



1

## MASCHINELLES LERNEN ZUR VORHERSAGE THERMODYNAMISCHER EIGENSCHAFTEN

Zuschauer, die diese Serie gucken, gefällt auch diese Serie? Nach welchem Prinzip schlägt ein Portal wie Netflix Filme für seine Zuschauer vor? Oder Amazon seine Ware? Oder Facebook seine Seitenempfehlungen? Und was kann man aus der Anwendung dieser Algorithmen über die thermodynamischen Eigenschaften von Mischungen lernen? Das sind Fragen, auf die wir dank interner Fraunhofer-Förderung in einer Kooperation mit Prof. Dr. Hans Hasse, Jun.-Prof. Fabian Jirasek und Prof. Dr. Marius Kloft und von der TU Kaiserslautern vielversprechende erste Antworten gegeben werden konnten.

1 *Histogrammdarstellung des Vorhersagefehlers für die Ergebnisse der Netflix-Methode verglichen mit den Ergebnissen einer etablierten physikalischen Methode*

Durch Personalisierung ihrer Services wollen Netflix, Amazon Prime Video, Maxdome und Co. ihren Zuschauern helfen, noch schneller passende Inhalte zu finden. Diese Empfehlungssysteme vervollständigen lückenhaft besetzte Matrizen. Die Zeilen so einer Matrix sind dabei die Zuschauer, die Spalten sind die Filme. Ein Matrixeintrag besteht in der Bewertung eines Films durch einen Nutzenden. Allerdings gibt es erheblich weniger besetzte Matrixelemente als unbesetzte. Die Kernidee besteht im Auffüllen der unbesetzten Matrixelemente, so dass die Zeilen bzw. Spalten möglichst ähnlich sind. Dies wird beispielsweise durch ein Auffüllen erreicht, das die Singulärwerte der vervollständigten Matrix minimiert.

### Empfehlungssystem für Mischprobleme

Bei der Beschreibung thermodynamischer Eigenschaften von binären Mischungen gibt es ein ganz ähnliches Problem: Die Zeilen der Matrix sind in diesem Fall die Lösungsmittel, und die Spalten die gelösten Stoffe. Bildlich gesprochen ziehen sich Lösungsmittel und gelöster Stoff an (wie Wasser und Ethanol) oder stoßen sich ab (wie Wasser und Öl). Diese Wechselwirkung wird durch Aktivitätskoeffizienten beschrieben, die die Inhalte der Matrix bilden. Experimentell vermessen sind aber, bezogen auf die Gesamtmenge an Stoffen, nur verhältnismäßig wenige. Das Vervollständigen dieser Matrix stellt also ein analoges Problem dar – wie Zuschauern Filme vorzuschlagen.

In ersten Anwendungen von Empfehlungssystemen auf das Mischungsproblem zeigte sich, dass die Qualität der Vorhersagen vergleichbar ist mit denen, die aus involvierten, physikalische motivierten, semi-empirischen Gruppenbeitragsmethoden resultieren, s. Abb. 1. Aktuell wird daran gearbeitet, physikalisches Wissen bei der Matrixvervollständigung zu berücksichtigen. Diese Arbeiten sind nicht nur ein schönes Beispiel interdisziplinärer Kooperation, sondern zeigen auch das Potenzial von maschinellen Lernverfahren, eingesetzt in neuen Domänen.

