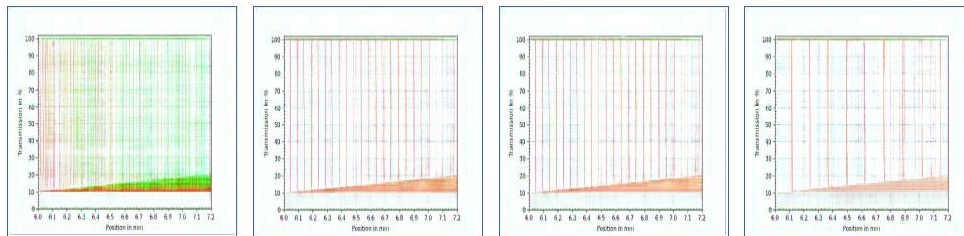


Abbildung 14: Synthetische SEP-Bilder (512 px x 512 px) für den LFG-Datensatz mit cWGAN-DIV aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben. Die bedingten Eingaben von links nach rechts: 3125, 34375, 40625, 75000.

Die Graustufendarstellung könnte möglicherweise eine sinnvolle Lösung sein. Sie hat jedoch auch Nachteile, denn im Allgemeinen enthalten farbige Bilder (z. B. SEP-Bilder) reichere Informationen, die es dem Netz ermöglichen, auffälligere Merkmale zu lernen.

Die zuvor vorgestellte bedingte WGAN-DIV-Architektur (cWGAN-DIV) wurde mit Graustufenbildern trainiert. Die synthetischen Ergebnisse, die für den LUM-Datensatz erzielt wurden, sind in Abbildung 15 (obere Reihe) dargestellt. Obwohl sie den realen Prozessen ähneln, enthalten die synthetischen Transmissionsspektren quadratische Muster, ein typisches Artefakt bei der Arbeit mit neuronalen Faltungsnetzen. Diese Artefakte entsprechen kleinen Zickzacklinien für jedes einzelne Profil in den SEP-Bildern (Abbildung 15, untere Reihe).

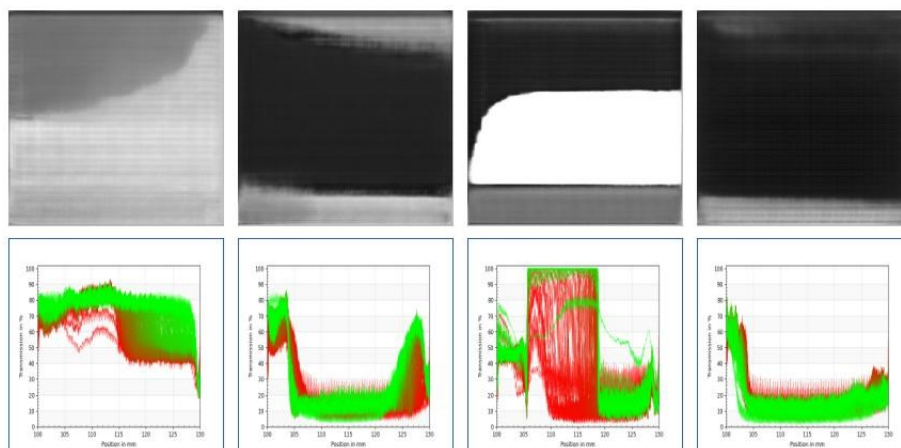


Abbildung 15: Synthetische Graustufenbilder (512 px x 512 px) für den LUM-Datensatz unter Verwendung von cWGAN-DIV aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben (erste Reihe) und die entsprechenden SEP-Bilder (zweite Reihe). Die bedingten Eingaben von links nach rechts: Sedimentation, Aufrahmung, Kombiniert und Sonstige.

Bei der Verwendung des LFG-Datensatzes wurden zusätzliche physikalische Randbedingungen in den Lernprozess einbezogen, um die Qualität der generierten Ergebnisse weiter zu verbessern. Das Netzwerk wurde gezwungen, das Konzept der Sedimentation von einem physikalischen Standpunkt aus zu verstehen, was bedeutet, dass der Sedimentationsprozess unumkehrbar ist. Wenn also die Partikel vom oberen Bereich der Küvette zum Boden wandern, sollten sie sich bei jedem weiteren Zeitstempel noch näher am Boden befinden. Solche physikalischen Beschränkungen können durch die Verwendung des Gradienten des Bildes umgesetzt werden. Abbildung 16 (erste Zeile) zeigt Beispiele für synthetisierte Transmissionsspektren (zweite und vierte Spalte) im Vergleich zu dem

Trainingsdatensatz (erste, dritte, und vierte Spalte). Die erzeugten Spektren sehen im Vergleich zu den drei simulierten (parameter-basierten) Messungen realistisch aus. Darüber hinaus wurden die synthetischen Bilder unter Verwendung der bedingten Sedimentationswerte von 15625 und 31250 erzeugt, und sie passen vom physikalischen Standpunkt aus gesehen zu den simulierten Messungen mit Sedimentationskoeffizienten von 6000, 25000 und 50000. Diese Schlussfolgerung lässt sich auch visuell bestätigen, wenn man die SEP-Darstellungen in der zweiten Zeile von Abbildung 16 vergleicht. Qualitativ sehen die synthetischen Daten also gut aus.

