

Masterarbeit

MODELLE FÜR WÄRMEÜBERTRAGER: ERSATZ – AUS PHYSIKALISCHEN MODELLEN

Models for heat exchangers: surrogate from physical models

Vorgelegt von

Alireza Norouzi

Matrikelnummer: 3151301

Zur Erlangung des akademischen Grades

Master of Science (M. Sc.)

Fakultät für Ingenieurwissenschaften

Institut für Energie- und Material-Prozesse

Universität Duisburg-Essen

Datum der Abgabe: 30.05.2024

Erstprüfer: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Burak Atakan

Zweitprüfer: Dr. rer. nat. Ulf Bergmann

Betreuerin: M. Sc. Alexandra Welp

Abstract

Wärmeübertrager spielen eine wesentliche Rolle bei der Entropieproduktion in Carnot-Batterien. Eine effiziente Wärmeübertragung erfordert daher die Modellierung eines physikalischen Modells für einen Doppelrohrwärmeübertrager, Ein ternäres zeotropes Gemisch aus Kohlenwasserstoffen (Propan, Isobutan und Pentan) wird aufgrund des Temperaturlgleits als Arbeitsfluid verwendet. Dies führt zu einer Verringerung der Exergieverluste beim Phasenwechsel. Die Berechnung der lokalen Wärmeübergangskoeffizienten erfordert zahlreiche Aufrufe von Stoffdaten, was ein äußerst zeitaufwendiges Verfahren ist. Diese Arbeit entwickelt ein Ersatzmodell für einen Doppelrohrwärmeübertrager mithilfe von maschinellem Lernen (ML), um die Rechenzeit zu verringern. Ein Multiple-Layer-Perzeptron (MLP) Regressions-Modell wird verwendet, um die spezifische Enthalpie und den Druck des Arbeits- und Sekundärfluids am Austritt des Wärmeübertragers bei beliebiger Länge und Randbedingung am Eintritt vorherzusagen. Das Ziel ist eine hohe Vorhersagegenauigkeit unter Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze zu erreichen. Der Gesamtdatensatz für das Training und Testing des MLP-Modells wird zunächst durch die Lösung der Differentialgleichungen für Druckverlust und Energiebilanz in einem Kontrollvolumen im Wärmeübertrager generiert. Ein Datenerzeugungsalgorithmus verteilt die Lösungen der Differentialgleichungen auf verschiedene Anfangspunkte und Rohrlängen. Mithilfe des Sobol-Sampling-Algorithmus wird ein großer homogener Parameterraum erzeugt, der verschiedene Eintrittsdrücke, Zusammensetzungen des Arbeitsfluids und Massenströme beider Fluide bei verschiedenen Kombinationen der Rohrdurchmesser umfasst. Die Simulationsergebnisse ergeben einen Gesamtdatensatz von 2,2 Millionen Datenpunkten, die mittels der Holdout-Methode in Trainings- (80 %), Test- (20 %) aufgeteilt und mit einer MinMax-Skalierung zwischen 0 und 1 normalisiert werden. Das Training erfolgt mit dem Adam-Optimierer und der MSE-Verlustfunktion, wobei L2-Regularisierung, Early Stopping und Batch Training Überanpassungen verhindern. Die Hyperparameter des Modells werden im Rahmen einer Coarse-to-Fine-Studie optimiert und das beste Modell wird mit dem Testdatensatz validiert. Dies ergibt eine RMSE von 1,82 kJ/kg für die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids und 1,25 kPa für den Druck des Arbeitsfluids. Die Abweichung bei der Berechnung des ersten Hauptsatzes beträgt 38,44 W, und beim Entropieproduktionsstrom liegt sie bei $10^{-4} \frac{\text{kW}}{\text{K}}$. Das MLP zeigt dazu eine ausreichende Genauigkeit zur Interpolation und Extrapolation außerhalb den Trainingsdaten. Eine weitere Analyse zeigt, dass ab 50 % des Gesamtdatensatzes keine signifikante Verbesserung der Modellleistung oder der Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze erfolgt. Eine Break-Even-Analyse vergleicht die Rechenzeiten des MLP-Modells mit dem physikalischen Modell und zeigt, dass das MLP-Modell ab einer Simulationssanzahl von 2047 vorteilhaft ist.

Versicherung an Eides Statt

Ich _____
Name, Vorname, Matrikel-Nr.

versichere an Eides statt durch meine untenstehende Unterschrift,

- dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig ohne fremde Hilfe angefertigt habe und
- dass ich alle Stellen, die wörtlich oder annähernd wörtlich aus fremden Quellen entnommen sind, entsprechend als Zitate gekennzeichnet habe und
- dass ich ausschließlich die angegebenen Quellen (Literatur, Online-Ressourcen, sonstige Hilfsmittel) verwendet habe.

Ich versichere an Eides Statt, dass ich die vorgenannten Angaben nach bestem Wissen und Gewissen gemacht habe und dass die Angaben der Wahrheit entsprechen und ich nichts verschwiegen habe.

Die Strafbarkeit einer falschen eidesstattlichen Versicherung ist mir bekannt, namentlich die Strafandrohung gemäß § 156 StGB bis zu drei Jahren Freiheitsstrafe oder Geldstrafe bei vorsätzlicher Begehung der Tat bzw. § 161 Abs. 1 StGB bis zu einem Jahr Freiheitsstrafe oder Geldstrafe bei fahrlässiger Begehung.

Ort, Datum

Unterschrift

Erklärung von KI und KI-unterstützten Technologien im Schreibprozess

Während der Erstellung dieser Arbeit wurden Chat-GPT 3.5 [1], Gemini [2] und Scribbr [3] zur sprachlichen Überarbeitung, zur Behebung grammatischer Fehler, zur wissenschaftlichen Wortwahl, zur Übersetzung und für Strukturierungsvorschläge verwendet. Nach der Nutzung dieser Tools/Dienste habe ich den Inhalt überprüft und bearbeitet und übernehme die volle Verantwortung für den Inhalt der Masterarbeit.

Unterschrift

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1-1
2	Stand der Forschung	2-4
3	Theoretische Grundlagen.....	3-7
3.1	Doppelrohr-Wärmeübertrager	3-7
3.1	Wärmeübertragungs-Mechanismen.....	3-8
3.2	Energiebilanz im Wärmeübertrager	3-13
3.3	Druckverlust im Wärmeübertrager.....	3-15
3.4	Entropieproduktion im Wärmeübertrager	3-18
3.5	Kondensation des Arbeitsfluids	3-19
3.6	Maschinelles Lernen	3-21
3.6.1	Training	3-24
3.6.2	Bewertung.....	3-25
3.6.3	Hyperparamter Optimierung (HPO).....	3-27
4	Methodik.....	4-30
4.1	Softwarepakete	4-30
4.2	Vorgehensplan	4-31
4.3	Entwicklung des physikalischen Modells	4-32
4.4	Parameterraumerzeugung.....	4-38
4.5	Datenerzeugung.....	4-40
4.6	Datenvorbereitung für das MLP-Modell	4-42
4.7	Entwicklung des MLP-Modells	4-43
4.8	Hyperparameteroptimierung.....	4-44
4.9	Bewertung des MLP-Modells	4-46
4.10	Datensatzgröße-Analyse	4-49
4.11	Break-Even-Analyse	4-49
5	Ergebnisse und Diskussion	5-51

5.1	Gesamtdatensatz	5-51
5.2	Validierung des MLP-Modells	5-52
5.2.1	Herausforderungen.....	5-55
5.2.2	Verbesserungs-Strategien.....	5-56
5.3	Thermodynamische Bewertung des MLP-Modells.....	5-57
5.3.1	Bewertung der Einhaltung des ersten Hauptsatzes.....	5-57
5.3.2	Bewertung der Einhaltung des zweiten Hauptsatzes	5-58
5.4	Interpolation-Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells.....	5-59
5.5	Feature-Importance-Analyse	5-68
5.6	Analyse der Datensatzgröße	5-71
5.6.1	Validierung	5-71
5.6.2	Thermodynamische Bewertung: Ersten Hauptsatz	5-71
5.6.3	Thermodynamische Bewertung: Zweiten Hauptsatz.....	5-74
5.7	Break-Even-Analyse	5-75
6	Fazit und Ausblick	6-78
7	Literatur	Error! Bookmark not defined.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Temperaturverläufe, in einem Doppelrohr-Wärmeübertrager. Arbeitfluid:T1, Sekundärfluid:T2, T' : Eintrittstemperatur, T'' : Austrittstemperatur, (b) Gegenstromführung, (a) Gleichstromführung (nach [27, S. 46]).....	3-8
Abbildung 2: Energiebilanz in einem Rohrabschnitt, dQ ist zugeführte Wärme in das System, Enthalpie H (nach [27, S. 14]).	3-14
Abbildung 3: Phasendiagramm für Propan/Isobutan mit Gleichgewicht zwischen Flüssig- und Dampfphase. (erstellt mit Refprop [44], nach [42, S. 259]).....	3-20
Abbildung 4: Temperaturverlauf von Arbeits- und Sekundärfluid in einer Gegenstrom- Wärmeübertrager, linkes Diagramm (a) mit Reinstoff, rechtes Diagramm (b) mit zeotropem Gemisch und Temperaturgleit. (nach [43]).....	3-21
Abbildung 5: (a): Darstellung eines biologischen Neurons. (b): Darstellung eines künstlichen Neurons nach dem mathematischen Modell von McCulloch und Pitts. (nach [48])	3-23
Abbildung 6: Architektur eines MLPs (nach [48]).	3-24
Abbildung 7: Drei Fälle von Lernkurven. Das Diagramm zeigt (a) eine perfekte Anpassung, (b) Überanpassung und (c) Unteranpassung. (nach [52])	3-27
Abbildung 8: Vorgehensplan der Arbeit.	4-31
Abbildung 9: Ablaufschemas des physikalischen Modells inklusiv die Nachbearbeitung. Weiße Blöcke repräsentieren die Eingangswerte, graue Blöcke: Die Bedingungen, dunkelgraue Blöcke: Die Operationen und schwarze Blöcke: Die Ergebnisse.....	4-33
Abbildung 10: Schema für Örtliche Diskretisierung der Doppelrohrwärmeübertrager und Eingaben und Ausgaben des physikalischen Modells, WF: Arbeitsfluid , SF: Sekundärfluid.	4-35
Abbildung 11: Schema des Datenerzeugungsalgorithmus, Arbeitsfluid ist In Rot und Sekundärfluid im Grün dargestellt. Δx entspricht Elementgröße Rohrlänge, Der Zähler i der Änderung der Länge, Zähler j der Änderung des Anfangsorte, n dem Anzahl der Elemente.	4-41
Abbildung 12: Vorgehensplan zur Entwicklung des Ersatzmodells (MPL Modell), Hyperparameteroptimierung und Validierung.	4-44
Abbildung 13: Verteilung der spezifischen Enthalpie von Eingangswerten und Zielwerten im Gesamtdatensatz.	5-51
Abbildung 14: Bewertung des besten MLP-Modells mit dem Testdatensatz , x-Achse :spezifische Enthalpie und Temperatur von Arbeitsfluid am Austritt aus dem physikalischen Modell , y-Achse: vorhergesagte spezifische Enthalpie aus dem MLP-Modell und berechnete Temperatur daraus. ..	5-53
Abbildung 15: Darstellung des Ersten Hauptsatzes im Wärmeübertrager durch Verwendung des MLP- Modells.	5-57

Abbildung 16: Darstellung des Zweiten Hauptsatzes im Wärmeübertrager durch Verwendung des MLP-Modells.....	5-59
Abbildung 17: Vergleich zwischen physikalischem Modell und MLP-Modell für die Ausführung einer Simulation mit gegebenen Eingangswerten. Die Kästen zeigen die Eingabewerte und Fehlerkriterien.	5-61
Abbildung 18: Szenario 2: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids.....	5-64
Abbildung 19: Szenario 4: Verlauf von h_{wf} bei Extrapolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids,.....	5-66
Abbildung 20: Feature-Importance Analyse auf das MLP-Modell unter Berücksichtigung des Pentanmolenbruchs in Modelleingangswerten.....	5-68
Abbildung 21: Feature-Importance Analyse auf die MLP-Modell ohne Molenbruch von Pentan x_c als Eingangswert.....	5-69
Abbildung 22: Einfluss der Datensatzgröße auf den mittleren relativen Fehler (MRE) durch Validierung.....	5-71
Abbildung 23: Auswirkung von Datensatzgröße auf ersten Hauptsatz.....	5-73
Abbildung 24: Auswirkung von Datensatzgröße auf zweiten Hauptsatz.....	5-74
Abbildung 25: Zeitliche Analyse der MLP-Modell gegen die physikalisches Modell im Rahmen einer Break-Even –Analyse.....	5-76
Abbildung 26 : Verteilung des Gesamten Datensatzes, enthält Druck und Massenström beider Fluide, spezifische Enthalpie des Sekundärfluids.	A-1
Abbildung 27 : Verteilung des Gesamten Datensatzes, eenthält Zusammensetzungen des Arbeitsfluids in den Eingangswerten.	A-2
Abbildung 28 : Bewertungs des besten MPL-Modells mit dem Testdatensatz , X-Achse :spezifische Enthalpie und Temperatur von Sekundärfluid am Austritt aus Zielwerte , Y-Achse: vohergesagte spezifische Enthalpie aus dem MLP-Modell und berechnete Temperatur daraus.....	A-3
Abbildung 29 : Bewertungs des besten MPL-Modells mit dem Testdatensatz , X-Achse :Druck der beiden Fluiden aus physikalischen Modell, Y-Achse: vohergesagte Druck der beiden Fluiden aus dem MLP-Modell.	A-4
Abbildung 30 : Bewertungs des besten MPL-Modells ohne x_c mit dem Testdatensatz , X-Achse :spezifische Enthalpie der beiden Fluiden aus physikalischen Modell, Y-Achse: vohergesagte spezifische Enthalpie der beiden Fluiden aus dem MLP-Modell.	A-5
Abbildung 31 : Thermodynamische Bewertungs des besten MPL-Modells ohne x_c	A-6

Abbildung 32: Szenario 2: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids.....	A-7
Abbildung 33: Szenario 4 : Verlauf von h_{wf} bei Extrapolation durch Änderung des Eingangsdruck des Arbeitsfluids,.....	A-7

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Verwendete Python Bibliotheken und deren Anwendungen in der Studie.....	4-31
Tabelle 2: Die untersuchten Durchmesser wurden als Eingangswerte für die Erzeugung des Parameterraums verwendet.....	4-39
Tabelle 3: Struktur der Eingaben und Zielwertdatensatz, mit zwei Datenpunkten als Beispiel.....	4-42
Tabelle 4: Verwendeter Hyperparameterraum der Zufallssuche für Hyperparameteroptimierung die MLP-Model. Die besten Parameter sind in festschrift dargestellt.....	4-46
Tabelle 5: Generalisierungsfehler und thermodynamische Bewertung des MLP-Modells	5-59
Tabelle 6: Zusammenfassung von Interpolation- und Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells durch Variation jeder einzelnen Eingangsparametern, Exakt scenario ist als Exemplar dargestellt, Jede Spalte entpricht die Änderung der Parameter im Vergleich zum Exakt-Scenario.....	5-67
Tabelle 7: Vergleich der Leistung des MLP-Modells mit x_c und ohne x_c in den Eingabewerten.	5-70

Abkürzungsverzeichnis

CNN	Convolutional Neural Network
CV	Cross Validation (Kreuzvalidierung)
EE	erneuerbare Energien
HCs	Hydrocarbons (Kohlenwasserstoffe)
HPO	Hyperparameteroptimierung
KI	Künstliche Intelligenz
KNN	Künstliches neuronales Netzwerk
MAE	Mean Absolute Error (mittlerer absoluter Fehler)
ML	Maschinelles Lernen
MLP	Multilayer Perceptron (Mehrlagiges Perzepron)
MRE	Mean Relative Error (mittlerer prozentualer Fehler)
MSE	Mean Squared Error (Mittlere quadratische Abweichung)
ORC	Organic Rankine Cycle
PINN	physikalisch informiertes neuronales Netzwerk
RMSE	Root Mean Squared Error (Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung)
RNN	Recurrent Neural Networks
SF	Secondary Fluid (Sekundärfluid)
SGD	Stochastic gradient descent
WF	Working Fluid (Arbeitsfluid)

Formelzeichenverzeichnis

Symbol	Bezeichnung	Einheit
A	Fläche	m^2
A_m	Mantelfläche	m^2
c	Geschwindigkeit	m/s
c_p	Isobare Wärmekapazität	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
d	Durchmesser	m
d_h	Hydraulischer Durchmesser	m
Fr	Froude-Zahl	—
g	Erdbeschleunigung	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$
h	Spezifische Enthalpie	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
\dot{H}	Enthalpiestrom	W
L	Länge	m
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
Nu_D	Nußelt-Zahl	—
p	Druck	Pa
Pr	Prandtl-Zahl	—
\dot{Q}	Wärmestrom	W
\dot{q}	Wärmestromdichte	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$
R_{ges}	gesamter Wärmewiderstand	$\frac{\text{K}}{\text{W}}$
Re	Reynolds-Zahl	—
r	Radius	m
\dot{S}_{irr}	Entropieproduktionsstrom	$\frac{\text{W}}{\text{K}}$
s	Spezifische Entropie	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$

S	Carnot-Batterie	Mm
T	Temperatur	K, °C
u	Geschwindigkeit	m/s
U	Wärmedurchgangskoeffizient	$\frac{W}{m \cdot K}$
We	Weber-Zahl	—
x	Ort	m
x	Dampfgehalt	—
x_A	Stoffmengenanteil von Propan	$\frac{\text{mol}_{\text{Propan}}}{\text{mol}_{\text{gesamt}}}$
x_B	Stoffmengenanteil von Isobutan	$\frac{\text{mol}_{\text{Isobutan}}}{\text{mol}_{\text{gesamt}}}$
x_C	Stoffmengenanteil von Pentan	$\frac{\text{mol}_{\text{Pentan}}}{\text{mol}_{\text{gesamt}}}$
z	Geodäische Höhe	m
Z	Zusammensetzung	—
α	Wärmeübergangskoeffizient	$\frac{W}{m^2 \cdot K}$
Δp	Druckdifferenz, Druckverlust	Pa, bar
Δx	Elementslänge	m
η	Kinematische Viskosität	Pa.s
ϵ	Rauigkeit	mm
λ	Wärmeleitfähigkeit	$W/m \cdot K$
ν	Dynamische Viskosität	m^2/s
σ	Oberflächenspannung	J/m^2
ξ	Darcy-Rohrreibungszahl	—

Indizes

<i>a</i>	Außen
<i>aus</i>	Austritt
<i>ein</i>	Eintritt
<i>eq</i>	äquivalent
<i>f</i>	Fluid
<i>g</i>	Gasphase
<i>H</i>	homogen
<i>i</i>	Innen
<i>l</i>	Flüssigphase
<i>m</i>	Mittel
<i>q</i>	Querschnitt
<i>s</i>	Oberfläche
<i>sf</i>	Sekundärfluid
<i>wf</i>	Arbeitsfluid

1 Einleitung

Hintergrund

Klimawandel stellt eine existenzielle Bedrohung für die Welt dar [4]. Die durchschnittliche globale Temperatur der Erde im Februar 2024 zeigt einen Anstieg von $0,68^{\circ}\text{C}$ im Vergleich zu den letzten Jahrzehnten und $1,56^{\circ}\text{C}$ zu vor der Industrialisierung [5]. Anthropogene Treibhausgasemissionen wie CO_2 spielen dabei eine Hauptrolle [6]. Aus diesem Grund hat Europa im Rahmen des Europäischen Grünen Deals das Ziel bis 2050 keine Netto-Treibhausgase auszustoßen [4]. In Deutschland ist die Energiewirtschaft die Hauptquelle für Treibhausgasemissionen [7]. Als Reaktion darauf hat Deutschland das Ziel gesetzt, bis 2030 mindestens 80 % seines Stroms aus erneuerbaren Energien (EE) zu erzeugen [8]. Allerdings ist die Verfügbarkeit der erneuerbaren Energien aufgrund der klimatischen Bedingungen sehr fluktuierend [9]. Diese Schwankungen können zu Engpässen in der Stromversorgung führen, insbesondere wenn die Nachfrage nach Strom hoch ist [4]. Die Speichersysteme können als Puffer dienen, um Angebot und Nachfrage von Strom auszugleichen. Die Thermische Energiespeicher wie Carnot-Batterien werden als alternative Speicherkonzepte erforscht. Sie bieten trotz ihres niedrigeren Wirkungsgrads im Vergleich zu konventionellen elektrochemischen Batterien potenzielle Vorteile in Bezug auf Kosteneffizienz, Langzeitspeicherung und Langlebigkeit [9, 10, 11]. In einer Carnot-Batterie wird elektrische Energie bei der Aufladung durch eine Wärmepumpe in Wärme umgewandelt und in einem Medium wie Wasser, einer Salzschnelze oder Stein gespeichert, um bei der Entladung durch einen Organic Rankine Cycle (ORC) [11] wieder in elektrische Energie umgewandelt zu werden [12]. Der Gesamtprozess umfasst Verdichter, Pumpen, Expander, Turbinen und Wärmeübertrager [12]. Bei der Auslegung und Optimierung von Carnot-Batterien ist eine effiziente Wärmeübertragung entscheidend, um den Gesamtwirkungsgrad zu verbessern [12]. Die Auswahl des Arbeitsfluids spielt dabei eine wesentliche Rolle. Aufgrund der klimaschädlichen Eigenschaften konventioneller Kältemittel gewinnen alternative Kältemittel mit geringeren Treibhauspotenzialen an Bedeutung. Kohlenwasserstoffe (HC) werden dabei als neue Generation von natürlichen Kältemitteln betrachtet [13]. Insbesondere zeotrope Gemische als Arbeitsfluid sind vorteilhaft, da der Temperaturlauf während des Phasenwechsels den Exergieverlust verringert, was zu einer Verbesserung des Gesamtwirkungsgrads führt [14]. Da die Wärmeübertragung einen wesentlichen Ursprung für den Exergieverlust im Gesamtprozess darstellt [15] und die Prozessbedingungen maßgeblich vom Arbeitsfluid abhängen, besteht ein Bedarf an der Modellierung von Wärmeübertragern mit ausreichender Genauigkeit mithilfe eines physikalischen Modells. Das physikalische Modell löst Differentialgleichungen, die sich aus der Energiebilanz und dem Druckverlust im Wärmeübertrager ergeben. Hierbei ist die

Berechnung der lokalen Wärmeübergangskoeffizienten und lokalen Stoffdaten erforderlich. Die Berechnung der lokalen Stoffdaten ist äußerst zeitaufwendig.

Die vorliegende Masterarbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Ersatzmodells mithilfe von maschinellem Lernen, um die Rechenzeit bei Auslegungs- und Optimierungsverfahren zu verringern. Maschinelles Lernen sind datengesteuerte Algorithmen, die es Computern ermöglichen, ohne explizite Programmierung komplexe Muster in den Daten zu erlernen und Vorhersagen für neue Daten zu treffen [16, S. 306-307, 17]. Sie sind besonders vorteilhaft, wenn zahlreiche Einflussfaktoren in einer komplexen Analyse beteiligt sind und es nicht zielführend ist, den Einfluss jedes einzelnen Faktors mit traditionellen regelbasierten Modellen zu untersuchen. Es gibt verschiedene Arten von maschinellem Lernen, die für unterschiedliche Aufgaben geeignet sind. [16, S. 306-307]

In vorherigen Arbeiten hat sich das MLP als überlegen für dieses Problem erwiesen [18]. Das MLP gehört zur Gruppe der Künstlichen neuronalen Netzwerke (KNN) und besteht aus Schichten von miteinander verbundenen Neuronen, die eine komplexe Netzwerkstruktur bilden. KNN-Regressionsmodelle beruhen auf dem Prinzip der Datenanpassung, wobei die Verbindungen zwischen den Neuronen während des Trainings an die vorhandenen Daten angepasst werden. [16, S. 308-312]

Mit ausreichend analytischen Datenpunkten, die aus dem physikalischen Modell gewonnen werden, können Trainingsdaten für das MLP-Modell generiert werden. Durch sorgfältige Auswahl der Architektur des MLP-Modells sowie Trainings- und Hyperparameteroptimierungsmethoden wird ein Ersatzmodell entwickelt, das eine nahezu genaue Vorhersage neuer Datenpunkte im Vergleich zur Berechnung mit dem physikalischen Modell ermöglicht und die thermodynamischen Gesetze einhält.

Zielsetzung der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Doppelrohrwärmeübertrager im Gegenstrom mit einem physikalischen Modell in Python ortsaufgelöst modelliert, um die spezifische Enthalpie und den Druck des Arbeitsfluids und Sekundärfluids zu bestimmen. Hierbei wird ein ternäres Gemisch aus Propan, Isobutan und Pentan als Arbeitsfluid und Wasser als Sekundärfluid berücksichtigt. Die analytischen Daten aus dem physikalischen Modell dienen zum Training eines Multi-Layer-Perzeptron-Regressormodells. Das Ziel besteht darin, ein optimales Ersatzmodell zu entwickeln, das die spezifische Enthalpie und den Druck des Arbeitsfluids und des Sekundärfluids am Austritt über eine beliebige Länge des Wärmeübertragers mit ausreichenden Genauigkeit vorhersagen kann. Dazu

ist es erforderlich, die Konsistenz der Ergebnisse mit dem ersten und zweiten Hauptsatz der Thermodynamik zu überprüfen.

Die Qualität und Verteilung der Daten sind entscheidend für das Training eines präzisen MLP-Modells. Daher sollten die richtige Randbedingungen für die Simulationen im physikalischen Modell bestimmt werden. Hierzu gehören der Eintrittsdruck des Arbeitsfluids, die Massenströme beider Fluide, die Zusammensetzung des Arbeitsfluids, der Innendurchmesser des inneren Rohrs und der Innendurchmesser des äußeren Rohrs. Um einen gleichmäßigen Parameterraum zu erzeugen, wird der Sobol-Sampling-Algorithmus verwendet. Dies ermöglicht eine umfassende Analyse der Rahmenbedingungsintervalle und ihrer Auswirkungen auf die Enthalpie- und Druckverläufe sowie die vorhandenen Phasen des Arbeitsfluids in den Ergebnissen. Durch zahlreiche Simulationen werden ausreichend analytische Daten für das Training des MLP-Modells generiert. Es ist wichtig, die Auswirkung der einheitlichen Eingangsparameter des physikalischen Modells auf die Generalisierungsfähigkeit des MLP-Modells zu untersuchen. Das Ersatzmodell sollte in der Lage sein, einen breiten Parameterbereich von Arbeitsdruck, Arbeitsfluidzusammensetzungen und geometrischen Parametern für die Optimierung abzudecken. Zu diesem Zweck wird die Interpolations- und Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells mit Eingabeparametern außerhalb der Trainingsdaten überprüft.

Es ist wichtig, durch Hyperparameteroptimierung die besten Hyperparameter zu ermitteln, die einen ausreichend niedrigen Generalisierungsfehler gewährleisten, wobei darauf geachtet wird, dass keine Überanpassung während des Trainings auftritt. Darüber hinaus untersucht diese Arbeit die Auswirkung der Trainingsdatengröße auf die Leistung des MLP-Modells, um festzustellen, wie sich die Generalisierungsfähigkeit sowie die Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze im Verhältnis zur Datensatzgröße des MLP-Modells ändern.

Abschließend wird im Rahmen einer Break-Even-Analyse die Rechenzeit für die Entwicklung eines präzisen MLP-Modells im Vergleich zum physikalischen Modell über verschiedene Anzahl von Optimierungsschritten oder Simulationen verglichen. Dabei wird untersucht, ab welchem Punkt das MLP-Modell zeitlich vorteilhaft ist, wenn davon ausgegangen wird, dass ein neues MLP-Modell mit beliebigen Rahmenbedingungen von Anfang an trainiert werden soll und das vorhandene MLP-Modell nicht geeignet ist.

2 Stand der Forschung

Die rasanten Fortschritte in den Bereichen Data Science und Maschinelles Lernen eröffnen neue Möglichkeiten für datengetriebene Modellierung in der Prozessoptimierung. Die Anwendung von Ersatzmodellen im Ingenieurwesen, insbesondere von maschinellen Lernmodellen, hat aufgrund ihrer robusten Vorhersagefähigkeiten und schnellen Durchführung eine wichtige Bedeutung bei Forschungsarbeiten in den Ingenieurwissenschaften gewonnen. [19, 20]

Die folgende veröffentlichte Arbeit befasst sich mit dem Einsatz von maschinellem Lernen in verschiedenen Anwendungen:

Krzywanski (2019) [21] zeigt, dass der KI-Ansatz eine vielversprechende Ergänzung zu herkömmlichen Methoden der Wärmeübertragerentwicklung darstellt. Er bietet eine effektive und alternative Methode im Vergleich zu analytischen, numerischen und experimentellen Ansätzen, insbesondere bei komplexen Wärmeübertragern. In seiner Arbeit entwickelte Krzywanski eine Methode, die auf der Kombination von KNN und genetischen Algorithmen basiert, um einen Doppelrohrwärmeübertrager unter verschiedenen Betriebsbedingungen und Geometrien zu optimieren. Dabei wurden verschiedene Rohrtypen, Anordnungen von Rohrdurchgängen, Flüssigkeitsmassenströme und die Anzahl der strömenden Rohre sowie deren Einfluss auf die Vorhersagefähigkeit des neuronalen Netzwerks untersucht. Das Modell sagte die Wärmeübertragungsleistung mit hoher Genauigkeit vorher, wobei der maximale Fehler unter $\pm 3\%$ lag. Die höchste Wärmeübertragungsleistung wurde mit Turbo-EHP-Rohren und einer "unten-nach-oben"-Anordnung erzielt, was die beste thermische Energieumwandlung bot.

In der Arbeit von Benyekhlef et al. (2022) [22] wurde die Vorhersage des Widerstandes durch Verschmutzung in Wärmeübertragern mithilfe eines MLP-Modells durchgeführt. Dazu wurden 375 experimentelle Datenpunkte aus der Literatur für das Training verwendet. Die Eingangsgrößen des MLP-Modells umfassten Zeit, Volumenkonzentration, Wärmefluss, Massenstrom, Einlasstemperatur und Wärmeleitfähigkeit, während der Verschmutzungswiderstand als Ausgabegröße diente. Das Netzwerk, das 20 Neuronen in der verdeckten Schicht hatte, erzielte einen prozentualen mittleren absoluten Fehler von 2,57 % und einen R²-Wert von 0,99812.

Konvektion ist ein äußerst komplexes Problem, für das es empirisch abgeleitete Korrelationen gibt, die von den Rahmenbedingungen der Strömung und der Geometrie des Wärmeübertragers abhängen. Die Arbeit von Kwon, Ejaz et al. (2020) [23] zeigt den Vorteil von maschinellen Lernalgorithmen (ML) zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten für ein nichtlineares, höhergeordnetes Wärmeübertragungsproblem. In dieser Studie wurde die Konvektion in einem

Kanal während der Abkühlung mit variabler Rippen-Rauigkeit für 243 verschiedene Anordnungen von Rippen untersucht. Numerische Simulationen mit einem physikalischen Modell wurden zur Datenerzeugung für das Training eines Random-Forest-Modells verwendet. Das ML-Modell sagte den Wärmeübergangskoeffizienten im Vergleich zu den Zielwerten mit hoher Genauigkeit ($R^2 > 0,966$) für den Testdatensatz vorher.

Die Arbeit von Donnelly et al. (2024) [24] befasst sich mit der Entwicklung eines neuartigen, physikinformierten neuronalen Netzes (PINN) als Ersatzmodell für hydrodynamische Simulatoren, die auf den Flachwassergleichungen basieren. Im Rahmen dieser Studie wurde ein Convolutional Neural Network (CNN) zur Modellierung der Massenerhaltung in die Netzwerkstruktur integriert. Die Daten wurden durch die Anwendung auf ein hochauflösendes Binnenhochwassermodell und ein großräumiges regionales Gezeitenmodell generiert. Diese Studie zeigt, dass das PINN-Modell eine Leistungsverbesserung von 25 % im Vergleich zu einem herkömmlichen CNN-Netzwerk erzielt, was die Vorteile der Integration physikalischer Regeln in die Fehlerfunktion während des Trainings verdeutlicht.

Das breite Interesse und die vielfältigen Möglichkeiten dieses Ansatzes werden durch die verschiedenen Studien zum Einsatz von maschinellen Lernmethoden im Bereich thermischer Systeme deutlich [18]. Dabei erfolgt eine Untersuchung verschiedener Prozessgrößen von Wärmeübertragern, wie zum Beispiel der Wärmeübergangskoeffizient, die Reibungsfaktoren oder der übertragene Wärmestrom [25]. Neben der Genauigkeit ist auch die Geschwindigkeit der Vorhersage ein bedeutender Aspekt dieser Untersuchungen. Diese kann den Optimierungsprozess erheblich verbessern und in der Entwicklungs- und Auslegungsphase neuer Systeme frühzeitige Entscheidungen unterstützen [26].

Die vorliegende Arbeit ist eine Erweiterung der Masterarbeit von M. Reese (2023) [18]. Reese entwickelte verschiedene Ersatzmodelle für einen Doppelrohr-Wärmeübertrager im Gegenstrom, wobei er ein binäres zeotropes Gemisch aus Propan und Butan als Arbeitsfluid verwendete. Um den Einfluss jedes Modells auf die Vorhersagegenauigkeit der Ausgangsparameter zu untersuchen, erstellte er ein physikalisches Modell des Wärmeübertragers und generierte Trainingsdatensätze für die Ersatzmodelle in verschiedenen Phasen wie überhitzter Dampfphase, Nassdampfgebiet und unterkühlter Flüssigkeitsphase. In seiner Arbeit wurden die Regressionsmodelle Support Vector Machines, k-nächste-Nachbarn-Regression, baumbasierten Ensembleverfahren (Random Forests) und MLP untersucht. Er konnte nachweisen, dass das MLP-Modell am besten für die gegebene Problemstellung geeignet ist. Mit dem MLP-Modell konnte die benötigte Länge des Wärmeübertragers mit einem RMSE-Fehler von 0,0661 m sowie der Entropieproduktionsstrom mit

einem RMSE-Fehler von 0,0159 W/K vorhergesagt werden. Die vorliegende Arbeit hat das ursprüngliche Konzept des physikalischen Modells und Ersatzmodells von Reese weiterentwickelt. Anstatt drei verschiedene MLP-Modelle basierend auf unterschiedlichen Arbeitsfluidphasen zu verwenden, wurde nun ein einzelnes MLP-Modell trainiert. Diese Vereinigung der MLP-Modelle wurde in Reese's Arbeit als potenzielle Verbesserung vorgeschlagen und im Rahmen dieser Arbeit umgesetzt. Darüber hinaus werden statt der Rohrlänge und des Entropieproduktionsstroms nun die spezifische Enthalpie und der Druck am Austritt in beiden Fluiden mit gegebenen Rahmenbedingungen am Eintritt und beliebigen Längen vorhergesagt. Die Arbeitsfluide wurden von einem binären auf ein ternäres Gemisch aus Propan, Isobutan und Pentan erweitert. Der Datensatz wurde von 25.248 auf 2,2 Millionen Datenpunkte vergrößert. Zudem wurde ein breiterer Hyperparameterraum bei der Hyperparameteroptimierung untersucht. Diese Änderungen führten zu einer verbesserten Vorhersagegenauigkeit des MLP-Modells, mit einer Reduktion des RMSE von 0,0150 W/K auf 10^{-4} kW/K für die Entropieproduktion.

3 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel behandelt die theoretischen Grundlagen der Arbeit. Zunächst wird der untersuchte Wärmeübertrager sowie die beteiligten Wärmeübertragungsmechanismen detailliert beschrieben. Dabei werden die Wärmeübergangskoeffizienten anhand empirischer Korrelationen für die Nusselt-Zahl sowohl im Einzelphasen- als auch im Nassdampfbereich berechnet und zur Bestimmung des Wärmedurchgangskoeffizienten zwischen Arbeitsfluid und Sekundärfluid verwendet.

Ein Rohrabschnitt wird als Kontrollvolumen untersucht, wobei durch die Energiebilanz die Beziehung zwischen Enthalpieänderung und übertragener Wärme vom Arbeitsfluid zum Sekundärfluid bestimmt wird. Dies führt zu einer Differentialgleichung, die den örtlichen Verlauf der spezifischen Enthalpie entlang des Rohrs beschreibt. Darüber hinaus wird anhand der Gleichung für den Druckverlust im Einzelphasenbereich und den Korrelation für den Druckverlust im Zweiphasengebiet eine Differentialgleichung zur Beschreibung des örtlichen Druckverlusts im Wärmeübertrager hergeleitet. Diese Differentialgleichungen dienen als fundamentale Basis für die Modellierung des physikalischen Modells. Des Weiteren wird in diesem Kapitel die Kondensation des Arbeitsfluids als zeotropes Gemisch näher untersucht, um besondere Eigenschaften wie den Temperaturgleit zu verdeutlichen.

Abschließend werden die Grundlagen für die Entwicklung des Ersatzmodells mithilfe von maschinellen Lernalgorithmen beschrieben, insbesondere der Aufbau und die Funktion künstlicher neuronaler Netze, Lernparadigmen und Trainingsverfahren sowie die Methoden zur Bewertung und Optimierung des Ersatzmodells. Zudem werden die thermodynamischen Hauptsätze erläutert, die zur Validierung des Ersatzmodells herangezogen werden.

