Institut für Thermodynamik

Leibniz Universität Hannover

Ausschreibung einer studentischen Arbeit am IfT

Modellierung thermodynamischer Eigenschaften mit symbolischer Regression

Art der Arbeit:	☒ Bachelorarbeit ☒ Studienarbeit ☒ SC (WiIng) ☒ Masterarbeit
Beginn der Arbeit:	ab sofort
Betreuer(-in):	Dr.-Ing. Ophelia Frotscher, frotscher@ift.uni-hannover.de, 0511 762-13937

Hintergrund der Arbeit:

In der Chemie- und Energietechnik ist es von entscheidender Bedeutung, die thermodynamischen Eigenschaften von Flüssigkeiten und Feststoffen (z.B., Temperatur, Druck, Dichte und Schallgeschwindigkeit) und ihr Phasenverhalten zu verstehen. Zustandsgleichungen (Equations of State, EOS) haben sich als äußerst hilfreich bei der Beschreibung dieser Eigenschaften erwiesen, z. B. in Prozesssimulationen. In diesem Zusammenhang gibt es eine Vielzahl von Ansätzen, sowohl zur Modellierung einzelner thermodynamischer Eigenschaften, aber auch zur Entwicklung von Fundamentalgleichungen.

Um den Modellierungsprozess zu beschleunigen, soll das Potenzial von Symbolischer Regression (SR) untersucht, einer Methode aus dem maschinellen Lernen, bei der nicht nur die Parameter eines Modells, sondern auch deren funktionale Form angepasst werden. Das im Rahmen des Forschungsprojektes „Machine Learning and Optimal Experimental Design for Thermodynamic Property Modeling" entwickelte SR-Tool: „Thermodynamics-informed Symbolic Regression – TiSR" (schematischer Programmablauf in Abbildung 1) soll dabei eingesetzt werden, um unter Berücksichtigung von Randbedingungen physikalisch plausible EOS zu entwickeln.

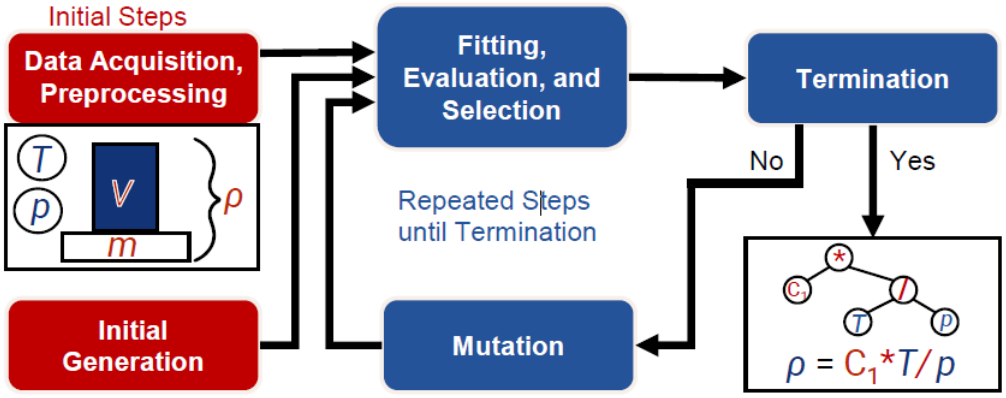

Abbildung 1: Vereinfachter Programmablauf der Gleichungsentwicklung mit symbolischer Regression in TiSR (Frotscher (2024))

Aufgabenstellung:

- Untersuchung von Kriterien zur Bewertung thermodynamischen Zustandsgleichungen
- Auswahl geeigneter Datensätze zur Modellierung
- Implementierung der Randbedingungen und Gleichungsentwicklung mit TiSR
- Bewertung und Validierung der gefundenen Gleichungen

Voraussetzungen:

- Interesse am maschinellen Lernen im Bereich der Thermodynamik
- Vorkenntnisse in Julia (oder matlab/Python) vorteilhaft
- selbstständige und strukturierte Arbeitsweise