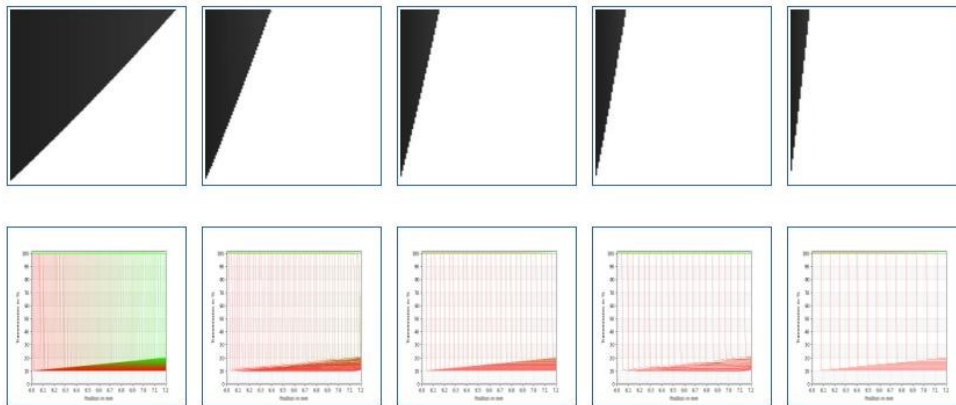


Abbildung 16: Graustufenbilder (512 px x 512 px) und ihre entsprechenden SEP-Bilder. Die Graustufenbilder in der zweiten und vierten Spalte stammen von cWGAN-DIV aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben (15625 und 31250). Die anderen Graustufenbilder stammen aus dem Trainingsdatensatz (Sedimentationskoeffizienten: 6000, 25000 und 50000).

Zum anderen wurde ein Variational Autoencoder (VAE) implementiert und getestet. VAE besteht aus einem Encoder (Enc) und einem Decoder (Dec) (ähnlich wie ein Autoencoder). Der Encoder komprimiert die Eingabebilder in eine kompakte Darstellung als Gauß-Verteilung, während der Decoder die Eingabebilder aus einem zufälligen Rauschvektor rekonstruiert. Die Verlustfunktion des VAEs besteht daher aus Regularisierungs- und Rekonstruktionskomponenten. Sobald der Trainingsprozess abgeschlossen ist, kann der Decoder-Teil zur Generierung neuer Daten verwendet werden. Ähnlich wie bei GANs kann VAE zu einer bedingten Version, d.h. cVAE, erweitert werden.

Im Allgemeinen sind VAEs dafür bekannt, dass sie (im Vergleich zu GANs) unscharfe Ergebnisse liefern. Obwohl es möglich ist, die Unschärfe zu verringern, geht dies in der Regel auf Kosten einer schlechteren Regularisierung im latenten Raum. Nach der Abwägung zwischen diesen beiden Faktoren waren die erzielten Ergebnisse (siehe Abbildung 17) immer noch verbesserungswürdig.

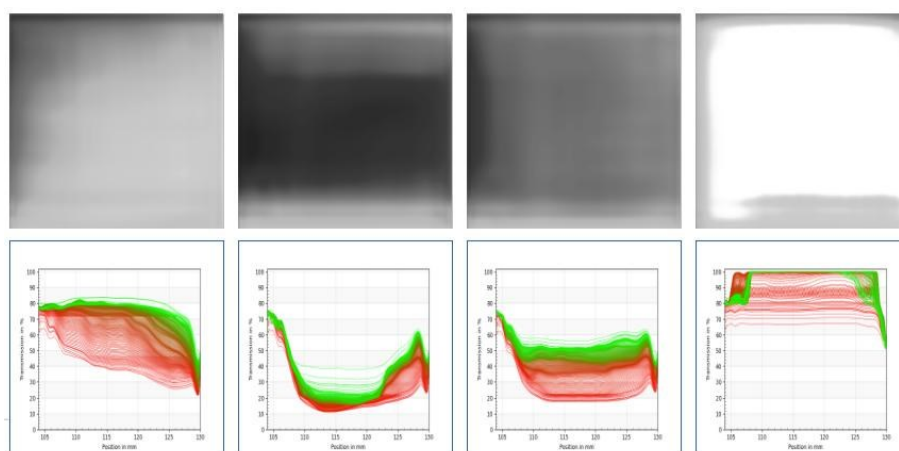


Abbildung 17: Synthetische Graustufenbilder (512 px x 512 px) für den LUM-Datensatz unter Verwendung von cVAE aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben (erste Reihe) und ihre entsprechenden SEP-Bilder (zweite Reihe). Die bedingten Eingaben von links nach rechts: Sedimentation, Aufrauhmung, Kombiniert und Sonstige.