3.1 Doppelrohr-Wärmeübertrager

Wärmeübertrager ist ein Apparat zur Übertragung der Wärme von einem Fluidstrom auf einen anderen. Die Fluidströme sind dabei räumlich getrennt, meist durch eine Rohrwand. Aufgrund der Temperaturdifferenz zwischen den Fluiden wird Wärme vom Fluid mit der höheren Temperatur auf das kältere Fluid übertragen. [27, S. 45-46]

Der übertragene Wärmestrom hängt von den thermischen und Transporteigenschaften wie Viskosität und Wärmeleitfähigkeit ab, die material- und temperaturabhängig sind. Ebenso spielt die Strömung eine Rolle, und es sind auch die thermischen und geometrischen Eigenschaften der Rohre

von Bedeutung, wie etwa ihre Wärmeleitfähigkeit, Dicke, Durchmesser und die Fläche zwischen den Rohrwänden und den Fluiden. [27]

Eine einfache Bauform eines Wärmeübertragers ist der Doppelrohr-Wärmeübertrager. Hier sind zwei Rohre in der Regel konzentrisch angeordnet. Die verschiedenen Stromführungen und Temperaturverläufe in einem Wärmeübertrager sind in der Abbildung 1 dargestellt. In diesem Wärmeübertrager strömt das Arbeitsfluid (Index 1) im Innenrohr, während das Sekundärfluid (Index 2) im ringförmigen Raum zwischen dem Innen- und dem Mantelrohr strömt. Es sind zwei Stromführungen möglich: der Gegenstrom (b), bei dem die beiden Fluide in entgegengesetzte Richtungen strömen, und der Gleichstrom (a). Der Gegenstrom-Wärmeübertrager ist dem Gleichstrom-Wärmeübertrager überlegen, weil er effizienter Wärme überträgt. Dabei können Austrittstemperaturen erreicht werden, die im Gleichstrombetrieb nicht möglich sind, und er benötigt weniger Fläche für die gleiche Wärmeleistung. [27, S. 46-47]

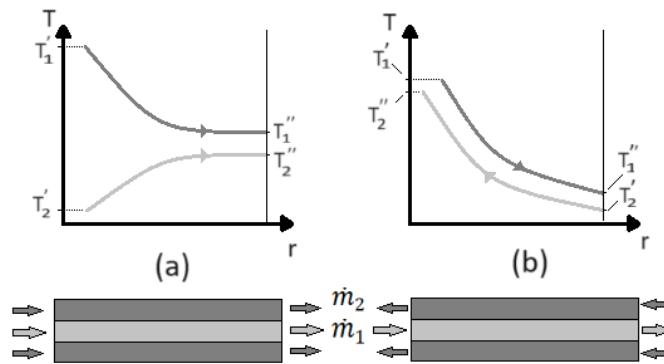


Abbildung 1: Temperaturverläufe, in einem Doppelrohr-Wärmeübertrager. Arbeitfluid:T1, Sekundärfluid:T2, T': Eintrittstemperatur, T'': Austrittstemperatur, (b) Gegenstromführung, (a) Gleichstromführung (nach [27, S. 46]).

3.1 Wärmeübertragungs-Mechanismen

In einem Wärmeübertrager erfolgt die Wärmeübertragung zunächst durch das mit der höheren Temperatur strömende Fluid an der Rohrwoberfläche, was als erzwungene Konvektion bezeichnet wird. Anschließend erfolgt die Wärmeübertragung aufgrund der Temperaturgradienten zwischen der inneren und äußeren Wandoberfläche, was zur Erwärmung der äußeren Wandoberfläche führt. Diese Art der Wärmeübertragung in der Rohrwand wird als Wärmeleitung bezeichnet. Die Temperaturdifferenz treibt einen weiteren erzwungenen Konvektionswärmeübergang zwischen der äußeren Wand und der Sekundärflüssigkeit. Da die äußere Wand des Wärmeübertragers in der Regel eine sehr gute Isolierung aufweist, kann die Wärmeübertragung an die Umgebung vernachlässigt werden. [27, S. 45-46]

Wärmeleitung im Rohr

Die Wärmeleitung in der Rohrwand erfolgt durch den Energietransport zwischen den Festkörpermolekülen aufgrund der Temperaturdifferenz zwischen der inneren und äußeren Rohrwand [28, S. 4]. Eine Beziehung für die Wärmeleitung in Rohren wird durch das Fourier'sche Gesetz in zylindrischen Koordinaten hergeleitet, indem die Integration in radialer Richtung durchgeführt wird. Die resultierende Gleichung (1) beschreibt die Wärmeleitung in der Rohrwand [28, S. 25].

$$\dot{Q}_{WL} = \lambda \frac{2\pi L}{\ln\left(\frac{r_a}{r_i}\right)} (T_{s,i} - T_{s,a}) \quad (1)$$

Hierbei entspricht \dot{Q}_{WL} dem Wärmestrom durch Wärmeleitung, λ der Wärmeleitfähigkeit, L der Rohrlänge, r dem Rohrradius und T_s der Oberflächentemperatur.

Erzwungene Konvektion

Der Wärmeübergang bei erzwungener Konvektion wird durch Temperaturunterschiede und die Strömung bestimmt, die durch eine äußere Druckdifferenz z. B. durch Pumpen oder Verdichter aufrechterhalten werden. Wenn man ein Fluid mit der mittleren Temperatur T_m betrachtet, kann der Wärmestrom durch erzwungene Konvektion mit der Gleichung (2) berechnet werden. Hierbei ist die Mantelfläche des Rohres A und der Wärmeübergangskoeffizient α . [28, S. 79]

$$\dot{Q}_{konv} = \alpha A (T_s - T_m) \quad (2)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient ist eine Funktion des Temperaturfelds im Fluid, der Wärmeleitfähigkeit des Fluids sowie der Strömung. In unmittelbarer Nähe der Wände bildet sich eine Temperaturgrenzschicht, die sich in ihrer Charakteristik von der Geschwindigkeitsgrenzschicht unterscheidet. In dieser Grenzschicht erfolgt eine Änderung der Temperatur von der Wandtemperatur zur Fluidtemperatur. [28, S. 79-80]

Anhand der Energiebilanz an der Wandoberfläche und des dimensionslosen Temperaturfeldes wird eine wichtige dimensionslose Kennzahl, die Nusseltzahl (Nu_D), hergeleitet. Sie beschreibt das Verhältnis der konvektiven Wärmeübertragung an der Wandoberfläche zur reinen Wärmeleitung durch eine ruhende Schicht des Fluids. Gleichung (3) stellt den Zusammenhang zwischen der Nusseltzahl und dem Wärmeübergangskoeffizienten dar. Hierbei entspricht λ_f der Wärmeleitfähigkeit des Fluids, d dem Durchmesser des Rohrs. Die Nusseltzahl ist eine Funktion der Reynoldszahl (Re) und der Prandtlzahl (Pr). [27, S. 18-23]

$$Nu_D = \frac{\alpha d}{\lambda_f} \quad (3)$$

Die Strömungsart (laminare oder turbulente Strömung) und die Dicke der Geschwindigkeitsgrenzfläche können durch die dimensionslose Kennzahl der Reynolds-Zahl beschrieben werden. Die Reynolds-Zahl ist das Verhältnis der Trägheits- zu den Reibungskräften und wird durch die dimensionslose Navier-Stokes-Bewegungsgleichung hergeleitet. Die Reynolds-Zahl Re_D (Gleichung (4)) hängt von der charakteristischen Länge ab, wobei in durchströmten Körpern der Durchmesser d verwendet wird, sowie von der kinematischen Viskosität ν und der mittleren Geschwindigkeit der Strömung u . [28, S. 82-83]

$$Re_D = \frac{u d}{\nu} \quad (4)$$

Durch Anwendung der Kontinuitätsgleichung (Gleichung (5)) im Rohr kann die mittlere Geschwindigkeit berechnet werden. Dabei steht \dot{m} für den Massenstrom des Fluids, ρ für die Dichte des Fluids und A_q für den entsprechenden Querschnitt im Innenrohr.

$$u = \frac{\dot{m}}{\rho A_q} \quad (5)$$

mit:

$$A_q = \frac{\pi}{4} d^2$$

Die Prandtlzahl ist das Verhältnis der Dicken der laminaren Strömungs- und Temperaturgrenzschichten. Die Prandtlzahl ist temperaturabhängig und wird durch Formel (6) berechnet. Dabei stehen c_p für die spezifische Wärmekapazität und. [28, S. 84]

$$Pr = \frac{\rho \nu c_p}{\lambda_f} \quad (6)$$

Die Nusseltzahl wird mithilfe empirischer Korrelationen berechnet. Es gibt verschiedene Nusseltkorrelationen für verschiedene Probleme. Für eine laminar thermisch und hydrodynamisch ausgeformte Rohrströmung können das Temperatur- und Geschwindigkeitsprofil analytisch berechnet werden [27, S. 23]. In diesem Fall ergibt sich eine konstante Nusseltzahl von $Nu_D = 4,36$ [28, S. 418].

Bei turbulenten, thermisch und hydrodynamisch ausgeformten einphasigen Strömungen durch Rohre kann die Nusseltzahl mit einer guten Näherung gemäß der Korrelation von Gnielinski [29] (Gleichung (7)) berechnet werden. [30, S. 788]

$$Nu_D = \frac{\left(\frac{\xi}{8}\right)(Re_D - 1000) Pr}{1 + 12,7 \sqrt{\frac{\xi}{8}}(Pr^{\frac{2}{3}} - 1)} \left[1 + \left(\frac{d}{L}\right)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (7)$$

Die Rohreibungszahl ξ ist dabei wie folgt zu berechnen:

$$\xi = [1,8 \cdot \log(Re_D) - 1,5]^{-2} \quad (8)$$

Das äußere Rohr, durch das das Sekundärfluid strömt, bildet einen Ringspalt. Daher erfordern Nusselt-Korrelationen für Ringspalte eine zusätzliche Korrektur. In Gleichung (9) wird zunächst die Nusseltzahl unter Verwendung des hydraulischen Durchmessers des Ringspalts mit der Gnielinski-Nusselt-Korrelation berechnet (Nu_{dh}). Anschließend kann die Nusselt-Korrelation für den Ringspalt mit Gleichung (9) korrigiert werden. Dabei steht d_i für den Außendurchmesser des inneren Rohrs und $d_{a,i}$ für den Innendurchmesser des äußeren Rohrs [27, S. 458].

$$Nu_{Ringpalt} = Nu_{dh} \cdot 0,86 \left(\frac{d_{a,i}}{d_i} \right)^{0,16} \quad (9)$$

Die Nusselt-Korrelation von Gnielinski gilt nur für einphasige Fluide. Für Kondensation und den zweiphasigen Bereich kann die Nusselt-Korrelation von Cavallini und Zecchin [31] verwendet werden. Diese Korrelation erfordert die äquivalente Reynoldszahl, die gemäß Gleichung (10) berechnet wird. Dabei steht Re_l für die Reynoldszahl der Flüssigphase, Re_g für die Reynoldszahl der Gasphase, u für die Geschwindigkeit, η_l für die dynamische Viskosität der Flüssigkeit in der Flüssigphase, η_g für die dynamische Viskosität der Flüssigkeit in der Gasphase, x für den Dampfgehalt und d_i für den inneren Durchmesser des Rohrs. [31]

$$Re_{eq} = Re_g \left(\frac{\rho_f}{\rho_g} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{\eta_g}{\eta_f} \right) + Re_l \quad (10)$$

Mit:

$$Re_l = \frac{u(1-x)d_i}{\eta_l}$$

$$Re_g = \frac{uxd_i}{\eta_l}$$

Die Nusseltzahl kann nun mit der äquivalenten Reynoldszahl durch Gleichung (11) berechnet werden. Dabei ist Pr_l die Prandtlzahl der Flüssigkeit in der Flüssigphase. [31]

$$Nu_D = 0,05 Re_{eq}^{0,8} Pr_l^{0,33} \quad (11)$$

Wärmedurchgang

Der Wärmedurchgang in einem Wärmeübertrager ist der Übergang von Wärme vom heißen Fluid zum kalten Fluid durch die in den vorherigen Kapiteln erklärten Wärmeübertragungsmechanismen. Im Kondensator wird die Wärme zunächst durch Konvektion zur inneren Oberfläche der Rohrwand übertragen, dann von der inneren Oberfläche zur äußeren Oberfläche der Rohrwand durch Wärmeleitung und schließlich von der äußeren Oberfläche der Rohrwand zum Sekundärfluid. Der Wärmedurchgang in einem Doppelrohrwärmeübertrager ist in Abbildung 2 dargestellt. [27, S. 34-35]

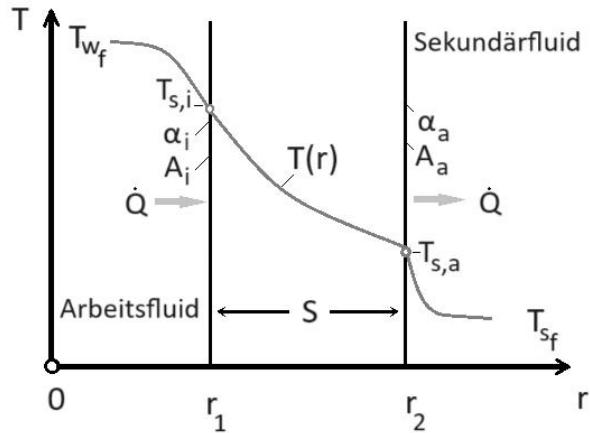


Abbildung 2 Wärmedurchgang und Temperaturverlauf im Doppelrohrwärmeübertrager in radialer Richtung. S : Wandstärke, \dot{Q} : Wärmestrom (nach [27, S. 35]). Top of Form

Der Wärmeübergang durch Konvektion zwischen dem Arbeitsfluid und der Rohrwand sowie zwischen Sekundärfluid und der Rohrwand wird gemäß Gleichung (2), während die Wärmeleitung in der Rohrwand wird gemäß Gleichung (1) berechnet. Das ergibt drei Gleichungen für \dot{Q} . Hierbei können die unbekannten Oberflächentemperaturen eliminiert werden. Das Ergebnis wird in Form von Gleichung (12) dargestellt. [27, S. 35-38]

$$\dot{Q} = UA(T_{wf} - T_{sf}) \quad (12)$$

Hierbei ist U der Wärmedurchgangskoeffizient bezogen auf eine beliebige Fläche A . Es kann die Gleichung (13) für UA basierend auf den Wärmeleitungs- und Wärmeübergangskoeffizienten abgeleitet werden. [27, S. 35-38]

$$\frac{1}{UA} = \frac{1}{\alpha_{wf} A_i} + \frac{\ln\left(\frac{d_{i,a}}{d_i}\right)}{2\pi L \lambda} + \frac{1}{\alpha_{sf} A_a} \quad (13)$$

Mit :

$$A_i = \pi d_i L$$

$$A_a = \pi d_{i,a} L$$

Mit dem bekannten UA kann der Wärmestrom nach Gleichung (12) berechnet werden. Dabei sind die Wärmeübergangskoeffizienten des Arbeitsfluids α_{wf} und des Sekundärfluids α_{sf} unbekannt und können gemäß Strömungsart und Fluidsphase mithilfe von zuvor beschriebenen Nusselt-Korrelationen berechnet werden. [27, S. 35-38]

3.2 Energiebilanz im Wärmeübertrager

Zunächst sollte die Energiebilanz im Wärmeübertrager aufgestellt werden. Der Erste Hauptsatz (Gleichung (14)) des Wärmeübertragers kann unter folgenden Annahmen vereinfacht werden: Die geodätische Höhendifferenz Δz wird vernachlässigt, ebenfalls die Änderung der kinetischen Energie Δc , und es findet keine Arbeit P im Wärmeübertrager statt. Die gesamte Wärme wird vom Arbeitsfluid zum Sekundärfluid übertragen, daher entspricht die Enthalpiestromdifferenz im Arbeitsfluid der Enthalpiestromdifferenz im Sekundärfluid. Die Gleichung (15) zeigt die Gesamtenergiebilanz [28, S. 9], welche im nächsten Kapitel zur Validierung des neuronalen Netzwerks verwendet wird, wobei h_{wf} die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids und h_{sf} die spezifische Enthalpie des Sekundärfluids ist. Die Variablen \dot{m}_{wf} und \dot{m}_{sf} stellen die Massenströme des Arbeits- bzw. Sekundärfluids dar.

$$\dot{Q} + P = \dot{m} \left[\Delta h + \frac{\Delta c^2}{2} + g\Delta z \right] \quad (14)$$

Mit: $\Delta z = 0$, $\Delta c = 0$, $P = 0$

$$\dot{m}_{wf} (h_{wf_aus} - h_{wf_in}) + \dot{m}_{sf} (h_{sf_aus} - h_{sf_in}) = 0 \quad (15)$$

Zur Herleitung der Differentialgleichungen, welche die lokalen Änderungen der Enthalpie beschreiben, wird ein Rohrabschnitt als Kontrollvolumen angenommen und die Energiebilanz wird für dieses Kontrollvolumen aufgestellt. In Abbildung 2 ist die Energiebilanz des Kontrollvolumens dargestellt, wobei der Rohrabschnitt sowohl das Arbeitsfluid als auch das Sekundärfluid beschreiben kann.

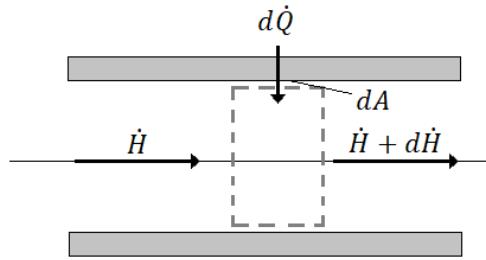


Abbildung 2: Energiebilanz in einem Rohrabschnitt, $d\dot{Q}$ ist zugeführte Wärme in das System, Enthalpie \dot{H} (nach [27, S. 14]).

Dabei wird die Wärmestrom $d\dot{Q}$ in das System hinein oder aus dem System heraus berücksichtigt, was zu einer Änderung der Enthalpie im Fluid führt. Für das Sekundärfluid tritt der Wärmestrom $d\dot{Q}$ aus dem Arbeitsfluid in das Kontrollvolumen ein, wodurch sich der Enthalpiestrom des Sekundärfluids um $d\dot{H}$ erhöht, wie in Gleichung (16) beschrieben .[27]

$$\begin{aligned} (\dot{H} + d\dot{H}) - \dot{H} &= d\dot{Q} \\ d\dot{Q} &= d\dot{H} \end{aligned} \quad (16)$$

Weiterhin kann die Wärmedurchgang gemäß Gleichung (12) unter Verwendung der bekannten Wärmeübergangskoeffizienten in Differentialform umgeschrieben werden. Gleichung (17) zeigt die lokale Wärmeübertragung zwischen Arbeitsfluid und Sekundärfluid. UdA kann mithilfe von Gleichung (13) berechnet und weiter vereinfacht werden, was Gleichung (18) ergibt. In einem nächsten Schritt wird die rechte Seite der Gleichung nach dx aufgelöst und der Term $\frac{UdA}{dx}$ als umgekehrter gesamter lokaler Wärmewiderstand $R_{ges,x}$ zusammengefasst. Durch Einsetzen von $\frac{dx}{R_{ges,x}}$ als UdA in Gleichung (17) kann die lokale Durchgangswärme im Kontrollvolumen mithilfe von

Gleichung (19) berechnet werden.

$$d\dot{Q} = UdA(T_{wf} - T_{sf}) \quad (17)$$

Mit:

$$\begin{aligned} \frac{1}{UdA} &= \frac{1}{\alpha_{wf}(\pi d_i dx)} + \frac{\ln\left(\frac{d_{i,a}}{d_i}\right)}{2\pi\lambda dx} + \frac{1}{\alpha_{sf}(\pi d_{i,a} dx)} \\ \frac{1}{R_{ges,x}} &= \frac{UdA}{dx} = \left(\frac{1}{\alpha_{wf}\pi d_i} + \frac{\ln\left(\frac{d_{i,a}}{d_i}\right)}{2\pi\lambda} + \frac{1}{\alpha_{sf}\pi d_{i,a}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (18)$$

$$d\dot{Q} = \frac{(T_{wf} - T_{sf})}{R_{ges,x}} dx \quad (19)$$

Die gesamte übertragene Wärme, die zu einer Änderung der Fluidenthalpie führt, entspricht dem Wärmedurchgang. Durch Einsetzen von Gleichung (19) in Gleichung (16) können die lokalen Differentialgleichungen für die Änderung der Enthalpie in beiden Fluiden hergeleitet werden. Gleichung (20) beschreibt den lokalen spezifischen Enthalpiegradienten im Arbeitsfluid und Gleichung (21) den lokalen spezifischen Enthalpiegradienten im Sekundärfluid.

$$\frac{dh_{wf}}{dx} = \frac{-(T_{wf} - T_{sf})}{R_{ges,x} \dot{m}_{wf}} \quad (20)$$

$$\frac{dh_{sf}}{dx} = \frac{-(T_{wf} - T_{sf})}{R_{ges,x} \dot{m}_{sf}} \quad (21)$$

3.3 Druckverlust im Wärmeübertrager

Der Druckverlust im Doppelrohrwärmeübertrager entsteht aufgrund der Reibung des Arbeitsfluids und des Sekundärfluids an der Rohrwand. Der Druckverlust im Arbeitsfluid ist besonders wichtig, da der Druck des Arbeitsfluids den Gesamtprozess maßgeblich beeinflusst. Der Druckverlust ist eine Funktion des Massenstroms, der Dichte und Viskosität des Fluids sowie des Durchmessers, der Länge und der Rauheit der Rohre. [32, S. 201-202]

Der Druckverlust in einem einphasigen Fluidstrom in einem Rohr kann mithilfe der empirischen Darcy-Weisbach-Gleichung (22) berechnet werden. Diese beschreibt den Druckverlust in einem beliebigen Rohrabschnitt mit der Länge dx und den hydraulischen Durchmessern d_h und der Darcy-Reibungszahl ζ . Im untersuchten Doppelrohrwärmeübertrager, bei dem das Arbeitsfluid im Innerenrohr strömt, ist der hydraulische Durchmesser gleich dem Innendurchmesser d_i . Beim Sekundärfluid hingegen sollte im Ringspalt anstelle des Durchmessers der hydraulische Durchmesser $d_h = d_a - d_{i,a}$ in Gleichung (22) eingesetzt werden. [33, S. 139-140]

$$\frac{dp}{dx} = \frac{\zeta}{d_h} \cdot \rho \cdot \frac{u^2}{2} \quad (22)$$

Die Darcy-Reibungszahl ζ hängt von der Reynoldszahl, der Rauigkeit ϵ und dem Durchmesser des Rohrs ab. Die Colebrook-Korrelation kann zur Berechnung der Darcy-Reibungszahl verwendet werden. [33, S. 142]

$$\frac{1}{\sqrt{\zeta}} = -2 \log \left(\frac{2,51}{Re_D \sqrt{\zeta}} + 0,27 \frac{\epsilon}{d} \right) \quad (23)$$

Druckverlust während der Kondensation

Die Gleichung (22) für den Druckverlust gilt nur im einphasigen Bereich. In Wärmeübertragern ist die Kondensation des Arbeitsfluids und somit eine zweiphasige Gemischströmung erwünscht. In diesem Fall wird ein Multiphasen-Korrelation für die Kondensation zur Berechnung des Druckverlusts betrachtet. Die Erhaltungsgleichungen für Zweiphasenströmungen sind ein Teil der Gleichungen für Mehrphasenströmungen. Ein einfacher Ansatz zur Vorhersage von Zweiphasenströmungen besteht darin, anzunehmen, dass die Phasen gründlich vermischt sind und als Einphasenströmung behandelt werden können. Dieses homogene Modell ist jedoch nicht die bevorzugte Option. Stattdessen wird im getrennten Strömungsmodell davon ausgegangen, dass die Phasen separat im Kanal fließen, wobei jede eine bestimmte Geschwindigkeit hat und einen bestimmten Anteil des Kanalquerschnitts einnimmt. Die grafische Korrelation von Lockhart-Martinelli [34] ist die bekannteste Methode dafür, während die Friedel-Korrelation [35] eine neuere Verbesserung darstellt. [36]

Zur Berechnung des Druckverlusts mit Hilfe der Friedel-Korrelation (Gleichung (24)) muss zunächst der Druckverlust in der Flüssigphase Δp_l berechnet werden. Anschließend wird der Verstärkungsfaktor ϕ_l^2 mit Hilfe von Gleichung (25) berechnet, wobei F , E und H die Modellkoeffizienten, Fr die Froudezahl und We die Weberzahl sind .[35, 37, 38]

$$\Delta p_{multiphase} = \Delta p_l \phi_l^2 \quad (24)$$

$$\phi_l^2 = E + \frac{3,24FH}{Fr^{0,0454}We^{0,035}} \quad (25)$$

Der Druckverlust in der Flüssigphase wird gemäß Gleichung (26) berechnet, wobei sind u_L die Geschwindigkeit, ρ_l die Dichte in der Flüssigphase, Re_l die Reynoldszahl in der Flüssigphase, ζ_l die Reibungszahl in Flüssigphase, die mit Gleichung (23) berechnet wird.

$$\Delta p_L = \frac{\zeta_l L}{d} \cdot \rho_L \cdot \frac{u_L^2}{2} \quad (26)$$

Mit :

$$u_l = \frac{\dot{m}}{\rho_l (\frac{\pi}{4} d^2)}$$

$$Re_l = \frac{\rho_l u_l d}{\mu_l}$$

Dann sollten die Weber- und Froudezahl für die Friedel-Korrelation berechnet werden. Dafür wird die Gasblasenbruchfläche α (Oberfläche des Gases im Verhältnis zur gesamten Rohroberfläche) für das homogene Modell gemäß Gleichung (27) berechnet, wobei x der Dampfgehalt, ρ_g die Dichte des Fluids in der Dampfphase und ρ_l die Dichte des Fluids in der Flüssigphase sind. [39]

$$\alpha = \frac{1}{1 + \left(\frac{1-x}{x}\right)\left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)} \quad (27)$$

Anschließend können mit Hilfe des Gasblasenbruchs die homogene Dichte und Geschwindigkeit des Fluids berechnet werden.

$$\rho_H = \rho_l(1 - \alpha) + \rho_g\alpha \quad (28)$$

$$u_H = \frac{\dot{m}}{\rho_H\left(\frac{\pi}{4}d^2\right)} \quad (29)$$

Die Froudezahl wird mithilfe von Gleichung (30) berechnet, wobei ρ_H die homogene Dichte und u_H die homogene Geschwindigkeit sind, und g die Erdbeschleunigung ist.

$$Fr = \frac{u_H}{\sqrt{\rho_H g}} \quad (30)$$

Die Weberzahl wird mithilfe von Gleichung (31) berechnet, wobei ρ_H die homogene Dichte und u_H die homogene Geschwindigkeit sind, und σ die Oberflächenspannung des Fluids ist.

$$We = \frac{\rho_H u_H^2 d}{\sigma} \quad (31)$$

Als nächstes werden die Friedel-Modellkoeffizienten berechnet. Der Koeffizient E wird nach Gleichung (32) berechnet, wobei x der Dampfgehalt und ζ_l die Darcy-Reibungszahl in der Flüssigphase sind. $f_{d,g}$ ist die Darcy-Reibungszahl in der Dampfphase, die durch Berechnung der Reynoldszahl in der Dampfphase mithilfe der Geschwindigkeit in der Dampfphase gemäß Gleichung (5) mit der Dichte in der Dampfphase berechnet werden kann. Mit der Reynoldszahl in der Dampfphase kann dann mit Gleichung (23) die Darcy-Reibungszahl berechnet werden. [35]

$$E = (1 - x)^2 + x^2 \left(\frac{f_{d,g}}{f_{d,l}} \right) \quad (32)$$

Der Koeffizient F wird gemäß Gleichung (33) und der Koeffizient H gemäß Gleichung (34) berechnet, wobei μ_l die dynamische Viskosität in der Flüssigphase, μ_g die dynamische Viskosität in der Dampfphase, ρ_l die Dichte in der Flüssigphase und ρ_g die Dichte in der Dampfphase sind.

$$F = x^{0,78}(1-x)^{0,224} \quad (33)$$

$$H = \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0,91} \left(\frac{\mu_g}{\mu_l}\right)^{0,19} \left(1 - \frac{\mu_g}{\mu_l}\right)^{0,7} \quad (34)$$

Schließlich wird Gleichung (26) in Gleichung (24) eingesetzt und die Kontrollvolumenlänge dx als die Rohrlänge L in die Gleichung (26) eingesetzt, was Gleichung (35) ergibt, die die differentielle Form des Druckverlusts in den Rohren im Zweiphasengebiet darstellt.

$$\frac{dp_{multiphase}}{dx} = \frac{\zeta_l}{d} \cdot \rho_l \cdot \frac{u_l^2}{2} \cdot \phi_l^2 \quad (35)$$

3.4 Entropieproduktion im Wärmeübertrager

Bislang wurde der erste Hauptsatz zur Beschreibung des Wärmeübergangs im Doppelrohr-Wärmeübertrager verwendet, sowie die Untersuchung des Druckverlusts als einer der Verlustmechanismen im Wärmeübertrager. Die thermodynamische Analyse eines thermischen Systems wie eines Wärmeübertragers kann jedoch nicht allein durch den ersten Hauptsatz vollständig beschrieben werden. Dies liegt daran, dass viele natürlichen Prozesse irreversibel sind. Das Prinzip der Irreversibilität stellt eine grundlegende Einschränkung in Bezug auf die Richtung und Durchführbarkeit von Prozessen dar. Die Irreversibilität eines Prozesses wird mithilfe des zweiten Hauptsatzes und der Zustandsgröße Entropie s (in $\frac{J}{kg \cdot K}$) quantitativ beschrieben. Viele reale thermodynamische Prozesse, wie Wärmeübertragung und Phasenwechsel, führen zur Erzeugung von Entropie. Analog zur Energiebilanz kann eine Bilanzgleichung für die Entropie (2.Hauptsatz) für ein offenes System formuliert werden (Gleichung (36)). [40, S. 102-116]

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{ein} \dot{m}_e(t) s_e(t) - \sum_{aus} \dot{m}_a(t) s_a(t) + \dot{S}_Q(t) + \dot{S}_{irr}(t) \quad (36)$$

Da das System stationär betrieben wird, beträgt $\frac{ds}{dt} = 0$. Dazu sind die äußerern Wände isoliert deswegen beträgt $\dot{S}_Q = 0$. Dadurch kann die Gleichung (36) weiter vereinfacht werden. Somit ergibt sich die Gleichung (37) zur Berechnung des Entropieproduktionsstroms. Dabei entspricht \dot{m}_{wf} dem Massenstrom des Arbeitsfluids, \dot{m}_{sf} dem Massenstrom des Sekundärfluids, s_{aus} der spezifischen Entropie des Fluids am Austritt und s_{ein} der spezifischen Entropie des Fluids beim Eintritt. [40, S. 116]

$$\dot{S}_{irr} = \dot{m}_{wf} (s_{aus}^{wf} - s_{ein}^{wf}) + \dot{m}_{sf} (s_{aus}^{sf} - s_{ein}^{sf}) \quad (37)$$

Der Entropieproduktionsstrom eine entscheidende Größe in thermodynamischen Prozessen. Während sie für reversible Prozesse null ist, ist sie für irreversible Prozesse immer positiv (Gleichung (38)). Die erzeugte Entropie stellt ein Maß für die Irreversibilität eines Vorgangs dar und erlaubt die Unterscheidung zwischen reversiblen, irreversiblen und unmöglichen Prozessen sowie die Bestimmung des Grads der Abweichung vom Ideal des reversiblen Prozesses. [40, S. 95]

$$\dot{S}_{irr} \geq 0 \quad (38)$$

3.5 Kondensation des Arbeitsfluids

Im vorangegangenen Kapitel wurde bereits darauf verwiesen, dass in ORC-Zyklen aus klimatischen Gründen ein zeotropes Gemisch von natürlichen Kohlenwasserstoffen als Arbeitsfluid empfohlen wird [13]. Diese besitzen eine niedrige Verdampfungstemperatur, welche bei ORC-Prozessen eine entscheidende Rolle spielt [41, S. 290]. Im Rahmen dieser Studie wird ein ternäres zeotropes Gemisch von Kohlenwasserstoffen untersucht, nämlich Propan (R290), Isobutan (R600a) und Pentan (R601). Ein Vorteil der Verwendung eines Fluidgemischs liegt darin, dass sich die physikalischen und thermodynamischen Eigenschaften des Gemischs durch Änderung seiner Zusammensetzung verändern lassen [42, 257–259].

Zeotrope Gemische sind spezielle Gemische, die sich beim Verdampfen anders verhalten als reine Substanzen. Während der Verdampfung einer reinen Substanz bleibt die Temperatur konstant, bis die gesamte Flüssigkeit verdampft ist. Bei zeotropen Gemischen hingegen ändert sich die Temperatur während des Verdampfens, da die Zusammensetzung der verdampfenden Phase von der Zusammensetzung der verbleibenden flüssigen Phase abweicht. [43]

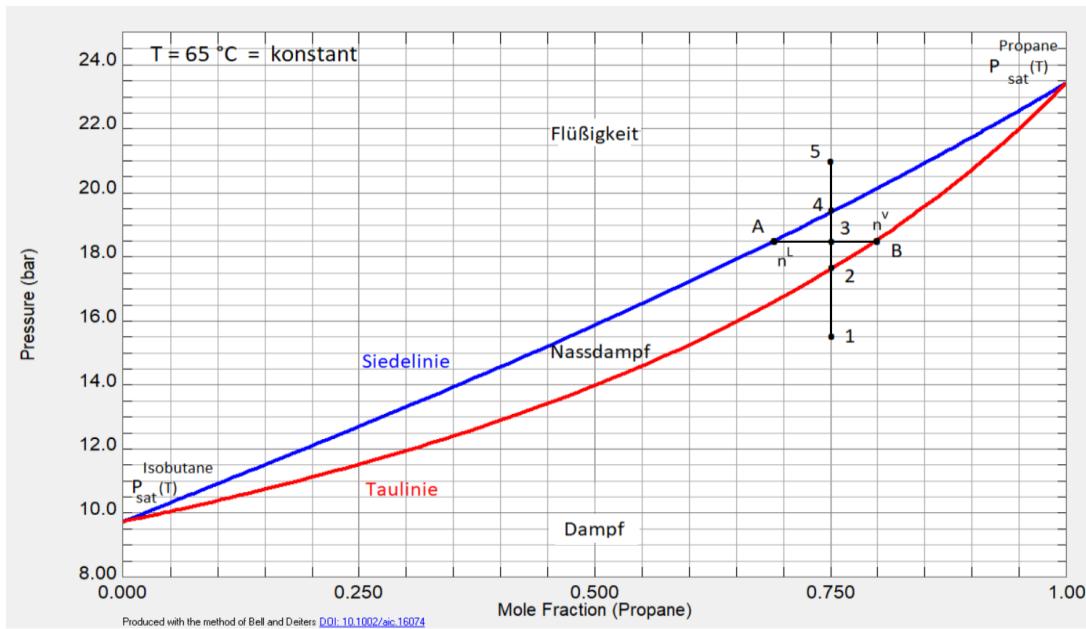


Abbildung 3: Phasendiagramm für Propan/Isobutan mit Gleichgewicht zwischen Flüssig- und Dampfphase. (erstellt mit Refprop [44], nach [42, S. 259])

Im obigen Phasendiagramm (Abbildung 3) ist der Druck über dem Stoffmengenanteil x der leichter siedenden Komponente (Propan) bei konstanter Temperatur (65°C) dargestellt. Bei niedrigem Druck am Punkt 1 liegt das Gemisch als überhitzter Dampf vor. Mit steigendem Druck erreicht das Gemisch zunächst den Punkt 2 auf der Taulinie, wo ein Phasengleichgewicht herrscht. Ab diesem Punkt beginnt die Kondensation, und Punkt 3 liegt im Nassdampfgebiet, wo sich das Gemisch in zwei Phasen befindet. Mit weiter steigendem Druck kondensiert das Gemisch bis zum Punkt 4 auf der Siedelinie, wo das gesamte Gemisch gerade kondensiert ist. Bei weiterer Druckerhöhung verbleibt das Gemisch am Punkt 5 als unterkühlte Flüssigkeit. Dieses Gemisch wird als zeotropes Gemisch bezeichnet, da durch Änderung von Druck oder Temperatur die leichter flüchtige Komponente Propan vollständig kondensiert und aus dem Gemisch entfernt werden kann. [42, S. 257-260]

Es ist zu beachten, dass bei einem ternären Gemisch der Stoffmengenanteil für die zweite Phase in einem Raum-Kubusdiagramm als dritte Dimension dargestellt wird.

Temperaturgleit

Der Einsatz von zeotropen Gemischen als Arbeitsfluid bietet einen Vorteil: Aufgrund der unterschiedlichen Sättigungstemperaturen der Komponenten kann die Temperatur während der Phasenwechsel weiter abgesenkt werden. Den Unterschied zwischen der Siedetemperatur der flüssigen Phase und der Taupunktttemperatur der Gasphase bei konstantem Druck wird Temperaturgleit genannt, während bei reinen Stoffen der Phasenwechsel bei konstanter Temperatur stattfindet [43]. Der Einsatz von zeotropen Gemischen ist daher besonders vorteilhaft, da die

Temperaturdifferenz zwischen Arbeits- und Sekundärfluid während der Kondensation abnimmt. Dies führt unter Anwendung eines sensiblen Wärmespeichers (Sekundärfluid ohne Phasenumwandlungen) zu einer Reduzierung der Exergieverluste und einer Steigerung der Gesamteffizienz des Wärmeübertragers [14, 43].

Die Abbildung 4 veranschaulicht den Unterschied im Temperaturverlauf zwischen einem reinen Stoff (a) und einem zeotropen Gemisch (b).

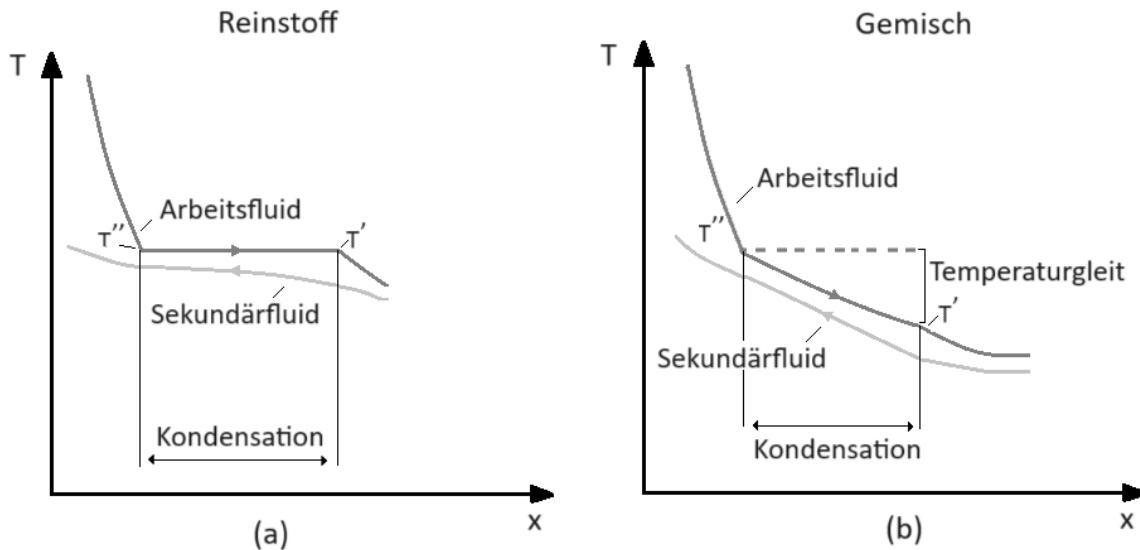


Abbildung 4: Temperaturverlauf von Arbeits- und Sekundärfluid in einer Gegenstrom-Wärmeübertrager, linkes Diagramm (a) mit Reinstoff, rechtes Diagramm (b) mit zeotropem Gemisch und Temperaturgleit. (nach [43])

3.6 Maschinelles Lernen

Einleitung

In diesem Unterkapitel werden die Grundlagen von maschinellen Lernalgorithmen (ML) behandelt. Es wird auf deren Aufbau, Anwendung und Trainingsverfahren eingegangen. Zudem werden Bewertungsverfahren sowie verschiedene Optimierungsmethoden und Strategien zur Verbesserung der Modelleistung ausführlich erläutert.

