



Diplomarbeit / Promotion

Simulation von Autoabgaskatalysatoren: Maschinellen Lernverfahren und detaillierten chemischen Modelle

Motivation: Im Arbeitskreis von Prof. Deutschmann werden detaillierte chemische Modelle für Autoabgaskatalysatoren entwickelt. Diese Modelle geben das Reaktionsgeschehen im Katalysator sehr genau wieder, um die die technischen Systeme von den molekularen Prozessen her verstehen zu können. Im industriellen Alltag sind die mit dieser Genauigkeit verbundenen langen Rechenzeiten jedoch hinderlich.

Thema: In dieser Arbeit soll in einem gemeinsamen Projekt mit der Firma umicore, Hanau, untersucht werden, inwieweit die detaillierten Mechanismen durch maschinelle Lernverfahren wie z.B. neuronale Netze vereinfacht und damit einer industriellen breiten Anwendung zugänglich gemacht werden können.



Voraussetzungen: Studium der Chemie, Physik, Chemie-Ingenieurwesen, Maschinenbau

Betreuer: Dr. M. Votsmeier (umicore AG, Hanau), Prof. Dr. Olaf Deutschmann (ITCP/UKA)