



## **Thema für Bachelor / Master / Diplom / Beleg**

### **Modellierung von thermischen Zustandsgrößen für Alkangemische durch Methoden maschinellen Lernens**

*Modelling of thermal properties for alkane mixtures using methods of machine learning*

#### **Beschreibung:**

Die akkurate rechnerische Modellierung thermischer Zustandsgrößen (Dichte, Wärmekapazität, kritische Größen, Phasengrenzen, ...) von Alkangemischen ist von hoher Bedeutung zur Auslegung von Kreisprozessen, chemischen Verfahren oder Strömungssimulationen. So werden Alkangemische beispielsweise als organische Kältemittel in Kältemaschinen bzw. Wärmepumpen oder als Treibstoffe in der Luft- und Raumfahrtindustrie eingesetzt.

Da Experimente einen hohen Geld- sowie Zeitbedarf haben, existieren unzureichend Messdaten von Alkangemischen, um alle relevanten Einsatzgebiete in Hinsicht auf thermische Zustandsgrößen hinreichend genau beschreiben zu können, während die Reinstoffe gut vermessen sind. Aus diesem Grund werden gemessene Zustandsgrößen auf thermodynamische Potentiale wie z.B. die Helmholtz-Energie (freie Energie) zurückgeführt und deren Verhalten modelliert. Aus den partiellen Ableitungen des modellierten Potentials können weitere thermische Zustandsgrößen bestimmt werden. Die heute etablierten hochgenauen Zustandsgleichungen für die reduzierte Helmholtz-Energie sind in der Lage, die zur Modellierung verwendeten Experimente innerhalb ihrer Messunsicherheit abzubilden. Für numerische Simulationen von Prozessen oder Strömungen sind jedoch möglichst genaue aber insbesondere mathematisch simple Zustandsgleichungen nötig, damit die Beschreibung des Realstoffverhaltens nicht zu einer deutlichen Erhöhung der Rechenzeit führt. Um diesen Anforderungen zu entsprechen und auch schlecht vermessene Alkane oder Zustandsgrößen dennoch möglichst prädiktiv zu beschreiben, wurden bereits eine Vielzahl von Zustandsgleichungen entwickelt und angepasst.

Ziel der Arbeit ist die Erstellung und das Training eines neuronalen Netzes unter thermodynamischen Randbedingungen zur Modellierung des Potentials der reduzierten Helmholtz-Energie. Dazu ist die an der Professur vorhandene Datenbank für Literaturdaten von Alkangemischen zu erweitern und die vorhandenen Daten in die Modellierung eines neuronalen Netzes zu integrieren. Ferner sind mithilfe des Stoffdatenprogramms TREND die Modellierungsergebnisse mit ausgewählten Zustandsgleichungen zu vergleichen.

#### **Aufgaben:**

- Literaturstudium zu Zustandsgleichungen von Mehrkomponentengemischen
- Erweiterung der Stoffdatenbank um weitere Alkangemische
- Fehlerberechnung zu Literaturdaten für ausgewählte Zustandsgleichungen
- Erstellung und Training eines neuronalen Netzes mit thermodynamischen Randbedingungen

#### **Voraussetzungen:**

- Programmiererfahrung, idealerweise mit *Python* oder *Matlab*
- Interesse an Thermodynamik/Mehrphasenthermodynamik
- Selbstständige und akkurate Arbeitsweise

#### **Betreuende Hochschullehrerin:**

Prof. Dr. rer. nat. habil. Cornelia Breitkopf

cornelia.breitkopf@tu-dresden.de

#### **Betreuer:**

Dipl.-Ing. Marcel Felix Schneegans

marcel\_felix.schneegans@tu-dresden.de