ML nutzt datengesteuerte Algorithmen und statistische Modelle zur Analyse von Daten, Identifizierung von Mustern und Vorhersagen, wobei es aus den vorhandenen Daten lernt. Dieser Ansatz unterscheidet sich von traditionellen regelbasierten Analyse-Systemen und bietet vereinfachten Code und verbesserte Leistung. [16, S. 306, 45]

ML Algorithmen unterscheiden sich in ihren Lernparadigmen. Zwei übliche Lernparadigmen sind überwachtes Lernen und unüberwachtes Lernen.

Überwachtes Lernen: Beim überwachten Lernen werden Algorithmen auf einem Datensatz trainiert, bei dem die korrekten Antworten für einige Fälle bereits bekannt sind. Dieses Wissen wird genutzt, um dem Computer beizubringen, wie er auch für neue, unbekannte Daten die korrekten Antworten (Zielwerte) vorhersagen kann. [16, S. 308]

Unüberwachtes Lernen: Beim unüberwachten Lernen sind die korrekten Antworten oder das Ziel der Analyse nicht im Voraus bekannt. Stattdessen analysiert der Computer die Daten, um Muster und Zusammenhänge zu finden. [16, S. 308]

ML erweist sich insbesondere für komplexe Probleme als wertvoll, die umfangreiche Feinabstimmung oder regelbasierte Ansätze erfordern. Zum Beispiel kann es den Umsatz eines Unternehmens anhand verschiedener Leistungsmetriken prognostizieren und dabei Regressionsmodelle wie lineare Regression, Polynomiale Regression, Support-Vektor-Maschinen, Random Forests oder künstliche neuronale Netzwerke (KNN) einsetzen. Während Modelle wie Convolutional Neural Networks (CNNs), Recurrent Neural Networks (RNNs) und Transformer für Probleme mit zeitlichen oder räumlichen Sequenzen nützlich sind, sind sie für stationäre Probleme möglicherweise nicht erforderlich [46, S. 28]. Wie bereits in Kapitel 2 dargelegt, hat sich das mehrschichtige Perzeptron (MLP) als eine Art künstliches neuronales Netzwerk in Regressionsmodellen als überlegen erwiesen [18]. Diesbezüglich erfolgt in diesem Kapitel eine ausführliche Erläuterung der Grundlagen von KNN-Modellen.

Künstliches neuronales Netzwerk

Künstliche neuronale Netzwerke sind äußerst vielseitige Modelle im Bereich des maschinellen Lernens. Sie fungieren als universelle Funktionsapproximatoren. Sie wurden ursprünglich von den Neurophysiologen Warren McCulloch und dem Mathematiker Walter Pitts inspiriert, die die biologischen neuronalen Netzwerke im Gehirn erforschten und als einfache mathematische Modelle formulierten. Heutzutage werden KNN für die Vorhersagemodellierung und die Lösung von Problemen im Bereich der künstlichen Intelligenz eingesetzt. [47]

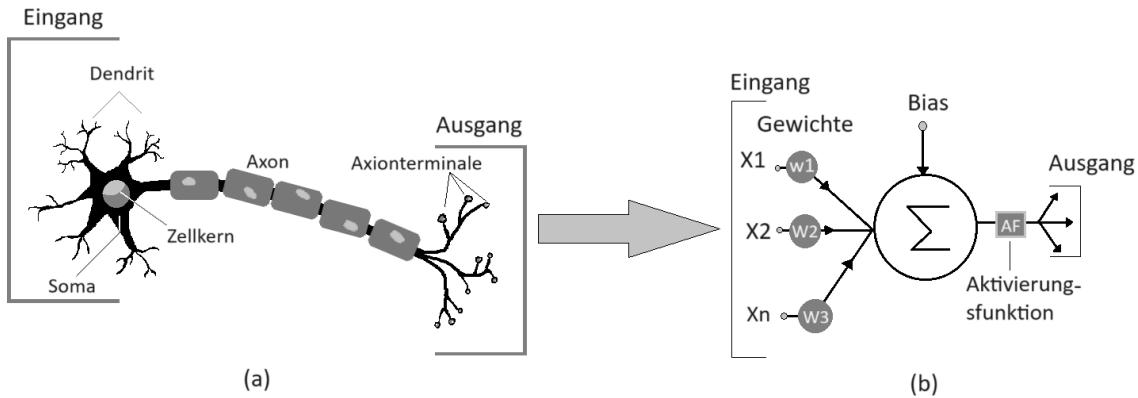


Abbildung 5: (a): Darstellung eines biologischen Neurons. (b): Darstellung eines künstlichen Neurons nach dem mathematischen Modell von McCulloch und Pitts. (nach [48])

Perzeptron

Das Perzeptron wurde erstmals 1957 von Frank Rosenblatt eingeführt und stellt ein einfaches künstliches neuronales Netzwerk dar. Es besteht aus einer Schicht von miteinander verbundenen Neuronen, wie in der rechten Seite von Abbildung 5 dargestellt. Jedes Neuron führt eine lineare Transformation auf den Eingabevektor durch, gefolgt von einer nichtlinearen Transformation mittels Aktivierungsfunktionen zur Erzeugung des Ausgabevektors. Zentral für seine Funktionsweise sind Matrizen von anpassbaren Gewichtungen und Bias, die sich durch iterative Trainingsprozesse an Datenmustern anpassen. [46, S. 397-398]

Mehrschichtiges Perzeptron

Mehrere Perzeptrone können in Schichten miteinander verbunden werden, wodurch die Neuronen einer Schicht mit allen Neuronen der direkt folgenden Schicht verbunden sind. Dies bildet ein mehrschichtiges Feedforward-Netzwerk, das als mehrschichtiges Perzeptron bekannt ist. Die Architektur eines MLP, wie in Abbildung 6 dargestellt, umfasst typischerweise eine Eingangsschicht, eine oder mehrere verborgene Schichten von Neuronen und eine Ausgabeschicht. Der Begriff "Feedforward-Netz" bedeutet, dass der Informationsfluss nur in eine Richtung, von Eingang zu Ausgang, verläuft. [46, S. 403-404]

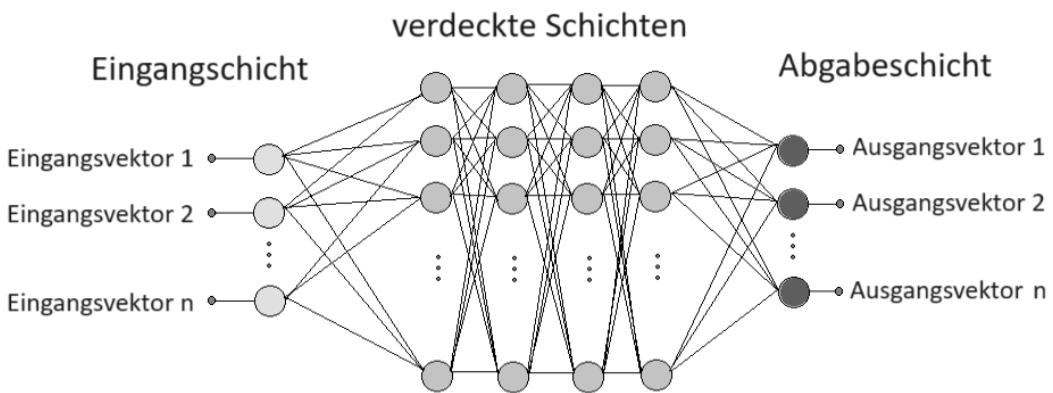


Abbildung 6: Architektur eines MLPs (nach [48]).

3.6.1 Training

KNN werden mithilfe des überwachten Lernens trainiert. Dabei wird ein Lernalgorithmus mit Datensätzen trainiert und validiert. Bei Regressionsaufgaben benötigt jeder Eingabewert einen entsprechenden Ausgabewert, der als Zielwert bezeichnet wird. Das neuronale Netzwerk versucht, diese Ausgabewerte mit möglichst geringem Fehler vorherzusagen. [49]

Der Trainingsalgorithmus des Perzeptrons ist von den Hebbischen Postulaten über biologische Neuronen inspiriert. Wenn ein Neuron ein anderes Neuron aktiviert, werden die Verbindungen zwischen ihnen verstärkt. Im Perzeptron-Lernalgorithmus ist es ähnlich: Wenn das Netzwerk eine Vorhersage trifft, verstärkt der Lernalgorithmus die Gewichtsverbindungen zwischen den Neuronen, um den Fehler zwischen den vorhergesagten Werten und den Zielwerten zu verringern. [46, S. 400]

Trainings-Algorithmen

Zum Training eines MLP-Netzwerks wird die sogenannte Backpropagation-Methode (Rückpropagierung) verwendet, die zur Gruppe der überwachten Lernverfahren gehört. Bei der Rückpropagierung werden die Eingabewerte in das neuronale Netzwerk eingegeben und vorwärts propagiert, um die Zielwerte vorherzusagen. Die Ausgabe des Netzwerks wird dann mit den Zielwerten verglichen, und die Differenz wird als Fehler betrachtet. Dieser Fehler wird nun von der Ausgabe- zur Eingabeschicht zurück propagiert. Auf diese Weise kann ermittelt werden, welche Pfade den größten Einfluss auf die Ausgabe haben und wie die Gewichtungen der Neuronenverbindungen und die Biases geändert werden sollten, um den Fehler zu minimieren. Dies gewährleistet, dass bei erneuter Anwendung der Eingabe eine Annäherung an die Zielwerte erfolgt. Daher ist die Optimierung der Neuronenverbindungen ein iterativer Prozess, wobei jeder

Iterationsschritt als Epoche bezeichnet wird. Bei erfolgreichem Training sollte sichergestellt werden, dass der Fehler in jeder Iteration abnimmt. [46, S. 403-405]

Verlustfunktion

Der Fehler wird durch eine Fehlerfunktion (auch Verlustfunktion genannt) berechnet. Die Rückpropagierung nutzt die Kettenregel, um die partielle Ableitung der Fehlerfunktion zu berechnen. Daher spielt die Wahl der Fehlerfunktion eine entscheidende Rolle im Trainingsverfahren. Bei Regressionsaufgaben wird häufig die mittlere quadratische Abweichung (MSE) (siehe Gleichung (39)) als Fehlerfunktion angewendet. Dabei entspricht t den Zielwerten (target), o den vom Netzwerk vorhergesagten Ausgaben (output) und n der Anzahl der Ausgabeneuronen. [46, S. 200-201]

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t - o)^2 \quad (39)$$

Optimiser

Der einfachste Algorithmus zur Optimierung der Gewichtungen von Neuronenverbindungen während Training ist das Stochastic Gradient Descent (SGD). Eine moderne Variante des SGD-Verfahrens namens Adam (Adaptive Moment Estimation) wurde im Jahr 2014 entwickelt. Adam bietet eine schnelle und speichereffiziente Methode zur Berechnung des SGD und es wurde gezeigt, dass weniger Epochen benötigt werden, um ein KNN während des Trainings konvergieren zu lassen. [50, 51]

3.6.2 Bewertung

Die Optimierung der Gewichtungen der Neuronenverbindungen während des Trainings durch iterative Verfahren zielt darauf ab, den Fehler beim Training zu minimieren. Dennoch kann selbst beim Fehlerkonvergenz auf einen niedrigen Wert nicht garantiert werden, dass das MLP-Modell hohe Leistung hat. Es ist von entscheidender Bedeutung, sicherzustellen, dass das MLP-Modell in der Lage ist, neue, unbekannte Daten mit ausreichender Genauigkeit vorherzusagen, was als Generalisierungsfähigkeit bekannt ist. [16, S. 63]

Um die Generalisierungsfähigkeit des Netzwerks zu bewerten, kann die Holdout-Methode eingesetzt werden. Bei dieser Methode wird der gesamte Trainingsdatensatz zu Beginn in mehrere Teile aufgeteilt. Dabei werden typischerweise 20 % des Gesamtdatensatzes als Testdatensatz verwendet, während die restlichen 80 % erneut in zwei Teile unterteilt werden. Von dem 80 % Teil werden

wiederum 80 % als Training-Datensatz und 20 % als Dev-Datensatz verwendet. Der Dev-Datensatz wird zur Bewertung des Modells während des Trainings herangezogen, um die Überanpassung des MLP-Modells an den Trainingdatensatz zu kontrollieren. Der Ansatz dieses Datensatzes wird in den Abschnitten „Learning-curves“ und „Early stopping“ detailliert erläutert.

Dabei ist es wichtig sicherzustellen, dass sowohl die Eingabe- als auch die Zielwertvektoren gleichzeitig aufgeteilt werden, um die Verbindung zwischen Zielwertvektoren und Eingabevektoren im Datensatz nicht zu beeinträchtigen. Zudem ist es üblich, die Datenpunkte beim Aufteilen der Datensätze zu mischen um sicherzustellen, dass das Netzwerk keine Muster in der Anordnung der Daten lernt, sondern nur Muster zwischen Eingaben und Zielwerten erkennt. [16, S. 320-321, 46, S. 64-65]

Der Trainingsdatensatz wird verwendet, um das Netzwerk im Lernalgorithmus zu trainieren. Der Dev-Datensatz wird nach jeder Epoche in den Algorithmus eingespeist, und der Fehler (Verlust) wird mit derselben Verlustfunktion wie beim Trainingsfehler berechnet. Dieser wird als Validierungsverlust bezeichnet und ist ein entscheidender Parameter zur Darstellung des Generalisierungsfehlers während des Trainings.[46, S. 63-64]

Der Testdatensatz wird zur endgültigen Bewertung des Netzwerks verwendet. Dieser Datensatz enthält unbekannte Daten. Wenn dieser Datensatz dem Netzwerk zugeführt wird, ist der Fehler zwischen den Zielwerten und den Ausgaben der Gesamtgeneralisierungsfehler bzw. Netzwerksleistung. [46, S. 63-64]

Lernkurven

Die Darstellung der Verluste während des Trainings ist eine gängige Methode zur Überwachung des Trainingsverfahrens. Lernkurven sind Kurvendiagramme, die den Verlust über die Epochen darstellen. Sie bestehen aus zwei Kurven: der Trainingskurve, die den Fehler (Verlust) zwischen der Netzwerkausgabe und den Zielwerten während des Trainings zeigt, wobei der Trainingsdatensatz verwendet wird, und der Validierungskurve, die den Fehler (Verlust) zwischen der Netzwerkausgabe und den Zielwerten zeigt, wenn den Dev-Datensatz verwendet wird. Wenn es keine Diskrepanz zwischen Datensätzen gibt, können drei Fälle bei den Lernkurven auftreten, wie in Abbildung 7 dargestellt. [46, S. 59-62, 52]

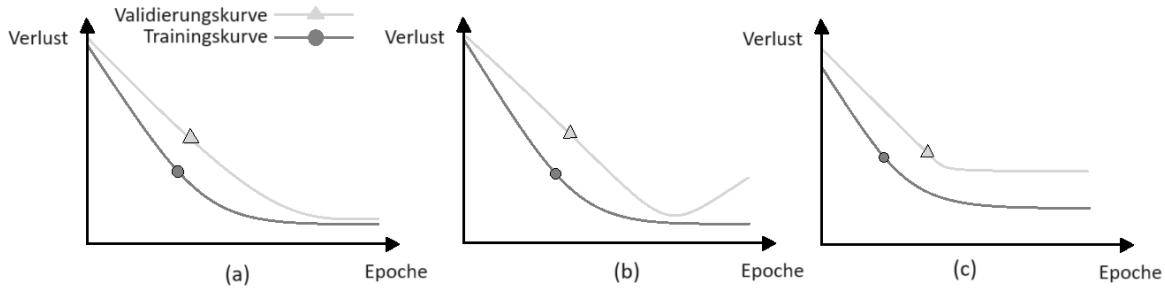


Abbildung 7: Drei Fälle von Lernkurven. Das Diagramm zeigt (a) eine perfekte Anpassung, (b) Überanpassung und (c) Unteranpassung. (nach [52])

In einem “perfekten Anpassungsszenario” (Diagramm a in der Abbildung 7) nähert sich die Validierungskurve der Trainingskurve an, und beide konvergieren mit einem niedrigen Verlust. Dies ist das bevorzugte Ergebnis, und das trainierte Netzwerk könnte als geeignet betrachtet werden, wenn weitere Kriterien erfüllt sind. Im zweiten Fall (Diagramm b in der Abbildung 7) tritt eine Überanpassung auf, was bedeutet, dass die Generalisierungsfähigkeit aufgrund ungeeigneter Netzwerkparameter und Überkomplexität des Modells für die Trainingsdaten abnimmt. Das Netzwerk passt sich zu stark an die Trainingsdaten an und kann daher neue Daten nicht korrekt vorhersagen. In diesem Fall sollten spezifische Trainingstechniken wie Regularisierung und Early Stopping angewendet werden oder eine einfachere Netzwerkarchitektur ausgewählt werden. Im dritten Fall (Diagramm c in der Abbildung 7) tritt ein Unteranpassung auf, was bedeutet, dass das Netzwerk weder zu den Trainingsdaten noch zu den Validierungsdaten passt. Hier sollte ein komplexeres Netzwerk mit mehreren verdeckten Schichten oder Neuronen verwendet werden, um komplexe Muster im Datensatz besser zu erkennen. [16, S. 320-323, 46, S. 61-62, 52]

3.6.3 Hyperparameter Optimierung (HPO)

Beim Training eines Machine-Learning-Modells werden die Modellparameter gesucht, die einen definierten Fehler zwischen dem tatsächlichen und dem vorhergesagten Wert minimieren. Das Hauptziel besteht darin, Parameter zu finden, die eine möglichst gute Generalisierungsfähigkeit des Modells ermöglichen. Es gibt verschiedene Strategien, um den Generalisierungsfehler (oder Validierungsverlust) zu minimieren und das perfekte Anpassung-Szenario anzunähern. [46, S. 64-65]

Der Begriff „Hyperparameter“ bezeichnet diejenigen Parameter eines Modells, welche den Lernprozess beeinflussen, jedoch im Regelfall nicht während des Trainings erlernt werden. Zu den Parametern, die den Lernprozess beeinflussen, gehören Parameter, die die Architektur des Netzwerks bestimmen, wie die Anzahl der verdeckten Schichten (HL), die Anzahl der Neuronen in

jeder verdeckten Schicht (N) und die Aktivierungsfunktion (AF), sowie Trainingsparameter, die zur Optimierung der Netzwerkleistung untersucht wurden, wie der L2-Regularisierungsfaktor (alpha), die Lernrate (LR), die Batchgröße und die Anzahl der Trainingsschritte. [46, S. 451-463]

Die größte Herausforderung beim Training von ML-Modellen besteht darin, das passende Set von Hyperparametern für das Modell zu finden, da sie einen entscheidenden Einfluss auf die endgültige Güte und Leistung des Netzwerks haben. Es gibt verschiedene Methoden zur Bestimmung der Hyperparameter [46, S. 63-65]. Die Zufallsuche und Rastersuche basieren auf dem Versuch-und-Irrtum-Verfahren, bei dem verschiedene Hyperparameter innerhalb eines sinnvollen Intervalls ausprobiert werden. Es ist zu beachten, dass jede Änderung der Hyperparameter ein vollständiges Training des MLP-Modells erfordert.

Die einfachste Methode ist die Rastersuche, bei der ein Parametergitter für einen bestimmten Hyperparameterraum erstellt wird. Das MLP-Modell wird für jeden Hyperparameter im Gitter vollständig trainiert und durch das Kreuzvalidierungsverfahren (CV) ausgewertet. Anschließend werden die Hyperparameter verwendet, die zu den niedrigsten durchschnittlichen Fehlern bei der CV führen, um das endgültige beste Modell zu trainieren. Diese Methode ist einfach zu implementieren, aber äußerst zeitaufwendig, daher können weniger Hyperparametervariationen durch diese Methode getestet werden. [46, S. 142]

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, aus dem festgelegten Hyperparameterraum eine bestimmte Anzahl von Kombinationen zufällig verteilter Hyperparameter zu untersuchen, was als Zufallssuche bezeichnet wird. Die Zufallssuche kann die Rastersuche in Bezug auf Geschwindigkeit und Leistung übertreffen, da sie es ermöglicht, einen größeren Hyperparameterraum zu erproben. [46, S. 145]

Wie bereits erwähnt, spielen neben der Netzwerksarchitektur weitere Hyperparameter beim Training des MLP-Modells eine entscheidende Rolle. Im Folgenden werden diese Hyperparameter und ihre jeweilige Funktion detailliert erläutert.

Lernrate

Das Training mit dem Rückpropagationsalgorithmus und die Optimierung mit dem Adam-Algorithmus können direkt durch die korrekte Einstellung der Schrittgröße beeinflusst werden, die zur Anpassung der Gewichtungen verwendet wird. Die Auswahl der richtigen Lernrate ist eine der einfachsten Strategien, die sowohl die Leistung des Netzwerks als auch die Dauer sowie die Konvergenz des Trainings drastisch verbessern können. [46, S. 206-209]

Regularisierung

Eine weitere Strategie ist die Regularisierung der Verlustfunktion, bei der ein zusätzlicher Regularisierungsterm zur Verlustfunktion (z. B. MSE) hinzugefügt wird. Dadurch wird sichergestellt, dass der Lernalgorithmus nicht nur das Netzwerk an die Trainingsdaten anpasst, sondern auch dafür sorgt, dass die Gewichtungen klein gehalten werden. Die Ridge-Regression, auch als L2-Regularisierung bekannt, wird häufig zur Regularisierung der Verlustfunktion verwendet. In Gleichung (40) wird dies dargestellt, wobei MSE die Verlustfunktion ist und α den L2-Regularisierungsfaktor darstellt, der die Stärke der Regularisierung kontrolliert. $J(\theta)$ ist die regulierte Fehlerfunktion, und θ_i ist der Gewichtungsvektor für jeden Ausgabevektor. [46, S. 229]

$$J(\theta) = \text{MSE}(\theta) + \frac{\alpha}{m} \sum_{i=0}^n \theta_i^2 \quad (40)$$

Batch-Training

Eine weitere Strategie zur Verbesserung der Leistung des Modells sowie zur Steigerung der Speichereffizienz und Reduzierung der Trainingszeit durch Parallelisierung ist das sogenannte Batch-Training. Anstatt alle Datenpunkte des Trainingsdatensatzes gleichzeitig in das Netzwerk einzugeben, wird der Datensatz in kleinere Teile, sogenannte Batches, aufgeteilt, die nacheinander zum Training verwendet werden. Dabei spielt die Batchgröße eine wichtige Rolle, da eine ungeeignete Batchgröße die Leistung des Netzwerks beeinträchtigen kann. [46, S. 462]

Early-Stopping

Die Anzahl der Trainingsiterationen spielt eine entscheidende Rolle für die Trainingsleistung und die Dauer des Trainings. Wie in Abbildung 7 (Diagramm b) dargestellt ist, kann bei iterativen Trainingsmethoden beobachtet werden, dass sowohl der Trainingsverlust als auch der Validierungsverlust (Generalisierungsfehler) in den ersten Schritten abnehmen. Doch ab einem bestimmten Punkt steigt der Validierungsverlust, während der Trainingsverlust weiter sinkt. Dieses Phänomen wird als Overfitting bezeichnet. Die Strategie besteht darin, das Training zu stoppen, sobald eine signifikante Verschlechterung oder keine signifikante Verbesserung des Validierungsverlusts über einen vordefinierten Schrittraum festgestellt wird. Dadurch wird die optimale Anzahl der Trainingsschritte bestimmt, die einen minimalen Validierungsverlust ergeben.[46, S. 335-336, 53]

4 Methodik

Das vorliegende Kapitel befasst sich mit dem methodischen Vorgehen zur Entwicklung eines thermischen Modells für einen Doppelrohr-Wärmeübertrager sowie der Erstellung eines mathematischen Ersatzmodells mithilfe von ML-Algorithmen. Zunächst wird das physikalische Modell auf Basis der hergeleiteten Differentialgleichungen in Kapitel 3 entwickelt. Im nächsten Schritt werden Methoden zur Erzeugung eines Datensatzes aus zahlreichen Simulationen anhand des physikalischen Modells mit verschiedenen Rahmenbedingungen untersucht. Ziel ist es, zahlreiche Szenarien für Eintrittszustände und Rohrlänge abzudecken und Datensätze für das überwachte Lernen auszusortieren. Dazu werden verschiedene Schritte für die Datenvorbereitung erklärt, die für das Training und die Bewertung eines MLP-Modells erforderlich sind. Im Anschluss werden Methoden zur erfolgreichen Trainingsgestaltung des MLP-Modells auf Basis vorbereiteter Datensätze untersucht. Zudem werden Methoden zur Optimierung der Modellhyperparameter auf Basis vorhandener Datensätze untersucht. Des Weiteren werden in der maschinellen Lernforschung übliche Validierungsmethoden für das trainierte MLP-Modell angewendet, um zu eruieren, ob das Ersatzmodell auf Daten nahezu angepasst ist und keine Überanpassung an den Trainingsdaten aufweist sowie ob das MLP-Modell die neuen Daten mit einer ausreichenden Genauigkeit vorhersagen kann. Darüber hinaus erfolgt eine Untersuchung der Kohärenz des MLP-Modells im Hinblick auf thermodynamische Hauptsätze. Daraufhin wird der Einfluss der Datengröße auf die Leistung des Netzwerks sowie die Rechenzeit des MLP-Modells im Vergleich zu einem physikalischen Modell analysiert.

4.1 Softwarepakete

Die gesamte Arbeit wurde durch computergestützte Analyse durchgeführt. Die Softwarepakete, die für die Durchführung dieser Arbeit verwendet wurden, umfassen Refprop (Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties) [44] in der Version DLL 10,0 von NIST. Diese Software wurde als Grundlage für die thermodynamischen Berechnungen und die Stoffdaten beider Fluide verwendet. Die Programmiersprache Python in der Version 3.11 [54] wurde aufgrund ihrer umfangreichen Bibliotheken für die erforderlichen Berechnungen, Modellbildungen, maschinellen Lernprozesse sowie Visualisierungen als geeignetste Lösung ausgewählt. Darüber hinaus stellten die Entwickler von Refprop NIST [44] eine umfassende Bibliothek bereit, die nahtlos mit den Softwarepaketen verbunden ist. Die folgende Tabelle zeigt eine Liste der wichtigsten Python-Bibliotheken, die in der Studie verwendet wurden, sowie deren Anwendungen.

Tabelle 1: Verwendete Python Bibliotheken und deren Anwendungen in der Studie

Bibliothek	Anwendungen
Numpy 1.24.3 [55]	Mathematische Operationen auf Vektoren und Matrizen
Matplotlib 3.7.2[56]	Erzeugung der Abbildungen für Ergebnisse
Pandas 2.0.3[57]	Datenbearbeitung, Erstellung der Ergebnistabelle
Joblib 1.2.0 [58]	Speicherung der Ergebnisse (Modelle und Variablen) als Datei
Scipy 1.11.1[59]	Numerische Berechnungen, Löser für Differenzialgleichungen für Physikalisches Modell
Scikit-learn 1.3.0 [60]	Erstellung der Maschinelles Lernen Modelle, Datenvorbereitung, Optimierung des Modells, sowie Validierung
Ht 1.0.5 [61]	Nusseltkorrelationen
Fluids 1.0.25[62]	Korrelationen für Reibungszahl und Druckverlust
SALib 1.4.7 [63, 64]	Sobol-Algorithmus zur Parameterraumerstellung
Refprop 0.10.2 [44]	Stoffdaten und Thermodynamische Berechnungen, Erstellung des PXY Phasen Diagramm

4.2 Vorgehensplan

Vorgehensplan

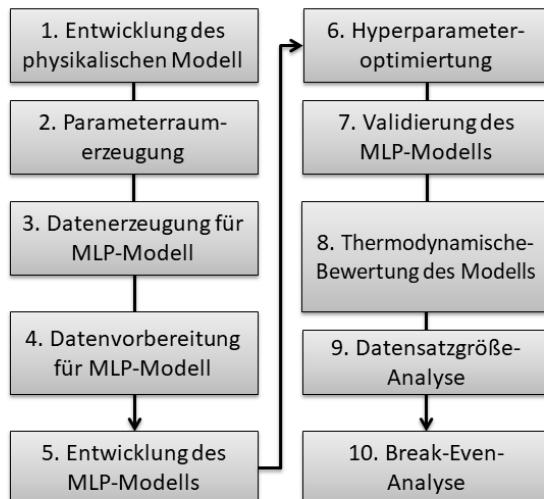


Abbildung 8: Vorgehensplan der Arbeit.

Die Abbildung 8 veranschaulicht den Gesamtprozess der Arbeit. Zunächst wird das physikalische Modell entwickelt, indem durch die Energiebilanz und die Druckverlustgleichung differenzielle Gleichungen für die spezifische Enthalpie und den Druck ortsauflöst hergeleitet werden. Diese werden dann mithilfe des Runge-Kutta-Verfahrens als Anfangswertproblem gelöst. Anschließend

werden systematisch die Eingangsparameter innerhalb eines definierten Parameterraums für das physikalische Modell festgelegt, und für jeden Parameter wird eine Simulation durchgeführt. Die geeigneten Simulationen für die Entwicklung des MLP-Modells unter den festgelegten Rahmenbedingungen werden ausgewählt und als Matrix gespeichert, die die spezifische Enthalpie und den Druck an allen Orten enthält. Diese Daten werden dann mithilfe eines Datenerzeugungsalgorithmus für das MLP-Modell vorbereitet. Dabei werden verschiedene Schritte wie die Aufteilung der Daten für die Kreuzvalidierung und das Testen durchgeführt, um Trainings-, Test- und Entwicklungsdatensätze zu generieren. Diese werden in vergleichbaren Intervallen von 0 bis 1 skaliert, um sie vergleichbar zu machen, wobei die Min-Max-Skalierung verwendet wird. Anschließend wird das MLP-Modell entwickelt, wobei der Fokus auf Strategien liegt, die die Leistung des Netzwerks während des Trainings verbessern und Überanpassungen vermeiden können. Methoden wie das Batch-Training, die Early-Stopping-Methode und Regularisierung werden implementiert. Zur Bestimmung der geeigneten Architektur und Hyperparameter des neuronalen Netzwerks wird eine Hyperparameteroptimierung durchgeführt, wobei die Zufalls- und Rastersuche in einer Coarse-to-Fine-Studie verwendet werden, um das Netzwerk mit hoher Generalisierungsfähigkeit zu trainieren. Nachdem das beste MLP-Modell trainiert wurde, wird es mit einem Testdatensatz bewertet, um die Generalisierungsfähigkeit des Netzwerks bei unbekannten Daten zu überprüfen, was als Validierung bezeichnet wird. Anschließend wird das MLP-Modell thermodynamisch bewertet, um sicherzustellen, dass das MLP-Modell die physikalischen Aspekte des analytischen Modells im Rahmen des ersten und zweiten Hauptsatzes des Wärmeübertragers abbilden kann. Schließlich wird die Auswirkung der Datensatzgröße auf die Leistung des Modells untersucht, und das MLP-Modell wird zeitlich in Rahmen einer Break-Even-Analyse mit dem physikalischen Modell verglichen, um die Anzahl der Modellaufrufe zu ermitteln und die zeitlichen Vorteile der Verwendung des MLP-Modells zu bestätigen.

4.3 Entwicklung des physikalischen Modells

Der Hauptschritt zur Erzeugung der benötigten Daten für das Training eines Neuronalen Netzwerks ist Entwicklung eines analytischen Modells für Doppelrohrwärmeübertrager ,die in dieser Arbeit als physikalisches Modell bezeichnet wird. Hierbei handelt es sich um ein thermisches Modell eines Doppelrohrwärmeübertragers, das auf den Wärmeübertragungsmechanismen sowie der Energiebilanz basiert, die in den Grundlagen ausführlich erklärt wurden. Die Abbildung 9 stellt den Ablaufplan zur Entwicklung des physikalischen Modells dar.

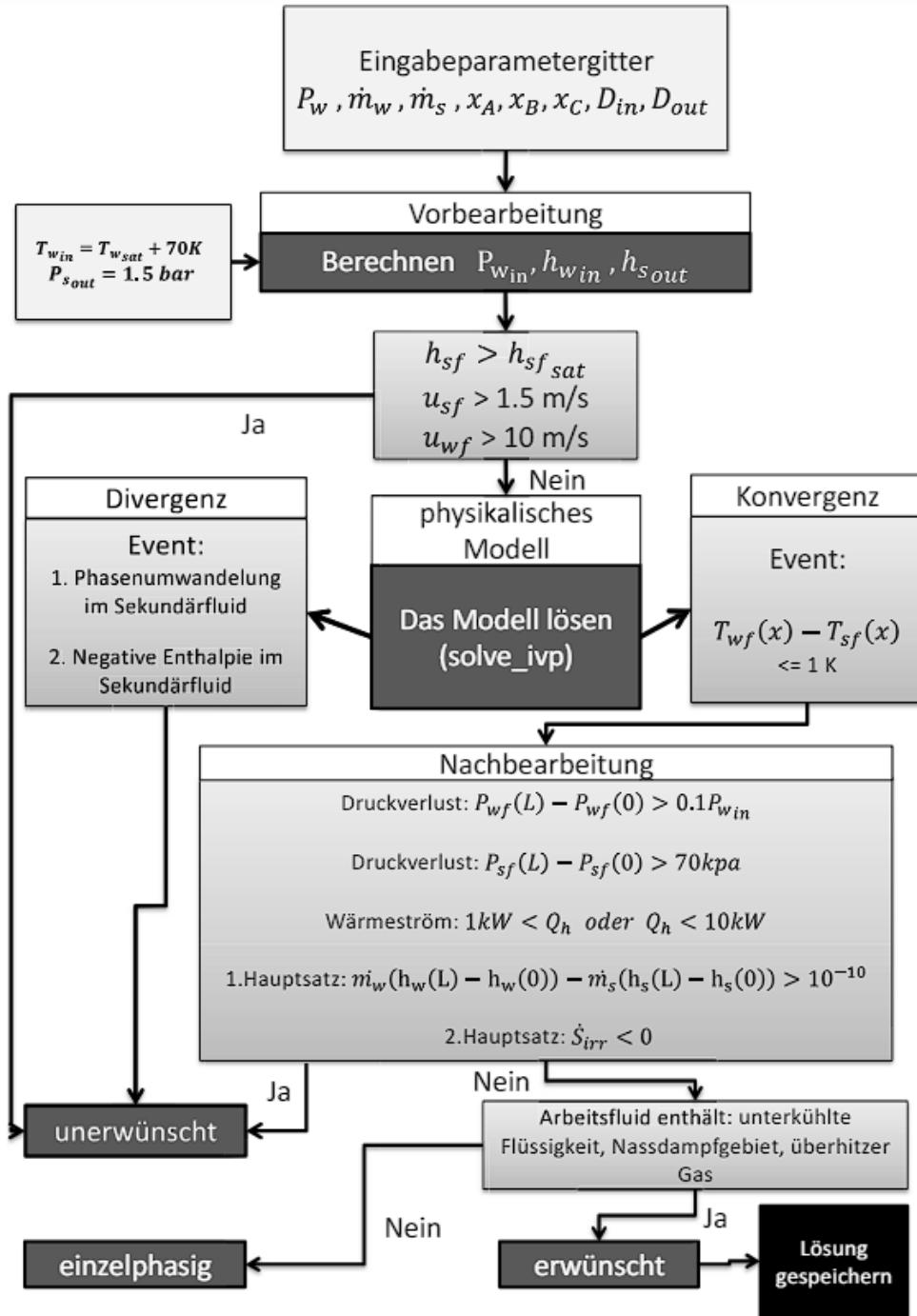


Abbildung 9: Ablaufschemas des physikalischen Modells inklusiv die Nachbearbeitung. Weiße Blöcke repräsentieren die Eingangswerte, graue Blöcke: Die Bedingungen, dunkelgraue Blöcke: Die Operationen und schwarze Blöcke: Die Ergebnisse.

Das Arbeitsfluid tritt in den Wärmeübertrager mit einem Massenstrom \dot{m}_{wf} , einem Druck p_{wf} und einer Zusammensetzung bestehend aus x_A (Molenbruch von Propan), x_B (Molenbruch von Isobutan) und x_C (Molenbruch von Pentan) ein. Die Eintrittstemperatur des Arbeitsfluids $T_{wf\text{ ein}}$ wird 70 K höher als die Sättigungstemperatur des Arbeitsfluid $T''_{wf\text{ ein}}$ gewählt, um sicherzustellen, dass das Arbeitsfluid am Eintritt immer als überhitzter Dampf vorliegt.

Für das Sekundärfluid (Wasser) wird angenommen, dass es den Wärmeübertrager mit einem Massenstrom \dot{m}_{sf} , einer Temperatur von $T_{sf\text{ aus}} = T''_{wf\text{ ein}}$ und einem Druck $p_{sf\text{ aus}}$ von 1,5 bar verlässt. Zur Berechnung von $T''_{wf\text{ ein}}$ werden der Eintrittsdruck $p_{wf\text{ ein}}$ der Sättigungsdampfgehalt ($x''=1.0$) und die gegebene Zusammensetzung in Refprop [44] eingegeben. Refprop berechnet $T''_{wf\text{ ein}}$ basierend auf den beiden thermodynamischen Zustandsgrößen Druck und Dampfgehalt.

Mit der bekannten Eintrittstemperatur des Arbeitsfluids $T_{wf\text{ ein}}$ und der Austrittstemperatur des Sekundärfluids $T_{sf\text{ aus}}$ können in Refprop, basierend auf den Zustandsgrößen Temperatur und Druck, die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids am Eintritt $h_{wf\text{ ein}}$ und die spezifische Enthalpie des Sekundärfluids am Austritt $h_{sf\text{ aus}}$ berechnet werden. Diese Werte dienen als Randbedingungen für das physikalische Modell. Für weiterführende Details zur Berechnung der Stoffdaten mit Refprop wird auf die Dokumentation der Funktion „**REFPROPdII**“ von Refprop 10.0 [65] verwiesen.

Zunächst wird das physikalische Modell entwickelt, indem die Rohre des Doppelrohr-Wärmeübertragers örtlich diskretisiert werden. Dabei wird das Ortsgitter x mithilfe der Funktion linspace aus pythonsbibliothek Numpy erstellt. Bei allen Simulationen wird $L = 100 \text{ m}$ als die maximale Länge und $\Delta x = 0,5 \text{ m}$ als die Gittergröße angenommen.