Als letzter Ansatz wurden bedingte GANs und VAEs kombiniert, um die cVAE-GANs zu erstellen. Die in Abbildung 18 gezeigten Ergebnisse stellen das Beste aus beiden Welten dar: realistisch aussehende Ergebnisse, jedoch mit weniger Rauschen (weniger Zick-Zack-Artefakte in den entsprechenden SEP-Bildern).

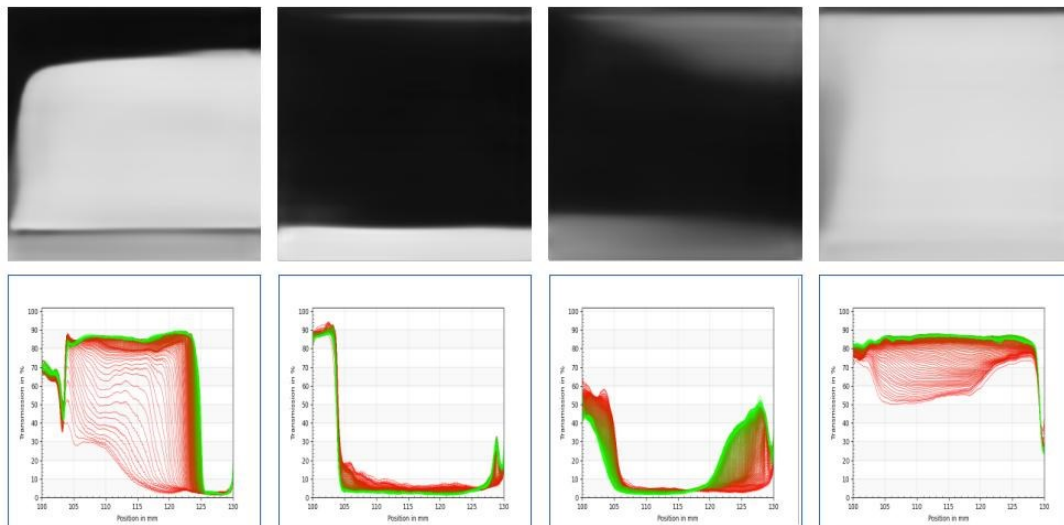


Abbildung 18: Synthetische Graustufenbilder (512 px x 512 px) für den LUM-Datensatz unter Verwendung von cVAE-WGAN-DIV aus zufälligen Rauschvektoren und bedingten Eingaben (erste Reihe) und die entsprechenden SEP-Bilder (zweite Reihe). Die bedingten Eingaben von links nach rechts: Sedimentation, Aufrahmung, Kombiniert und Sonstige.

Es ist wichtig zu erwähnen, dass die generierten Ergebnisse sowohl für die LUM- als auch für die LFG-Datensätze für die menschliche Wahrnehmung realistisch erscheinen. Daher wurden diese Ergebnisse mit analytischen und KI-Ansätzen weiter quantitativ bewertet. AP2.5 enthält weitere Details und Ergebnisse zur KI-basierten Bewertung.

### AP2.3.b Direkte Synthese durch RNN-basierte Architekturen

Die ersten Experimente wurden mit einem klassischen MNIST-Datensatz durchgeführt, der handgeschriebene Ziffern zwischen 0 und 9 enthält, beginnend mit einer Sequenzlänge von 8 und aufsteigend auf 256 Elemente. Diese Experimente zeigten, dass das RNN-AE-Modell (Autoencoder mit RNNs statt CNNs) nicht gut skaliert und daher verschiedene Tricks (z. B. Gradienten-Beschneidung (engl. gradient clipping) zur Vermeidung von Gradienten-Explosionen) zur Stabilisierung des Trainingsprozesses erforderlich sind. Darüber hinaus erfordert der Trainingsprozess von RNN-AEs mehr Rechenressourcen als der von CNN-AEs, da solche Modelle die Parallelisierung auf GPUs nicht gut unterstützen.

