

Master Thesis im Clusterprojekt „Clean Circles – Eisen als Energieträger einer klimaneutralen Kreislaufwirtschaft“

Im Rahmen des **Clean Circles Clusterprojektes** (www.clean-circles.tu-darmstadt.de) ist eine **Masterarbeit** im Bereich Strömungsmodellierung zu vergeben.

Gesucht werden Studierende aus den Bereichen Physik, Mathematik, Maschinenbau, Chemieingenieurwesen oder verwandter Studiengänge.

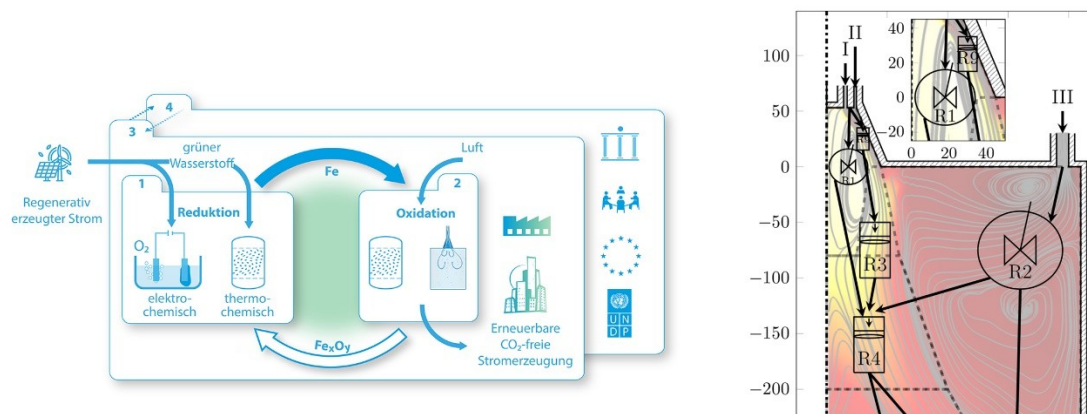


Abbildung: (a) Ein innovativer Energie-Stoff-Kreislauf als zentraler Baustein der Energiewende.
(b) Netzwerkmodell eines chemischen Reaktors.

Clean Circles steht für einen einzigartigen Forschungsansatz, in dem Eisen mit seinen Oxiden in einem Kreislauf als Kohlenstoff-freier chemischer Energieträger zur Speicherung erneuerbar erzeugten Stroms (Wind, Sonne) nutzbar gemacht werden soll.

Es kooperieren die TU Darmstadt (Federführung), die Hochschule Darmstadt, das KIT Karlsruhe, das DLR Institut für CO₂-arme Industrieprozesse und die JG-Universität Mainz in einem stark transdisziplinären Clusterprojekt. Zahlreiche Wissenschaftler_innen aus den Fachbereichen Chemie, Mathematik, Maschinenbau, Politikwissenschaft, und Wirtschaftswissenschaften kooperieren in Clean Circles. Das Cluster ist in die vier Forschungsfelder Reduktionsverfahren, Oxidationsverfahren, thermodynamisch-mathematische Prozess- und Systembetrachtung und politisch-wirtschaftliche Betrachtung strukturiert, die untereinander stark verzweigt sind.

In unserem Teilprojekt, das zum Forschungsbereich thermodynamisch-mathematische Prozessbetrachtung gehört, befassen wir uns mit der skalen- und

komplexitätsreduzierten Modellierung der Reduktion und Oxidation von Eisen in einem chemischen Reaktor.

Um die Forschung aus Clean Circles auf reale industrielle Prozesse übertragen zu können, sind breit gefächerte Parameterstudien erforderlich. Solche Parameterstudien erfordern bei voll aufgelöste Strömungssimulationen einen zu hohen Rechenaufwand. Deshalb müssen die komplexen Strömungsfelder in einem Reaktor effizienter beschrieben werden.

Hierfür werden sogenannte Netzwerkmodelle eingesetzt. Die Idee dabei ist einen realen Reaktor durch ein Netzwerk idealisierter Reaktorbereiche zu approximieren. Die idealisierten Reaktoren können dann durch wesentlich einfachere Modellgleichungen beschrieben werden. Auf diese Weise kann der Rechenaufwand im Vergleich zu voll aufgelösten Strömungssimulationen erheblich reduziert werden.

Ein wesentlicher Schritt bei der Erstellung des Netzwerkmodells ist dabei die Einteilung der funktionalen Bereiche (sog. „Kompartments“) des Reaktors anhand der Strömungsstruktur. Dieser Schritt wird häufig noch manuell durchgeführt. Ziel der Masterthesis ist es, diesen Schritt durch geeignete Algorithmen (mindestens teilweise) zu automatisieren. Automatisierte Verfahren zur Identifikation der Kompartments könnten die Robustheit der Modelle verbessern und den Gesamtalgorithmus transparenter machen. Damit leistet die Masterarbeit einen wichtigen Beitrag zur mathematischen Modellierung in Clean Circles.

Grundlegendes Ziel der Masterarbeit ist:

- Die Identifikation geeigneter Methoden sowie
- die Entwicklung und Implementierung geeigneter Algorithmen zur (semi-) automatischen Identifikation von Kompartments in Strömungsreaktoren.
- Ggf. Weiterentwicklung von bereits bestehenden Algorithmen zu diesem Zweck

Die folgenden Vorkenntnisse sind zur Bearbeitung hilfreich:

- Grundlegende Kenntnisse der Physik und Mathematik, zum Beispiel erworben im Studiengang Physik, Maschinenbau, Chemieingenieurwesen, Mathematik, und verwandten Studiengängen.
- Grundlegende Programmier- und Numerikkenntnisse, zum Beispiel erworben in Computational Physics oder vergleichbaren Modulen oder Programmiererfahrung in einer Sprache wie C/C++, Fortran, Python, Matlab oder Mathematica usw.
- Generell Spaß am wissenschaftlichen und interdisziplinären Arbeiten sowie Offenheit und Lernbereitschaft

Der zeitliche Umfang richtet sich nach der jeweiligen Studienordnung. Insbesondere kann das Projekt auch mehrteilige Module (wie Praktikum zur Einführung in das wissenschaftliche Arbeiten + Masterarbeit) umfassen.

Das Projekt ist im Clusterprojekt Clean Circles an der Schnittstelle zwischen den Arbeitsgruppen Simulation reaktiver Thermofluidströmungen (STFS, FB Maschinenbau) und Mathematische Modellierung und Analysis (FB Mathematik) angesiedelt. Die Betreuung liegt beim Institut für Mathematische Modellierung und Analysis (MMA, www.mma.tu-darmstadt.de)

Die Masterarbeit ist ab sofort (April 2022) verfügbar, das genaue Startdatum kann individuell geregelt werden. Bei Interesse bitte Kontakt aufnehmen mit

Dr. Mathis Fricke

Mathematische Modellierung und Analysis
Alarich-Weiss-Str.10
64287 Darmstadt

fricke@mma.tu-darmstadt.de



Mathematical
Modeling and Analysis