Das Ziel des physikalischen Modells besteht in der Berechnung der spezifischen Enthalpie und des Drucks des Arbeits- $h_{wf}(x)$, $p_{wf}(x)$ und Sekundärfluids $h_{sf}(x)$, $p_{sf}(x)$ an jedem Ort x des Doppelrohrwärmeübertrager beim Gegenstrom unter vorhandenene Randbedingungen am Eintritt des Arbeitsfluids und am Austritt des Sekundärfluids. Die Ergebnisse werden als analytische Daten zur Training des MLP-Modells verwendet. $h_{wf}(x)$ kann mithilfe der Gleichung (20) und $h_{sf}(x)$ mit Gleichung (21) berechnet werden. $p_{wf}(x)$ und $p_{sf}(x)$ können mithilfe von Druckverlust-Gleichungen wie Gleichung (22) bei einphasiger Strömung und Gleichung (35) für Multiphasenströmung (beim Nassdampfgebiet) berechnet werden. Diese Gleichungen sind gewöhnliche Differentialgleichungen mit Anfangswerten, die numerisch mithilfe des numerischen Löser solve_ivp aus dem Softwarepaket Scipy [59] gelöst werden können. Da Wärmeübertrager beim Gegenstrom modelliert wird, wird für das Arbeitsfluid von Eingang bis Ausgang vorwärts und für das

Sekundärfluid von Ausgang bis Eingang rückwärts integriert. Der Löser „Solve_IVP“ erfordert das Ortsgitter x , das Integrationsintervall $(0, L)$, eine Hilfsfunktion, die Anfangswerte sowie die numerische Methode wie Runge-Kutta 4. Ordnung (RK45). Dazu werden verschiedene Abbruchkriterien für den Löser als „Events“ berücksichtigt. Die Diskretisierung der Doppelwärmeübertrager und die Eingaben und Ausgaben des physikalischen Modells werden in Abbildung 10 dargestellt.

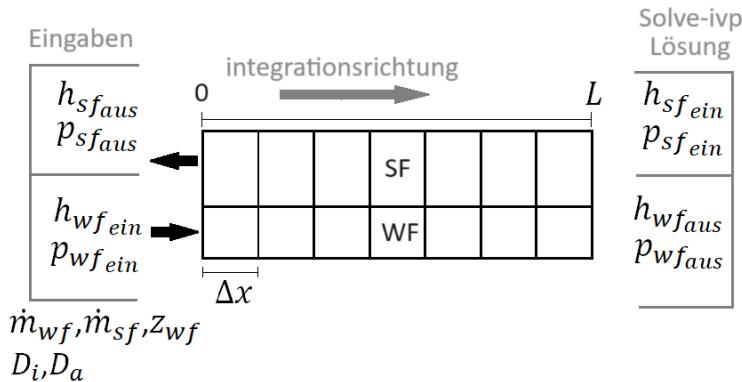


Abbildung 10: Schema für Örtliche Diskretisierung der Doppelrohrwärmeübertrager und Eingaben und Ausgaben des physikalisches Modells, WF: Arbeitsfluid , SF: Sekundärfluid, Z_{wf} :Zusammensetzung des Arbeitsfluids.

Die Hilfsfunktion enthält die Differentialgleichungen und ist so konzipiert, dass sie ein System von gekoppelten Differentialgleichungen lösen kann. Dabei werden die konstanten Werte wie der Durchmesser der Rohre, die Massenströme und die Zusammensetzung beider Fluide sowie die zu suchenden Parameter wie dem Druck und der spezifische Enthalpie beider Fluide als Eingang übergeben. Die Funktion gibt den Gradienten der zu suchenden Parameter, nämlich den Druck und die spezifische Enthalpie beider Fluide, bezüglich des Ortsvektors zurück. Mathematisch ausgedrückt ergibt sich die Differentialgleichung $dy/dx = \text{fun}(x, y, \text{parameter})$.

Bei Jeder Aufrufe der Hilfsfunktion von Solve_ivp wird Zunächst die Phase beider Fluide durch Refprop basierend auf Zustandgrößen bestimmt, um festzustellen, ob sich das Fluid im Nassdampfgebiet befindet. Wie in den Grundlagen ausführlich erklärt, sollten zur Berechnung der Nusseltzahl und des Druckverlusts phasenspezifische Korrelationen verwendet werden. Für einphasige Fluide werden zunächst die thermodynamischen Eigenschaften des Fluids mithilfe von Refprop berechnet. Dabei werden Dichte, kinematische Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Prandtl-Zahl als Stoffdaten sowie die Temperaturen beider Fluide gesucht.

Anschließend kann mithilfe der Dichte, des Massenstroms und des hydraulischen Durchmessers die Geschwindigkeit gemäß Gleichung (5) berechnet werden. Für das Arbeitsfluid entspricht der hydraulische Durchmesser dem inneren Durchmesser, während für das Sekundärfluid gilt:

$d_h = d_a - (d_i + 2 \cdot S)$, wobei d_i der innere Durchmesser des Innenrohrs, d_a der innere Durchmesser des Außenrohrs und S die Wandstärke sind. Mit der Geschwindigkeit, der Dichte, der dynamischen Viskosität und dem hydraulischen Durchmesser kann dann die Reynoldszahl berechnet werden.

Für die Berechnung der Nusseltzahl Nu_D nach der Gnielinski-Korrelation müssen die Reynoldszahl Re_D , die Prandtl-Zahl Pr und der Reibungsbeiwert ζ bekannt sein. Bei einer Turbulenten Strömung wird ζ gemäß der Colebrook-White-Gleichung (Gleichung (23)) berechnet. Hingegen bei der laminaren Strömung kann ζ analytisch mit $\zeta = \frac{64}{Re_D}$ berechnet werden. Die Bibliothek "fluids" [62] in Python stellt die Funktion **fluids.friction.Colebrook($Re_D, \epsilon/d_h$)** zur Verfügung, die die Colebrook-White-Gleichung implizit lösen kann. In dieser Studie wurde eine Rauigkeit (ϵ) von 0,045 mm für Kupfer als Rohrmaterial angenommen.

Die Nusseltzahlen beider Fluide werden mithilfe der Funktion **ht.conv_internal.Nusselt($Re_D, Pr, \zeta, Method = "Gnielinski"$)** aus der Bibliothek "ht" [61] in Python berechnet. Hierbei wird als Methode die Gnielinski-Korrelation ausgewählt. Für das Sekundärfluid sollte die Nusseltzahl für den Ringspalt gemäß Gleichung(9) korrigiert werden. Mit den Nusseltzahlen beider Fluide können die Wärmeübergangskoeffizienten mithilfe von Gleichung (2) berechnet werden. Anhand des bekannten Wärmeübergangskoeffizienten werden der lokale Wärmedurchgangskoeffizient UA sowie der gesamte lokale Wärmewiderstand $R_{ges,x}$ nach Gleichung (18) ermittelt. Abschließend können mit den bekannten gesamten Wärmewiderständen sowie den Temperaturen und Massenströmen beider Fluide die spezifischen Enthalpieänderungen dh_{wf} und dh_{sf} sowie die Druckverluste dp_{wf} und dp_{sf} berechnet werden. Die Druckverluste werden unter Verwendung der bekannten Reibungsbeiwert, Dichte und Geschwindigkeit gemäß Gleichung (22) bestimmt.

Im Nassdampfgebiet sollte die Friedel-Gleichung (Gleichung (24)) zur Berechnung des Druckverlusts und die Cavallini-Korrelation zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten verwendet werden. Die Friedel-Korrelation kann mithilfe der Funktion **cond_Cavallini($m, x, d_h, \rho_l, \rho_g, \mu_l, \mu_g, \lambda_l, cp_l$)** aus dem Softwarepaket "ht" [61] berechnet werden. Dabei stehen die Masseströmung m , die Dichte in der Flüssigphase ρ_l , die Dichte in der Dampfphase ρ_g , der Dampfgehalt x , der hydraulische Durchmesser d_h , die Viskosität in der Flüssigphase μ_l , die Viskosität in der Dampfphase μ_g , die Wärmeleitfähigkeit in der Flüssigphase λ_l und in der Dampfphase λ_g , und die Wärmekapazität in der Flüssigphase cp_l als Eingabeparameter zur Verfügung. Die Stoffdaten in Flüssig- und

Dampfphasen können ebenfalls mithilfe von Refprop berechnet werden, wie in der Refprop-Dokumentation [65] ausführlich beschrieben.

Die Friedel-Korrelation kann auch mithilfe der Funktion `two_phase_dP(m, x, rho_L, D_h, L = dx, rho_V, mu_L, mu_V, sigma, Method = 'Friedel')` aus dem Softwarepaket "fluids" [38] berechnet werden. Dabei sollte die Oberflächenspannung σ mit Refprop berechnet werden.

Die berechneten Gradienten $\frac{dh_{wf}}{dx}$, $\frac{dh_{sf}}{dx}$, $\frac{dp_{wf}}{dx}$ und $\frac{dp_{sf}}{dx}$ sollten als Ausgangsvektor der zuvor beschriebenen Hilfsfunktion von Solve_ivp zurückgegeben werden. Die spezifische Enthalpie und der Druck beider Fluide an den nächsten Orten können dann durch Integration mithilfe von Solve_ivp berechnet werden. Allerdings müssen in dieser Arbeit einige Punkte beachtet werden:

Rahmenbedingungen für Druckverluste, benötigte Wärmeströme und Geschwindigkeiten im Rohr müssen festgelegt werden. Da eine funktionelle Wärmeübertrager für eine Carnot-Batterie untersucht werden soll, müssen branchenrelevante Standards für die Analyse von Wärmeübertragern berücksichtigt werden.

Es müssen Konvergenz- und Divergenzbedingungen für den Solver festgelegt werden, um die Simulation bei unphysikalischen Ergebnissen, die durch instabile numerische Berechnungen verursacht werden, abzubrechen. Unerwünschte Simulationsszenarien wie Phasenwechsel im Sekundärfluid, negative Enthalpie beim Sekundärfluid oder Temperaturkonvergenz sollten ebenfalls berücksichtigt werden. In diesem Zusammenhang kommen Abbruchevents für Solve_ivp zum Einsatz.

Im Vorverarbeitungsschritt wird die Solve_ivp durch eine weitere Funktion in Python aufgerufen, die bestimmte Eingaben wie den Innendurchmesser beider Rohre, den Massenstrom und die Zusammensetzungen sowie den Eintrittsdruck des Arbeitsfluids und den Austrittsdruck des Sekundärfluids annimmt und eine Simulation durchführt. Dies ermöglicht eine systematische Analyse mit dem gegebenen Parametergitter. Ein Filter kann in dieser Funktion definiert werden, um hohe Geschwindigkeiten und Phasenwechsel im Sekundärfluid zu vermeiden. Das bedeutet, dass die Geschwindigkeit im Arbeitsfluid $u_{wf} < 10 \text{ m/s}$ und im Sekundärfluid $u_{sf} < 1,5 \text{ m/s}$ nicht überschreiten sollte, wie im Lehrbuch [32, S. 660] empfohlen wird. Hohe Geschwindigkeiten führen zu hohen Druckverlusten, die vermieden werden müssen. Es wird auch überprüft, ob die spezifische Austrittsenthalpie im Sekundärfluid zu einer Phasenänderung führt, indem sie mit der Sättigungsenthalpie verglichen wird.

Nach der Lösung der Differentialgleichungen müssen unerwünschte Simulationsergebnisse herausgefiltert werden. Dies umfasst hohe Gesamtdruckverluste im Arbeitsfluid $dp_{wf} > 0,1 \cdot$

p_{wf_ein} und im Sekundärfluid ($dp_{sf} > 70$ kPa), wie es im Lehrbuch [32, S. 660-661] empfohlen wird. Ebenso sollten Simulationen vermieden werden, die zu einem Gesamtwärmestrom (über die gesamte Länge übertragene Wärmemenge) von weniger als $\dot{Q} < 1000$ W oder mehr als $\dot{Q} > 10$ kW führen, da dies die energetischen Grenzen der untersuchten Carnot-Batterie sind. Darüber hinaus werden die Simulationen ausgewählt, bei denen Temperaturdifferenz an Ort auf 1.0 K konvergiert $T_{wf}(x) - T_{sf}(x) \cong 1.0$ K, Dazu enthält bei denen das Arbeitsfluid alle drei Phasen - unterkühlte Flüssigkeit, Nassdampf und überhitzter Dampf.

4.4 Parameterraumerzeugung

Für eine systematische Analyse und Datenerzeugung ist ein gleichmäßiges Sampling des Parameterraums von entscheidender Bedeutung, um sicherzustellen, dass die gesamte Parameterintervalle homogen abgedeckt wird und keine Redundanzen auftreten. Hierbei wird der Sobol-Algorithmus aus der SALib-Bibliothek [64] für das Sampling verwendet.

Der Sobol-Algorithmus ermöglicht die Erzeugung einer gleichmäßigen Verteilung von Parametern innerhalb bestimmter Intervalle. Dabei sollte die Samplinggröße eine Potenz von 2 sein (z. B. 2^8). In dieser Arbeit wird die Rohrdurchmesser gemäß dem Standard für Rohrgrößen ausgewählt, und die folgenden Parameter wird in den Sobol-Algorithmus eingegeben: der Druck des Arbeitsfluids, der Massenstrom des Sekundärfluids, das Massenstromverhältnis ($\frac{\dot{m}_s}{\dot{m}_w}$) sowie die Molenbrüche jeder Komponente im Arbeitsfluid (x_A , x_B und x_C). Die Parameterintervalle werden in Tabelle 2 dargestellt.

Es wurde sichergestellt, dass die Zusammensetzung nach der Parametererzeugung auf 1.0 summiert wird. Darüber hinaus wurde der Molenbruch von Pentan ausgeschlossen, wenn er größer als 0,65 war. Diese Entscheidung wurde getroffen, weil das untere Druckniveau für die Anwendung in Carnot-Batterien zu niedrig ist. Durch diese Maßnahme konnten unerwünschte Simulationen frühzeitig herausgefiltert werden, wodurch Rechenzeit gespart wird. Für jeden Versuch wird der Durchmesser beider Rohre konstant gehalten, während die anderen Eingabeparameter im Sobol-Algorithmus festgelegt wurden, um einen Parameterraum zu erstellen. Mit einer Stichprobengröße (auf Eng. Sampling Size) von 2^{13} werden ungefähr 15.600 Parameter erzeugt und im Anschluss simuliert. Jede Simulation entspicht einem Aufrufe von `solve_ivp`. Zur Erforschung des Parameterraums wird das explizite Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung mit einer absoluten Toleranz von 10^{-5} und einer relativen Toleranz von 10^{-3} verwendet. Der Parameterraum wurde in kleinere Batch-Listen aufgeteilt und durch Parallelisierung wurde für jeden Parameter eine Simulation

(Aufrufe von `Solve_ivp`) durchgeführt. Die Ergebnisse werden nach Abschluss des `Solve_ivp`-Abbruchevents und unter Berücksichtigung der zuvor festgelegten Kriterien ausgewertet. Die Ergebnisse, die alle erwünschte Kriterien erfüllen, werden als Datei gespeichert. Dies erlaubt die Erforschung des Parameterraums, um die optimalen Parameterintervalle für den Sobol-Algorithmus zu identifizieren, bei denen eine Vielzahl gültiger Simulationen erzielt werden kann.

Um möglichst genaue Datenpunkte für das MLP-Modell zu generieren, sollten Simulationen mit genaueren Lösern und niedrigeren Konvergenztoleranzen ausgeführt werden. *DOP853*, ein explizites Runge-Kutta-Verfahren 8. Ordnung, bietet eine höhere Genauigkeit (niedrigere numerische Fehler bei der Integration) und Stabilität im Vergleich zum häufig verwendeten *RK45* (Runge-Kutta-Verfahren 4. und 5. Ordnung). Für diese Simulationen wird eine absolute Toleranz von 10^{-8} und eine relative Toleranz von 10^{-5} verwendet. Durch den Einsatz von *DOP853* können präzisere Datensätze erzeugt werden, was die Qualität der Trainingsdaten für neuronale Netzwerke erheblich verbessert und zu genaueren Vorhersagen führt. Deswegen wird in Rahmen dieser Arbeit *DOP853* Löser zur Erzeugung der Datenpunkte verwendet. Die Tabelle 2 zeigt die Parameterintervalle für jeden Eingabeparameter und untersuchten Durchmesser sowie die Gesamtanzahl der Simulationen und die Anzahl der Simulationen, deren Daten beim Training des neuronalen Netzwerks verwendet wurden.

Tabelle 2: Die untersuchten Durchmesser wurden als Eingangswerte für die Erzeugung des Parameterraums verwendet.

#	d_i [mm]	d_a [mm]	Anzahl der Simulationen	Anzahl der verwendeten Simulationen	\dot{m}_{sf} [kg/ s]	\dot{m}_{wf} [kg/ s]	p_{wf} [bar]	x_A [mol/ mol]	x_B [mol/ mol]	x_C [mol/ mol]
1	16	20	15622	6	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,7	$2,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,7	4 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
2	16	25	15611	1618	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,7	$2,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,7	4 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
3	20	30	485	100	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,1	$3,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,036	2 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
4	25	30	15639	1132	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,1	$3,0 \cdot 10^{-4}$ - 0,01	4 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
5	25	38	483	293	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,1	$3,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,035	2 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
6	30	50	971	199	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,1	$3,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,035	2 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65
7	38	50	491	44	$2,5 \cdot 10^{-3}$ - 0,1	$3,5 \cdot 10^{-4}$ - 0,035	2 - 25	0 - 1	0 - 1	0 - 0,65

Insgesamt wurden 49.302 Simulationen durchgeführt, von denen 3.392 Simulationen geeignete Ergebnisse lieferten, die innerhalb des gesuchten Intervalls lagen und den Übergang von überhitztem Dampf bis zu unterkühlten Flüssigkeit umfassten. Diese wurden für das Training des neuronalen Netzwerks verwendet. Das Ziel lag darin, den Innendurchmesser der Rohre zwischen 16 mm und 25 mm zu variieren. Da zusätzliche Daten durch Datenvermehrung (Data Augmentation) die Leistung des neuronalen Netzwerks verbessern können, wurden verschiedene Fälle mit unterschiedlichen Zusammensetzungen von Innen- und Außendurchmesser des Wärmeübertragers in den Trainingsdatensatz aufgenommen.

4.5 Datenerzeugung

Die geeigneten Simulationsergebnisse können für das Training verwendet werden, aber das neuronale Netzwerk benötigt einige Vorbereitungsschritte. Der erste Schritt besteht darin, künstliche Datenpunkte für das MLP-Modell basiert auf die berechnete ortaufgelöste h,p -Verläufe zu erzeugen, um mit den gegebenen spezifischen Enthalpien (h) und Drücken (p) am Einlass des Wärmeübertragers sowie einer beliebigen Rohrlänge (Δx) die Enthalpien und Drücke am Auslass zu berechnen. Das bedeutet, dass jeder Datenpunkt im Datensatz für das MLP-Modell einem hypothetischen Rohrproblem entspricht, bei dem die Eingabewerte h_{ein} und p_{ein} für beide Fluide am Eintritt liegen und die Zielwerte des MLP-Datensatzes den h_{aus} - und p_{aus} -Werten am Austritt dieses Rohrs entsprechen. Die h - und p -Werte an allen Orten werden mithilfe des physikalischen Modells in jeder Simulation berechnet. Hierbei ist ein Algorithmus erforderlich, um einen Datensatz für das MLP-Modell zu erzeugen, der verschiedene Längen, Eintrittswerte mit Austrittswerten und verschiedene Anfangsorte miteinander verbinden kann. Dies ermöglicht es dem Netzwerk, den Zusammenhang zwischen den Eingabewerten und den Ausgabewerten unabhängig vom Anfangsort relativ zur gesuchten Rohrlänge zu erlernen. Abbildung 11 zeigt ein Schema für den Datenerzeugungsalgorithmus.

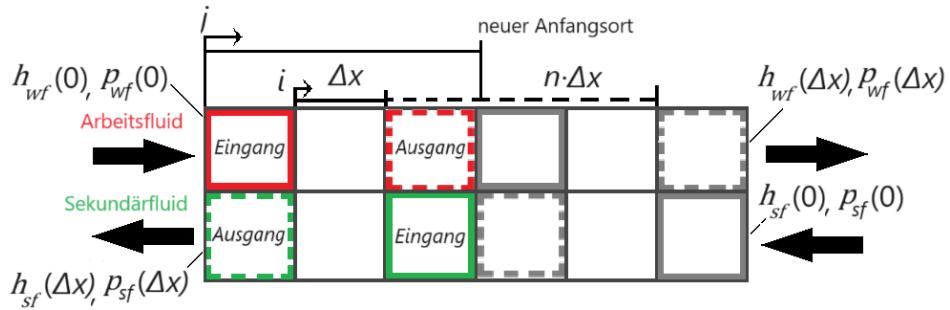


Abbildung 11: Schema des Datenerzeugungsalgorithmen, Arbeitsfluid ist In Rot und Sekundärfluid im Grün dargestellt. Δx entspricht Elementgröße Rohrlänge, Der Zähler i der Änderung der Länge, Zähler j der Änderung des Anfangsorte, n dem Anzahl der Elemente.

In Abbildung 11 ist der diskretisierte Wärmeübertrager dargestellt, wobei jede Zelle einem Rohrelement entspricht. An jedem Punkt entlang der Zelle sind die Werte für h und p am Ein- und Auslass bekannt. Der Abstand zwischen den Zellen entspricht der zuvor verwendeten Gittergröße bei der örtlichen Diskretisierung. Es wird zwei Schleifen definiert, die über die Zellen iterieren. Die erste Schleife mit dem Zähler i dient dazu, die Länge des Rohrelements zu ändern. In jedem Schritt wird die Anzahl der durchlaufenen Zellen n mit dem Zähler i multipliziert, bis die gesamte Wärmeübertragerlänge erreicht ist. Dieser Wert wird als Rohrlänge Δx im Eingabedatensatz gespeichert. Dabei werden die Werte für h_{wf} und p_{wf} des Arbeitsfluids an jedem Zielpunkt als Zielwerte und die Werte für h_{sf} und p_{sf} des Sekundärfluids als Eingabewerte gespeichert. Im Gegensatz dazu werden die Werte für h_{wf} und p_{wf} an der Anfangsposition als Eingabewerte und die Werte für h_{sf} und p_{sf} als Zielwerte gespeichert. Die zweite Schleife mit dem Zähler j dient dazu, den Anfangsort zu ändern. Sie beginnt am ersten Punkt und wird bis zum vorletzten Punkt vor der letzten Zelle iteriert.

Nachdem die spezifischen Enthalpien und Drücke des Arbeitsfluids am Eintritt jedes Rohres sowie entsprechend für das Sekundärfluid am Austritt jedes Rohres als Eingabewerte gespeichert wurden, müssen diese mit weiteren konstanten Informationen wie dem Rohrdurchmesser, dem Massenstrom und den Zusammensetzungen vervollständigt werden. Tabelle 3 zeigt die Eingabe- und Zielmatrizen.

Tabelle 3: Struktur der Eingaben und Zielwertdatensatz, mit zwei Datenpunkten als Beispiel.

Eingabedatensatz											
Δx [m]	$h_{wf}(0)$ [J/kg]	$p_{wf}(0)$ [Pa]	\dot{m}_{wf} [kg/s]	$h_{sf}(\Delta x)$ [J/kg]	$p_{sf}(\Delta x)$ [Pa]	\dot{m}_{sf} [kg/s]	x_A [mol/mol]	x_B [mol/mol]	x_C [mol/mol]	d_i [mm]	d_a [mm]
0.5	$h_{wf}(0)$	$p_{wf}(0)$	\dot{m}_{wf}	$h_{sf}(0.5)$	$p_{sf}(0.5)$	\dot{m}_{sf}	x_A	x_B	x_C	d_i	d_a
2	$h_{wf}(1)$	$h_{wf}(1)$	\dot{m}_{wf}	$h_{sf}(3)$	$h_{sf}(3)$	\dot{m}_{sf}	x_A	x_B	x_C	d_i	d_a
Zielwertdatensatz											
$h_{wf}(\Delta x)$ [J/kg]	$p_{wf}(\Delta x)$ [Pa]		$h_{sf}(0)$ [J/kg]			$p_{sf}(0)$ [Pa]					
$h_{wf}(0.5)$	$p_{wf}(0.5)$		$h_{sf}(0)$			$h_{sf}(0)$					
$h_{wf}(3)$	$h_{wf}(3)$		$h_{sf}(1)$			$h_{sf}(1)$					

4.6 Datenvorbereitung für das MLP-Modell

Der gesamte Datensatz besteht aus 2,2 Millionen von Datenpunkten, die aus verschiedenen Simulationen mithilfe des Datenerzeugungsalgorithmus gewonnen wurden. Jedoch sind diese Daten nicht direkt für das MLP-Modell geeignet. Daher müssen einige Vorbereitungsschritte für die Eingabe- und Zielwertdatensätze durchgeführt werden.

Zunächst werden die Daten gemäß der Holdout-Methode gemischt und gespaltet, um sicherzustellen, dass die Daten gleichmäßig über die Datensätze verteilt sind. Danach werden sie in eine vergleichbare Skala normalisiert, um sicherzustellen, dass alle Datenpunkte in einem ähnlichen Wertebereich liegen.

Schließlich werden nach Bedarf zufällig Teilmengen der Daten für das Training ausgewählt, um sicherzustellen, dass das Modell mit ausreichend Daten trainiert wird und gleichzeitig die Überanpassung vermieden wird.

Aufteilung des Gesamtdatensatzes

Wie bereits im Grundlagenkapitel erläutert wurde, sollten die Daten für die Hold-out Methode zum Bewertung des MLP-Modell in drei Datensätze unterteilt werden. Zunächst wird 20 % des Gesamtdatensatzes für das Testen reserviert und für das neuronale Netzwerk bereitgestellt. Die verbleibenden 80 % der Daten werden erneut in zwei Datensätze aufgeteilt, wobei 80 % für das Training verwendet werden und die verbleibenden 20 % als Dev-Datensatz für den Early Stopping-Algorithmus dienen.

Normalisierung

Jeder Vektor im Datensatz repräsentiert verschiedene Eigenschaften der Flüssigkeit und der Rohrgeometrie, die unterschiedliche Skalen haben und daher nicht direkt miteinander vergleichbar sind. Neuronale Netzwerke erleiden deutliche Leistungsverluste, wenn die Daten unterschiedliche Skalen aufweisen. Dieses Problem kann durch Normalisierungsfunktionen behoben werden. Die einfachste Normalisierungsfunktion ist die MinMax-Funktion, Dadurch wird in dieser Arbeit alle Eingabevektoren und Zielwertvektoren nach der ersten Aufteilung zwischen 0 und 1 skaliert. Diese Funktion wird vom Softwarepaket Scikit-learn bereitgestellt. Gleichung (41) zeigt die MinMax-Funktion, wobei x für jeden Eingabevktor (Spalte) im Eingangsdatensatz steht und x_{norm} den normalisierten Vektor darstellt. [46, S. 119-120]

$$x_{norm} = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (41)$$

4.7 Entwicklung des MLP-Modells

In diesem Kapitel wird ein Ersatzmodell basiert auf der Grundlagen entwickelt. Das Softwarepaket Scikit-Learn stellt den MLP-Regressor zur Verfügung, der sich für Regressionsaufgaben eignet. Das MLP-Modell wird als Klasse in Python definiert, um verschiedene Funktionen für Training, Optimierung und wichtige Modellparameter als Attribute übersichtlich und strukturiert bereitzustellen. Die wichtigsten Funktionen umfassen das Laden der Daten, die Datenvorbereitung, das Training, die Hyperparameteroptimierung, die Validierung und eine Funktion zur Darstellung der Lernkurve. In Abbildung 12 wird der detaillierte Ablaufplan des MLP-Modells dargestellt.

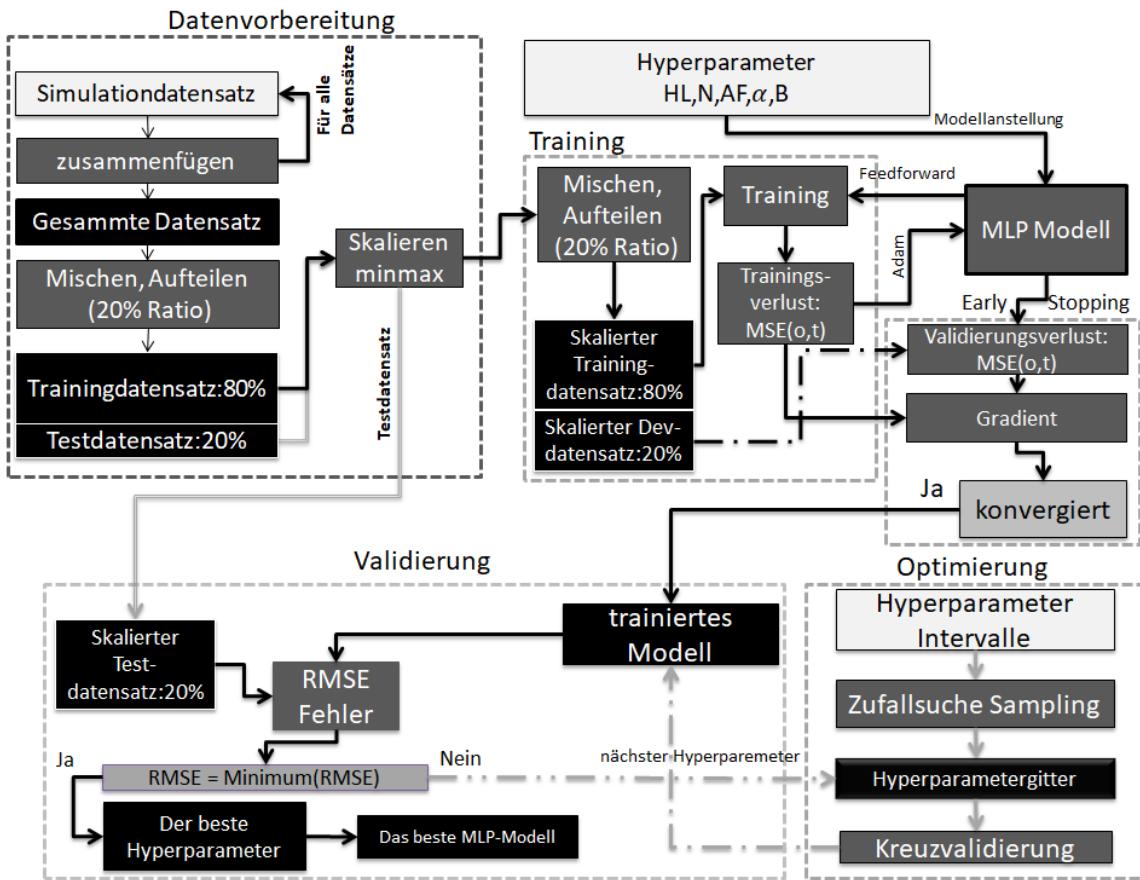


Abbildung 12: Vorgehensplan zur Entwicklung des Ersatzmodells (MLP Modell), Hyperparameteroptimierung und Validierung.

Das Modell wird zunächst mit einem MLP-Regressor initialisiert. Dabei werden Hyperparameter wie die Anzahl der Schichten und Neuronen als Vektor festgelegt. Die Adam-Methode wird als Optimierungsverfahren gewählt, und die Aktivierungsfunktion in den Perzeptronen wird bestimmt. Weiterhin werden die Batch-Größe, der L2-Regularisierungsfaktor und die Lernrate angegeben. Der MLP-Regressor führt das Batch-Training und die L2-Regularisierung durch, sobald diese Hyperparameter festgelegt wurden. Für das normale Training wird das Early Stopping ausgeschaltet und ein eigener Early Stopping-Algorithmus verwendet. Der Grund dafür ist, dass der Early Stopping-Mechanismus von Scikit-Learn mit der Bestimmtheitsmaß R^2 arbeitet, was zu Diskrepanzen bei der Darstellung der Lernkurven in einem Diagramm führen kann.

4.8 Hyperparameteroptimierung

Vor dem Training wird eine zweite Aufteilung durchgeführt, wobei der Eingabedatensatz des Trainingsdatensatzes mithilfe der Methode der partiellen Anpassung (MLP.partial_fit) an den Zielwertdatensatz angepasst wird. Anschließend werden die Trainingsverluste aus den

Modellausgaben und dem Zielwertdatensatz mithilfe der RMSE-Funktion berechnet. Dann wird der Eingabedatensatz des Dev-Datensatzes dem Modell übergeben, und die Modellausgaben sowie der Zielwertdatensatz des Dev-Datensatzes werden mit der RMSE-Funktion verwendet, um die Validierungsverluste zu berechnen. Diese Verluste werden gespeichert, um die Lernkurven darzustellen. Die Early Stopping-Methode wird hier angewendet, um den Trainingsverlauf zu überwachen und Überanpassung zu vermeiden. Hierbei werden die Gradienten der Validierungsverluste und Trainingsverluste berechnet. Wenn der Mittelwert des Gradienten der Validierungsverluste über eine bestimmte Anzahl von Epochen positiv wird oder einen bestimmten Toleranzwert erreicht und keine weitere Verbesserung aufweist, wird das Training abgebrochen. Während des Trainings wird kontinuierlich das Modell mit dem minimalen Validierungsverlust gespeichert, um die beste Generalisierungsfähigkeit zu erzielen.

Für die Hyperparameteroptimierung (HPO) wurde eine Coarse-to-Fine-Studie durchgeführt. Das bedeutet, dass die Suche mit einer groben Einschätzung der Intervalle begann und die Auflösung der Intervalle kontinuierlich erhöht wurde, bis eine akzeptable Toleranz für die Änderung des Generalisierungsfehlers erreicht wurde. Zunächst wurden für jeden Datensatz große Intervalle für verschiedene Aktivierungsfunktionen wie ReLU, Sigmoid und Tanh, sowie für verschiedene Anzahlen versteckter Schichten von 2 bis 4, Neuronen von 8 bis 256, Lernrate von 10^{-2} bis 10^{-5} , Batchgrößen zwischen 64 und 512 und Regularisierungsfaktoren zwischen 10^{-3} und 10^{-5} für 50 Kombinationen mithilfe einer Zufallssuche (RandomizedSearchCV) bestimmt. Dieses Verfahren ist sehr zeitaufwendig, aber es ermöglicht die Identifizierung schlechter Hyperparameter, und durch wiederholte Durchführung dieses Schritts können Muster in den Hyperparametern erkannt werden. Für weitere Schritte wurden aus den Hyperparameterintervallen die 10 besten Kandidaten erneut einer Zufallssuche unterzogen. Ab diesem Punkt wurde ein engerer Raum für die Lernrate, die Anzahl der Schichten und Neuronen bestimmt. Der Fine-Schritt umfasst eine Rastersuche (GridSearchCV) mit konstanter Lernrate und Aktivierungsfunktion sowie eine Bestimmung der besten Anzahl von Neuronen pro Schicht, der Batchgröße und des Regularisierungsfaktors, die nicht einfach zu erkennen sind. Nach erfolgreicher Hyperparameteroptimierung wurde das beste MLP-Netzwerk mit den besten Hyperparametern für den Datensatz trainiert. Die Hyperparameterraum und die beste Hyperparameter für MLP-Modell mit dem Trainingsdatensatz wird in Tabelle 4 dargestellt.

Tabelle 4: Verwendeter Hyperparameterraum der Zufallssuche für Hyperparameteroptimierung die MLP-Model. Die besten Parameter sind in fetschrift dargestellt.

Hyperparameter	Hyperparameterintervallen
Anzahl der verdeckten Schichten	1,2,3, 4
Anzahl der Neuronen	8,16,32,64,128, 256
Aktivierungsfunktion	Sigmoid, ReLU , Tanh
Lernrate	$10^{-2}, 10^{-3}, \mathbf{10^{-4}}, 10^{-5}$
Batchgröße	64,128, 256 , 512
Regularisierungsfaktor α	$10^{-3}, \mathbf{10^{-4}}, 10^{-5}$

4.9 Bewertung des MLP-Modells

Nach dem Training werden zunächst die Lernkurven aus den gespeicherten Trainings- und Validierungsverlustvektoren gezeichnet. Anhand dieser Kurven kann beurteilt werden, ob eine perfekte Anpassung erzielt wurde oder ob das Modell überangepasst ist. Durch die Early-Stopping-Methode wird das Modell bei dem niedrigsten Validierungsverlust gespeichert.

Als Nachbearbeitungsschritt werden die Temperaturen und spezifischen Entropien beider Fluide aus dem Testdatensatz mithilfe von Refprop berechnet. Anschließend werden die Zielwerte aus dem Testdatensatz mit den vorhergesagten Werten des MLP-Modells verglichen, die aus den Eingabewerten des Testdatensatzes generiert wurden. Zusätzlich werden die berechneten Temperaturen und Entropien verglichen. Dabei wird der Erste Hauptsatz mithilfe von Gleichung (15) und der Zweite Hauptsatz mithilfe von Gleichung (36) und (37) untersucht.

Das Erstellen von Kurvendiagrammen für örtliche Verläufe von Temperatur, Enthalpie und Druck kann durch erneutes Aufrufen des physikalischen Modells und Durchführung einer Simulation mit den festgelegten Eingaben wie Massenstrom, Durchmesser und Zusammensetzung sowie dem Druck des Arbeitsfluids erreicht werden. Die Ergebnisse können dann mithilfe des Datenerzeugungsalgorithmus für einen festen Anfangsort ($j = 0$) für verschiedene Rohrlängen von 0 bis L sortiert und skaliert werden. Anschließend werden die vorhergesagten Werte des MLP-Modells und die Ergebnisse des physikalischen Modells über die verschiedenen Rohrlängen Δx aufgetragen.

Die größte Herausforderung bei der Validierungsphase besteht jedoch darin, Kurvendiagramme für das Sekundärfluid zu erstellen. Das Problem liegt in der Datenerzeugungsmethode, bei der der Abstand Δx im Eingangsdatensatz dem Abstand zwischen dem Eintrittspunkt des Arbeitsfluids und einem beliebigen Punkt entspricht. Bei einem Gegenstrom-Wärmeübertrager haben die Fluide unterschiedliche Richtungen, und an einem beliebigen Punkt ist die Enthalpie und der Druck des Sekundärfluids unbekannt.

Validierung des Modells

Zur Validierung des MLP-Modells wird die sogenannte Hold-Out-Methode verwendet. Dabei wird ein Testdatensatz verwendet, der während der Datenvorbereitung für das MLP-Modell in einer Modelldatei gespeichert wird und nicht beim Training verwendet wird. Die erfolgreiche Vorhersage der Zielwerte dieses Datensatzes durch Angabe der Eingangswerte im MLP-Modell zeigt, wie gut das Modell in der Lage ist, unbekannte Datenpunkte zu generalisieren. Dies gewährleistet die Anwendbarkeit des Modells auf weitere Probleme, die in den meisten Fällen nicht dieselben Ergebnisse haben. Die Differenz zwischen den vorhergesagten Werten des Testdatensatzes und den tatsächlichen Zielwerten kann in einem Streudiagramm dargestellt werden. Dazu werden die Fehlermetriken Bestimmtheitsmaß R^2 , Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung (RMSE), mittlerer absoluter Fehler (MAE) und prozentualer mittlerer relativer Fehler (MRE %) berechnet und auf dem Diagramm dargestellt. Die Berechnung der RMSE-Fehler [46, S. 76] erfolgt gemäß Gleichung (43), während die MRE %-Fehler gemäß Gleichung (42) ermittelt werden. Hierbei entspricht t den Zielwerten und o der Ausgabe des MLP-Modells.

$$MRE\% = 100 \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{t_i - o_i}{t_i} \right| \quad (42)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t_i - o_i)^2} \quad (43)$$

Das Modell sollte anschließend thermodynamisch bewertet werden. Hierbei wird der erste Hauptsatz angewendet, indem die vorhergesagten spezifischen Enthalpienwerte am Ausgang des Wärmeübertragers und die bekannten spezifischen Enthalpienwerte am Eingang berücksichtigt werden. Idealerweise sollte die Abweichung bei der Energieerhaltung nahe Null liegen. Diese Abweichung wird in dieser Arbeit in Form eines Balkendiagramms dargestellt, das die Verteilung der Ergebnisse des ersten Hauptsatzes zeigt. Aufgrund der hohen Abweichung zwischen dem MLP-Modell und dem physikalischen Modell ist der Ansatz des Streudiagramms möglicherweise nicht deutlich genug.