Verschiedene RNN-AEs wurden mit dem LUM-Datensatz trainiert und getestet. So wurde während des Trainings und des Tests jede Spalte des Graustufenbildes (oder jede Sequenz) separat durch das Netzwerk propagiert. Abbildung 19 zeigt die plausibelsten Ergebnisse, die mit dem LSTM-AE-Modell bei einer Sequenzlänge von 256 erzielt wurden. Sie ähneln zwar den Inputdaten (Grundwahrheiten), sehen aber sicher nicht so realistisch wie die Ergebnisse des CNN-basierten Ansatzes (siehe Abbildung 18).

Aufgrund der unbefriedigenden Ergebnisse und der zu langen Trainingszeit und in Anbetracht der Tatsache, dass AE das einfachste Modell im Vergleich zu VAEs, GANs, VAE-GANs und deren bedingten Erweiterungen ist, verlagerte sich der Schwerpunkt des Projekts auf CNN-basierte Ansätze.

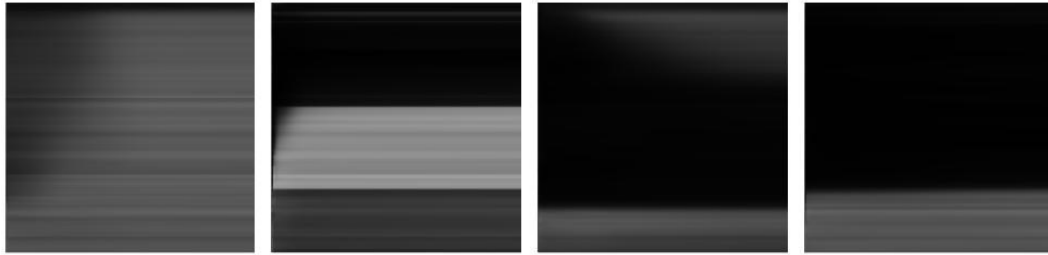


Abbildung 19: Rekonstruierte Graustufenbilder (256 px x 256 px) für den LUM-Datensatz mit LSTM-AE.

#### AP2.4 Zusammenführung von parameter-basierten und -freien Methoden und Softwareentwicklung

Die Software wurde so konzipiert und entwickelt, dass sie einen flexiblen Mechanismus zum Laden von Daten unterstützt. Sie kann Daten aus LUM- und LFG-Datensätzen laden und unterstützt auch Bilder (SEP- oder Graustufenbilder) oder Sequenzen. Außerdem unterstützt sie das Laden von synthetischen Daten, die in AP2.3 erzeugt wurden.

Diese Designwahl ermöglicht eine nahtlose Integration synthetischer Daten für jede Aufgabe, sei es eine Synthese, Klassifizierung oder Regression. Dies bedeutet, dass die synthetisierten Transmissionsspektren zum Trainieren anderer KI-Algorithmen verwendet werden können (AP2.5). Darüber hinaus ermöglicht es eine einfache KI-basierte Auswertung der generierten Transmissionsspektren (Teil von AP2.6).

#### AP2.5 Tests synthetischer Daten an KI-Algorithmen

Ein CNN-basierter Klassifikator (ResNet34) wurde unter verschiedenen Dateneinstellungen trainiert, um die Brauchbarkeit synthetischer Daten zu bewerten. Im ersten Experiment wurde das Modell mit dem realen LUM-Datensatz trainiert und dann mit den synthetischen Daten getestet. Abbildung 20 zeigt die erhaltenen Konfusionsmatrizen für den realen Datensatz, den mit cWGAN-DIV generierten synthetischen Datensatz (SEP-Bilder) und den mit cVAE-WGAN-DIV generierten synthetischen Datensatz (Graustufenbilder).

Das Modell zeigte eine gute Leistung in der Testuntergruppe (92% Genauigkeit) der realen Daten, was auf eine gute Generalisierung auf ungesehene Daten hindeutet. Die Leistung des Modells nahm jedoch ab, als das vortrainierte Modell zur Klassifizierung synthetischer Daten aus den Modellen cWGAN-DIV (53% Genauigkeit) und cVAE-WGAN-DIV (28% Genauigkeit) verwendet wurde. Positiv zu vermerken ist, dass ein Teil der synthetischen Transmissionsspektren korrekt klassifiziert wurde, was darauf hindeutet, dass die generativen Modelle brauchbare Ergebnisse liefern können.

