

Kooperative Masterarbeit mit der Firma BASF SE

# Konzeptioneller Entwurf von Chemieverfahren mittels Reinforcement Machine Learning

## Beschreibung

An den Professuren Bioinformatik & Chemische und Thermische Verfahrenstechnik (TUM Campus Straubing) wurde in den letzten Jahren eine künstliche Intelligenz trainiert, Chemieverfahren zu entwerfen. In einem Reinforcement Learning Setup lernt ein Agent einzelne Prozessschritte (z.B. Reaktion und Trennverfahren) zu einem optimalen Gesamtverfahren zu kombinieren. Der Agent wurde bislang an einem vereinfachten Prozesssimulator trainiert. Im Rahmen einer Kollaboration möchte die Firma BASF SE die Methode mit ihrem In-House Prozesssimulator testen. Die Aufgaben in der Masterarbeit umfassen die Adaption der vorhandenen Reinforcement Learning Methode auf den neuen Prozesssimulator, Computereperimente mit gegebenen chemischen Stoffsystemen und den Vergleich der Performance zwischen den beiden Simulatoren.

Es handelt sich um eine TUM-externe Masterarbeit in der Fachstelle für Destillation und Wärmeübertragung der BASF, bei der Sie wertvolle Industrieerfahrung sammeln können. Neben Betreuern vor Ort, werden Sie zudem durch die beiden genannten Professuren der TUM unterstützt, über welche Sie die Masterarbeit auch formal anmelden. Die Arbeit kann in Präsenz am Verbundstandort der BASF in Ludwigshafen (Rheinland-Pfalz) oder in Mobilarbeit (nach Absprache) erfolgen.

## Vorkenntnisse/Voraussetzungen

Sehr gute Programmierkenntnisse sind Voraussetzung für die Masterarbeit, insbesondere Erfahrungen in Python. Vorkenntnisse im Bereich maschinelles Lernen, Reinforcement Learning, Verfahrenstechnik, technische Chemie sind willkommen, aber keine zwingende Voraussetzung.

## Beginn/Bewerbung

ab sofort, flexibel. Kontaktieren Sie uns mit aktuellem Notenauszug und legen Sie dabei kurz Ihre Motivation dar.

## Kontakt

Professur für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik  
M.Sc. Alexander Wolf  
Uferstraße 53, 94315 Straubing  
Tel. +49 9421 187 295  
alexander.b.wolf@tum.de

BASF, Fachstelle für Destillation und Wärmeübertragung  
Dr.-Ing. Marina Stavrou  
marina-eleni.stavrou@basf.com