Der zweite Hauptsatz wird durch die Berechnung der Entropieproduktionsströme aus den spezifischen Enthalpiewerten und dem Druck am Ausgang angewendet. Anschließend wird die Abweichung zwischen dem physikalischen Modell und dem MLP-Modell in einem Streudiagramm dargestellt. Dabei ist zu beachten, dass alle Entropieproduktionsströme positiv sind.

Feature-Importance-Analyse

Die Feature-Importance-Analyse (Wichtigkeitsbewertung der Eingabeparameter) ist eine statistische Methode zur Bewertung des Einflusses einzelner Eingangsparameter (Features) auf die Vorhersagegenauigkeit eines ML-Modells. Durch diese Methodik erhält man ein klares Bild davon, wie stark das Modell von jedem Eingangsparameter abhängt. [66]

Zunächst wird die Leistung des trainierten Modells mithilfe eines Testdatensatzes aus der Holdout-Methode gemessen, um eine Basislinie zu erstellen. Dies kann durch die Berechnung des RMSE-Fehlers erfolgen. Anschließend wird für jeden Eingangsparameter nacheinander eine Permutation durchgeführt. Dabei werden die Werte des zu untersuchenden Eingangsparameters zufällig durchmischt, während alle anderen Eingangsparameter unverändert bleiben. Diese Permutation bricht die Verbindung zwischen den Zielwerten und dem permutierten Eingangsparameter. [66]

Nach jeder Permutation wird die Leistung des Modells erneut gemessen, und die Abweichung zwischen der ursprünglichen Basisleistung und der Leistung nach der Permutation wird berechnet. Eine größere Abweichung, d.h. ein Anstieg des RMSE-Fehlers, deutet auf eine höhere Wichtigkeit des jeweiligen Eingangsparameters hin. [66]

Dieses Verfahren wird mehrfach wiederholt. In dieser Arbeit wird das Permutationsverfahren fünfmal durchgeführt, um die Robustheit der Ergebnisse zu erhöhen. Der durchschnittliche Anstieg des RMSE-Fehlers bzw. die Verschlechterung der Modellleistung über alle Permutationen hinweg wird als endgültiger Wichtigkeit für jeden Eingangsparameter berücksichtigt. Diese Werte werden in einem Histogramm für jeden Eingangsparameter dargestellt, sodass sie miteinander verglichen werden können. [66]

Es gibt jedoch einige wichtige Anmerkungen zu dieser Analyse. Bei stark korrelierten Eingangsparametern kann die Permutation eines Parameters die Bedeutung des anderen verringern, da das Modell weiterhin auf die Informationen des korrelierten Parameters zugreifen kann. Daher sollten die Korrelationen zwischen den Eingangsparametern sorgfältig untersucht und interpretiert werden. [66]

4.10 Datensatzgröße-Analyse

Die Analyse der Datensatzgröße spielt eine entscheidende Rolle bei der Optimierung der Leistung eines neuronalen Netzwerks. Indem wir den Einfluss der Datensatzgröße auf die Leistung des Modells untersuchen, können wir die minimale erforderliche Datensatzgröße bestimmen, um ein ausreichend trainiertes Netzwerk zu gewährleisten. Diese Erkenntnis ist entscheidend, um Überanpassungen zu vermeiden, die auftreten können, wenn das Netzwerk mit einer zu großen Menge an Trainingsdaten trainiert wird.

Zusammenfassend besteht die Methodik darin, dass die Netzwerke wiederholt trainiert und optimiert werden, wobei verschiedene prozentuale Anteile des gesamten Datensatzes zufällig ausgewählt und zur Schulung der besten Netzwerke verwendet werden. Anschließend erfolgt die Validierung der jeweiligen Netzwerke anhand ihrer Testdatensätze unter Verwendung von Fehlerkriterien sowie die thermodynamische Bewertung jedes Netzwerks, wie im vorherigen Kapitel ausführlich erläutert. Die Ergebnisse werden dann in Kurvendiagrammen veranschaulicht, wobei die Y-Achse den MRE (%) der vorhergesagten Ausgangswerte für die Validierung der jeweiligen neuronalen Netzwerke, den RMSE-Fehler bei der Berechnung des ersten Hauptsatzes und den RMSE-Fehler bei der Berechnung des Entropieproduktionsstroms zeigt. Die X-Achse zeigt die prozentuale Datengröße relativ zur Gesamtzahl der generierten Datenpunkte.

Bemerkungen

Der Grund für die Auswahl vom mittleren relativen Fehler MRE % als Fehlerkriterium bei der Validierung der Netzwerke liegt darin, dass dieser Fehler alle Ausgangsvektoren unabhängig von ihren Einheiten und Skalen in einer vergleichbaren Weise darstellt. Es wird die Datengröße von 0.001% bis 100% untersucht.

4.11 Break-Even-Analyse

Das Ziel bei Break-Even-Analyse des MPL-Modells ist die Bestimmung des Break-Even-Punkts, an dem die Verwendung eines neuronalen Netzes zur Vorhersage zeitlich vorteilhafter wird als die direkte Berechnung mit einem physikalischen Modell. Die Break-Even-Analyse ist eine wichtige Methode zur Bewertung der Effizienz neuronaler Netze für zeitkritische Anwendungen. Sie ermöglicht den Vergleich der Rechenzeit des neuronalen Netzes mit der des traditionellen Ansatzes und hilft bei der Entscheidung, wann die Verwendung des neuronalen Netzes sinnvoll ist.

Erzeugung von Parameterräumen: Acht verschiedene Szenarien werden untersucht, wobei die Sobol-Sampling-Größe von 2^1 bis 2^8 iterativ variiert wird, um unterschiedliche Eingangs-Parameterräume zu erzeugen.

Simulationen und Zeitmessung des physikalischen Modells: Für jeden generierten Parametersatz in jedem Szenario werden Simulationen mit dem physikalischen Modell durchgeführt. Die Rechenzeit des physikalischen Modells für die Generierung von Simulationsergebnissen wird für jeden Parametersatz gemessen, dies wird in dieser Arbeit *Rechenzeit-Datenpunkt* genannt.

Training und Optimierung neuronaler Netze: Für jeden Datensatz aus den Rechenzeiten-Datenpunkt werden neuronale Netze trainiert und optimiert. Die Generalisierungsfehler der trainierten Netze werden miteinander verglichen.

Auswahl des Referenzmodells fürs MLP-Modell: Das neuronale Netzwerk mit dem minimalen Generalisierungsfehler unter allen Szenarien wird als Referenz-MLP-Modell ausgewählt. Die Rechenzeiten für die Hyperparameteroptimierung, das Training und die Vorhersage des Referenzmodells werden gemessen.

Darstellung der Ergebnisse: Die Rechenzeit des physikalischen Modells für jedes Szenario wird auf der Y-Achse eines Diagramms dargestellt. Die X-Achse zeigt die Anzahl der Simulationen, die zur Generierung des gesamten Datensatzes für Training und Testen der neuronalen Netze verwendet wurden (entspricht auch der Anzahl der `Solve_ivp`-Aufrufe). Ein Polynom wird an die Rechenzeiten des physikalischen Modells angepasst, um den Trend zu verdeutlichen. Die Kurve des Polynoms wird verwendet, um den Schnittpunkt mit der Rechenzeitkurve für die Entwicklung des MLP-Modells zu bestimmen. Die Rechenzeit für die Entwicklung des besten optimalen MLP-Modells wird als konstante Linie dargestellt, da die Vorhersagezeiten für verschiedene Datenpunkte im Vergleich zu anderen Rechenzeiten vernachlässigbar sind.

Bestimmung des Break-Even-Punkts: Ein beliebiger Punkt außerhalb des betrachteten Simulationsbereichs wird mit der Polynomfunktion extrapoliert, um die Rechenzeitkurve des physikalischen Modells zu erweitern. Der Schnittpunkt dieser extrapolierten Kurve mit der Rechenzeitkurve für die Entwicklung des MLP-Modells wird als Break-Even-Punkt bezeichnet. Die Anzahl der Simulationen bzw. `Solve_ivp`-Aufrufe auf der X-Achse bei diesem Punkt wird als "kritische Anzahl der Simulationen" bezeichnet. Ab dieser Anzahl ist die Verwendung des MLP-Modells mit geringem Fehler zeitlich vorteilhaft.

5 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der MLP-Modelle sowie ihre Interpretationen diskutiert, um die Eignung des MLP-Modells zu überprüfen. Zunächst erfolgt eine Validierung des MLP-Modells anhand eines Testdatensatzes, bei dem die spezifische Enthalpie und Temperatur in einem Streudiagramm dargestellt werden. Des Weiteren wird eine thermodynamische Bewertung des MLP-Modells anhand des ersten und zweiten Hauptsatzes durchgeführt. Darüber hinaus werden verschiedene Szenarien untersucht, in diesen Szenarien wird der Enthalpieverlauf in einem Wärmeübertrager mit konstanten Massenströmen und Zusammensetzungen mithilfe des MLP-Modells vorhergesagt. Durch Variation von Durchmesser und Druck des Arbeitsfluids am Eintritt werden die Interpolations- und Extrapolationsfähigkeiten des neuronalen Netzwerks im Vergleich zu den Zielwerten aus dem physikalischen Modell bewertet. Anschließend wird der Einfluss der Datensatzgröße auf die Leistung des Modells sowie der Einfluss auf die Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze ausgewertet. Abschließend wird im Rahmen einer Break-Even-Analyse die Rechenzeit des physikalischen Modells bei verschiedenen Optimierungsversuchen mit einem beliebigen neuronalen Netzwerk verglichen, um festzustellen, ab welchem Punkt das MLP-Modell zeitlich vorteilhaft ist.

5.1 Gesamtdatensatz

Die Verteilung der Datenpunkte im gesamten Datensatz wird in Abbildung 13 dargestellt, wobei die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids sowohl in den Zielwerten als auch in den Eingangswerten auf der x-Achse gezeigt wird; die y-Achse zeigt die Verteilung in Prozent.

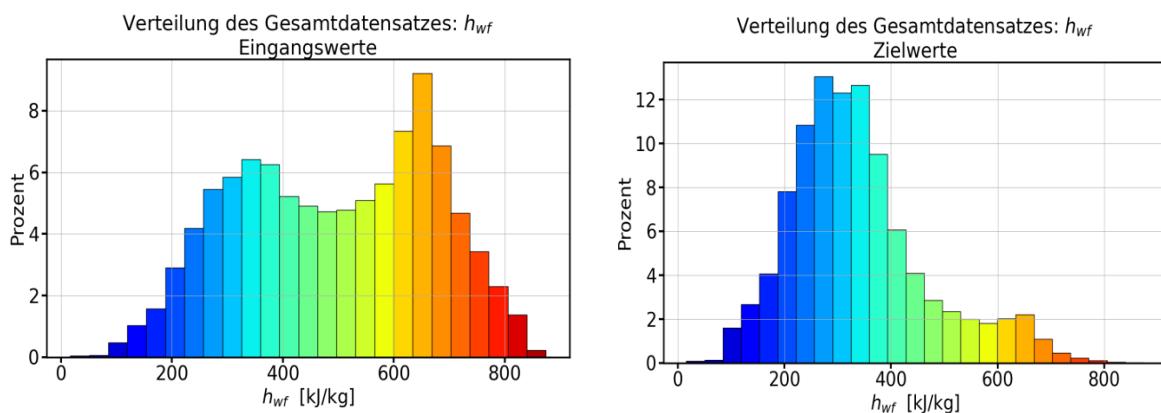


Abbildung 13: Verteilung der spezifischen Enthalpie von Eingangswerten und Zielwerten im Gesamtdatensatz.

In Abbildung 13 ist zu erkennen, dass die Datenpunkte bei den Zielwerten nicht gleichmäßig verteilt sind wie bei den Eingangswerten. Etwa 56 % der gesamten Datenpunkte konzentrieren sich im Bereich zwischen 200 kJ/kg und 400 kJ/kg, während weniger als 1 % der gesamten Daten unter 100 kJ/kg liegen und insgesamt etwa 6 % der Daten über 600 kJ/kg liegen. Diese Ungleichmäßigkeit könnte die Generalisierungsfähigkeit des Modells in Bereichen mit niedriger Datendichte beeinträchtigen, da das Modell während des Trainings weniger Beispiele (Datenpunkte) für diese Werte lernt. Gleichzeitig könnte die zehnfache Anzahl der Datenpunkte im Bereich zwischen 200 kJ/kg und 400 kJ/kg die Wahrscheinlichkeit der Überanpassung an diese Datenpunkte erhöhen, was die Leistung des MLP-Modells verringern kann.

5.2 Validierung des MLP-Modells

Um die Frage zu beantworten, ob das MPL-Modell das Potenzial hat, eine geeignete Alternative zum physikalischen Modell zu sein, wird zunächst das MLP-Modell gemäß den in der Methodik erläuterten Methoden mit einem Testdatensatz bewertet. Dieser Testdatensatz besteht aus 439.121 Datenpunkten (20 % von insgesamt 2.195.602 Datenpunkten). Fehlerkriterien wie die Quadratwurzel des mittleren quadratischen Fehlers (RMSE), der mittlere absolute Fehler (MAE), der mittlere relative Fehler (MRE) und das Bestimmtheitsmaß (R^2) werden verwendet, um die Übereinstimmung zwischen den Zielwerten und den Ausgaben des MLP-Modells zu beurteilen. Dies dient der Untersuchung der Generalisierungsfähigkeit des Modells und der Sicherstellung, dass weder eine Unteranpassung noch eine Überanpassung während des Trainings aufgetreten ist. Abbildung 14 präsentiert zwei Streudiagramme, die die Fehler zwischen dem physikalischen Modell und dem MLP-Modell darstellen. Das MLP-Modell entspricht dem optimierten neuronalen Netzwerk, das mit dem Trainingdatensatz von Gesamtdatensatz trainiert wurde.

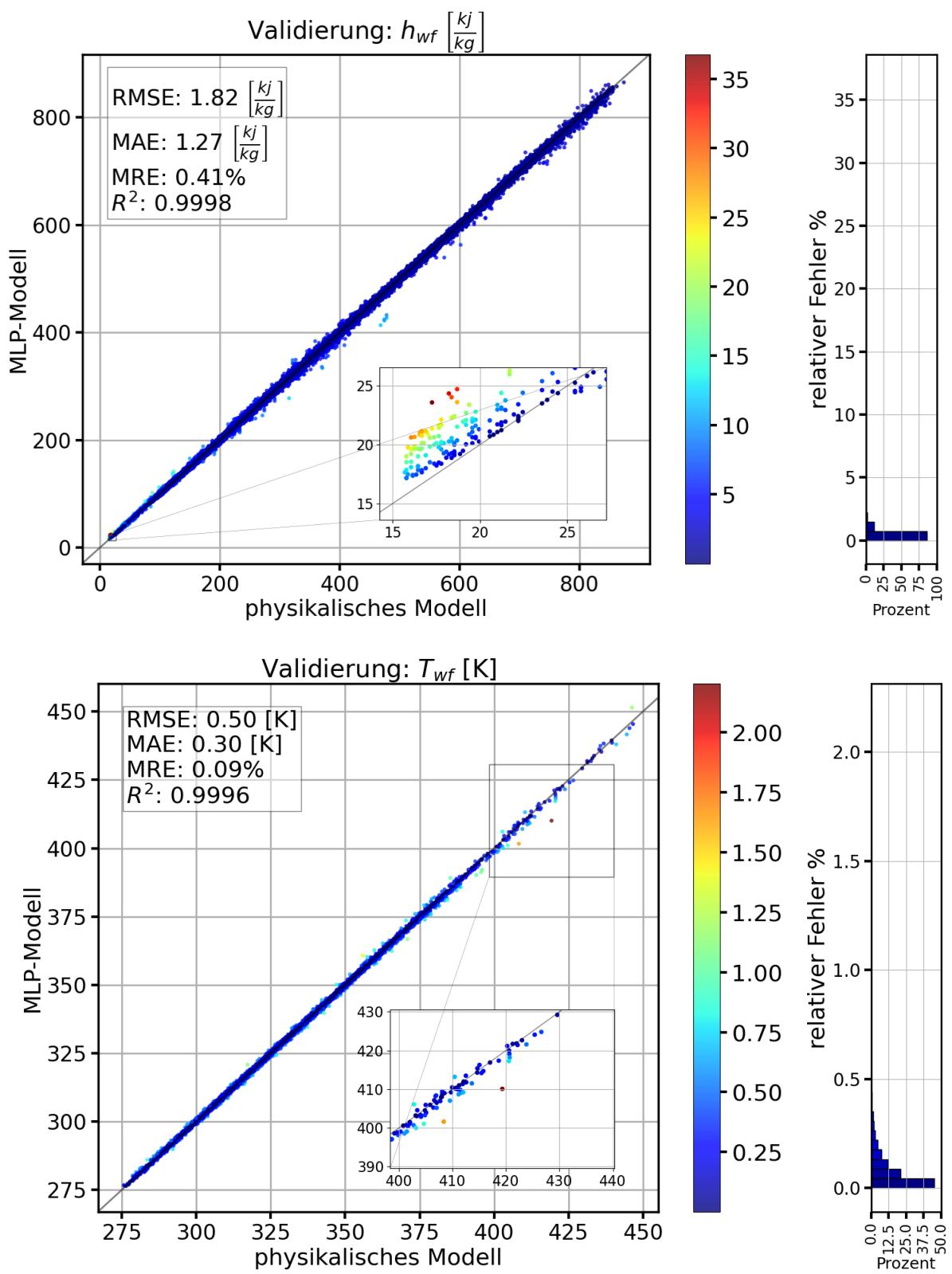


Abbildung 14: Bewertung des besten MLP-Modells mit dem Testdatensatz , x-Achse :spezifische Enthalpie und Temperatur von Arbeitsfluid am Austritt aus dem physikalischen Modell , y-Achse: vorhergesagte spezifische Enthalpie aus dem MLP-Modell und berechnete Temperatur daraus.

Die x-Achse des oberen Diagramms entspricht der spezifischen Enthalpie des Arbeitsfluids in den Zielwerten des Testdatensatzes, wie sie vom physikalischen Modell berechnet wurden. Die y-Achse des oberen Diagramms zeigt die spezifische Enthalpie am Austritt, wie sie vom MLP-Modell vorhergesagt wurde, basierend auf den Eingabewerten des Testdatensatzes. Im unteren Diagramm wird die Temperatur aus der vorhergesagten spezifischen Enthalpie und dem Druck mithilfe von Refprop berechnet und auf der y-Achse als vom MLP-Modell dargestellt. Auf der x-Achse werden die Temperaturen aus der spezifischen Enthalpie der Zielwerte des Testdatensatzes dargestellt, wie sie vom physikalischen Modell berechnet wurden. Für die Darstellung wurden 10.000 Datenpunkte des Testdatensatzes zufällig ausgewählt.

In der oberen linken Ecke sind verschiedene Fehlerkriterien RMSE, MAE, MRE% und R^2 dargestellt. Die Farbbalken auf der Rechten Seite zeigen die relativen Fehler zwischen die Modellsvorhersage und Zielwerte, während das Balkendiagramm die Verteilung der Fehler darstellt. Auf der X-Achse des Balkendiagramms wird der Prozentsatz der Datenpunkte und Auf der Y-Achse die relative Fehler dargestellt.

R^2 für die vorhergesagte spezifische Enthalpie basierend auf den Eingangswerten des Testdatensatzes beträgt 0,9998, was nahe an einer perfekten Anpassung ($R^2 = 1.0$) liegt. Der maximale relative Fehler beträgt 35 %, tritt jedoch nur bei einigen Datenpunkten im Bereich der spezifischen Enthalpie zwischen 15 und 25 kJ/kg auf. Ein Balkendiagramm verdeutlicht, dass über 90 % der Datenpunkte einen relativen Fehler von unter 1,5 % aufweisen, wobei jeder Balken einem relativen Fehler von 0,7 % entspricht. Der mittlere relative Fehler für die gesamte Testdatensatzspezifische Enthalpie beträgt 0,41 %, was auf eine sehr geringe Generalisierungsfehler hinweist und die hohe Genauigkeit des neuronalen Netzwerks bei unbekannten Eingangswerten bestätigt.

Die hohe Genauigkeit lässt sich teilweise darauf zurückführen, dass etwa 1,3 Millionen Datenpunkte zum Training des neuronalen Netzwerks verwendet wurden, wobei eine breite Variation der Rahmenbedingungen im Wärmeübertrager berücksichtigt wurde. Die Simulationen wurden gezielt ausgewählt, um Wärmeströme \dot{Q}_h zwischen 1 kW und 10 kW zu übertragen und die Austrittstemperatur des Sekundärfluids ständig unter 98 ° C zu halten, um den Phasenwechsel zu vermeiden. Infolgedessen enthalten viele Datenpunkte ähnliche spezifische Enthalpie-Werte im Bereich von 100 kJ/kg und 800 kJ/kg. Die Wiederholung von Daten verstärkt die Gewichtungen im MLP-Modell und verbessert die Netzwerkleistung, jedoch sollte darauf geachtet werden, dass die Datenpunkte gleichmäßig verteilt sind, um eine verzerrte Vorhersage zu vermeiden.

Das Streudiagramm der Temperatur zeigt eine Verschlechterung des Bestimmtheitsmaßes um $2 \cdot 10^{-4}$, während der mittlere relative Fehler abnimmt. Die Ursache für die Verringerung der relativen Fehler liegt darin, dass Temperaturverläufe im Vergleich zur spezifischen Enthalpie geringere Skalenänderungen aufweisen. Eine weitere Erklärung für das niedrigere R^2 könnte sein, dass die Temperatur in Refprop unter Verwendung von gegebenem Druck und spezifischer Enthalpie berechnet wird. Die Fehler, die bei der Druckvorhersage und der Enthalpievorhersage auftreten, werden dadurch addiert, was zu einer größeren Fehlermenge führt.

Der RMSE der berechneten Arbeitsfluidtemperatur T_{wf} aus der vorhergesagten spezifischen Enthalpie des Arbeitsfluids beträgt 0,46 K, während der RMSE des Sekundärfluids T_{sf} , $RMSE_{T_{sf},aus} = 0,15$ K beträgt. Beide RMSE-Fehler liegen unter der angenommenen Konvergenztemperaturdifferenz von 1 K zwischen beiden Fluiden, was darauf hinweist, dass diese Fehler bei der Anwendung des MLP-Modells keine signifikante Rolle spielen.

Die RMSE-Fehler zwischen dem vorhergesagten Druck des Arbeitsfluids und dem Zielwert des Arbeitsfluiddrucks beträgt 1,25 kPa mit einem MRE von 0,09 %, während er beim Sekundärfluid 0,17 kPa mit einem relativen Fehler von 0,07 % beträgt. Die Streudiagramme für Temperaturen und Druck beider Fluide sind im Anhang verfügbar.

5.2.1 Herausforderungen

Es ist wichtig zu beachten, dass die Verteilung der Ausgangswerte nicht vollständig kontrolliert werden kann, da nur die Eingangswerte des physikalischen Modells mithilfe des Sobol-Sampling-Algorithmus gleichmäßig eingegeben werden können. Dies stellt eine Herausforderung dar, um die Trainingsdatensätze möglichst uniform zu halten und Überanpassungsszenarien aufgrund hoher Datendichte in bestimmten Bereichen zu vermeiden.

Eine weitere Herausforderung bestand in der Hyperparameteroptimierung (HPO). In dieser Arbeit wurden nur zwei Versuche mit Zufallssuche und ein Versuch mit Rastersuche innerhalb begrenzter Hyperparameterintervalle durchgeführt. Aufgrund der Speicherkapazität des Rechners war die Anzahl der versteckten Schichten auf vier begrenzt und die Anzahl der Neuronen auf bis zu 256 beschränkt.

Das Streudiagramm zeigt jedoch, dass die relativen Fehler für die meisten Werte für die Datenpunkte im Bereich von 100 kJ/kg und 800 kJ/kg unter 5 % liegen. Die größten Fehler treten im Bereich zwischen 15 kJ/kg und 25 kJ/kg auf, wo die Datenpunktdichte im Vergleich zu anderen

Bereichen im Diagramm sehr niedrig ist. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass das neuronale Netzwerk auf Basis des RMSE-Fehlers optimiert wurde, wobei der RMSE-Fehler bei mittleren Enthalpiewerten sehr klein ist. Beispielsweise beträgt der relative Fehler bei einem RMSE-Fehler von 5 kJ/kg im Vergleich zu einem mittleren Enthalpiewert von 450 kJ/kg ungefähr 1,1 %. Im Gegensatz dazu beträgt der relative Fehler bei einer spezifischen Enthalpie von 15 kJ/kg 34%, da diese Datenpunkte im Trainingsdatensatz seltener vorkommen und der Adam-Algorithmus die Netzwerkgewichte nicht optimal auf diesen Teil des Datensatzes abstimmen konnte.

5.2.2 Verbesserungs-Strategien

Eine Strategie zur Verbesserung der Leistung der ML-Modelle ist sogenannte Datenaugmentation [67]. Diese Methode zielt darauf ab, die Anzahl der Datenpunkte in Bereichen mit niedriger Datendichte zu erhöhen. Hierfür könnten Simulationen im Trainingsdatensatz identifiziert werden, die sich in Bereichen mit geringer Datendichte befinden, und diese Simulationen könnten mit geringfügigen Änderungen wiederholt werden, um ausreichend Datenpunkte im gesamten Datensatz hinzuzufügen. Anschließend könnte das neuronale Netzwerk erneut auf der Grundlage dieses erweiterten Datensatzes optimiert werden. Obwohl die Anzahl der Sonderfälle im Vergleich zum gesamten Trainingsdatensatz vernachlässigbar sein kann und einige dieser Sonderfälle möglicherweise in einem gut trainierten Modell nicht signifikant sind, könnten Bereiche mit niedriger Datendichte potenzielle Schwachstellen darstellen, insbesondere wenn sie für das Problem entscheidend sind. Daher kann die Anwendung von Datenaugmentation auch in diesen Fällen sinnvoll sein, um die Modellleistung weiter zu verbessern und die Robustheit des Modells zu erhöhen. [67]

Es könnte auch untersucht werden, wie die Reduzierung der Anzahl der Datenpunkte in Bereichen mit hoher Datendichte die Generalisierungsfähigkeit des Modells beeinflusst. Es gibt neue Methoden wie *Deep Imbalanced Regression* [68] und *Uniform-in-phase-space sampling* [69]. Diese Methoden verwenden ein weiteres ML-Modell, um aus dem Datensatz zu lernen und ein gezieltes Downsampling durchzuführen, um die Redundanz der Daten zu verringern und die Verteilung der Daten zu glätten.

Während der Analyse der HPO-Ergebnisse wurde beobachtet, dass die Genauigkeit des Modells stark von der Anzahl der versteckten Schichten und der Lernrate abhängt. Daher stellt weitere Schritte in der HPO und die Erweiterung der Hyperparameterintervalle, insbesondere bei der Lernrate und der Anzahl der versteckten Schichten, ein erhebliches Verbesserungspotenzial für die Genauigkeit des neuronalen Netzwerks dar.

5.3 Thermodynamische Bewertung des MLP-Modells

Die Validierung des MLP-Modells mit dem Testdatensatz ergibt niedrige RMSE-Fehler zwischen allen Ausgaben und ihren Zielwerten, was auf eine starke Generalisierungsfähigkeit des MLP-Modells hinweist. Es ist jedoch wichtig zu betonen, dass eine Kreuzvalidierung des neuronalen Netzwerks und eine hohe Generalisierungsfähigkeit keine thermodynamische Gültigkeit des MLP-Modells garantieren. Um sicherzustellen, dass das MLP-Modell thermodynamisch gültig ist, müssen der erste und zweite Hauptsatz der Thermodynamik untersucht werden.

5.3.1 Bewertung der Einhaltung des ersten Hauptsatzes

Bei der Enthalpiedifferenz zwischen Ein- und Ausgang des Arbeitsfluids und des Sekundärfluids sollte nach dem Ersten Hauptsatz null erreichen. Allerdings treten sowohl im physikalischen Modell als auch im MLP-Modell Fehler auf. In der Auswertung des Ersten Hauptsatzes werden nur die Fehler des MLP-Modells betrachtet, da der absolute Fehler im physikalischen Modell unter 10^{-10} W liegt. Diese geringe Fehlerquelle ist auf Diskretisierungs- und numerische Fehler bei der Integration mit dem Runge-Kutta-Löser zurückzuführen. Das MLP-Modell hingegen ist nicht in der Lage, einen vergleichbaren niedrigen Fehler bei der Energieerhaltung zu erreichen. Abbildung 15 zeigt ein Balkendiagramm, das die Auswertung des ersten Hauptsatzes im Wärmeübertrager darstellt. Auf der x-Achse sind die Fehler beim ersten Hauptsatz durch den Ansatz des MLP-Modells dargestellt, während die y-Achse den Prozentsatz der Daten angibt.

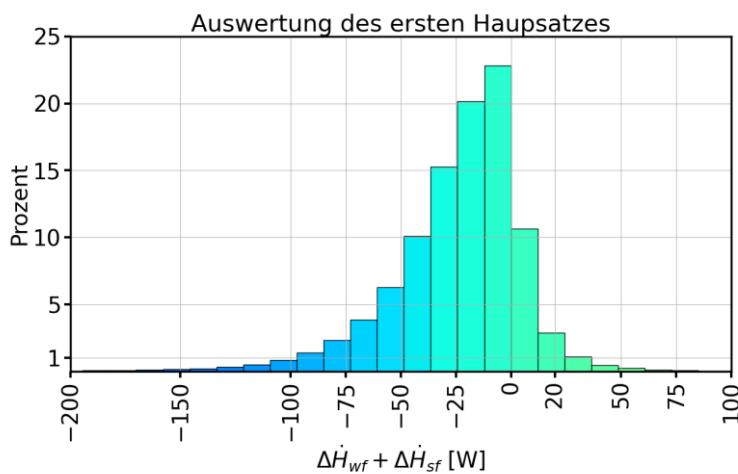


Abbildung 15: Darstellung des Ersten Hauptsatzes im Wärmeübertrager durch Verwendung des MLP-Modells.

Der RMSE-Fehler bei der Vorhersage der spezifischen Enthalpie des Arbeitsfluids beträgt etwa 1,82 kJ/kg und bei Sekundärfluid etwa 0,61 kJ/kg. Diese Fehler in den spezifischen Enthalpien beeinflussen den Ersten Hauptsatz, der im Durchschnitt einen Fehler von –24 W im gesamten

Testdatensatz aufweist, der verschiedene Simulationen enthält. Die Verteilung dieses Fehlers ist nach Abbildung 15 asymmetrisch, wobei etwa 55 % der gesamten Testdaten einen absoluten Fehler von weniger als 25 W aufweisen. Die Anzahl der Ausreißer mit einem absoluten Fehler von mehr als 75 W beträgt etwa 3%, was im Vergleich zur Gesamtzahl der untersuchten Datenpunkte vernachlässigbar ist und daher keine große Rolle für die Bestimmung der Genauigkeit des neuronalen Netzwerks spielt. Um zu bewerten, ob der Erste Hauptsatz für das MLP-Modell eingehalten wird, sollten die angestrebte Genauigkeit und die akzeptable Fehlergrenze bei der Optimierung berücksichtigt werden. Diese Fehler könnten durch die Verwendung größerer Trainingsdatensätze und eine genauere Hyperparameteroptimierung verringert werden. Es ist jedoch zu beachten, dass das MLP-Modell keine physikalische Intuition hat, während das physikalische Modell auf der Energiebilanz basiert und daher immer eine höhere Genauigkeit aufweist. Dennoch weist auch das physikalische Modell Fehler im Vergleich zu realen Wärmeübertragern aufgrund von Annahmen und Vereinfachungen auf. In praktischen Anwendungen, wie bei einer Carnot-Batterie, ist der absolute Fehler von 24 W im Ersten Hauptsatz im Vergleich zum übertragenen Wärmestrom zwischen 1000 W und 10 kW gering. Daher stellt das MLP-Modell eine akzeptable Einhaltung des Ersten Hauptsatzes dar.

5.3.2 Bewertung der Einhaltung des zweiten Hauptsatzes

Das Abbildung 16 (Validierung: s_{irr}) veranschaulicht den Entropieproduktionsstrom vom Einlass bis zum Auslass des Wärmeübertragers. Die Farbskala im Entropieproduktionsstromdiagramm repräsentiert die relativen Fehler, während das Balkendiagramm auf der rechten Seite die Verteilung der relativen Fehler der Datenpunkte zeigt. Dabei wurde die spezifische Entropie mit Refprop berechnet, und gemäß dem Zweiten Hauptsatz sollte der Entropieproduktionsstrom an allen Punkten positiv sein. Die Ergebnisse zeigen ein Bestimmtheitsmaß von 1 und einen RMSE von 10^{-4} , was darauf hinweist, dass eine perfekte Anpassung erreicht wurde und der Entropieproduktionsstrom an allen Punkten positiv ist. Somit wird der Zweite Hauptsatz vom MLP-Modell erfüllt. Daher ist das MPL-Modell für Exergetische Analysen bzw. Optimierungsaufgaben geeignet.

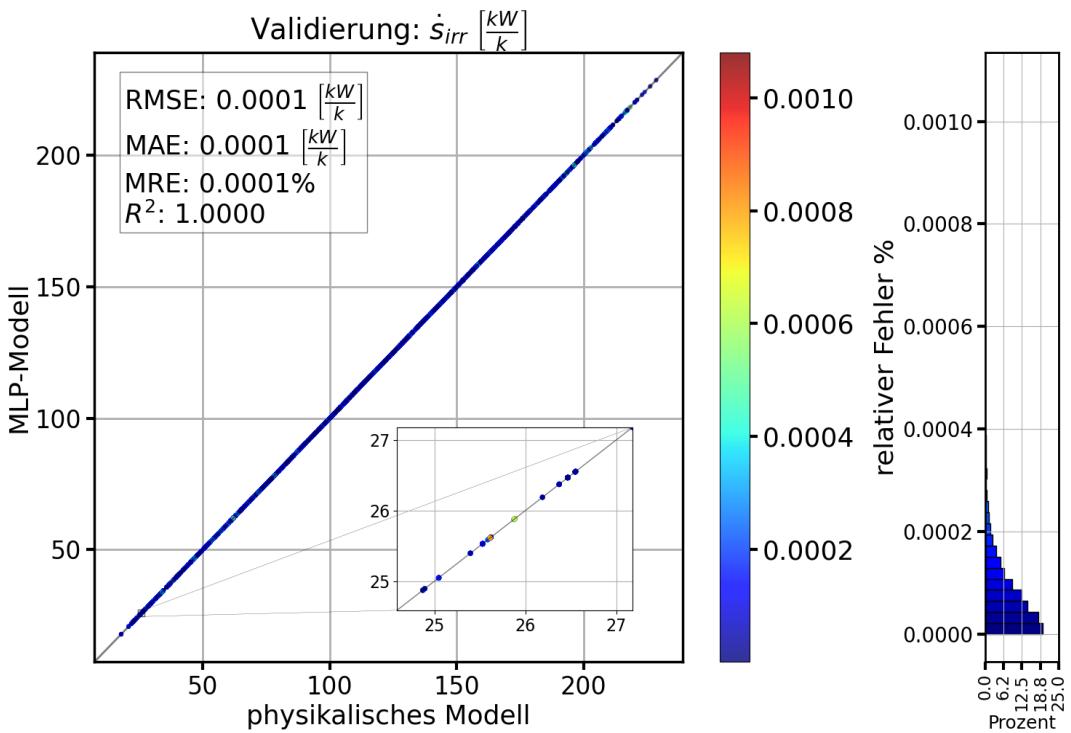


Abbildung 16: Darstellung des Zweiten Hauptsatzes im Wärmeübertrager durch Verwendung des MLP-Modells.

Als Fazit zu diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Validierung und der thermodynamischen Bewertung in Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 5: Generalisierungsfehler und thermodynamische Bewertung des MLP-Modells

Fehler Kriterien	h_{wf} [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	h_{sf} [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$]	p_{wf} [kPa]	p_{sf} [kPa]	T_{wf} [K]	T_{sf} [K]	$\Delta\dot{H}_{wf} + \Delta\dot{H}_{sf}$ [W]	\dot{s}_{irr} [$\frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$]
RMSE	1,82 $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$	0,61 $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$	1,25 kPa	0,17 kPa	0,5 K	0,15 K	38,44 W	0,0001 $\frac{\text{kW}}{\text{K}}$
MAE	1,27 $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$	0,47 $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$	0,90 kPa	0,11 kPa	0,3 K	0,11 K	27,65 W	0,0001 $\frac{\text{kW}}{\text{K}}$
MRE %	0,41	0,22	0,09	0,07	0,09	0,03	-	0,0001
R^2	0,9998	1,0	1,0	0,9996	0,9996	1,0	0,6263	1,0

5.4 Interpolation-Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells

Nach der Validierung des MLP-Modells wurden fünf verschiedene Szenarien untersucht, um dessen Anwendbarkeit in der Interpolation und Extrapolation zu prüfen. Dabei wurden Kurvendiagramme

erstellt, die die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids in Abhängigkeit von verschiedenen Rohrlängen darstellen, um den Enthalpieverlauf im Rohr zu beschreiben. Jedes Diagramm führte eine Simulation mithilfe des physikalischen Modells durch, wobei die Eingangswerte des Wärmeübertragers aus diesem Modell stammten, um die spezifische Enthalpie und den Druck beider Fluide an jedem Ort vorherzusagen.

Die Abbildungen gliedern sich in drei Gruppen: Exakt, Interpolation und Extrapolation. Jede Gruppe enthält verschiedene Scenarien die in diesem Abschnitt ausführlich erklärt werden.

