



University of Stuttgart
Germany

Department for Stochastic Simulation and Safety
Research for Hydrosystems (LS3/IWS)
Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und
Altlastensanierung (VEGAS/IWS)

**Modellgestützte
Hypothesenbildung
für Bodenkontami-
nationen mit Hilfe
Bayesscher Modell-
Analysen / ML**

SimTech Thema für B.Sc.- oder M.Sc.-Arbeit

Per- und Polyfluorierte- Alkylsubstanzen (PFAS) werden in vielen Branchen nutzbringend verwendet. Bodenkontaminationen mit PFAS sind jedoch weltweit ein dringendes Problem. So auch am Oberrhein, wo mehr als 1000 Hektar Landfläche mit PFAS kontaminiert ist. Das Verhalten von PFAS im Boden ist noch wenig verstanden: Diffusion, Sorption, Reaktion und Transportphänomene in einer interagierenden Substanzklasse (PFAS) stellt immense Herausforderungen an die Modellbildung. Entsprechend hoch sind Vorhersageunsicherheiten, und Experimentalisten stehen vor großen Herausforderungen in der Planung optimaler Experimente für maximalen

Zuwachs an Wissen über das System.



Basierend auf experimentellen Daten (1D-Säulenexperimente, Bild links) aus der VEGAS-Einrichtung am IWS soll jetzt systematisch modelliert werden. Erste Modelle in Form von partiellen Differentialgleichungen liegen bereits vor.

In Zentrum dieser Thesis soll eine systematische, kombinatorische Generierung von Modellen liegen; alternativ kann auch mit ML-in-PDE-Verfahren nach Termen „außerhalb“ der vorliegenden Kandidaten gesucht werden. In beiden Fällen soll das best-beschreibende Modell aus den Daten und aus vorliegendem Expertenwissen erlernt werden. Die Herausforderung kann wahlweise in algorithmisch-effizienter Durchsuchung des kombinatorischen Modellraums per Reinforcement Learning liegen, oder in der Kombination von PDEs, Expertenwissen, Daten und ML. Je nach Verlauf der Arbeit können auch Vorschläge für optimale Experimente mit Methoden der Bayes'schen optimalen Versuchsplanung erarbeitet werden.

Arbeitsschritte

- Einarbeitung in gängige Simulatoren (HYDRUS-1D) und in PFAS
- Modellbildung (Kombinatorisch oder mit ML-in-PDE)
- Bayes'sche Analyse oder Lernverfahren zur Modellidentifikation

Betreuung

- Wolfgang Nowak, Nils Wildt (IWS/LS3): Stochastische Modellbildung
- Claus Haslauer, Thomas Bierbaum (IWS/VEGAS): PFAS, Daten

Voraussetzungen

- Statistik, Stochastische Simulation, Optimierung, wahlweise ML
- Programmierkenntnisse (z.B. MATLAB, Python)
- Grundlagen in PDEs bzw. Strömung und Transport in porösen Medien



Apply now!

wolfgang.nowak@iws.uni-stuttgart.de