

# Mögliche Diplomarbeit – Nutzung neuronaler Netze um Systemverhalten zu beschreiben

Institut für Grundlagen der Informationsverarbeitung

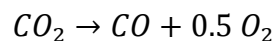
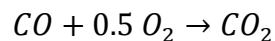
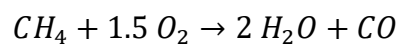
Institut für Wärmetechnik

TU Graz

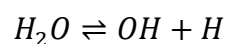
Bei Interesse, bitte um e-mail an: [robert.legenstein@tugraz.at](mailto:robert.legenstein@tugraz.at)

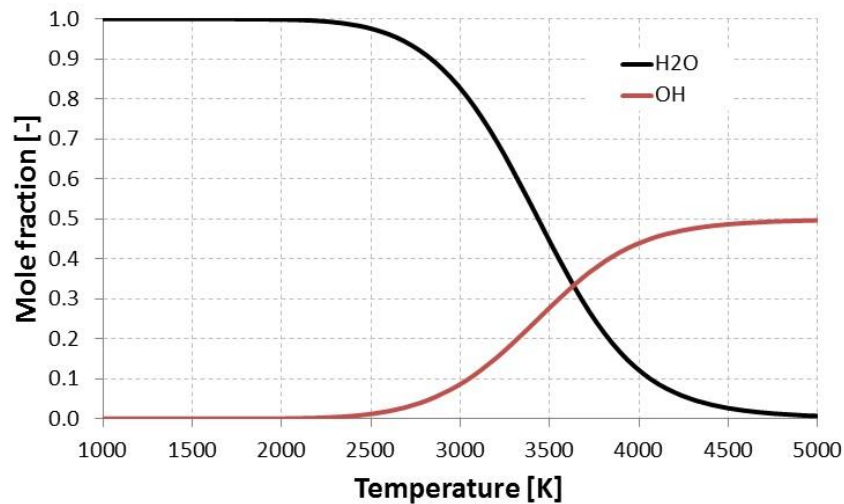
## **Problemstellung:**

Bei der numerischen Simulation von Verbrennungsvorgängen (meist CFD-Simulationen) wird aufgrund der vorhandenen Rechenkapazitäten häufig ein recht grober Ansatz zur Beschreibung der Gasphasenchemie verwendet. Dieser Ansatz umfasst dann lediglich wenige Reaktionsgleichungen wie zum Beispiel den folgenden 3-Schritt Mechanismus, der die totale Oxidation von Methan zu H<sub>2</sub>O und CO<sub>2</sub> beschreibt:



Bei den oben gezeigten Reaktionsschritten, handelt es sich jedoch um sogenannte Globalreaktionen. Das heißt, wichtige Zwischenschritte, sprich Elementarreaktionen, werden dabei vernachlässigt. Eine solche Elementarreaktion kann zum Beispiel der Zerfall eines H<sub>2</sub>O-Moleküls in OH und H Radikale sein. Das kann bei sehr hohen Temperaturen, wie sie in einer CH<sub>4</sub>-Flamme, welche mit reinem Sauerstoff betrieben wird, passieren. Im folgenden Diagramm ist der Zerfall von H<sub>2</sub>O bei sehr hohen Temperaturen dargestellt. Man sieht deutlich, dass ab ca. 2300 K die H<sub>2</sub>O-Konzentration sinkt.





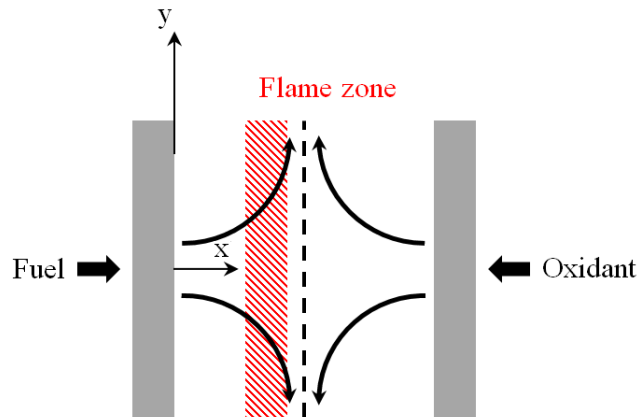
Um nun den Verlauf der chemischen Umsetzung des Brennstoffes in der Flamme auch mit Globalreaktionen wiedergeben zu können, werden dort die Parameter der Reaktionskinetik „nur“ angepasst. Die Reaktionskinetik beschreibt dabei den zeitlichen Ablauf der Reaktion. Wir am Institut arbeiten aktuell mit detaillierten Reaktionsmechanismen mit bis zu 56 Spezies (CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H, OH, CH<sub>3</sub>, etc.) und 325 Reaktionsschritten. Dies erfordert natürlich einen hohen Rechenaufwand.