Die zweite Gruppe von Diagrammen dient der Darstellung der Interpolationsfähigkeit des MLP-Modells durch Variation des inneren Rohrdurchmessers und des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids. Die dritte Gruppe von Diagrammen zeigt die Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells durch Variation des inneren Rohrdurchmessers und des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids. Jedes Diagramm zeigt zwei Verläufe: einen, der die untersuchten Parameter wie die spezifische Enthalpie direkt mit dem physikalischen Modell berechnet, dargestellt durch eine rote Linie, und einen, der die Parameter mit dem MLP-Modell berechnet, dargestellt durch eine schwarze gestrichelte Linie. In einem Textfeld oben links im Diagramm werden verschiedene Fehlerkriterien wie RMSE, MAE, MRE und R^2 dargestellt, während ein weiteres Textfeld unten Informationen zu den Simulations-Eingangsparametern wie Massenstrom, Zusammensetzung und Druck des Arbeitsfluids sowie dem Durchmesser der Rohre liefert.

Szenario 1 (Exakt)

In diesem Szenario werden die Massenströme beider Fluide, die Zusammensetzung und der Druck des Arbeits- und Sekundärfluids sowie die Durchmesser der inneren und äußeren Rohre exakt aus einer Simulation im gesamten Datensatz bestimmt. Mit diesen Eingaben wird eine Simulation mithilfe des physikalischen Modells durchgeführt, und die Ergebnisse werden in vier Diagrammen für die spezifische Enthalpie und den Druck der Arbeitsflüssigkeiten sowie die daraus berechnete Temperatur und spezifische Entropie des Arbeitsfluids als Funktion der Rohrlänge dargestellt. Dieses exakte Szenario dient als Referenz, da einige Datenpunkte aus dieser Simulation möglicherweise in den Trainingsdatensatz des MLP-Modells eingegangen sind. Es ist jedoch zu beachten, dass nicht alle Datenpunkte aus dem physikalischen Modell möglicherweise während der Datenaufbereitung in den Trainingsdatensatz aufgenommen wurden. Etwa 10 % der generierten Daten wurden zufällig im gesamten Datensatz gespeichert, und gemäß der Kreuzvalidierungsmethode wurden 60 % dieses Datensatzes für das Training verwendet. Daher

könnten einige Datenpunkte aus dem physikalischen Modell in diesem Szenario dem MLP-Modell nicht bekannt sein.

Szenario 1

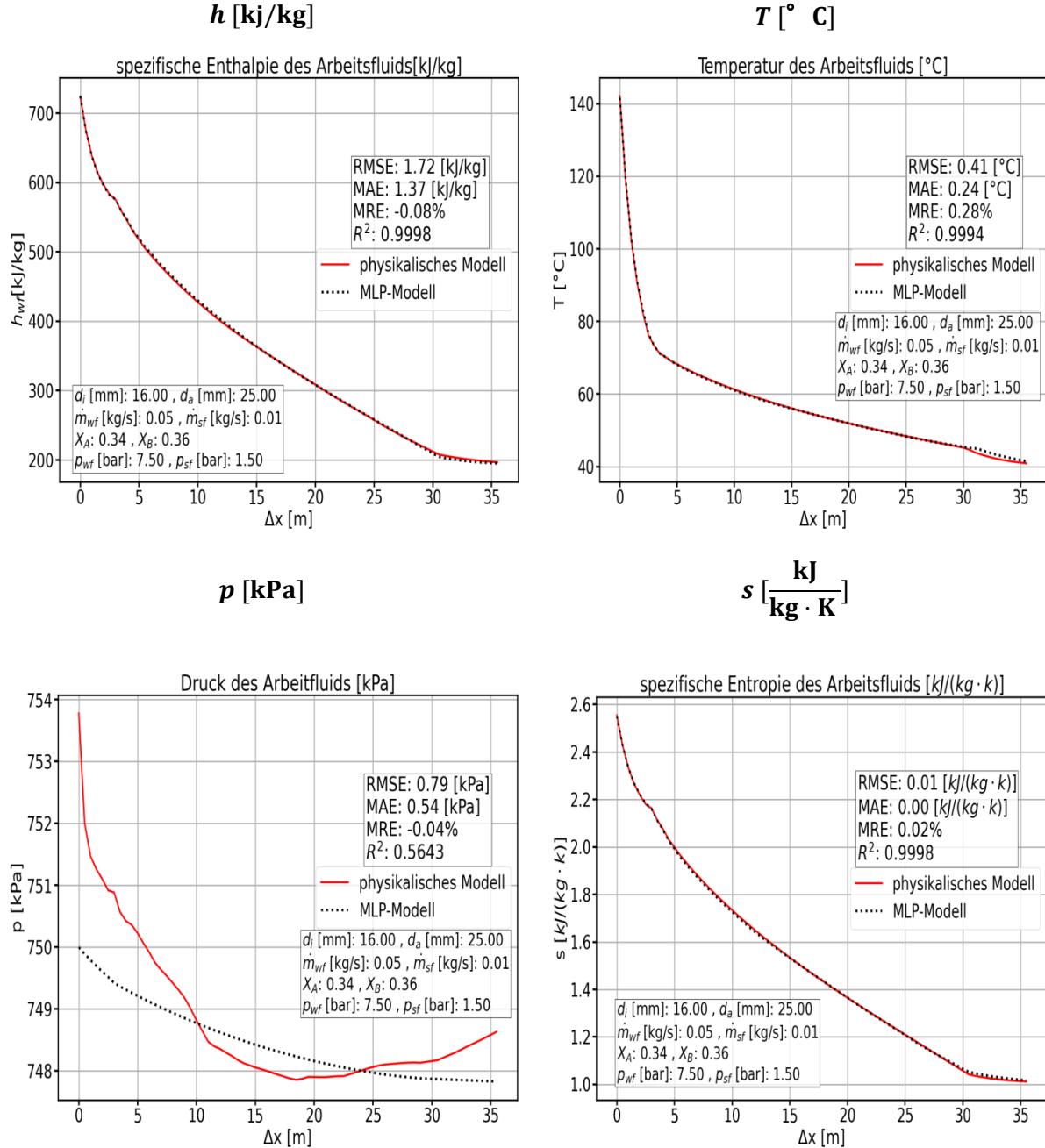


Abbildung 17: Vergleich zwischen physikalischem Modell und MLP-Modell für die Ausführung einer Simulation mit gegebenen Eingangswerten. Die Kästen zeigen die Eingabewerte und Fehlerkriterien.

In Abbildung 17 ist ersichtlich, dass die Vorhersage von Temperatur, spezifischer Enthalpie und spezifischer Entropie mit hoher Genauigkeit erfolgt ist. Die RMSE-Fehler und R^2 -Werte ähneln den Generalisierungsfehlern bei der Validierung mit dem Testdatensatz, und die Verläufe der

spezifischen Enthalpie h_{wf} aus dem physikalischen Modell und dem MLP-Modell sind nahezu deckungsgleich. Die größten Fehler treten an den Stellen auf, an denen der Übergang von Nassdampf zur unterkühlten Flüssigkeit stattfindet. Diese Fehler sind in den Temperaturverläufen deutlicher erkennbar, da die Übergangsbereiche im Trainingsdatensatz selten vertreten sind und die Anzahl dieser Datenpunkte geringer ist als in den anderen Phasen. Das MLP-Modell kann daher diese Punkte mit geringerer Genauigkeit vorhersagen. Obwohl das Netzwerk den richtigen Verlauf an diesen Stellen parallel zu den Zielwerten vorhergesagt hat, besteht eine Diskrepanz zwischen dem vorhergesagten Verlauf des MLP-Modells und dem berechneten Verlauf mit dem physikalischen Modell im Bereich der unterkühlten Flüssigkeit. Es gibt ein Verbesserungspotenzial, indem kritische Datenpunkte bei Phasenübergängen im Trainingsdatensatz, insbesondere dort, wo der Dampfgehalt 0 oder 1 beträgt, sowie deren Nachbardatenpunkte durch Datenaugmentation künstlich erhöht werden. Dadurch kann das neuronale Netzwerk diese Sonderfälle besser erkennen. Die Vorhersage der spezifischen Entropie erfolgte mit einem sehr geringen RMSE-Fehler von $0,01 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$, was darauf hindeutet, dass der zweite Hauptsatz erfüllt ist.

Problematik bei Vorhersage des Arbeitsfluiddrucks

Jedoch weist die Vorhersage der Druckverläufe nicht die erwartete Genauigkeit auf. Der RMSE-Fehler für den Druck beträgt 1,1 kPa oder 0,01 mbar, und der relative Fehler liegt bei 0,1 %. Dennoch ist der R^2 -Wert mit 0,27 sehr niedrig, was auf eine schlechte Anpassung hinweist. Das neuronale Netzwerk weist insbesondere einen absoluten Fehler von 4 kPa im Anfangspunkt auf und versagt dabei, den Druckverlauf im Nassdampfgebiet kontinuierlich wie die Enthalpie vorherzusagen. Auch der letzte Punkt am Ausgang des Rohrs weist einen Fehler von 1,5 bar auf. Angesichts eines Gesamtdruckverlusts von 5 kPa in diesem Szenario sind die Fehler erheblich groß und zeigen, dass das vorliegende MLP-Modell den Druckverlust in verschiedenen Simulationen nicht ausreichend berücksichtigen kann. Dies liegt nahe, da die Druckverluste im Vergleich zu den absoluten Druckwerten relativ klein sind und daher vom Modell nicht angemessen gewichtet werden. Die niedrigen Trainings- und Validierungsverluste ($\text{unter } 1,9 \cdot 10^{-3}$) deuten zwar darauf hin, dass das Modell die allgemeinen Druckmuster erfasst, jedoch die feinen Details der Druckverluste nicht ausreichend modellieren kann. Betrachten wir einen Fall, bei dem der maximale skalierte Druckwert vor Druckverlust 1,0 [Pa/Pa] beträgt. Nach dem Druckverlust liegt der Wert bei 0,9996 [Pa/Pa]. Diese geringe Veränderung von nur 0,04 % verdeutlicht, dass das Netzwerk für die präzise Modellierung der Druckverluste nicht ausreichend genau ist.

Eine mögliche Lösung wäre, dass weitere Skalierungsmethoden wie Standard-skaler und Robust-Skaler [70] untersucht werden. Eine weitere vielversprechende Lösung könnte darin bestehen,

spezialisierte neuronale Netze für verschiedene Druckintervalle zu entwickeln und diese mittels Ensemble-Methoden [71] zu kombinieren. Zunächst sollten die Druck- und Enthalpievektoren aus den Eingangsvektoren separiert und separate Zielwerte definiert werden. Anschließend können spezialisierte Netze für Druckvektoren von Arbeits- und Sekundärfluid mit unterschiedlichen Druckintervallen trainiert werden. Die Kombination dieser spezialisierten Netze durch Ensemble-Methoden wie Stacking, Voting oder Bagging kann die Genauigkeit der Druckvorhersage verbessern, insbesondere für die feinen Druckveränderungen [71].

Zunächst spielen die Größe und Qualität der Trainingsdaten für jedes spezialisierte Netzwerk eine wichtige Rolle für die Leistung des Ensembles. Dazu muss die optimale Konfiguration der Hyperparameter für jedes Netzwerk und die Ensemble-Methode sorgfältig bestimmt werden, was sehr zeitaufwendig ist. Eine weitere Herausforderung bei der Verwendung der Ensemble-Methode liegt darin, dass die Komplexität des Ensembles die Interpretierbarkeit der Ergebnisse erschweren kann. [71]

Szenario 2 (Interpolation Druck)

Dieses Szenario untersucht die Interpolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie von Arbeitsfluiden, indem der Eingangsdruck innerhalb des im Trainingsdatensatz verwendeten Druckintervalls variiert wird. Der gewählte Druck von 15 bar liegt innerhalb des Bereichs der Trainingsdaten, um die Interpolationsleistung des Modells zu testen. Die Simulation wird unter konstanten Bedingungen (z.B. konstanter Massenstrom, Zusammensetzung, Durchmesser) durchgeführt, um den Einfluss des Drucks zu isolieren.

Das Szenario 2 in Abbildung 18 zeigt den Verlauf der spezifischen Enthalpie in Abhängigkeit vom Eingangsdruck. Der RMSE-Fehler für die spezifische Enthalpie beträgt 2,45 kJ/kg. Im Vergleich zum RMSE-Fehler in Szenario 1 (0,42 kJ/kg) ist dies eine moderate Erhöhung. Die Differenz zwischen den RMSE-Werten beider Szenarien beträgt lediglich 0,73 kJ/kg. Der R^2 -Wert von 0,9998 deutet auf eine hohe Korrelation zwischen den vorhergesagten und den simulierten Werten der spezifischen Enthalpie hin.

Die Ergebnisse zeigen, dass das MLP-Modell eine gute Interpolationsfähigkeit für die spezifische Enthalpie innerhalb des im Trainingsdatensatz verwendeten Druckintervalls besitzt. Der moderate RMSE-Fehler von 2,45 kJ/kg und der hohe R^2 -Wert von 0,9998 belegen die Fähigkeit des Modells, die spezifische Enthalpie zuverlässig zu interpolieren, wenn der Eingangsdruck innerhalb des Trainingsintervalls liegt.

Interpolation

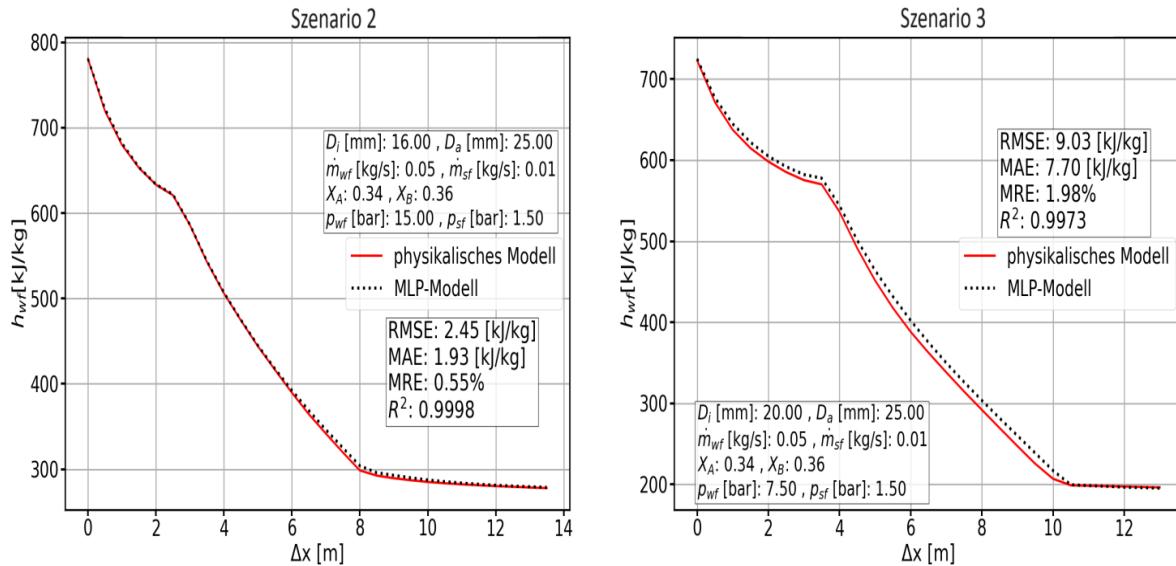


Abbildung 18: Szenario 2: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids.
Szenario 3: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Durchmessers des inneren Rohrs.

Szenario 3 (Interpolation Durchmesser)

Dieses Szenario untersucht die Interpolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie von Arbeitsfluiden, indem der Innendurchmesser des Rohrs (D_i) um 20 mm variiert wird. Der gewählte Durchmesser von 20 mm liegt innerhalb des im Trainingsdatensatz verwendeten Intervalls, um die Interpolationsleistung des Modells zu testen. Die Simulation wird unter konstanten Bedingungen (z.B. konstanter Massenstrom, Zusammensetzung, Eingangsdruck) durchgeführt, um den Einfluss des Durchmessers zu isolieren.

Das Szenario 3 in der Abbildung 18 zeigt den Verlauf der spezifischen Enthalpie in Abhängigkeit vom Innendurchmesser. Der RMSE-Fehler für die spezifische Enthalpie beträgt 9,03 kJ/kg. Im Vergleich zum RMSE-Fehler in Szenario 1 (0,42 kJ/kg) ist dies eine deutliche Verschlechterung um den Faktor 5. Auch der mittlere relative Fehler von 2% ist deutlich höher als in Szenario 1 (0,08 %). Trotz der korrekten Vorhersage des Verlaufs durch das Netzwerk ist ein auffälliger Versatz zwischen der Kurve des physikalischen Modells und der Kurve des MLP-Modells zu erkennen.

Die Ergebnisse zeigen, dass die Interpolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie bei Änderungen des Innendurchmessers deutlich eingeschränkt ist. Der hohe RMSE-Fehler und der relative Fehler deuten auf eine geringere Genauigkeit des Modells bei der Interpolation innerhalb des Trainingsintervalls hin. Der beobachtete Versatz könnte auf eine unzureichende Datendichte im

Trainingsdatensatz für verschiedene Durchmesserwerte zurückzuführen sein. Da der Zusammenhang zwischen Eingangsdruck und spezifischer Enthalpie im Vergleich zum Zusammenhang zwischen Durchmesser und spezifischer Enthalpie im Trainingsdatensatz besser abgebildet ist, scheint das Modell die Abhängigkeit vom Druck besser zu lernen als die Abhängigkeit vom Durchmesser.

Szenario 4 (Extrapolation Druck)

Dieses Szenario untersucht die Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie von Arbeitsfluiden, indem der Eingangsdruck außerhalb des im Trainingsdatensatz verwendeten Druckintervalls variiert wird. Der gewählte Druck von 4 bar liegt außerhalb des Bereichs der Trainingsdaten mit den vorhandenen Eingangswerten, um die Extrapolationsleistung des Modells zu testen. Die Simulation wird unter konstanten Bedingungen (z.B. konstanter Massenstrom, Zusammensetzung, Durchmesser) durchgeführt, um den Einfluss des Drucks zu isolieren.

Das Kurvendiagramm in Szenario 4 zeigt einen ähnlichen Verlauf wie in Szenario 2. Der RMSE-Fehler beträgt 2,15 kJ/kg und liegt leicht über dem Wert von Szenario 2 (0,42 kJ/kg). Der mittlere relative Fehler von –0,48 % deutet jedoch auf eine leichte Verbesserung gegenüber Szenario 2 (0,08 %) hin.

Die Ergebnisse zeigen, dass das MLP-Modell eine gewisse Extrapolationsfähigkeit für die spezifische Enthalpie bei einem Eingangsdruck außerhalb des Trainingsdatensatzes besitzt. Die akzeptable Vorhersagegenauigkeit (RMSE von 2,15 kJ/kg) und der leicht verbesserte relative Fehler (–0,48 %) im Vergleich zu Szenario 2 deuten darauf hin, dass das Modell die Muster zwischen Eingangsdruck und spezifischer Enthalpie erfolgreich lernen konnte.

Extrapolation

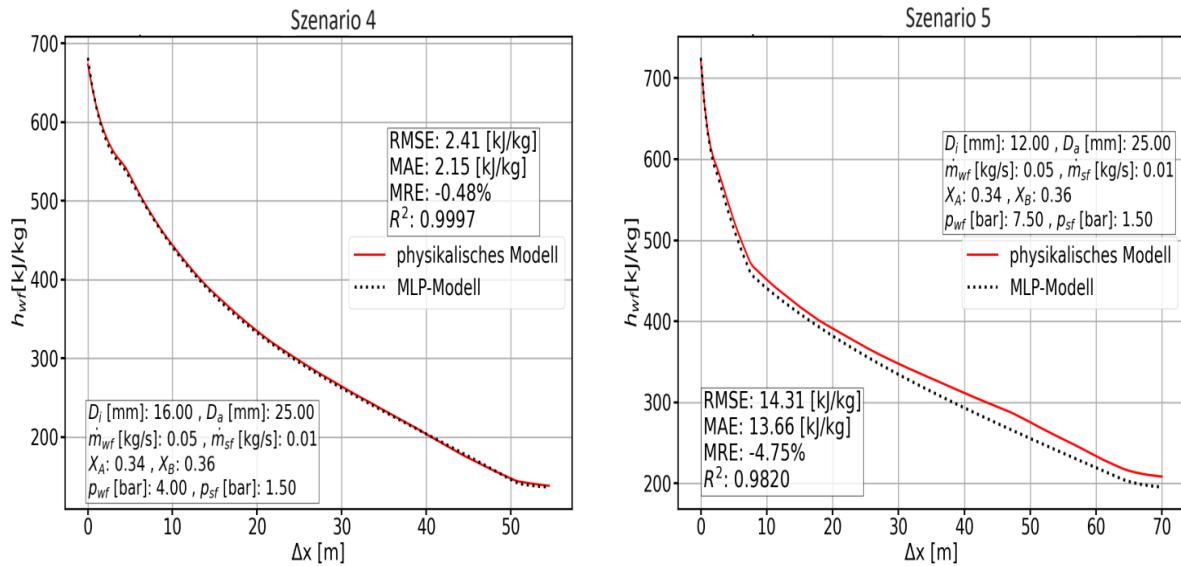


Abbildung 19: Szenario 4: Verlauf von h_{wf} bei Extrapolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids, Szenario 5: Verlauf von h_{wf} bei Extrapolation durch Änderung des Innendurchmessers des Rohrs.

Szenario 5 (Extrapolation Durchmesser)

Dieses Szenario untersucht die Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie von Arbeitsfluiden, indem der Innendurchmesser des Rohrs (d_i) auf 12 mm extrapoliert wird. Der gewählte Durchmesser liegt außerhalb des im Trainingsdatensatz verwendeten Intervalls, um die Extrapolationsleistung des Modells zu testen. Alle anderen Eingangsgrößen (z.B. Massenstrom, Zusammensetzung, Eingangsdruck) bleiben konstant wie in Szenario 1.

Das Szenario 5 in Diagramm zeigt den Verlauf der vorhergesagten spezifischen Enthalpie im Vergleich zum Verlauf des physikalischen Modells. Ein deutlicher Versatz zwischen den Kurven ist erkennbar, insbesondere im Bereich des Übergangs von überhitztem Dampf zu Nassdampf. Der RMSE-Fehler für die spezifische Enthalpie beträgt 14,31 kJ/kg, was den bisher höchsten Fehler in allen Szenarien darstellt. Im Vergleich zum RMSE-Fehler in Szenario 1 (0,42 kJ/kg) ist dies eine deutliche Verschlechterung um den Faktor 34. Der mittlere relative Fehler ist im Vergleich zu Szenario 1 um etwa den Faktor 50 erhöht (50 % vs. 0,08 %) und der R^2 -Wert beträgt 0,98.

Die Ergebnisse zeigen, dass die Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells für die spezifische Enthalpie bei einer Extrapolation des Innendurchmessers deutlich eingeschränkt ist. Der hohe RMSE-Fehler, der relative Fehler und der Versatz zwischen den Kurven deuten auf eine geringe Genauigkeit des Modells außerhalb des Trainingsintervalls hin. Der besonders große Fehler im Bereich des Übergangs von überhitztem Dampf zu Nassdampf lässt sich durch die geringe Datendichte in diesem Bereich im

Trainingsdatensatz erklären. Da das neuronale Netzwerk in diesem Bereich über weniger Trainingsdaten verfügt, fällt es ihm schwerer, die komplexen Zusammenhänge zu lernen und die spezifische Enthalpie korrekt vorherzusagen.

Fazit

Die Tabelle 6 fasst die RMSE-Fehler der verschiedenen Szenarien zusammen, die die Interpolations- und Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells durch Variation aller Eingangsparameter untersuchen. Die erste Spalte der Tabelle zeigt die verschiedenen Szenarien von "Exakt", "Interpolation" und "Extrapolation", wobei in den weißen Zellen die resultierenden RMSE-Fehler aus der Änderung der verschiedenen Eingangsparameter um den untersuchten Wert dargestellt sind. In den grauen Zellen werden folgende Parameter angezeigt: p_{wf} für die Änderung des Arbeitsdrucks, \dot{m}_{sf} für die Änderung des Massenstroms des Sekundärfluids, \dot{m}_{wf} für die Änderung des Massenstroms des Arbeitsfluids, x_A für die Änderung des Molenbruchs von Propan, x_B für die Änderung des Molenbruchs von Isobutan, d_i für die Änderung des Innendurchmessers des inneren Rohrs und d_a für die Änderung des Innendurchmessers des äußeren Rohrs.

Tabelle 6: Zusammenfassung von Interpolation- und Extrapolationsfähigkeit des MLP-Modells durch Variation jeder einzelnen Eingangsparametern, Exakt scenario ist als Exemplar dargestellt, Jede Spalte entspricht die Änderung der Parameter im Vergleich zum Exakt-Scenario.

Variabler Parameter Ergebnisse pro Scenario	p_{wf} [bar]	\dot{m}_{sf} [kg/s]	\dot{m}_{wf} [kg/s]	x_A [-]	x_B [-]	d_i [mm]	d_a [mm]
Exemplar von Exakt	7.5	0.047	0.012	0.34	0.36	16	25
RMSE h_{wf} [kJ/kg]	1.72	1.72	1.72	1.72	1.72	1.72	1.72
Interpolation	15	0.020	0.03	0.5	0.5	20	22
RMSE h_{wf} [kJ/kg]	2.45	1.85	1.68	0.97	1.97	9.03	11.85
Extrapolation	4	0.010	0.02	0.1	0.1	12	40
RMSE h_{wf} [kJ/kg]	2.41	3.72	13.98	2.14	12.94	14.31	13.64

Die Änderung des Innendurchmessers und des Außendurchmessers des Rohrs führt zu deutlich höheren RMSE-Fehlern als die Variation anderer Eingangsgrößen. Die Diskrepanz zwischen Interpolations- und Extrapolationsfehlern bei der Variation des Massenstroms des Arbeitsfluids

zeigt, dass das MLP-Modell gegenüber Änderungen des Massenstroms empfindlich ist. Dies führt zu höheren RMSE-Fehlern bei der Extrapolation im Vergleich zur Interpolation, die sogar geringer sein kann als der Fehler des exakten MLP-Modells. Ähnliches gilt für den Molenbruch von Isobutan (x_B), wo ebenfalls eine Diskrepanz zwischen Interpolations- und Extrapolations-RMSE-Fehlern zu beobachten ist.

5.5 Feature-Importance-Analyse

Der Einfluss der Eingangswerte auf die Genauigkeit des MLP-Modells wird mithilfe der Wichtigkeitsbewertung der Eingabewerte (Feature-Importance-Analyse) durch Permutation jeder einzeln Eingangsparameter bestimmt. Dabei werden zwei Fälle untersucht: Im ersten Fall wird das MLP-Modell unter Einbeziehung des Molenbruchs von Pentan trainiert und optimiert, wobei der gesamte Datensatz verwendet wird. Die Ergebnisse dieses Falls sind in Abbildung 20 dargestellt.

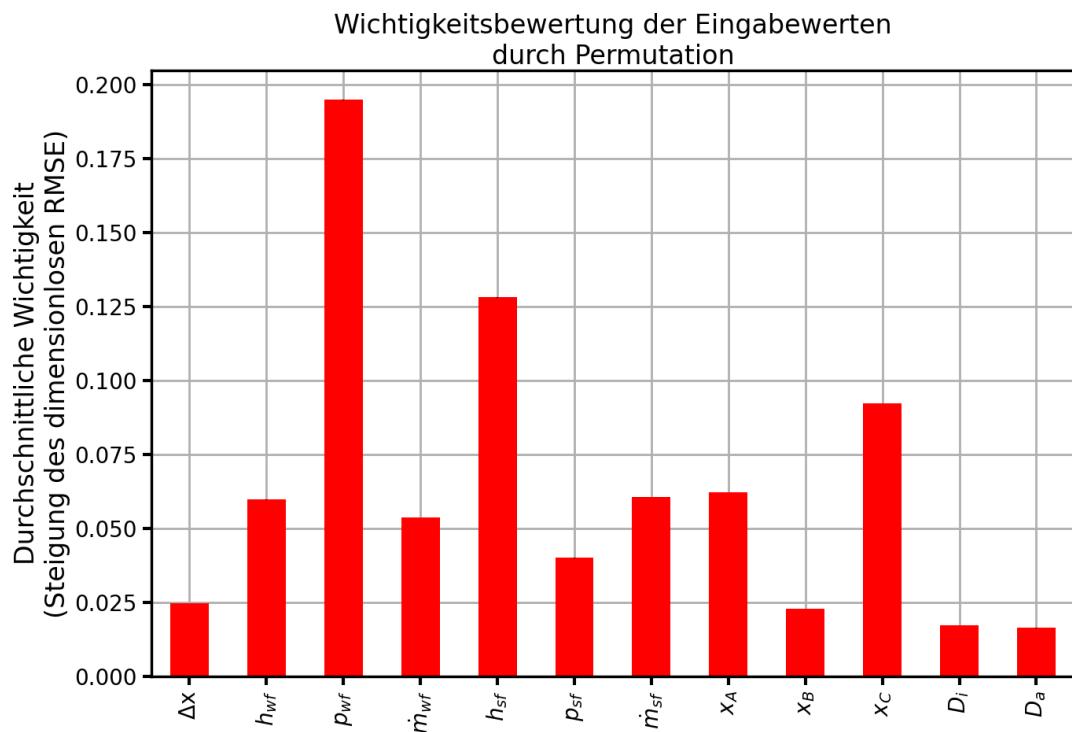


Abbildung 20: Feature-Importance Analyse auf das MLP-Modell unter Berücksichtigung des Pentanmolenbruchs in Modelleingangswerten.

In Abbildung 20 stellt die y-Achse die durchschnittliche Wichtigkeit der Eingabewerte dar, gemessen als die Zunahme des dimensionslosen RMSE-Fehlers des MLP-Modells, wenn jeder Eingangsparameter einzeln permuiert wird. Diese Zunahme zeigt, wie wichtig der jeweilige Eingangsparameter für die Vorhersagegenauigkeit des Modells ist. Auffällig ist, dass die Änderung

des Drucks des Arbeitsfluids den mittleren dimensionslosen RMSE-Fehler um 0,19 erhöht, was zu einer Verschlechterung der Genauigkeit führt. Dies bedeutet, dass dieser Parameter sehr wichtig für die Modellgenauigkeit ist. Eine größere Erhöhung des Fehlers bei der Permutation eines Parameters zeigt dessen größere Bedeutung für das Modell. Die spezifische Enthalpie des Sekundärfluids steht an zweiter Stelle, gefolgt vom Molenbruch von Pentan auf dem dritten Platz der wichtigsten Eingangsparameter.

Die Analyse weist auf einen methodischen Fehler hin, da die zufällige Mischung der Werte für x_c während der Permutation zu unphysikalischen Zusammensetzungen führen kann, bei denen die Molenbrüche der Komponenten sich nicht zu 1.0 summieren. Dies kann die Validität der Feature-Importance-Analyse beeinträchtigen. Daher wird ein weiteres MLP-Modell bewertet, das nicht explizit von x_c abhängt und bei dem x_c nicht zu den Eingangswerten gehört. Die Ergebnisse der Feature-Importance-Analyse für das MLP-Modell ohne x_c in den Eingangswerten sind in Abbildung 21 dargestellt.

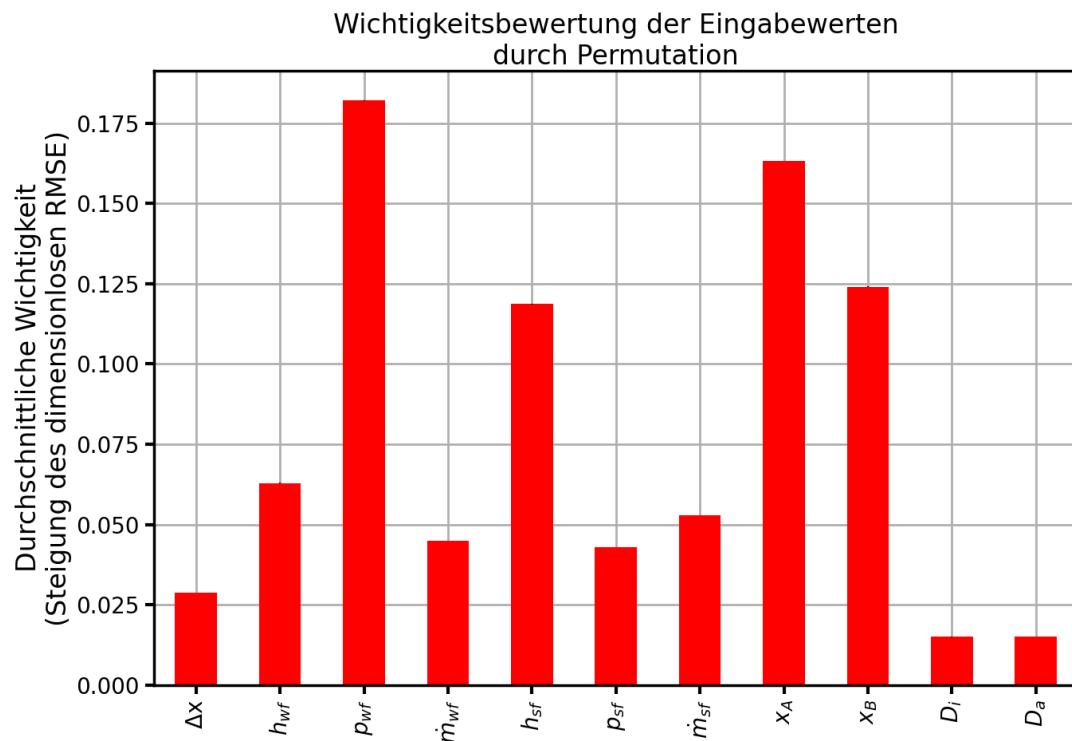


Abbildung 21: Feature-Importance Analyse auf die MLP-Modell ohne Molenbruch von Pentan x_c als Eingangswert.

In Abbildung 21 zeigt sich im Vergleich zum ersten Fall nur eine kleine Abweichung in der durchschnittlichen Wichtigkeit aller Eingangsparameter außer x_A und x_B . Die Analyse verdeutlicht die hohe Empfindlichkeit des MLP-Modells gegenüber den Zusammensetzungen der Arbeitsfluide. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass der Druck des Arbeitsfluids und die

Zusammensetzungen des Arbeitsfluids die Grundlage der Rahmenbedingungen im physikalischen Modell bilden. Weitere Parameter wie Dichte und spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids wurden basierend auf dem Eintrittsdruck des Arbeitsfluids und den gegebenen Zusammensetzungen berechnet. Zudem gibt es eine große Variation der Datenpunkte, die durch Simulationen mit unterschiedlichen Zusammensetzungen und Drücken berechnet wurden. Dies könnte auf eine Korrelation zwischen der hohen Genauigkeit des MLP-Modells und der ausreichenden Bereitstellung von Simulationsdaten durch Variation des Arbeitsfluidsdrucks und der Arbeitsfluidszusammensetzungen hinweisen.

Diese Erkenntnisse bieten eine bessere Perspektive zur Aggregation der wichtigsten Eingangsparameter im Trainingsdatensatz, um die Genauigkeit des MLP-Modells positiv zu beeinflussen. Sie zeigen auch eine Diskrepanz zwischen der Interpolation und Extrapolation durch Änderungen bestimmter Eingangsparameter außerhalb des Trainingsdatensatzes auf. Beispielsweise wurde bei der Änderung des Durchmessers eine signifikante Verringerung der Modellgenauigkeit beobachtet, was bei der Änderung des Arbeitsfluiddrucks nicht der Fall war [66].

Die Ergebnisse für das MLP-Modell ohne x_c zeigen, dass das Modell von x_c im Eingangsvektor lernen kann. Für das gleiche MLP-Modell, dessen Hyperparameter durch dieselbe Methodik optimiert und trainiert wurden, zeigt sich, dass der RMSE-Fehler aller Ausgabewerte bei der Validierung des Netzwerks mit gleicher Datensatzgröße im Vergleich zum MLP-Modell mit x_c in den Eingabewerten zunimmt. In Tabelle 7 wird die Leistung beider Modelle miteinander verglichen.

Tabelle 7: Vergleich der Leistung des MLP-Modells mit x_c und ohne x_c in den Eingabewerten.

RMSE-Fehler	h_{wf} [kJ/kg]	h_{sf} [kJ/kg]	p_{wf} [kPa]	p_{sf} [kPa]	1. Hauptsatz [w]	2. Hauptsatz [kj/kg · K]
MLP-Modell mit x_c	1,82	0,61	1,25	0,17	38,44	10^{-4}
MLP-Modell ohne x_c	2,97	0,8	2,29	0,26	43,33	10^{-4}
Abweichung zwischen beiden Modellen	63,19%	31,15%	45,57%	51,25%	12,72%	0,00%

Die Ergebnisse der Validierung mit dem Testdatensatz in Tabelle 7 zeigen eine leichte Abweichung zwischen den beiden Modellen. Diese Abweichung könnte entweder auf die Bedeutung von x_c als Eingabeparameter oder auf Abweichungen von den optimalen Hyperparametern bei der Hyperparameteroptimierung (HPO) zurückzuführen sein. Da für beide Modelle eine identische

Coarse-to-Fine-Studie zur Optimierung verwendet wurde, ist es wahrscheinlich, dass das MLP-Modell mit x_c in den Eingabewerten eine bessere Leistung erzielt.

5.6 Analyse der Datensatzgröße

Im vorherigen Kapitel wurde der gesamte Trainingssatz validiert und thermodynamisch untersucht. Dieser Datensatz enthält 1,2 Millionen Datenpunkte. In diesem Kapitel wird der Einfluss der Anzahl der Datenpunkte auf die Leistung des MLP-Modells untersucht. Danach wird das MLP-Modell thermodynamisch relativ zur Datensatzgröße untersucht.

5.6.1 Validierung

Die zentrale Fragestellung ist, ob 1,2 Millionen Datenpunkte für das Training eines genauen Netzwerks erforderlich sind. Um diese Frage zu beantworten, werden verschiedene Netzwerke mit jeweils $x\%$ des gesamten Datensatzes trainiert und durch Zufallsuche mit HPO optimiert. Anschließend werden sie mit dem zugehörigen gespeicherten Testdatensatz getestet, wie in der Methodik beschrieben. Die Ergebnisse sind in Abbildung 22 dargestellt.

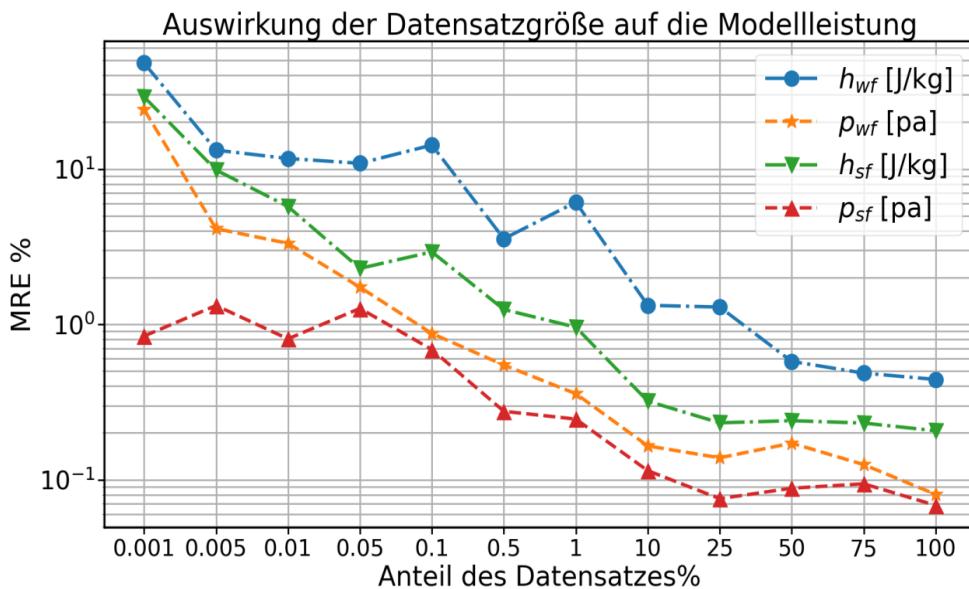


Abbildung 22: Einfluss der Datensatzgröße auf den mittleren relativen Fehler (MRE) durch Validierung.

