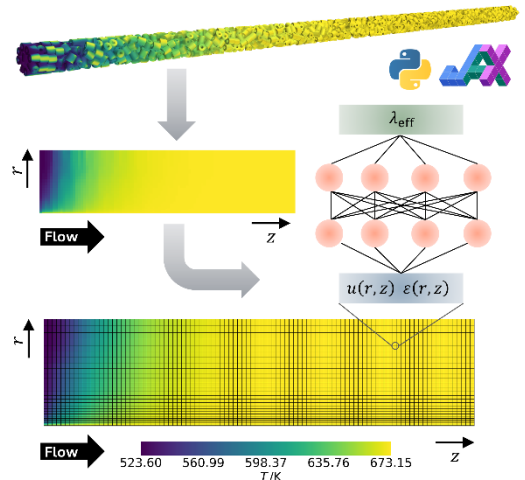


Masterarbeit

Integration von Machine Learning in Pseudokontinuum-Modelle zur Bestimmung effektiver Wärmetransportparameter

Motivation

Zur Vorhersage und Optimierung der Reaktorperformance industrieller Festbettreaktoren kommen recheneffiziente Pseudokontinuums-Modelle zum Einsatz. In diesen Modellen wird der gesamte konvektive und konduktive radiale Wärmetransport durch eine effektive Wärmeleitfähigkeit abgebildet, die mittels semi-empirischer Korrelationen berechnet wird. Diese sind jedoch oft zu ungenau, da sie die lokalen Effekte der Festbettstruktur und der Fluidströmung auf den Wärmetransport nicht berücksichtigen. Um diesen Nachteil zu überwinden, können neuronale Netze in die Reaktormodelle integriert und mithilfe von Daten aus partikel aufgelösten Strömungssimulationen (PRCFD) so trainiert werden, dass sie die effektive Wärmeleitfähigkeit als Funktion der lokalen Struktur bestimmen. Dies ist ein vielversprechender Ansatz, um Informationen aus rechenintensiven, strukturaufgelösten Simulationen in Pseudokontinuums-Modelle zu übertragen und die Reaktorskala mit der Partikelskala zu verbinden.



Aufgaben

- Konzeption und Implementierung einer Methodik zur Erzeugung von geeigneten Trainingsdaten basierend auf den bestehenden PRCFD Workflows
- Nutzung des bestehenden in der Python Bibliothek JAX implementierten Pseudokontinuums-Modell zum Trainieren und Testen der neuronalen Netze
- Sensitivitätsanalyse der neuronalen Netze und Vergleich mit Korrelationen aus der Literatur

Anforderungsprofil

- Kenntnisse in der Programmierung mit Python.
- Kenntnisse im Bereich CFD und Reaktormodellierung hilfreich, aber nicht erforderlich.

Beginn der Arbeit: ab sofort

Dauer der Arbeit: 6 Monate

Arbeitsweise: theoretisch

Anmerkungen: Mobiles Arbeiten möglich

Kontakt:

Dr.-Ing. Martin Kutscherauer

martin.kutscherauer@kit.edu

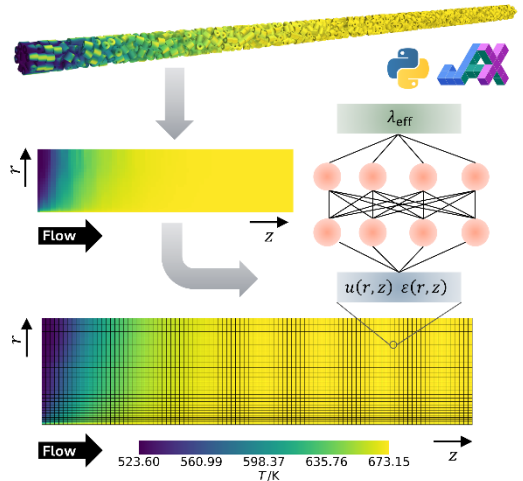
Tel.: +49 721 608 45427

Master's Thesis

Integration of machine learning into pseudo-continuum models for determining effective heat transport parameters

Motivation

Computationally efficient pseudo-continuum models are used to predict and optimize the performance of industrial fixed bed reactors. In these models, the total convective and conductive radial heat transport is represented by an effective thermal conductivity, which is calculated using semi-empirical correlations. However, these are often too imprecise, as they do not account for the local effects of the fixed-bed structure and fluid flow on heat transfer. To overcome this limitation, neural networks can be integrated into the reactor models and trained using data from particle-resolved computational fluid dynamics simulations (PRCFD) to determine the effective thermal conductivity as a function of the local structure. This is a promising approach for transferring information from computationally intensive, structure-resolved simulations into pseudo-continuum models and bridging the gap between the reactor scale and the particle scale.



Tasks

- Design and implementation of a methodology for generating suitable training data based on existing PRCFD workflows.
- Use of the existing pseudo-continuum model implemented in the Python library JAX to train and test the neural networks.
- Comparison of the neural network with correlations reported in the literature and conducting a sensitivity analysis.

Requirements

- Knowledge of Python programming.
- Knowledge of CFD and reactor modeling is helpful but not required.

Start date: from now

Duration: 6 month

Working mode: theoretical

Notes: Remote work possible

Contact:

Dr.-Ing. Martin Kutscherauer

martin.kutscherauer@kit.edu

Tel.: +49 721 608 45427