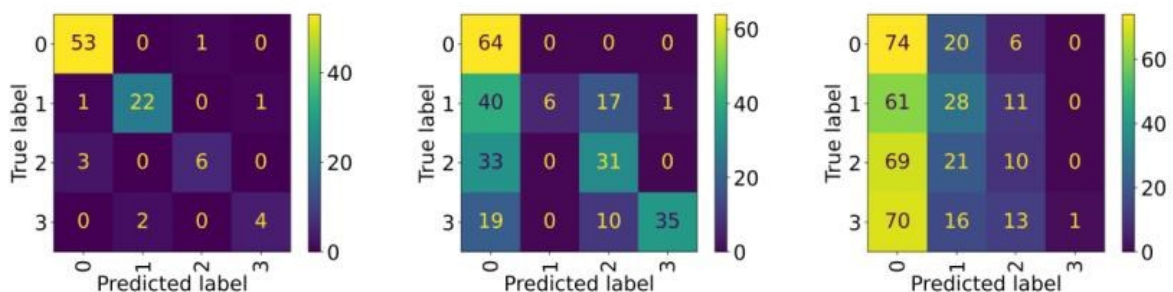


Abbildung 20: Konfusionsmatrizen für CNN-basierte Klassifikator. Verwendete Daten von links nach rechts: realer LUM-Datensatz, synthetisch generierte Daten von cWGAN-DIV (SEP-Bilder), synthetische Daten von cVAE-WGAN-DIV (Graustufenbilder).

## AP2.6 Methoden zur Qualitätsmessung synthetischer Transmissionsspektren

Um die Qualität der synthetischen Transmissionsspektren zu bewerten, wurden drei verschiedene Metriken entwickelt.

Eine davon ist die Fréchet Inception Distance (FID), die die Wasserstein-2- oder (oder Fréchet-) Distanz im latenten Raum berechnet und somit die Ähnlichkeit zwischen synthetischen und realen Daten erfassen kann. Da die FID eine Erweiterung des Inception Score (IS) ist, verwendet ihre ursprüngliche Implementierung auch den InceptionV3 Klassifikator.

Die zweite ist die Mean Feature Divergence (MFD), eine Divergenz zwischen realen und synthetischen Bildern, die auf der Grundlage der Softmax-Ausgaben des Klassifikationsmodells (Klassenwahrscheinlichkeitsverteilung als Feature) berechnet wird.

Die letzte ist die Kernel Inception Distance (KID), die im Wesentlichen die Anwendung der Maximum Mean Discrepancy (MMD) als Bewertungsmetrik darstellt (Mikołaj et al. "Demystifying MMD GANs"). Ähnlich wie bei der FID basieren die Berechnungen auf dem latenten Raum.

Die Berechnung der FID- und KID-Metriken erfordert einen Merkmalsextraktor wie ein CNN-Modell. Außerdem kann das InceptionV3-Modell nicht verwendet werden, da es mit dem ImageNet-Datensatz trainiert wurde, der natürliche Bilder mit 1000 verschiedenen Klassen enthält. Als Lösung kann ein Klassifikationsmodell mit dem LUM-Datensatz trainiert werden. Unter der Annahme, dass es in einem Test-Teilsatz gut abschneidet, könnte es für die Merkmalsextraktion verwendet werden. Außerdem können die Softmax-Ausgaben des Modells zur Berechnung der MFD-Metrik verwendet werden. In ähnlicher Weise kann ein gut trainiertes Regressionsmodell für die FID- und KID-Metriken für den LFG-Datensatz verwendet werden.

## AP3.3c Synthese von Transmissionsspektren anhand der Erkenntnisse der bildbasierten Messungen zum Training von KI-Methoden

Für die endgültige Synthese wurden die bedingten WGAN-DIV und VAE-WGAN-DIV Modelle verwendet. Zur Beurteilung der Qualität der synthetischen Transmissionsspektren wurden die quantitativen Bewertungsmetriken von AP2.6 verwendet. Da die FID- und KID-Metriken die Merkmale als Eingabe benötigen und die MFD-Metrik die Wahrscheinlichkeitsverteilung erfordert, wurde ein Klassifikationsmodell (ResNet34) als Merkmalsextraktor verwendet.

Tabelle 1 enthält den qualitativen Vergleich der erzielten Ergebnisse und zeigt, dass das Modell cVAE-WGAN-DIV besser abschneidet als das Modell cWGAN-DIV. Obwohl die synthetischen Daten realistisch aussehen, entsprechen sie nicht immer der verwendeten bedingten Ground-Truth-Klassenbezeichnung.

Modell	FID (↓)	MFD (↓)	KID (↓) (mean $MMD^2 \pm \text{std. } MMD^2$ )
cWGAN-DIV (SEP-Bilder)	254.05	0.39	2.12 ± <b>0.34</b>
<b>cVAE-WGAN-DIV (Graustufenbilder)</b>	<b>152.79</b>	<b>0.20</b>	<b>1.11 ± 0.42</b>

*Tabelle 1: Vergleich zwischen den synthetischen Daten von cWGAN-DIV und cVAE-WGAN-DIV.*

Die extrahierten Merkmale aus den realen und synthetischen Daten können zusätzlich für einen visuellen Vergleich mit der Hauptkomponentenanalyse (PCA) verwendet werden. Abbildung 21 ist eine 3D-Visualisierung der reduzierten latenten Merkmale für reale und synthetische Daten. Sie bestätigt, dass die Merkmale der synthetischen Daten dem Muster der realen LFG-Trainingsdaten folgen.