Abbildung 22 zeigt den Einfluss der Datensatzgröße auf den mittleren relativen Fehler (MRE) der verschiedenen Ausgabevektoren (spezifische Enthalpie von Arbeits- und Sekundärfluid, Druck von Arbeits- und Sekundärfluid). Es lässt sich ein deutlicher Zusammenhang zwischen MRE und

Datensatzgröße bis zu einem Sättigungspunkt erkennen, ab dem keine weiteren Verbesserungen für bestimmte Ausgabevektoren zu erwarten sind.

Niedrige Datensatzgrößen (0,001 % – 0,1 %)

In diesem Bereich zeigt der MRE einen deutlichen Abfall, wobei die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids den größten Fehler mit über 10 % aufweist. Dies deutet auf eine unzureichende Datendichte für die Modellierung der spezifischen Enthalpie bei kleinen Datensätzen hin.

Mittlere Datensatzgrößen (0,1 % – 25 %)

Der MRE aller Ausgabevektoren nimmt in diesem Bereich kontinuierlich ab. Die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids liegt nun zwischen 10 % und 1 % MRE, was auf eine deutlich verbesserte Modellierungsleistung hindeutet.

Hohe Datensatzgrößen (ab 50 %)

Ab 50 % der Datensatzgröße ist keine Verbesserung der Genauigkeit mit zunehmender Datensatzgröße mehr zu beobachten. Das Netzwerk ist in diesem Bereich gesättigt, da keine weiteren signifikanten Verbesserungen durch zusätzliche Datenpunkte erzielt werden. Es ist wichtig zu beachten, dass 50 % des gesamten Datensatzes ca. 600.000 Datenpunkte umfassen. Dies bedeutet, dass weitere 600.000 Datenpunkte im Gesamtdatensatz die Generalisierungsfähigkeit des neuronalen Netzwerks für die spezifische Enthalpie nicht verbessern.

Im Gegensatz zur spezifischen Enthalpie zeigt der Druck des Arbeitsfluids weiterhin eine Abhängigkeit von der Datensatzgröße. Die Steigung des MRE im mittleren Bereich ähnelt der in Abbildung 22 dargestellten Abhängigkeit der Netzwerkleistung von der Datensatzgröße. Dies deutet darauf hin, dass für den Druck des Arbeitsfluids noch weitere Datenpunkte im Trainingssatz benötigt werden, um den Fehler des Netzwerks zu verringern.

Die Ergebnisse bestätigen die Vermutung, dass die schlechte Vorhersage des Drucks des Arbeitsfluids in den vorherigen Kapiteln auf die geringe Variation im Druckvektor im Trainingssatz zurückzuführen ist. Aufgrund des geringen Druckverlusts gibt es keine ausgeprägten Lernmuster für das neuronale Netzwerk, was zu einer unzureichenden Modellierungsleistung führt.

5.6.2 Thermodynamische Bewertung: Ersten Hauptsatz

Die thermodynamische Bewertung des MLP-Modells in Abhängigkeit von der Datensatzgröße ist notwendig, um zu bestimmen, wie die Variation der Datengröße die Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze durch das Modell beeinflusst.

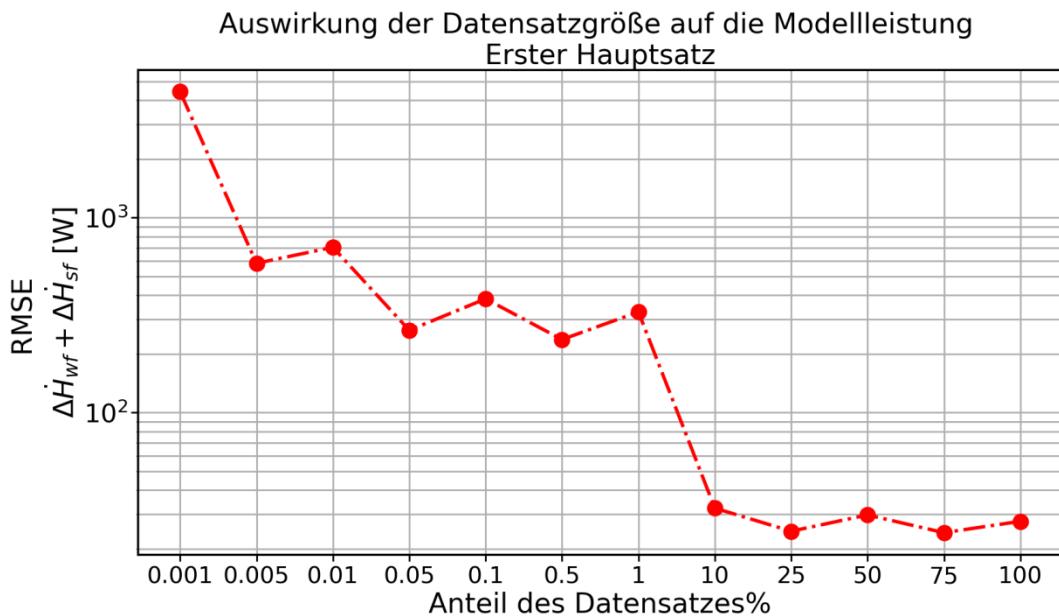


Abbildung 23: Auswirkung von Datensatzgröße auf ersten Hauptsatz.

Abbildung 23 zeigt die Auswirkung der Datensatzgröße auf die Energieerhaltung im Wärmeübertrager, modelliert durch das MLP-Modell. Die x-Achse zeigt den Anteil des gesamten Datensatzes und die y-Achse zeigt den RMSE-Fehler bei Energieerhaltung. Die Analyse zeigt, dass die Datensatzgröße einen Einfluss auf die Einhaltung des Ersten Hauptsatzes durch das MLP-Modell hat. Ein Datensatz von mindestens 10 % des Gesamtdatensatzes ist erforderlich, um eine akzeptable Genauigkeit zu gewährleisten. Es ist jedoch wichtig zu beachten, dass eine Vergrößerung des Datensatzes über 10 % hinaus keine signifikante Verringerung der Fehler bei Energieerhaltung bewirkt.

Der Fehler bei Energieerhaltung ist eine Funktion der spezifischen Enthalpie von Arbeits- und Sekundärfluid. Der Fehler resultiert aus Fehlerfortpflanzung und ist die Summe der RMSE-Fehler von h_{wf} und h_{sf} . Wenn die Fehler von h_{wf} und h_{sf} keine Verbesserung zeigen, bleibt auch der Fehler des Ersten Hauptsatzes konstant, wie in Abbildung 23 zu sehen ist. Im Gegensatz dazu führt ein Netzwerk mit einer beliebigen Datensatzgröße kleiner als 10 % des Gesamtdatensatzes zu einem Netzwerk, das den Ersten Hauptsatz nicht befolgt und höhere Fehler bei der Energieerhaltung ergibt. Im Vergleich zu einem minimalen Wärmestrom von 1 kW ist ein Fehler von 300 W jedoch nicht akzeptabel. Andererseits ist ein Datensatz größer als 10 % des gesamten Datensatzes eine

Verschwendung von Speicher und Zeit und führt zu keiner Verbesserung des Fehlers in der Energieerhaltung. Vermutlich kann aufgrund des beobachteten Trends mit höheren Datenmengen kein genaueres Netzwerk trainiert werden.

5.6.3 Thermodynamische Bewertung: Zweiten Hauptsatz

Die Abhängigkeit der Entropieproduktionsrate von der Anzahl der Datenpunkte ähnlich wie ersten hauptsatz im letzten Abschnitt betrachtet werden. Da der Entropieproduktionsstrom eine Funktion der spezifischen Enthalpie und des Drucks beider Fluide ist, resultiert ihr Fehler aus der Fehlerfortpflanzung der Fehler in der spezifischen Enthalpie und dem Druck beider Fluide. Dies führt zu einem komplexen und schwankenden Verlauf der Entropieproduktionsstrom. Dieser Verlauf ist in Abbildung 24 dargestellt.

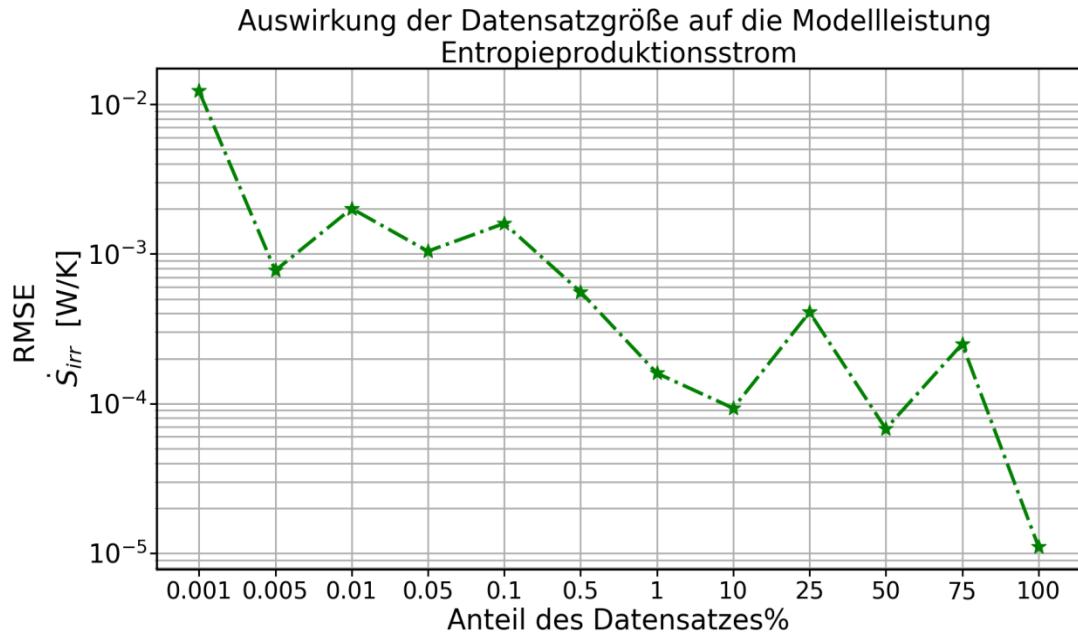


Abbildung 24: Auswirkung von Datensatzgröße auf zweiten Hauptsatz.

Abbildung 24 zeigt diesen Verlauf in Abhängigkeit vom prozentualen Anteil des Datensatzes an der Gesamtmenge. Die y-Achse repräsentiert den RMSE-Fehler der Entropieproduktionsrate im Wärmeübertrager, modelliert durch das MLP-Modell .

Ein deutlicher Einfluss der Datensatzgröße auf die Entropieproduktionsrate ist erkennbar. Durch die Erhöhung der Anzahl der Datenpunkte wird der Fehler von 10^{-2} auf 10^{-5} reduziert. Der Verlauf zeigt einige Schwankungen, weist aber einen abnehmenden Trend auf. Im Bereich von 0,1 % bis 10 % der Datensatzgröße ist eine starke Verringerung des Fehlers zu beobachten, ähnlich wie bei den Fehlern aller Ausgabevektoren in Abbildung 24. Unerwartete Sprünge im Verlauf bei 25 % und

75 % der Datensatzgröße sind vermutlich auf die Hyperparameteroptimierung zurückzuführen. Die zufällige Auswahl aus 10 Kandidaten kann zu leichten Abweichungen in der Netzwerkleistung führen.

Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die Datensatzgröße einen signifikanten Einfluss auf die Genauigkeit der Entropieproduktionsrate durch das MLP-Modell hat. Eine größere Menge an Trainingsdaten führt zu einer deutlichen Verbesserung der Vorhersage der berechneten Entropieproduktionsrate des MLP-Modells.

5.7 Break-Even-Analyse

In diesem Kapitel wird die Rechenzeit eines MLP-Modells mit der des physikalischen Modells verglichen (die in diesem Kapitel untersuchten MLP-Modelle basieren nicht auf den Datensätzen der vorhergehenden Kapitel, hier werden neue MLP-Modelle trainiert). Abbildung 25 zeigt eine zeitliche Analyse des MLP-Modells im Rahmen einer Break-Even-Analyse. Die schwarzen Punkte repräsentieren die Rechenzeit des physikalischen Modells (Rechenzeit-Datenpunkte), die aus den verschiedenen Analysen resultieren und die Gesamtzeit zur Erzeugung verschiedenen Datensätze mit unterschiedlicher Größe mithilfe des physikalischen Modells darstellen. Die x-Achse zeigt die Anzahl der Simulationen bzw. die Anzahl der `solve_ivp`-Aufrufe, die zur Erzeugung des gesamten Datensatzes verwendet wurden. Die Y-Achse zeigt die Dauer jeder Operation. Die blaue Linie stellt die Gesamtzeit für das Training und die Hyperparameteroptimierung eines MLP-Modells dar, das mit Daten aus Rechenzeit-Datenpunkten von 2.000 Simulationen trainiert wurde. Auf die Rechenzeit-Datenpunkte wird eine Kurve angepasst (rote gestrichelte Linie), um den Schnittpunkt mit der Zeitlinie des MLP-Modells zu finden. Dieser Schnittpunkt (Stern) markiert den Break-Even-Punkt.

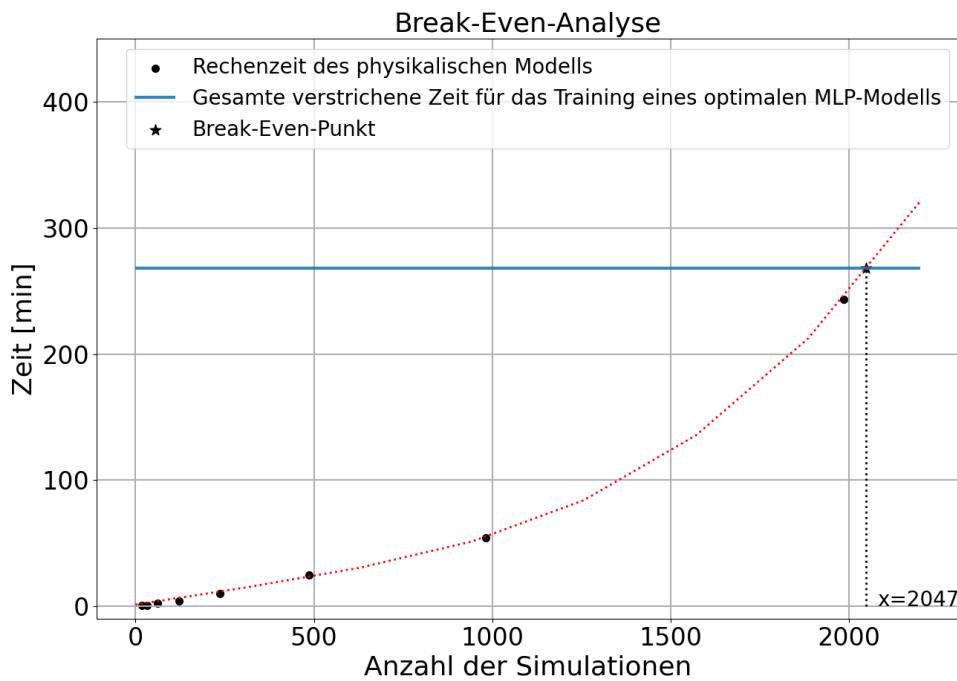


Abbildung 25: Zeitliche Analyse der MLP-Modell gegen die physikalische Modell im Rahmen einer Break-Even-Analyse.

Abbildung 25 zeigt den Break-Even-Punkt, ab dem die Verwendung des MLP-Modells anstelle des physikalischen Modells zeitlich vorteilhaft wird.

Bemerkungen

Das betrachtete neuronale Netzwerk wurde mit einem Datensatz von 140.000 Datenpunkten trainiert, was etwa 7 % der Größe des in den vorherigen Kapiteln untersuchten Datensatzes entspricht. Daten aus Rechenzeit-Datenpunkt mit weniger als 2.000 Simulationen führten zu einer geringeren Genauigkeit des Modells. Obwohl die Genauigkeit des Netzwerks nicht der des besten Netzwerks aus 2,2 Millionen Datenpunkten in den vorherigen Kapiteln entspricht, erreicht es dennoch einen relativen Fehler von 1,1% und einen RMSE-Fehler von 5 kJ/kg für die spezifische Enthalpie des Arbeitsfluids sowie einen RMSE-Fehler von 60 W für den Ersten Hauptsatz.

Parallele Berechnung: Um die Rechenzeit zu verkürzen, wurde der Eingangs-Parameterraum in jeder Simulation in kleinere Matrizen als Batches aufgeteilt, um die parallele Berechnungsmethode zu nutzen. Die Batchgröße waren nicht gleichmäßig, was als mögliche Ursache für den nicht-linearen Verlauf der Rechenzeiten des physikalischen Modells in Abbildung 25 Erwähnung gezogen werden kann.

Konvergenzprobleme bei Solve_ivp: Die numerische Methode Runge-Kutta 4. Ordnung in Solve_ivp führte in einigen Batches zu unendlichen Schleifen, was die Konvergenz des Solvers behinderte. Um

dieses Problem zu beheben, wurden die absolute und relative Toleranz des Solvers verringert. Dies führte zwar zur Konvergenz, erhöhte jedoch die Rechenzeit in diesen Batches erheblich. Diese ungleichmäßigen Rechenzeiten bei verschiedenen Batches, insbesondere bei größeren Eingangs-Parameterraummatrizen, können die Genauigkeit der Analyse negativ beeinflussen.

Extrapolation und Fehlermöglichkeiten: Die Extrapolation eines beliebigen Punkts außerhalb des Analysebereichs für die Rechenzeit des physikalischen Modells ist aufgrund der beschriebenen Probleme mit ungleichmäßigen Rechenzeiten bei verschiedenen Batches fehlerbehaftet. Dies kann die genaue Bestimmung des Break-Even-Punkts beeinflussen.

Ergebnisse

Die Datenvorbereitung für das MLP-Modell dauert ca. 243 Minuten, während Training und Hyperparameteroptimierung eines optimalen Netzwerks mit diesen Daten 25 Minuten dauern (6,5 Minuten für das Training des besten Netzwerks, 18,5 Minuten für die Hyperparameteroptimierung mit 10 Kombinationen per Zufallssuche). Die Vorhersage von 27.500 Datenpunkten dauert 50 ms, während die Vorhersage eines einzelnen Datenpunkts 1,5 ms in Anspruch nimmt.

Die Analyse zeigt, dass das MLP-Modell für große Datensätze und eine hohe Anzahl von Vorhersagen effizienter ist als das physikalische Modell. Die Break-Even-Analyse verdeutlicht den Punkt, ab dem das Training und die Anwendung des MLP-Modells schneller sind als die direkte Datengenerierung mit dem physikalischen Modell. In diesem Fall liegt der Break-Even-Punkt bei 2.047 Anzahl der Simulationen bzw. Solve_ivp Aufrufen.

6 Fazit und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Ersatzmodells für ein analytisches Modell eines Doppelrohrwärmeübertragers mithilfe des maschinellen Lernens. Dabei wird das Multiple-Layer Perzeptron (MLP) Regressions-Modell verwendet, um die spezifische Enthalpie und den Druck des Arbeitsfluids und des Sekundärfluids am Austritt des Wärmeübertragers anhand der gegebenen Eingangsparameter am Eintritt an einer beliebigen Länge vorherzusagen. Ziel ist es, ein genaues MLP-Modell zu entwickeln, das das physikalische Modell unter der Variation der Eingangsparameter, einschließlich der Massenströme beider Fluide, des Drucks und der Zusammensetzung des Arbeitsfluids sowie der Durchmesser beider Rohre, repräsentieren kann. Dabei soll zunächst eine hohe Genauigkeit bei der Vorhersage der beliebigen Eingangswerte unter Einhaltung der thermodynamischen Hauptsätze erreicht werden.

Das physikalische Modell basiert auf den Differentialgleichungen für Druckverlust und Energiebilanz. Diese Differentialgleichungen werden nach der Diskretisierung eines Doppelrohrwärmeübertragers und der Berechnung lokaler Wärmeübertragungskoeffizienten und Reibungszahlen sowie Stoffdaten durch den Einsatz von Nusselt-Korrelationen (Gnielinski und Cavalini) und Darcy-Reibungszahl-Korrelationen (Colebrook-White und Friedel) sowohl in einphasigen als auch im Nassdampfgebiet hergeleitet. In dieser Arbeit wurde ein zeotropes ternäres Gemisch von Kohlenwasserstoffen, bestehend aus Propan, Isobutan und Pentan als Arbeitsfluid, sowie Wasser als Sekundärfluid untersucht. Zur Berechnung der Stoffdaten für beide Fluide wurde Refprop v.10 verwendet.

Der Gesamtdatensatz für das Training des MLP-Modells wurde zunächst durch Lösung der Differentialgleichungen des physikalischen Modells mit dem expliziten Runge-Kutta-Algorithmus 8. Ordnung (DOP853) aus dem Solve_ivp-Löser in Python generiert. Dabei wurden verschiedene Szenarien für die Eingangsparameter durch den Sobol-Sampling-Algorithmus homogen erzeugt. Die Simulationsergebnisse (h,p -Verläufe) wurden dann basiert auf Problemsrahmenbedingungen ausgewertet und die Datenpunkte für das neuronale Netzwerk mithilfe eines Datenerzeugungsalgorithmus künstlich vermehrt. Dabei werden die Simulationsergebnisse in zahlreiche Datenpunkte mit verschiedenen Rohrlängen unterteilt, und die Ergebnisse der Simulationen werden in Eingangsvektoren und Zielwertvektoren aufgeteilt. Von insgesamt 49.302 Simulationen konvergierten 3.392 Simulationen auf eine Temperaturdifferenz von 1 K zwischen beiden Fluiden, wobei ein Phasenübergang vom überhitzten Dampf zur unterkühlten Flüssigkeit im Arbeitsfluid ohne Phasenwechsel im Sekundärfluid stattfand. Weitere Randbedingungen umfassen einen gesamten übertragenen Wärmestrom im Wärmeübertrager zwischen 1 kW und 10 kW, einen maximalen möglichen Druckverlust von

$0,1 \cdot P_{wfein}$ für das Arbeitsfluid und 70 kPa für das Sekundärfluid sowie eine maximale Geschwindigkeit von 10 m/s für das Arbeitsfluid und 1,5 m/s für das Sekundärfluid. Aus jeder Simulation wurden zufällig 10 % der Datenpunkte ausgewählt und in einer Datenbank zusammengefügt. Die resultierende Datenbank mit 2,2 Millionen Datenpunkten wurde anschließend nach der Holdout-Methode in drei Datensätze unterteilt. Dabei wurden 20 % der gesamten Daten als Testdatensatz für die Bewertung des Netzwerks gespeichert, und aus den verbleibenden 80 % wurden erneut 80 % für das Training und 20 % zur Bewertung des Netzwerks während des Trainings verwendet. Abschließend wurden die Eingangswerte und Zielwerte aller Datensätze mit einer MinMax-Skala zwischen 0 und 1 normalisiert. Für die Entwicklung des MLP-Modells wurden der Adam-Algorithmus als Gewichtsoptimierer, die RMSE-Fehlermetrik als Fehlerfunktion, die Batch-Training-Methode sowie die L2-Regularisierungsmethode und eine gradientenbasierte Early-Stopping-Methode zur Vermeidung von Überanpassungen verwendet.

Zur Optimierung der Architektur des neuronalen Netzwerks, einschließlich der Anzahl der versteckten Schichten, der Anzahl der Neuronen pro Schicht und der Aktivierungsfunktion sowie weiterer Hyperparameter wie der Lernrate, der Batch-Größe und des Regularisierungskoeffizienten α , wurde im Rahmen einer Coarse-to-Fine-Studie eine Reihe von Zufallssuchen durchgeführt. Das resultierende optimale MLP-Modell wurde anhand des Testdatensatzes bewertet. Die RMSE-Fehler und prozentualen mittleren relativen Fehler (MRE %) der vorhergesagten spezifischen Enthalpien lagen für das Arbeitsfluid bei 1,82 kJ/kg (RMSE) und 0,41 % (MRE %) und für das Sekundärfluid bei 0,61 kJ/kg (RMSE) und 0,22 % (MRE %). Nach dem ersten Hauptsatz ergab sich ein RMSE-Fehler von 38 W und durch die Berechnung der Entropieproduktionsrate aus den vorhergesagten spezifischen Enthalpien und dem Druck in beiden Fluiden ein MRE-Fehler von $10^{-4}\%$. Der Fehler bei der Vorhersage der spezifischen Enthalpie von unbekannten Eingabedaten durch das MLP-Modell ist gering, und der Fehler beim ersten Hauptsatz ist um das 26-fache kleiner im Vergleich zur niedrigsten Wärmestromgrenze von 1000 W als Randbedingung. Dies deutet auf eine ausreichende Übereinstimmung mit dem physikalischen Modell hin, was bedeutet, dass das MLP-Modell erfolgreich die Zusammenhänge zwischen den Eingabe- und Zielwerten in einem großen Parameterraum erlernt hat und gleichzeitig die thermodynamischen Gesetze einhält. Dies weist auf das Potenzial hin, das Ersatzmodell für die genaue Berechnung des Wirkungsgrads und der Exergieverluste in einer Carnot-Batterie zu verwenden.

Darüber hinaus zeigt das MLP-Modell eine starke Fähigkeit zur Interpolation und Extrapolation. Dies bedeutet, dass der Enthalpieverlauf im Wärmeübertrager für beliebige Simulationen, deren Datenpunkte nicht direkt während des Trainings verwendet wurden, gut vorhergesagt werden kann.

Beispielsweise ergab eine Interpolation mit einem Eintrittsdruck innerhalb des Trainingsdatensatzintervalls von 15 bar einen MRE-Fehler von 0,55 % und eine Extrapolation mit einem Eintrittsdruck außerhalb des Trainingsdatensatzintervalls von 4 bar einen MRE-Fehler von -0,48 %. Allerdings zeigt das MLP-Modell eine schwächere Interpolations- und Extrapolationsfähigkeit bei Änderungen des Rohrdurchmessers. Der Fehler bei der Interpolation mit einem Durchmesser von 20 mm lag bei 1,98 % und bei der Extrapolation mit einem Durchmesser von 12 mm bei 4,75 %. Dies könnte auf die geringere Anzahl von Datenpunkten mit unterschiedlichen Durchmessern zurückzuführen sein, da nur 5 verschiedene Durchmesser während der Datenerzeugung verwendet wurden. Besonders deutlich waren die Fehler in den Bereichen des Phasenübergangs, was möglicherweise auf die niedrige Anzahl von Datenpunkten in diesen Bereichen im Trainingsdatensatz zurückzuführen ist. Es wurde auch eine niedrige Genauigkeit bei der Vorhersage des Druckverlusts im Wärmeübertrager beobachtet, wobei der RMSE-Fehler 0,79 kPa betrug. Trotz eines niedrigen MRE-Fehlers von 0,04 % gab es eine Abweichung von 20 % im Vergleich zum tatsächlichen Druckverlust von 5 kPa im Arbeitsfluid. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass die Druckänderungen im Datensatz im Vergleich zu den vorhandenen Druckintervallen im Trainingsdatensatz gering waren, was die Leistung des MLP-Modells bei der Erkennung von Druckverlustmustern im Datensatz beeinträchtigt. Eine Analyse der Auswirkung der Datensatzgröße auf die Generalisierungsfähigkeit des MLP-Modells ergab ab 50 % der Datensatzgröße keine Verbesserung für die Vorhersage der Enthalpiewerte. Bei der Analyse des Ersten Hauptsatzes wurde ab 25 % der Datensatzgröße keine Verbesserung beobachtet. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass sich Fehler bei der Vorhersage der Enthalpiewerte in Arbeits- und Sekundärfluiden bei der Berechnung des Ersten Hauptsatzes gegenseitig aufhoben. Der Entropieproduktionsstrom und der Druck zeigten bei 100 % der Datensatzgröße noch Verbesserungspotenzial.

Zusammenfassend zeigt die Analyse der Datensatzgröße, dass zur genauen Berechnung der Enthalpie am Austritt des Wärmeübertragers mindestens 50 % des gesamten Datensatzes, d. h. etwa 1,1 Millionen Datenpunkte, benötigt werden, um einen MRE-Fehler von 0,5 % zu erzielen. Um die Genauigkeit des MLP-Modells bei der Vorhersage der Enthalpieverläufe zu verbessern, könnte die Datenverteilung in Bereichen mit niedriger Datendichte ausgeglichen werden, z. B. bei spezifischer Enthalpie des Arbeitsfluids mit Werten unter 200 kJ/kg oder über 600 kJ/kg sowie in Phasenübergangsbereichen, indem Datenaugmentation angewendet wird. Die Verteilung der Gesamtdaten bei spezifischen Enthalpiewerten in Zielwerten zeigen, dass ungefähr 66 % der Gesamtdatenpunkte im Bereich von 200 kJ/kg - 400 kJ/kg konzentriert sind. Je homogener der Datensatz ist, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit von Überanpassung. Darüber hinaus könnte

die Vorhersage des Druckverlusts verbessert werden, indem weitere Skalierungsmethoden untersucht oder die Druckintervalle im Trainingssatz in viele kleinere Datensätze unterteilt werden, wobei für jeden Datensatz ein spezifisches MLP-Modell zur Vorhersage des Arbeitsfluidsdrucks trainiert wird. Durch die Kombination dieser einzelnen Modelle mit Ensemble-Methoden wie Bagging oder Stacking könnte die Vorhersagegenauigkeit weiter erhöht werden. Eine breitere Suche nach optimalen Hyperparametern und die Ersetzung der Holdout-Methode durch k-fache Kreuzvalidierung oder die Untersuchung das optimale Verhältnis von Testdatensatz und Trainingsdatensatz bei Holdout-Methode, könnten ebenfalls dazu beitragen, die Genauigkeit des MLP-Modells zu verbessern.

Im Rahmen einer Break-Even-Analyse wurde das MLP-Modell zeitlich mit dem physikalischen Modell verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass das Netzwerk für die Vorhersage von 275.000 Datenpunkten etwa 50 ms benötigt, während ein einzelner Datenpunkt etwa 1,5 ms in Anspruch nimmt. Im Gegensatz dazu benötigt das physikalische Modell zur Erzeugung dieser Anzahl von Datenpunkten etwa 16,4 Minuten. Eine Simulation mit dem physikalischen Modell dauert ungefähr durchschnittlich 10 Sekunden. In dieser Studie wurde bei 7 Fällen die gesamte Zeit, die für die Datenerzeugung mit dem physikalischen Modell und das Training des optimalen MLP-Netzwerks für bis zu 2.000 Simulationen benötigt wird, untersucht. Ab dem Break-Even-Punkt bei 2.047 Simulationen zeigt sich, dass das Training und die Verwendung des Ersatzmodells vorteilhaft sind.

Die vorliegende Arbeit hat das Konzept des Ersatzmodells im Vergleich zur vorherigen Arbeit [18] geändert. Statt der Vorhersage der Rohrlänge und des Entropieproduktionsstroms bei gegebenen Ein- und Ausgangsrandbedingungen sagt das Modell nun mit gegebener Rohrlänge und Eingangswerten die spezifische Enthalpie und den Druck am Austritt voraus. Der Gesamtdatensatz wurde von 1 Million auf 2,2 Millionen Datenpunkte erweitert, indem das binäre Gemisch von Propan und Isobutan durch ein ternäres Gemisch aus Propan, Isobutan und Pentan ersetzt und weitere Variationen der Eingangsparameter eingeführt wurden. Der Ansatz des Gesamtdatensatzes, der auf 49.302 Simulationen mit dem physikalischen Modell basiert, führte zu einer Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit des MLP-Modells. Wobei der RMSE der Entropieproduktionsstrom von $0,0150 \frac{W}{K}$ auf $10^{-4} \frac{kW}{K}$ reduziert wurde. Die Einschränkungen der vorherigen Arbeit, wie die Entwicklung eines vollständigen Ersatzmodells für den gesamten Wärmeübertrager bei allen Phasen des Arbeitsfluids, wurden durch neue Datenerzeugungs- und Sortierungsalgorithmen behoben.

7 Literatur

- [1] "ChatGPT: Get instant answers, find inspiration, learn something new." Zugriff am: 22. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://chatgpt.com/?oai-dm=1>
- [2] Gemini. "Gemini - chat to supercharge your ideas." Zugriff am: 22. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://gemini.google.com/app>
- [3] Scribbr. "Scribbr - Your path to academic success." Zugriff am: 22. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.scribbr.com/>
- [4] Europäische Kommission. "Der europäische Grüne Deal." Zugriff am: 7. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: https://commission.europa.eu/strategy-and-policy/priorities-2019-2024/european-green-deal_de
- [5] "Copernicus: February 2024 was globally the warmest on record – Global Sea Surface Temperatures at record high | Copernicus." Zugriff am: 7. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://climate.copernicus.eu/copernicus-february-2024-was-globally-warmest-record-global-sea-surface-temperatures-record-high>
- [6] United Nations, *Kyoto Protocol To the United Nations Framework Convention on Climate Change*, 1998.
- [7] Umweltbundesamt. "Energiebedingte Emissionen von Klimagassen und Luftschadstoffen." Zugriff am: 7. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.umweltbundesamt.de/daten/energie/energiebedingte-emissionen#entwicklung-der-energiebedingten-treibhausgas-emissionen>
- [8] Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz, "Erneuerbare Energien," 2024.
- [9] Muhammed Y. Worku, "Recent Advances in Energy Storage Systems for Renewable Source Grid Integration: A Comprehensive Review," *Sustainability*, Jg. 14, Nr. 10, S. 5–6, 2022, doi: 10.3390/su14105985.
- [10] Vaclav Novotny, Vit Basta, Petr Smola und Jan Spale, "Review of Carnot Battery Technology Commercial Development," *Energies*, Jg. 15, Nr. 2, S. 647, 2022, doi: 10.3390/en15020647.
- [11] Hongna Qiao, Xiaohui Yu und Bin Yang, "Working fluid design and performance optimization for the heat pump-organic Rankine cycle Carnot battery system based on the group contribution method," *Energy Conversion and Management*, Jg. 293, S. 117459, 2023. doi: 10.1016/j.enconman.2023.117459. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890423008051>
- [12] Olivier Dumont, Guido Francesco Frate, Aditya Pillai, Steven Lecompte, Michel de paepe und Vincent Lemort, "Carnot battery technology: A state-of-the-art review," *Journal of Energy Storage*, Jg. 32, S.1-7, 2020, doi: 10.1016/j.est.2020.101756.

- [13] B. O. Bolaji und Z. Huan, "Ozone depletion and global warming: Case for the use of natural refrigerant – a review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Jg. 18, S.51–52, 2013, doi: 10.1016/j.rser.2012.10.008.
- [14] Benjamin Zühlendorf, Jonas Kjær Jensen, Stefano Cignitti, Claus Madsen und Brian Elmegaard, "Analysis of temperature glide matching of heat pumps with zeotropic working fluid mixtures for different temperature glides," *Energy*, Jg. 153, S. 650–660, 2018, doi: 10.1016/j.energy.2018.04.048.
- [15] Ruiqiang Ma und Bin Yang, "Non-Saturated 3E (Energy, Exergy, and Economic) Analysis of Carnot Battery Systems Based on Organic Rankine Cycle," *J. Adv. Therm. Sci. Res.*, Jg. 10, S. 59–74, 2023, doi: 10.15377/2409-5826.2023.10.5.
- [16] J. Jünger und C. Gärtner, *Computational Methods für die Sozial- und Geisteswissenschaften*. Wiesbaden: Springer VS, 2023. [Online]. Verfügbar unter: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-658-37747-2>
- [17] ISO. "Machine learning: Everything you need to know." Zugriff am: 23. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.iso.org/artificial-intelligence/machine-learning>
- [18] Max Reese, "Wärmeübertrager mit zeotropen Gemischen: Ersatzmodellentwicklung mit Methoden des maschinellen Lernens," Masterarbeit, Fakultät für Ingenieurwissenschaften Institut für Energie- und Material-Prozesse, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, 2023.
- [19] Ruth Misener und Lorenz Biegler, "Formulating data-driven surrogate models for process optimization," *Computers & Chemical Engineering*, Jg. 179, S. 108411, 2023, doi: 10.1016/j.compchemeng.2023.108411.
- [20] A. Forrester, A. Sóbester und A. Keane, *Engineering Design via Surrogate Modelling: A Practical Guide*. New York, NY: John Wiley & Sons, 2008.
- [21] Jaroslaw Krzywanski, "A General Approach in Optimization of Heat Exchangers by Bio-Inspired Artificial Intelligence Methods," *Energies*, Jg. 12, Nr. 23, S. 4441, 2019, doi: 10.3390/en12234441.
- [22] Ahmed Benyekhlef, Brahim Mohammedi, Djamel Hassani und Salah Hanini, "Application of artificial neural network (ANN-MLP) for the prediction of fouling resistance in heat exchanger to MgO-water and CuO-water nanofluids," *Water science and technology : a journal of the International Association on Water Pollution Research*, Jg. 84, Nr. 3, S. 538–551, 2021, doi: 10.2166/wst.2021.253.
- [23] Beomjin Kwon, Faizan Ejaz und Leslie K. Hwang, "Machine learning for heat transfer correlations," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Jg. 116, S. 104694, 2020, doi: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2020.104694.

