

Bachelorarbeit

Vorhersage des Wärmeübergangs in Raketenbrennkammern
mithilfe neuronaler Netze auf Basis simulativer und
experimenteller Daten

von Rosner, Arnulf



Diese Arbeit wurde vorgelegt am
Institut für Strahltriebwerke und Turbomaschinen

Fakultät für Maschinenwesen der
Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

Prüfer:	Prof. Dr. Michael Oswald
Betreuer:	Thorsten Bindewald, M.Sc.
externer Betreuer:	Kai Dresia, M.Sc. (DLR)
externer Betreuer:	Marcus Lehmann, Dipl.-Ing. (ArianeGroup)

Aachen, 16. Juli 2021

Inhalt und Ergebnisse dieser Arbeit sind ausschließlich zur Verwendung im Kontext einer Kooperation mit dem Institut für Strahlantriebe und Turbomaschinen bestimmt. Alle Nutzungsrechte liegen beim Institut für Strahlantriebe und Turbomaschinen. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Instituts ist es nicht gestattet, diese Arbeit oder Teile daraus an Dritte weiterzugeben.

Simulations were performed with computing resources granted by RWTH Aachen University under project thes0926.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungen	v
1. Einleitung	1
2. Grundlagen	3
2.1. Raketentriebwerke	3
2.2. Triebwerkzyklen	3
2.3. Kühlmethoden	5
2.4. Methan als Brennstoff	6
2.5. Effekte in der Kühlkanalströmung	8
2.5.1. Turbulenzen	8
2.5.2. Heat Transfer Deterioration	9
2.5.3. Thermische Schichtung	10
2.5.4. Trägheitseffekte	10
3. Berechnung des Wärmeübergangs	13
3.1. Nusselt Korrelationen	13
3.2. Numerische Strömungssimulationen	16
3.3. Künstliche neuronale Netzwerke	17
3.3.1. Grundlagen künstlicher neuronaler Netzwerke	17
3.3.2. Berechnung des Wärmeübergangs mittels eines KNN	21
4. Verbesserung und Analyse	25
4.1. Allgemeines Vorgehen	25
4.2. Problem der ungleichmäßigen Datenverteilung	27
4.2.1. Lösungsansätze	27
4.2.2. Anwendung DBSCAN und Gewichtung	29
4.3. Einsatz zusätzlicher Parameter	35

4.4.	Einfluss der Datenmenge	36
4.4.1.	Einfluss auf die Vorhersagegenauigkeit	37
4.4.2.	Einfluss auf die Netzwerkarchitektur	39
4.5.	Einbindung KKK-Datensatz	43
4.5.1.	Einbindung experimenteller Daten	43
4.5.2.	Berücksichtigung Trägheitseffekte	45
4.6.	Validierung	54
5.	Anwendung auf reales Triebwerk	56
5.1.	Motivation und Gültigkeitsbereich	56
5.2.	Datengenerierung	57
5.3.	Training und Auswertung des KNN	59
6.	Zusammenfassung und Ausblick	63
A.	Anhang	71
A.1.	Parameterbereiche der verwendeten Daten	72
A.2.	Auswertung KNN FV4	74
A.3.	Lebensdauerrechnung mit vom KNN berechneten Eingabegrößen	75

Abbildungsverzeichnis

2.1. Funktionsweise Expander-Zyklus und Expander-Bleed-Zyklus	5
2.2. p/T-Diagramm für Methan angepasst aus [6]	7
2.3. Stoffeigenschaften Methan angepasst aus [18]	8
2.4. Kühlkanalgeometrieverläufe realer Triebwerke	12
2.5. Strömungsgeschwindigkeit bei Höhen-Sprung eines Kühlkanals [19] .	12
3.1. Temperaturverlauf und Wärmeströme in und an einer Brennkammerwand nach Vorlage von SCHULZE [30]	15
3.2. Aufbau eines künstlichen neuronalen Netzwerks	18
3.3. Vorhersagen der Heißgaswandtemperatur des LUMEN-Triebwerks[19]	23
4.1. Auswertung Datenanalyse	32
4.2. Auswertung KNN Training mit Gewichtung	34
4.3. Einfluss der Datenmenge auf die Vorhersagegenauigkeit	38
4.4. Einfluss der Datenmenge auf die Anzahl der Netzwerkvariablen . . .	41
4.5. Einfluss Anzahl Netzwerkvariablen auf Vorhersagegenauigkeit . . .	42
4.6. Auswertung der Einbindung experimenteller Daten in das Training .	46
4.7. Vorhersagen an Sprungstellen in der Krümmung	49
4.8. Vorhersagen an Sprungstellen in der Höhe und Breite	51
4.9. Differenz zwischen absoluten Abweichung von P5 und S9	53
4.10. Vergleich des verbesserten KNNs anhand LUMEN im Gegenstrom .	55
5.1. Lastpunkte für die Datengenerierung	58
5.2. Auswertung KNN anhand eines Kühlkanals	60
5.3. Auswertung KNN anhand aller Datensätze	62