### **Grundlegende Fragestellung:**

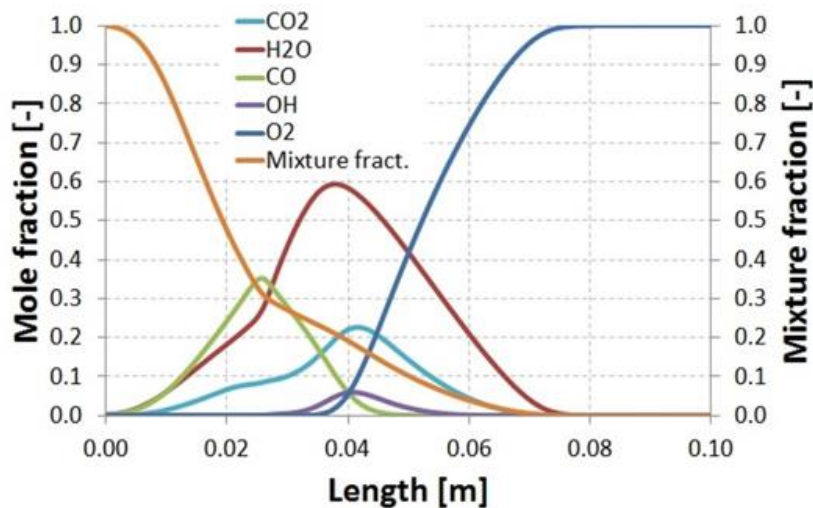
Können neuronale Netze trainiert werden, um die Temperaturen und Spezieskonzentrationen in einer Flamme vorherzusagen, ohne dass ein vollständiger reaktionskinetischer Ansatz gelöst werden muss?

### **Systemaufbau für Aufgabenstellung:**

Um die Anwendbarkeit solcher Netze zur Beschreibung komplexer Reaktionsvorgänge zu testen, könnte auf das Konzept einer laminaren Gegenstrom-Diffusionsflamme zurückgegriffen werden (siehe Abbildung). Dabei wird Brennstoff und Oxidator (z.B. N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>-Gemisch) durch ein poröses Medium in den Brennraum gebracht, und es entsteht eine längliche Flamme. Wir konstruieren so einen Versuchsstand gerade.



Der Vorteil dieser Konfiguration ist, dass sich die chemische Reaktion, Gasphasenströmung etc. auch 1D betrachten lässt, und somit können auch umfangreiche Reaktionsmechanismen (z.B. über 300 Reaktionen) numerisch in nur wenigen Minuten betrachtet werden. Case studies für die Generierung von Trainingsdaten können sehr rasch durchgeführt werden. Eine solche Berechnung wurde für die Verbrennung von CH<sub>4</sub> (von links kommend) und O<sub>2</sub> (von rechts kommend) durchgeführt (siehe folgende Abbildung). Der Abstand zwischen den Einlässen war dabei 10 cm. In dieser Abbildung sind jetzt nur die Konzentrationen einiger Spezies dargestellt (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, OH, O<sub>2</sub>). Für die Berechnung wurden aber 17 Spezies berücksichtigt und zusätzlich die Temperatur.



### Primäre Aufgabenstellung:

Erstellung neuronaler Netze um die Berechnungsergebnisse eines Reaktionsmechanismus vorherzusagen. Vorhersagen der Trends für die Konzentrationen (wie oben) und Temperatur, die eine Reaktionsmechanismus liefern würde.

- Input Daten: Zusammensetzung des Brennstoffes (CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO, etc.), Zusammensetzung des Oxidators (N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Verhältnis), Einströmgeschwindigkeiten, abgegebene Wärmestrahlung
- Output Daten: Spezieskonzentration und Temperatur an jeder Stelle zwischen Brennstoff- und Oxidatoreinlass

### **Weitere Aufgabenstellungen:**

- Finden von Input Parametern um definierte Output-Werte einzuhalten/zu erreichen. Zum Beispiel: Maximaltemperatur bei der die Bildung von Stickoxiden (NO<sub>x</sub>) im Abgas einen gewissen erlaubten Maximalwert nicht überschreitet. Welche Betriebsparameter sind erforderlich (Brennstoffzusammensetzung, Einströmgeschwindigkeiten etc.)?
- Optimierung der Reaktionsmechanismen: Identifikation von Einzelreaktionen im gesamten Reaktionspaket, welche auf das Ergebnis kaum oder nur wenig Einfluss haben (Sensitivitätsanalyse). Diese Reaktionen müssen dann nicht mehr betrachtet werden. Somit können kürzere Rechenzeiten in großen Brennersimulationen erreicht werden.