- [24] James Donnelly, Alireza Daneshkhah und Soroush Abolfathi, "Physics-informed neural networks as surrogate models of hydrodynamic simulators," *The Science of the total environment*, Early Access. doi: 10.1016/j.scitotenv.2023.168814.
- [25] Mohammad Ghalandari, Misagh Irandoost Shahrestani, Akbar Maleki, Mostafa Safdari Shadloo und Mamdouh El Haj Assad, "Applications of intelligent methods in various types of heat exchangers: a review," *J Therm Anal Calorim*, Jg. 145, Nr. 4, S. 1837–1848, 2021, doi: 10.1007/s10973-020-10425-3.
- [26] Orlando Duran, Nibaldo Rodriguez und Luiz Airton Consalter, "Neural networks for cost estimation of shell and tube heat exchangers," *Expert Systems with Applications*, Jg. 36, Nr. 4, S. 7435–7440, 2009, doi: 10.1016/j.eswa.2008.09.014.
- [27] H. D. Baehr und K. Stephan, *Wärme- und Stoffübertragung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [28] P. von Böckh und T. Wetzel, *Wärmeübertragung: Grundlagen und Praxis*, 4. Aufl. (Springer-Lehrbuch). Berlin, Heidelberg: Springer, 2011.
- [29] V. Gnielinski, "New Equation for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe and Channel Flow," (*International Chemical Engineering Vol. 16* ,), Jg. 16, S. 359-368, 1976.
- [30] VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, *VDI-Wärmeatlas*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [31] A. Cavallini, J. R. Smith and R. Zecchin, "A dimensionless correlation for heat transfer in forced convection condensation: 6th International Heat Transfer Conference. Tokyo, Japan," S.309-313, 1974.
- [32] R. K. Sinnott und J. M. Coulson, *Coulson & Richardson's chemical engineering design*, 4. Aufl. Amsterdam, London: Elsevier Butterworth-Heinemann,, 2005.
- [33] H. Sigloch, *Technische Fluidmechanik*, 8. Aufl. Heidelberg, New York: Springer, 2012.
- [34] LOCKHART W. R., "Proposed Correlation of Data for Isothermal Two-Phase, Two-Component Flow in Pipes," *Chemical Engineering Progress*, Jg. 45, Nr. 1, S. 39–48, 1949. [Online]. Verfügbar unter: <https://cir.nii.ac.jp/crid/1574231874770760320>
- [35] L. Friedel, "Improved Friction Pressure Drop Correlations for Horizontal and Vertical Two-Phase Pipe Flow." : in: Proceedings, European Two Phase Flow Group Meeting, Ispra, Italy,, " S. 485-481, 1979.
- [36] G. F. Hewitt, "PRESSURE DROP, TWO-PHASE FLOW," in *A-to-Z Guide to Thermodynamics, Heat and Mass Transfer, and Fluids Engineering*, Bd. P, Begellhouse, 2006.
- [37] P. B. Whalley, *Boiling, condensation, and gas-liquid flow* (The Oxford Engineering Science Series 21). Oxford: Forlag, 1987.

- [38] Caleb Bell. "Two phase flow fluids 1.0.25 Python Modul documentation." Zugriff am: April.2024. [Online.] Verfügbar: https://fluids.readthedocs.io/fluids.two_phase.html
- [39] Yu Xu und Xiande Fang, "Correlations of void fraction for two-phase refrigerant flow in pipes," *Applied Thermal Engineering*, Jg. 64, 1-2, S. 242–251, 2014, doi: 10.1016/j.aplthermaleng.2013.12.032.
- [40] *Thermodynamik: Grundlagen Und Technische Anwendungen*. Vieweg + Teubner Verlag, 2017.
- [41] H. Watter, *Regenerative Energiesysteme: Grundlagen, Systemtechnik und Analysen ausgeführter Beispiele nachhaltiger Energiesysteme*, 4. Aufl. (Lehrbuch). Wiesbaden: Springer Vieweg, 2015.
- [42] H. D. Baehr und S. Kabelac, *Thermodynamik*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [43] Leelananda Rajapaksha, "Influence of special attributes of zeotropic refrigerant mixtures on design and operation of vapour compression refrigeration and heat pump systems," *Energy Conversion and Management*, Jg. 48, Nr. 2, S. 539–545, 2007, doi: 10.1016/j.enconman.2006.06.001.
- [44] Marcia Huber, Allan Harvey, Eric Lemmon, Gary Hardin, Ian Bell und Mark McLinden, "NIST Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database (REFPROP) Version 10 - SRD 23," 2018, doi: 10.18434/T4/1502528.
- [45] Kathleen Walch, "Big data vs. machine learning: How they differ and relate," *techtarget*, 27. April 2021. Zugriff am: April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.techtarget.com/searchbusinessanalytics/tip/Big-data-vs-machine-learning-How-they-differ-and-relate>
- [46] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*. Sebastopol CA: O'Reilly Media Inc, 2023.
- [47] Larry Hardesty, "Explained: Neural networks: Ballyhooed artificial-intelligence technique known as “deep learning” revives 70-year-old idea.," *MIT News*, 14. April 2017. Zugriff am: April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://news.mit.edu/2017/explained-neural-networks-deep-learning-0414>
- [48] GfG, "Artificial Neural Networks and its Applications," *GeeksforGeeks*, 24. Juni 2020. Zugriff am: 19. April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.geeksforgeeks.org/artificial-neural-networks-and-its-applications/>
- [49] Daniele Mazzei und Reshawn Ramjattan, "Machine Learning for Industry 4.0: A Systematic Review Using Deep Learning-Based Topic Modelling," *Sensors (Basel, Switzerland)*, Early Access. doi: 10.3390/s22228641.

- [50] Diederik P. Kingma und Jimmy Ba, "Adam: A Method for Stochastic Optimization," Dez. 2014. [Online]. Verfügbar unter: <http://arxiv.org/pdf/1412.6980>
- [51] Sanket Doshi, "Various Optimization Algorithms For Training Neural Network," *Towards Data Science*, 13. Januar 2019. Zugriff am: 19. April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://towardsdatascience.com/optimizers-for-training-neural-network-59450d71caf6>
- [52] Jason Brownlee. "How to use Learning Curves to Diagnose Machine Learning Model Performance." Zugriff am: April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://machinelearningmastery.com/learning-curves-for-diagnosing-machine-learning-model-performance/>
- [53] MIT Press. "<https://www.deeplearningbook.org/contents/regularization.html>: Kapitel 7.8." Zugriff am: 18. April 2024. [Online.] Verfügbar: <https://www.deeplearningbook.org/contents/regularization.html>
- [54] Van Rossum, G. & Drake, F.L., *Python 3 Reference Manual* (2009). Scotts Valley, CA: Van Rossum, G. & Drake, F.L.
- [55] Charles R. Harris *et al.*, "Array programming with NumPy," *Nature*, Early Access. doi: 10.1038/s41586-020-2649-2.
- [56] The Matplotlib Development Team, *Matplotlib: Visualization with Python* (2024). Zenodo.
- [57] The pandas development team, *pandas-dev/pandas: Pandas* (2024). Zenodo.
- [58] Gael Varoquaux Guillamume Lesteve, *Joblib* (2008-2021). [Online]. Verfügbar unter: <https://github.com/joblib>
- [59] Pauli Virtanen *et al.*, "SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python," *Nature methods*, Early Access. doi: 10.1038/s41592-019-0686-2.
- [60] F. Pedregosa, "sklearn : Scikit-learn: Machine Learning in Python," Jg. 12, S. 2825–2830, 2011.
- [61] Caleb Bell and Contributors, *ht: Heat transfer component of Chemical Engineering Design Library (ChEDL)* (2016-2023). [Online]. Verfügbar unter: <https://github.com/CalebBell/ht>
- [62] Caleb Bell and Contributors, *fluids: Fluid dynamics component of Chemical Engineering Design Library (ChEDL)* (2016-2023). [Online]. Verfügbar unter: <https://github.com/CalebBell/fluids>
- [63] Takuya Iwanaga, William Usher und Jonathan Herman, "Toward SALib 2.0: Advancing the accessibility and interpretability of global sensitivity analyses," *SESMO*, Jg. 4, S. 18155, 2022, doi: 10.18174/sesmo.18155.
- [64] Jon Herman und Will Usher, "SALib: An open-source Python library for Sensitivity Analysis," *JOSS*, Jg. 2, Nr. 9, S. 97, 2017, doi: 10.21105/joss.00097.
- [65] National Institute of Standards and Technology, *REFPROP Documentation, Release 10.0*. Boulder, CO 80305, 2018. Zugriff am: 2024.

- [66] scikit-learn. "4.2. Permutation feature importance." Zugriff am: 20. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: https://scikit-learn.org/stable/modules/permutation_importance.html#id2
- [67] Connor Shorten und Taghi M. Khoshgoftaar, "A survey on Image Data Augmentation for Deep Learning," *J Big Data*, Jg. 6, Nr. 1, 2019, doi: 10.1186/s40537-019-0197-0.
- [68] Yuzhe Yang, Kaiwen Zha, Ying-Cong Chen, Hao Wang und Dina Katabi, "Delving into Deep Imbalanced Regression," 2021, doi: 10.48550/arXiv.2102.09554.
- [69] Malik Hassanaly, Bruce A. Perry, Michael E. Mueller und Shashank Yellapantula, "Uniform-in-phase-space data selection with iterative normalizing flows," *DCE*, Jg. 4, 2023, doi: 10.1017/dce.2023.4.
- [70] scikit-learn. "RobustScaler." Zugriff am: 25. Mai 2024. [Online.] Verfügbar: <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.RobustScaler.html>
- [71] Ammar Mohammed und Rania Kora, "A comprehensive review on ensemble deep learning: Opportunities and challenges," *Journal of King Saud University - Computer and Information Sciences*, Jg. 35, Nr. 2, S. 757–774, 2023, doi: 10.1016/j.jksuci.2023.01.014.

A Anhang

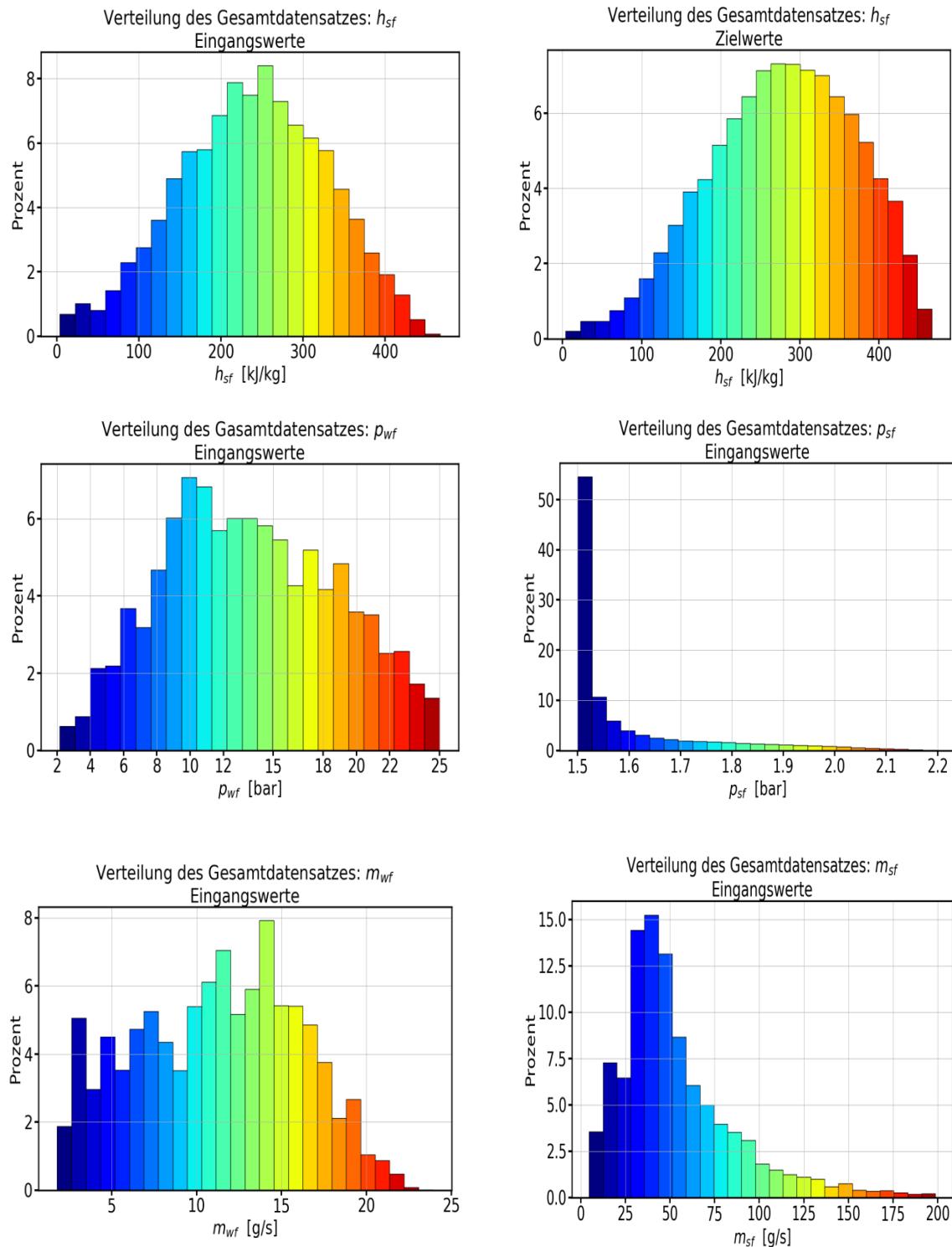


Abbildung 26 : Verteilung des Gesamten Datensatzes, enthält Druck und Massenström beider Fluide, spezifische Enthalpie des Sekundärfluids.

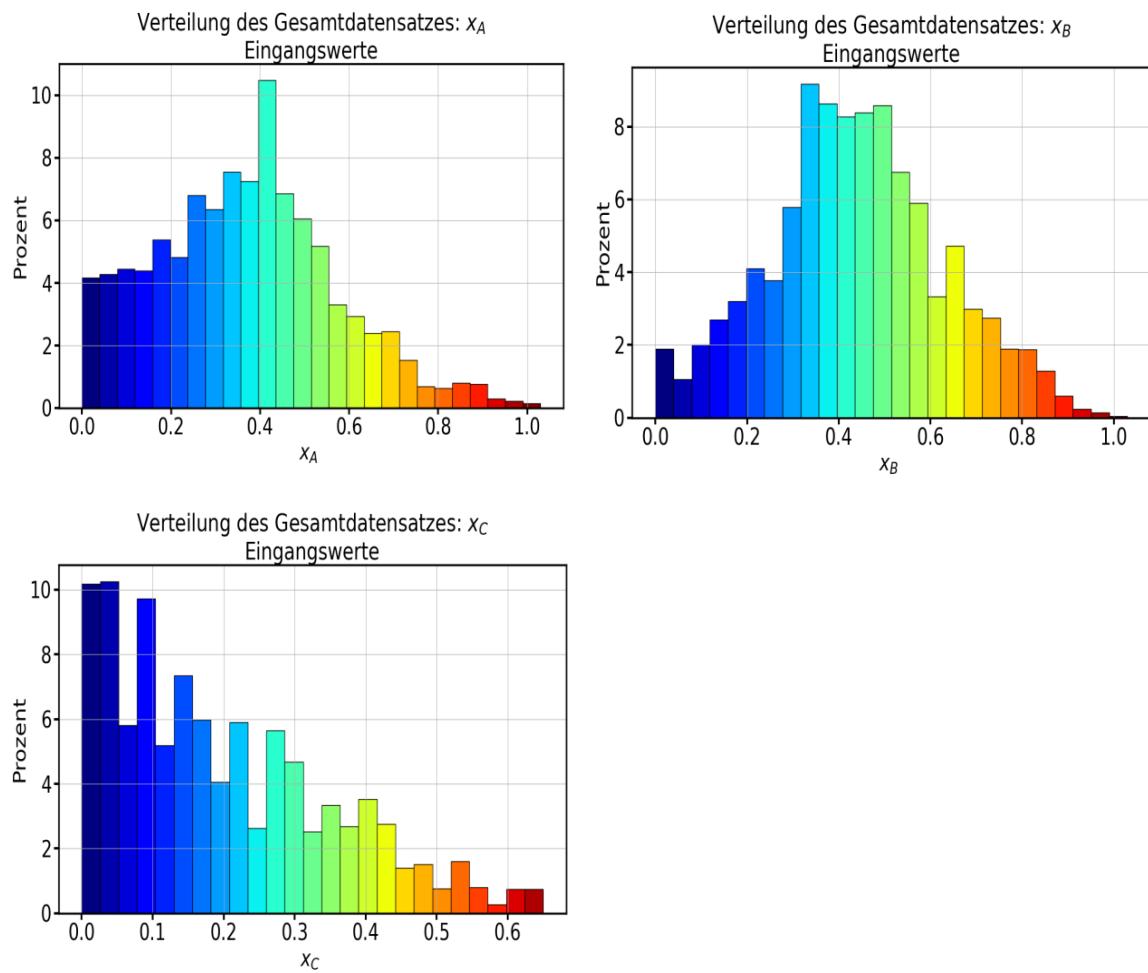


Abbildung 27 : Verteilung des Gesamten Datensatzes, eenthält Zusammensetzungen des Arbeitsfluids in den Eingangswerten.

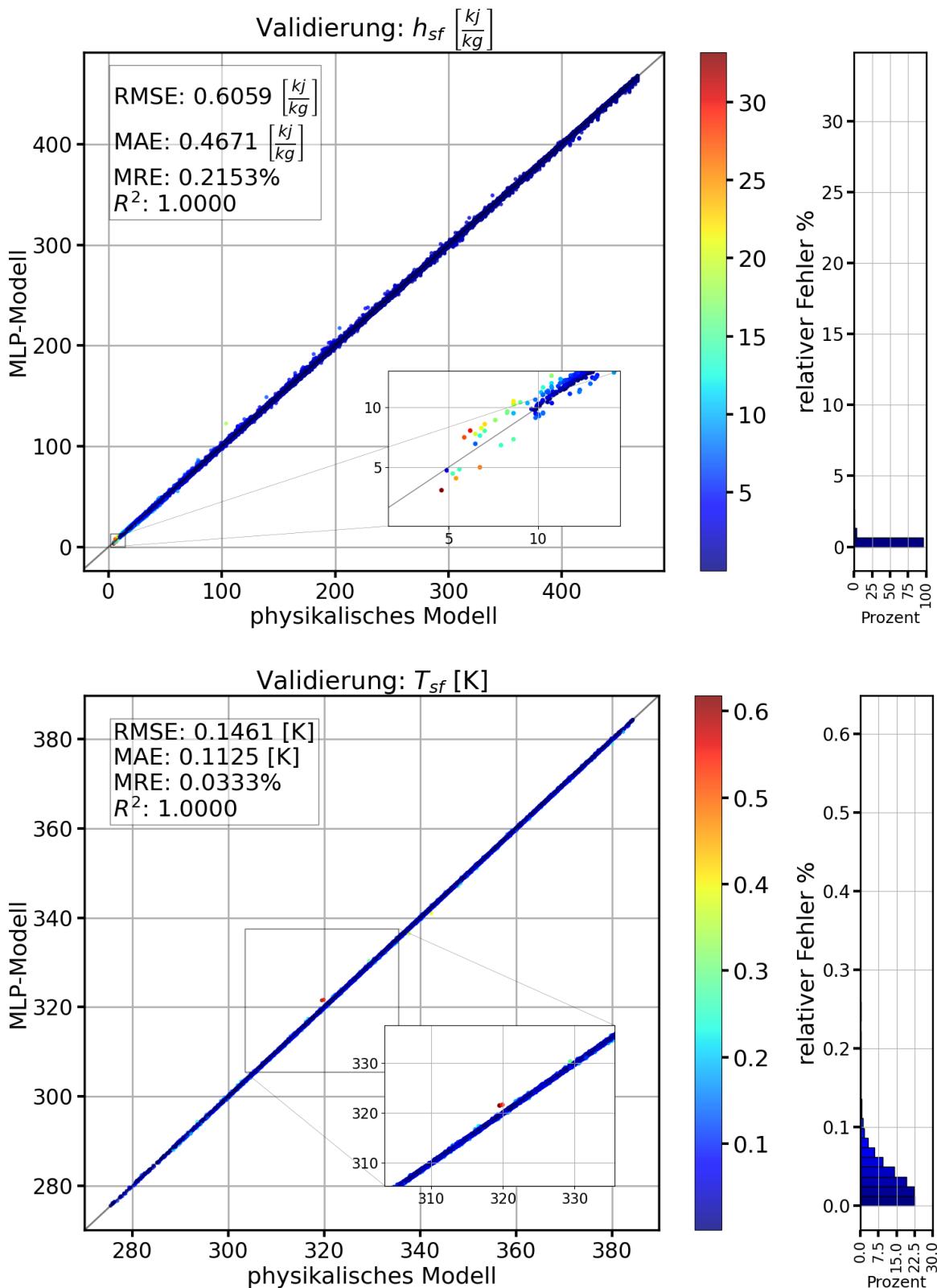


Abbildung 28 : Bewertungs des besten MPL-Modells mit dem Testdatensatz , X-Achse :spezifische Enthalpie und Temperatur von Sekundärfluid am Austritt aus Zielwerte , Y-Achse: vohergesagte spezifische Enthalpie aus dem MLP-Modell und berechnete Temperatur daraus.

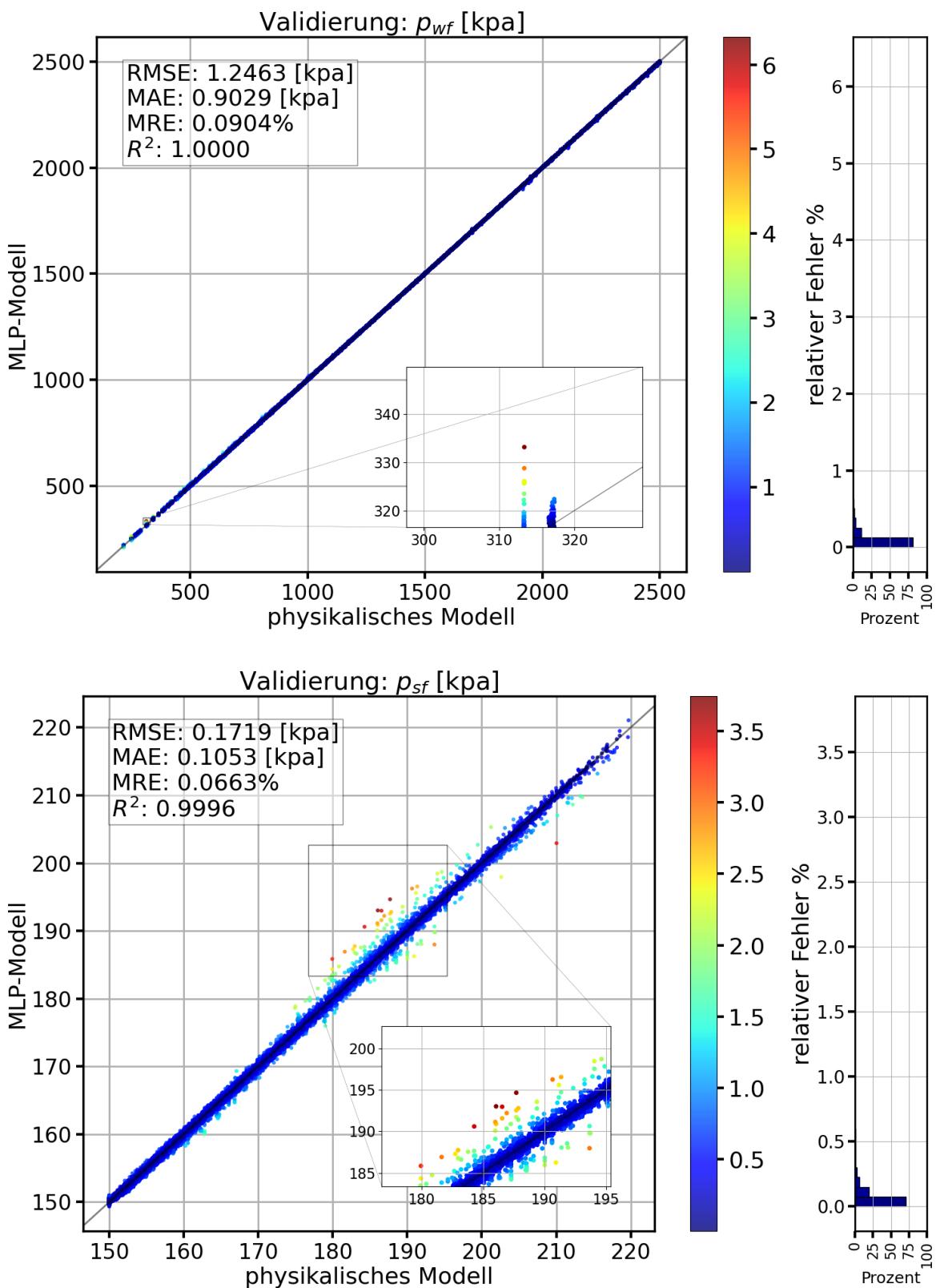


Abbildung 29 : Bewertung des besten MPL-Modells mit dem Testdatensatz , X-Achse :Druck der beiden Fluiden aus physikalischen Modell, Y-Achse: vorhergesagte Druck der beiden Fluiden aus dem MLP-Modell.

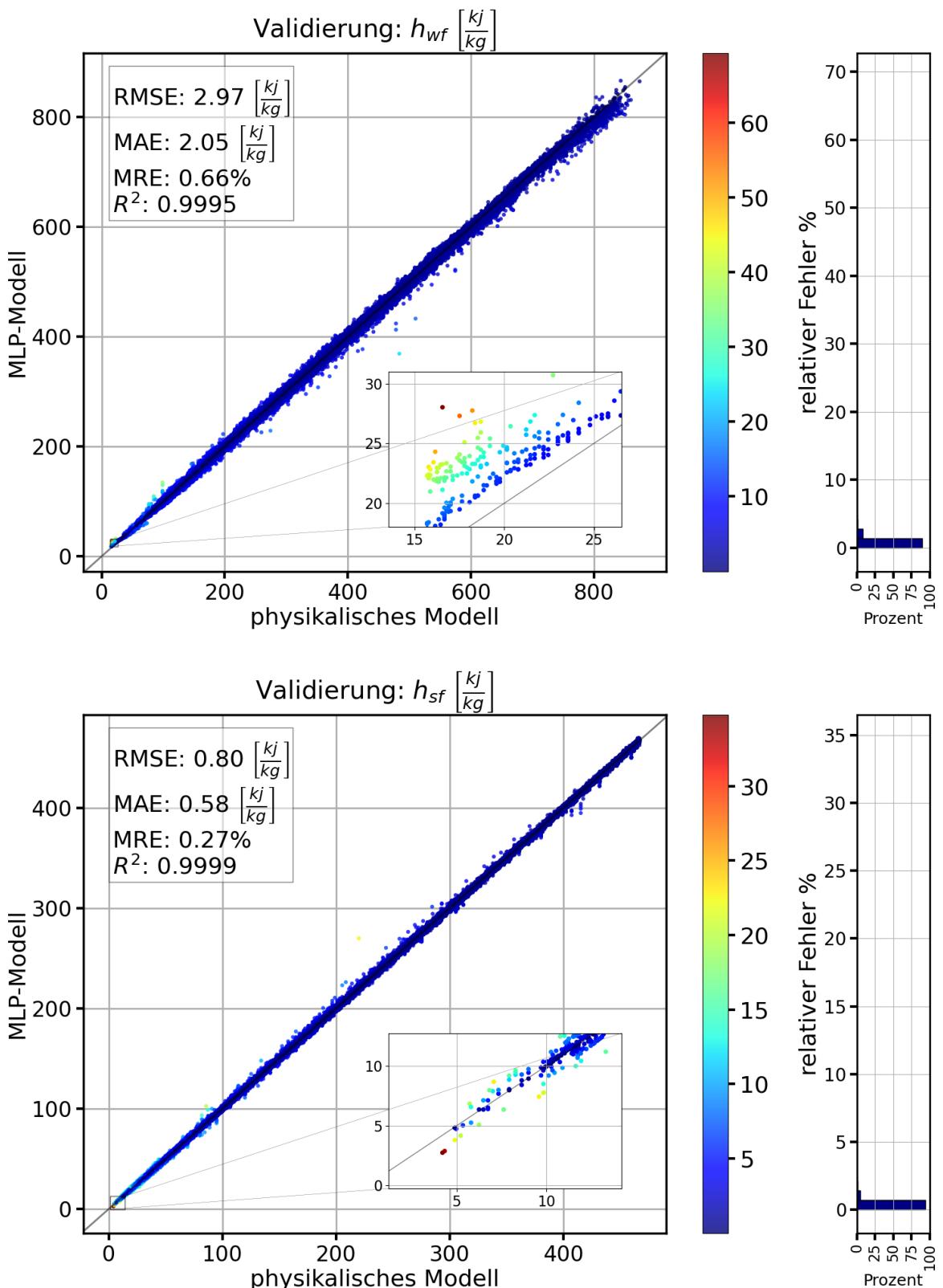


Abbildung 30 : Bewertung des besten MPL-Modells ohne x_C mit dem Testdatensatz , X-Achse :spezifische Enthalpie der beiden Fluiden aus physikalischen Modell, Y-Achse: vorhergesagte spezifische Enthalpie der beiden Fluiden aus dem MLP-Modell.

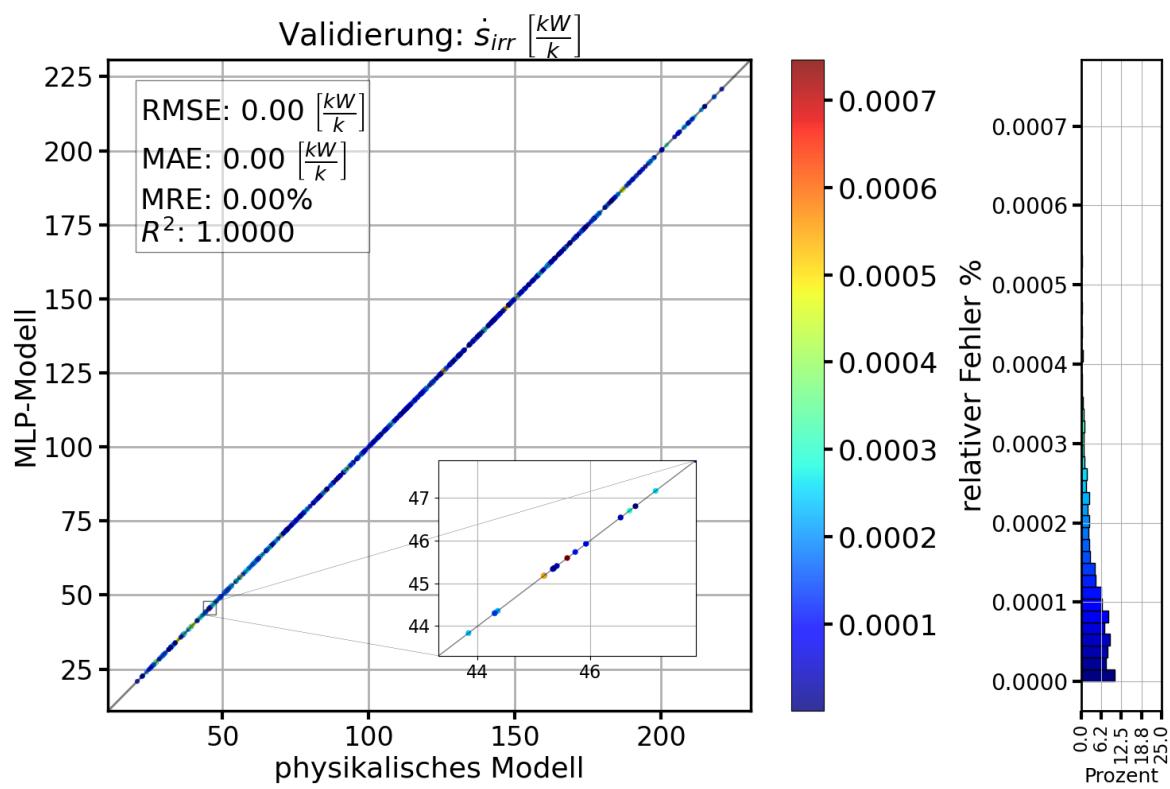
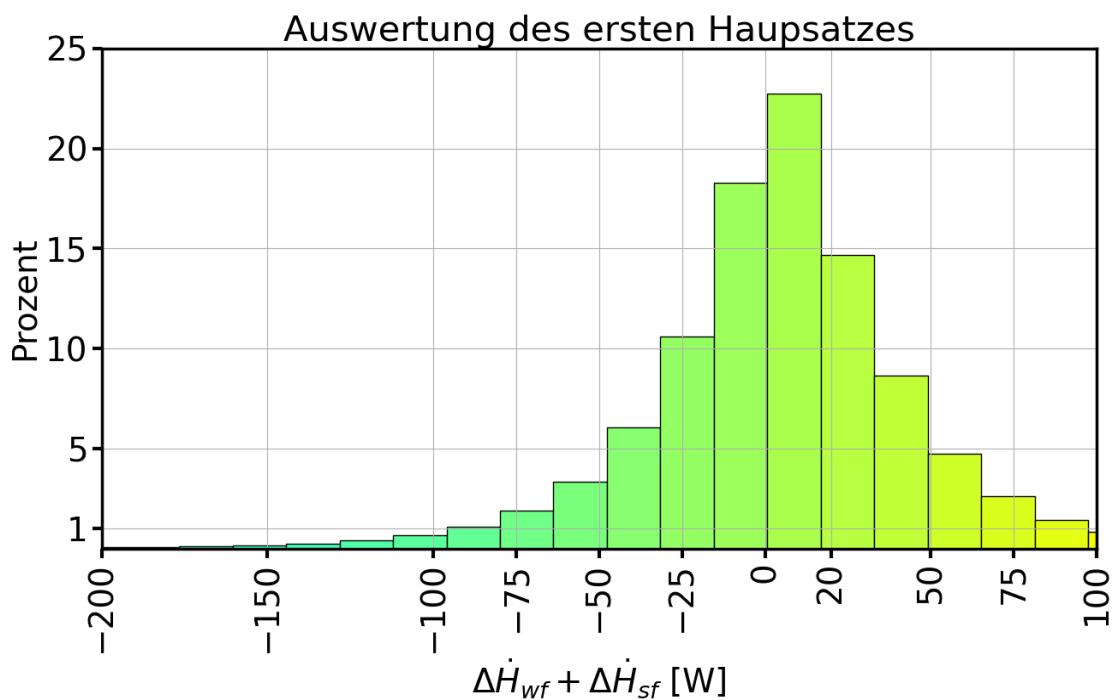


Abbildung 31 : Thermodynamische Bewertung des besten MPL-Modells ohne x_C

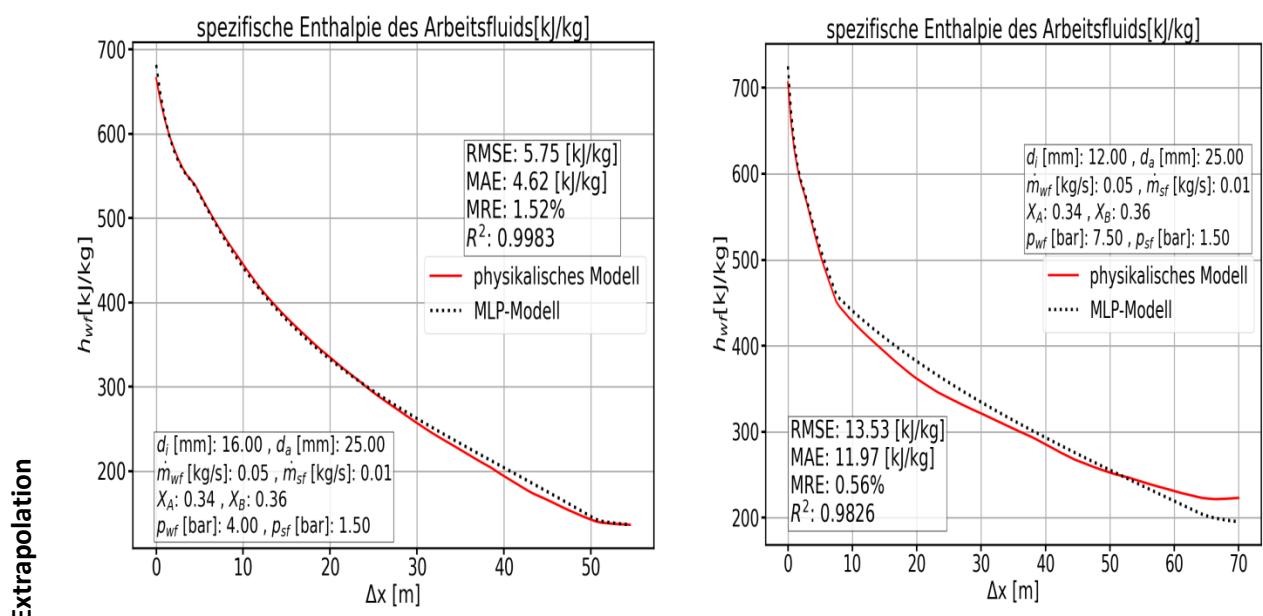
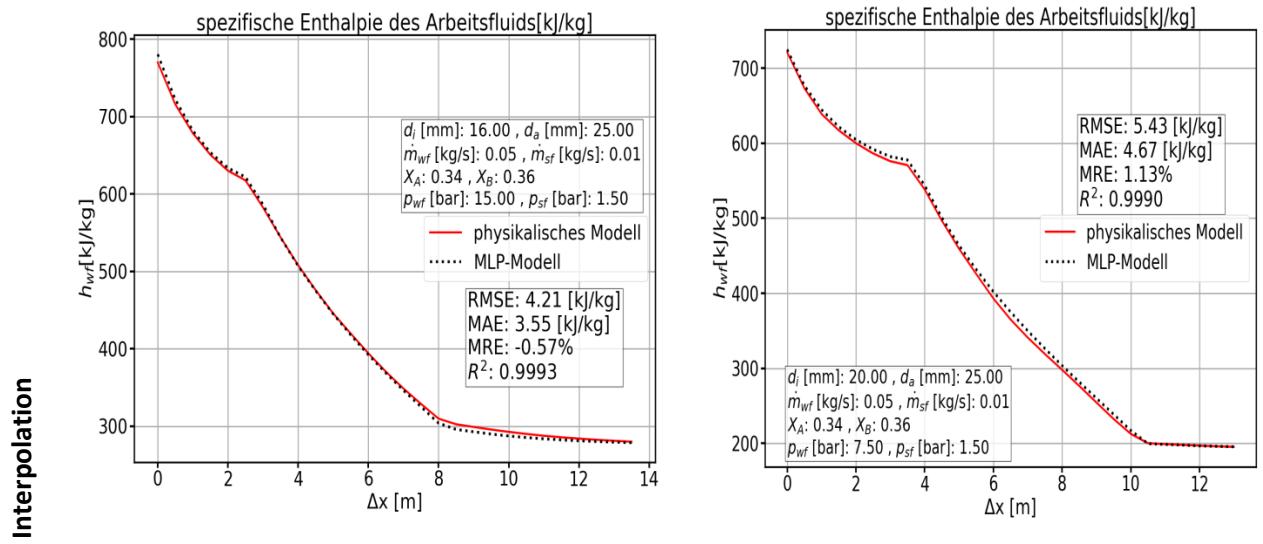


Abbildung 32: Szenario 2: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Eingangsdrucks des Arbeitsfluids.
 Szenario 3: Verlauf von h_{wf} bei Interpolation durch Änderung des Durchmessers des inneren Rohrs. Modell ohne x_c