Tabellenverzeichnis

4.1. Grenzwerte und zugehörige Clusteranzahl berechnet durch DBSCAN	32
4.2. Informationen zu den Testdatensätzen für die Auswertung der Gewichtung	33
4.3. Auswertung KNN mit zusätzlichen Eingabeparametern	36
4.4. Parameter für das Hyperparametertuning	37
4.5. Hyperparameter der jeweils besten KNN	39
4.6. Auswertung KNN mit KKK und EKA als Trainingsdaten	45
4.7. Auswertung KNN mit Information stromauf	47
5.1. Angestrebter Gültigkeitsbereich des KNN	57
5.2. Auswertung KNN auf den gesamten Validierungsdaten	59

Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics (numerische Strömungsmechanik)
DBSCAN	Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise
EKA	einfache Kühlkanalabschnitte
HARCC	High Aspect Ratio Cooling Channel
HTD	Heat Transfer Deterioration
ISP	spezifischer Impuls
KKK	komplexe komplette Kühlkanäle
KNN	künstliches neuronales Netzwerk
LH2	liquid hydrogen (flüssiger Wasserstoff)
LOX	liquid oxygen (flüssiger Sauerstoff)
MAE	mittlerer absoluter Fehler
MAPE	mittlerer absoluter prozentualer Fehler
MSE	mittlerer quadratischer Fehler
SMOTE	Synthetic Minority Oversampling Technique
std	Standardabweichung

1. Einleitung

In der Raumfahrt spielt der Kostenfaktor durch kommerziell getriebene Raumfahrtunternehmen, wie SPACEX oder BLUEORIGIN, eine immer größer werdende Rolle. Die Wiederverwendbarkeit rückt dabei zunehmend in den Fokus, da durch diese die Kosten gesenkt werden können und zudem auch die Bandbreite an möglichen Einsatzszenarien steigt. Der Brennstoff Methan bietet, gerade im Bezug auf die neuen Anforderungen, Wiederverwendbarkeit und Kostensenkung, eine Alternative zu den herkömmlichen Brennstoffen.

Methan verfügt aufgrund seiner thermodynamischen Eigenschaften über einige wesentliche Vorteile, wie gute Kühleigenschaften oder eine einfachere und effizientere Lagerfähigkeit [18]. Durch diese spezifischen Eigenschaften ergeben sich jedoch auch Besonderheiten, welche die Berechnung des Wärmeübergangs in einer regenerativ gekühlten Brennkammer erschweren [13]. Die genaue Modellierung des Wärmeübergangs ist jedoch für die Lebensdauervorhersage der Brennkammer und den Auslegungsprozess von Brennkammer und deren Kühlkanälen ausschlaggebend [17], [24]. Bisherige Rechenmethodiken sind, entweder durch starke Vereinfachung und daraus resultierender Vernachlässigung wichtiger Effekte, zu ungenau und in zu kleinen Bereichen gültig oder, bei einer exakten Berechnung, besonders für den Auslegungsprozess der Kühlkanalgeometrie, bei dem eine tausend Kühlkanalkonfigurationen getestet werden, zu rechenintensiv [33].

Es werden neue Rechenmodelle benötigt, die den Wärmeübergang in einem möglichst großem Gültigkeitsbereich, mit ausreichender Genauigkeit und geringer Rechenzeit berechnen. Eine neuere Berechnungsmöglichkeit bietet das maschinelle Lernen bzw. der Einsatz von künstlichen neuronalen Netzen (KNN). Ein solches KNN wurde zur Berechnung des Wärmeübergangs in einem mit Methan betriebenen regenerativ gekühltem Raketentriebwerk bereits durch DRESIA [6] aufgestellt und von WAXENEGGER-WILFING ET AL. [33] erweitert. Dabei konnte ein KNN mit Daten aus Strömungssimulationen trainiert werden, welches den Wärmeüber-

gang über einen breiten Gültigkeitsbereich mit einer Berechnungszeit von 0,6 s und einem mittleren Fehler von 16 K beschreibt. Weiterführend wurden dieses KNN in der Arbeit von JAKOBS [19] anhand neuer komplexerer Daten ausführlich validiert und vorhandene Problemstellen herausgearbeitet. Hierbei wurde ein großes Potential der angewandten Methodik aufgezeigt.

In der vorliegenden Arbeit soll die Methodik des Einsatzes eines KNN zur Berechnung des Wärmeübergangs in einer mit Methan regenerativ gekühlten Brennkammer verbessert werden. Angesetzt wird dabei an den von JAKOBS aufgezeigten Problemen mit besonderem Hinblick auf die Berücksichtigung von Trägheitseffekten. Zudem soll geprüft werden, wie sich experimentelle Daten in das Training des KNN einbinden lassen und inwieweit dadurch die Genauigkeit der Vorhersage beeinflusst wird. Mit diesen Erkenntnissen und zusätzlichen Analysen an dem KNN soll abschließend die Übertragbarkeit auf ein reales Triebwerk getestet und validiert werden.