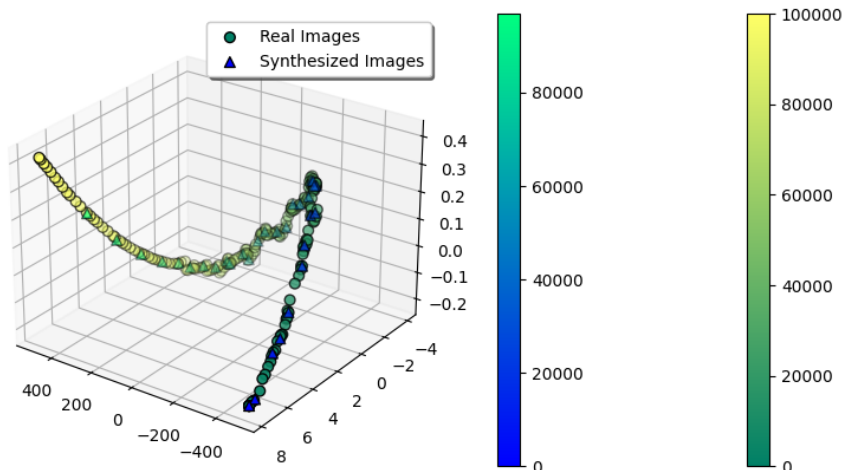


Abbildung 21: 3D-Visualisierung der reduzierten latenten Merkmalsvektoren mittels Hauptkomponentenanalyse (engl. Principal Component Analysis) (PCA).

### AP3.3.d Analyse realer Transmissionsspektren (Gravitation, Zentrifugation) mittels KI und Validierung durch den Vergleich mit klassischen Verfahren

In diesem Experiment wurden die synthetischen Daten von cWGAN-DIV zum Trainieren des Klassifizierungsmodells verwendet, und die realen LUM-Daten wurden zum Testen verwendet. Das Modell wurde dann anhand des realen Datensatzes weiter verfeinert und erneut getestet. Die erhaltenen Konfusionsmatrizen sind in Abbildung 22 dargestellt. Das erste Bild zeigt, dass das vortrainierte Modell angemessen funktioniert (88% Genauigkeit). Das zweite und dritte Bild zeigen die Bewertungsergebnisse mit und ohne Feinabstimmung (engl. fine-tuning).

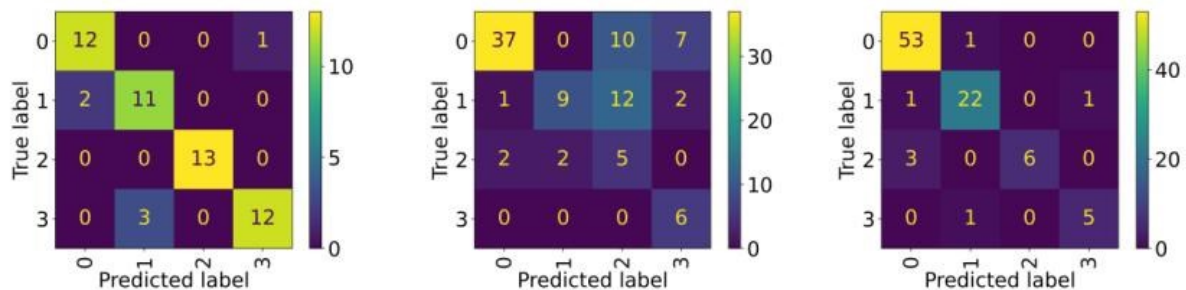


Abbildung 22: Konfusionsmatrizen für CNN-basierte Klassifikator. Verwendete Daten von links nach rechts: synthetische LUM-Daten von cWGAN-DIV (SEP-Bilder), reale Daten (ohne Feinabstimmung), reale Daten (mit Feinabstimmung).

Die Genauigkeit des Modells steigt von 61% auf 92%, wenn der Verfeinerungsschritt verwendet wird. Damit wurde eine leichte Verbesserung von 1% im Vergleich zu den Ergebnissen in Abbildung 20 (links) erzielt.

Das verwendete CNN-basierte Regressionsmodell erreichte einen RMSE (Root Mean Squared Error) von 721 auf dem Test-Subset und einen RMSE von 1862 bei der Verwendung synthetischer Daten. Ein so geringer Fehler bei der Vorhersage der Sedimentationskoeffizienten (die tatsächlichen Werte liegen zwischen 0 und 100 000) weist auf die gute Qualität der synthetischen Daten hin.

