

Data-driven modeling of self-ignition properties of the renewable fuel PODE (Polyoxymethylen Dimethyl ether) using methods of machine learning

Datenbasierte Modellierung des Selbstzündungsverhaltens des erneuerbaren Kraftstoffs OME (Oxymethylether) mit Methoden des maschinellen Lernens

Bachelor thesis by Pascal Roth (Student ID: 2541363)

Date of submission: April 11, 2020

1. Review: Prof. Dr.-Ing. C. Hasse
 2. Review: M. Sc. P. Haspel
 3. Review: M. Sc. J. Bissantz
- Darmstadt



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Mechanical Engineering
Department
Simulation reaktiver
Thermo-Fluid Systeme

Erklärung zur Abschlussarbeit gemäß §22 Abs. 7 und §23 Abs. 7 APB der TU Darmstadt

Hiermit versichere ich, Pascal Roth, die vorliegende Bachelorarbeit ohne Hilfe Dritter und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht worden. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Mir ist bekannt, dass im Fall eines Plagiats (§38 Abs. 2 APB) ein Täuschungsversuch vorliegt, der dazu führt, dass die Arbeit mit 5,0 bewertet und damit ein Prüfungsversuch verbraucht wird. Abschlussarbeiten dürfen nur einmal wiederholt werden.

Bei der abgegebenen Thesis stimmen die schriftliche und die zur Archivierung eingereichte elektronische Fassung gemäß §23 Abs. 7 APB überein.

Bei einer Thesis des Fachbereichs Architektur entspricht die eingereichte elektronische Fassung dem vorgestellten Modell und den vorgelegten Plänen.

Darmstadt, **?today?**

P. Roth

Contents

1	Introduction	4
2	Reactor simulation and data computation	5
2.1	Homogeneous Reactor	5
2.2	Data computation	5
3	Neural Network	6
3.1	Architecture	6
3.2	Training	6
4	Results and Discussion	7
4.1	Results of the Neural Network	7
4.2	Comparison to other models	7
5	Conclusion	8



1 Introduction

Polyoxymethylene Dimethyl ether



2 Reactor simulation and data computation

2.1 Homogeneous Reactor

2.2 Data computation



3 Neural Network

3.1 Architecture

3.2 Training

4 Results and Discussion

4.1 Results of the Neural Network

4.2 Comparison to other models

Comparison to detailed mechanism

Comparison to Global Reaction Mechanism



5 Conclusion