## 2 Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die im Zuwendungsbescheid zugebilligten Mittel wurden bis auf wenige Abweichungen wie vorgesehen verwendet. Im Bereich Personalkosten wurden zwei wissenschaftliche Mitarbeiter in der Lohnstufe TVL E13 eingestellt. Zusätzlich wurden studentische Hilfskräfte finanziert, welche unterstützend im Projekt mitgewirkt haben.

Im Bereich Reisekosten wurden die Besuche zu Konferenzen finanziert. Da die beiden ersten Statustreffen aufgrund der Corona-Pandemie digital abgehalten worden sind, sind hier keine weiteren Reisekosten entstanden.

## 3 Notwendigkeit und Angemessenheit

Die durchgeführten Arbeiten und die damit verbundenen Kosten waren entscheidend, um sowohl das Gesamtprojekt als auch das spezifische Teilprojekt für NST und IS erfolgreich abzuschließen. Diese Maßnahmen waren angemessen, da sie die Entwicklung eines funktionsfähigen und getesteten Verfahrensprototyps ermöglichten, der für die zukünftige Produktentwicklung genutzt werden kann. Aufgrund von internen Konsortialabhängigkeiten und Herausforderungen bei der Rekrutierung von Nachwuchskräften und die Cyberangriff im November 2022 an der Universität Duisburg-Essen kam es zu Verzögerungen in der Projektabwicklung. Um den Projekterfolg zu gewährleisten, wurde das Projekt kostenneutral um fünf Monate verlängert.

## 4 Ergebnisnutzen und -verwertbarkeit

Die im Rahmen des Projektes konzipierten und entwickelten Module werden zum Teil auch nach Projektende kontinuierlich verbessert und weiterentwickelt. Eine Zusammenarbeit mit anderen Instituten ist geplant.

Eine Masterarbeit aus NST wurde während der Projektlaufzeit ausgeschrieben und erfolgreich betreut, die sich mit der Entwicklung und Bewertung einer neuen Metrik zur Eignungsbeurteilung synthetischer REM-Bilder als Trainingsdaten für künstliche neuronale Netze in der Partikelmesstechnik befasste. Parallel wurde ein neues Projekt mit dem Projektpartner SOPAT GmbH auf Basis der Forschungsergebnisse initiiert. In diesem Projekt werden weitere synthetische Partikelbilder und ihre zugehörigen Grundwahrheiten aus verschiedenen Partikelsystemen mithilfe der parameterbasierten Toolbox synthPIC2 erzeugt, um einen Benchmark-Datensatz für partikuläre Systeme zu erstellen.

## 5 Fortschritt anderer Stellen

Mit der Entwicklung von generativen Modellen aus GAN-Algorithmen und Techniken der künstlichen Intelligenz werden, die in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner SOPAT entwickelten Verfahren der hybriden Bildsynthese und der parameterfreien Bildsynthese weiter verbessert.

Die entwickelten Methoden von NST wurden bereits von zwei anderen Arbeitsgruppen angewendet und haben zu zwei wissenschaftlichen Veröffentlichungen geführt.

Eine Kooperation mit anderen Instituten zur Generierung neuer synthetischer Partikelsysteme wird geplant, und NST kann weitere Unterstützung bei der Nutzung der Endergebnisse des Projekts bieten.

## 6 Veröffentlichung des Ergebnisses

### 6.1 Institut für Nanostrukturtechnik (NST)

Ein GitHub-Repository wurde für die Entwicklung einer Toolbox (synthPIC2) zur Erzeugung von bildbasierten Trainings- und Validierungsdaten für die Partikelmesstechnik erstellt. Die Veröffentlichung der Projektergebnisse wurde im Januar 2024 für alle kostenlos zur Verfügung gestellt.

Die vorläufigen Ergebnisse zur bildbasierten Partikelmesstechnik mittels Deep Learning wurden auf dem World Congress on Particle Technology (WCPT9) 2022, DECHEMA - Jahrestreffen 2022 und 2023 sowie PARTEC 2022 vorgestellt. Außerdem wurden die Ergebnisse in zwei peer-reviewed wissenschaftlichen Veröffentlichungen publiziert.

Eine Veröffentlichung mit den Projektpartnern SOPAT und BASF zum Thema Eisenpulver und Partikelbildsynthetisierung ist bis Ende 2024 geplant.

### 6.2 Lehrstuhl für Intelligente Systeme (IS)

Die vorläufigen Ergebnisse zur Klassifizierung und Synthese von Transmissionsspektren wurden auf der DECHEMA- Jahrestreffen 2023 vorgestellt. Die endgültigen Ergebnisse werden demnächst in der Open-Access-Zeitschrift MDPI (Particles) veröffentlicht.

---

Ort

Datum

Rechtsverbindliche Unterschrift und  
Firmenstempel

# Schlussbericht Projekt iPMT

## Veröffentlichungen

Vorhabenbezeichnung: 01|S21065A | iPMT | Datensynthese für Anwendungen in der intelligenten Partikelmesstechnik  
Ausführende Stelle: Lehrstuhl für Intelligente Systeme (IS)  
Universität Duisburg-Essen  
Laufzeit/Berichtszeitraum: 01.08.2021 – 31.12.2023

### 1 Veröffentlichung 1 (2023)

Gurbandurdy Dovletov, Adjie Salman, Josef Pauli, Sebastian Boldt and Dietmar Lerche, "Synthesis of Extinction-based Separation Kinetics Using Deep Learning Models." Jahrestreffen der DECHEMA Fachgruppen Aerosoltechnik, Gasreinigung, Mehrphasenströmung und Partikelmesstechnik, 28.-30. März 2023, Paderborn

### 2 Veröffentlichung 2 (2023)

Gurbandurdy Dovletov, Adjie Salman, Josef Pauli, Sebastian Boldt and Dietmar Lerche, "Deep Learning-based Classification of Separation Kinetics by Means of Analytical Photocentrifugation." Jahrestreffen der DECHEMA Fachgruppen Aerosoltechnik, Gasreinigung, Mehrphasenströmung und Partikelmesstechnik, 28.-30. März 2023, Paderborn

### 3 Veröffentlichung 3 (2024/2025 - in Vorbereitung)

Peer Review Artikel zusammen mit den Kooperationspartnern in Bearbeitung mit dem Arbeitstitel "Deep Learning based Synthesis, Classification and Analysis of Sedimentation Boundaries in Centrifugation Experiments"

---

Ort

Datum

Rechtsverbindliche Unterschrift und  
Firmenstempel

# Schlussbericht Projekt iPMT

## Veröffentlichungen

Vorhabenbezeichnung: 01|S21065A | iPMT | Datensynthese für Anwendungen in der intelligenten Partikelmesstechnik  
Ausführende Stelle: Institut für Nanostrukturtechnik (NST)  
Universität Duisburg-Essen  
Laufzeit/Berichtszeitraum: 01.08.2021 – 31.12.2023

### 1 Veröffentlichung 1

M. Frei and F. E. Kruis, “Image-Based Analysis of Dense Particle Mixtures via Mask R-CNN,” *Eng*, vol. 3, no. 1, pp. 78–98, Jan. 2022, doi: 10.3390/eng3010007.

### 2 Veröffentlichung 2

C. Gorynski, M. Frei, F. E. Kruis, and M. Winterer, “Machine learning based quantitative characterization of microstructures,” *Acta Materialia*, vol. 256, p. 119106, Sep. 2023, doi: 10.1016/j.actamat.2023.119106.

### 3 Veröffentlichung 3

Ein GitHub-Repository wurde für die Entwicklung einer Toolbox (synthPIC2) zur Erzeugung von bildbasierten Trainings- und Validierungsdaten für die Partikelmesstechnik erstellt. Die Veröffentlichung der Projektergebnisse wurde im Januar 2024 für alle kostenlos zur Verfügung gestellt.

### 4 Veröffentlichung 4

Max Frei and Einar Kruis, „*Image-Based Particle Analysis via Deep Learning*“ - World Congress on Particle Technology, 18.-22. September 2022, Madrid

### 5 Veröffentlichung 5

Xuebei Zhu, Max Frei and Einar Kruis, „*Particle detection and particle size distribution measurement using deep learning and image synthesis*“ - Jahrestreffen der DECHEMA Fachgruppen Aerosoltechnik, Gasreinigung, Mehrphasenströmung und Partikelmesstechnik, 28.-30. März 2023, Paderborn

## 6 Veröffentlichung 6

Xuebei Zhu, Max Frei, Einar Kruis " Particle detection and particle size distribution measurement using deep learning and image synthesis" - International Congress on Particle Technology PARTEC, 26.-28. September 2023, Nürnberg

## 7 Veröffentlichung 7

Xuebei Zhu, Einar Kruis „Bildbasierte Analyse von Agglomeraten mittels Deep Learning“ - Jahrestreffen der DECHEMA/VDI-Fachgruppen Grenzflächenbestimmte Systeme und Prozesse, Kristallisation, Mechanische Flüssigkeitsabtrennung und Partikelmesstechnik, 26.-28. Februar 2024, Frankfurt am Main

---

Ort	Datum	Rechtsverbindliche Unterschrift und Firmenstempel
-----	-------	---