Zu Beginn dieser Arbeit wird in Kapitel 2 eine Einführung in die Grundlagen von Raketentriebwerken mit Hinblick auf die verschiedenen Triebwerkszyklen, Kühlmethoden und Methan als Treibstoff gegeben. Zudem werden die besonderen Herausforderungen bei der Berechnung des Wärmeübergangs aufgelistet. Darauf werden in Kapitel 3 verschiedene Berechnungsmethodiken für den Wärmeübergang vorgestellt. Die Grundlagen eines KNN und die bisher geleisteten Arbeiten von DRESIA, WAXENEGGER-WILFING und JAKOBS werden erläutert. Aufbauend auf diese Ergebnisse soll die Methodik in Kapitel 4 verbessert und analysiert werden. Insbesondere werden dabei die Einbindung von experimentellen Daten in das Training eines KNN und die Berücksichtigung von Trägheitseffekten untersucht. Abschließend wird in Kapitel 5 ein KNN auf ein reales mit Wasserstoff betriebenes Raketentriebwerk angewandt und validiert.

2. Grundlagen

2.1. Raketentriebwerke

Raketentriebwerke erzeugen Schub auf Grundlage des Rückstoßprinzips. Bei chemisch angetriebenen diergolen Raketentriebwerken, wird ein Brennstoff zusammen mit einem Oxidator in einer Brennkammer verbrannt. Das bei der Verbrennung expandierende Gas wird mittels einer Düse in eine Richtung geleitet und erzeugt so nach NEWTONS Impulssatz Schub [15]. Die Endgeschwindigkeit einer Rakete kann nach ZIOLKOWSKY aus der Austrittsgeschwindigkeit des Heißgases, der aktuellen Masse sowie der Startmasse berechnet werden. Aus der Austrittsgeschwindigkeit und der Erdbeschleunigung berechnet sich außerdem der spezifische Impuls (ISP), welcher als Maß für die Effizienz eines Triebwerks dient [30].

Neben Feststoff- und Hybridantrieben werden für Raketentriebwerke im wesentlichen Flüssigkeitsantriebe genutzt. Die herkömmlichen Brennstoffe sind dabei Kerosin oder verflüssigter Wasserstoff (LH₂), die zusammen mit dem jeweiligen Oxidator, meist flüssigem Sauerstoff (LOX), in der Brennkammer verbrannt werden.

2.2. Triebwerkzyklen

Es gibt verschiedene Wege die in separaten Tanks gelagerten Treibstoffe mit entsprechendem Druck und gewünschtem Massenstrom in die Brennkammer zu befördern. Unterschieden wird dabei zwischen druckgeförderten und pumpengeförderten Triebwerkzyklen. Bei druckgeförderten Antrieben werden die Treibstoffe durch ein zusätzliches Bedrückungsgas aus den Tanks getrieben. Bei pumpengeförderten Antrieben gibt es zusätzliche Pumpen, die die Treibstoffe austreiben. Hierbei gibt es wiederum verschiedenen Zyklen, die sich in der Art des Antriebs der Pumpen

unterscheiden. [15]

Bei der gestuften Verbrennung wird der Brennstoff mit einem Teil des Oxidators in einer Vorbrennkammer unvollständig verbrannt und das entstehende Heißgas genutzt, um eine Turbopumpe anzutreiben, welche die Treibstoffe aus den Tanks in die Brennkammer pumpt. Das Turbinenaustrittsgas wird daraufhin in der Hauptbrennkammer mit dem restlichen Oxidator vollständig verbrannt. Beim Gasgenerator-Zyklus wird in einer separaten Brennkammer ein Teil der Treibstoffe verbrannt und das Heißgas zum Antrieb der Turbopumpen genutzt. In diesem Fall wird das Turbinenaustrittsgas in die Umgebung abgeführt. Bei dem in Abbildung 2.1a schematisch dargestellten Expander-Zyklus wird eine der Treibstoffkomponenten, meist der Brennstoff, an der Brennkammerwand entlang geleitet. Dabei nimmt der Brennstoff thermische Energie auf, die zum Antrieb der Turbinen und somit der Pumpen genutzt wird. Daraufhin wird der Brennstoff in der Brennkammer verbrannt. Die Auslegung eines Triebwerks im Expander-Zyklus ist kompliziert, da sich die einzelnen Komponenten Turbopumpe, Kühlkanäle und Brennkammer gegenseitig beeinflussen [30]. Um diese Abhängigkeit kontrollierbar zu machen und auch höhere Schübe erreichen zu können, wird alternativ im Expander-Bleed-Zyklus, dargestellt in Abbildung 2.1b, nur ein Teil des aufgeheizten Brennstoffes zum Antrieb der Turbopumpen genutzt und daraufhin in die Umgebung abgeführt. Der restliche Brennstoff wird direkt in die Brennkammer geleitet. Je nach Strömungsrichtung entlang der Brennkammerwand wird zwischen dem in Richtung des Heißgasausstoßes fließenden Gleichstrom und dem in entgegengesetzter Richtung fließenden Gegenstrom unterschieden. Sowohl der Expander- als auch der Expander-Bleed-Zyklus können in beiden Fließrichtungen betrieben werden. [18]

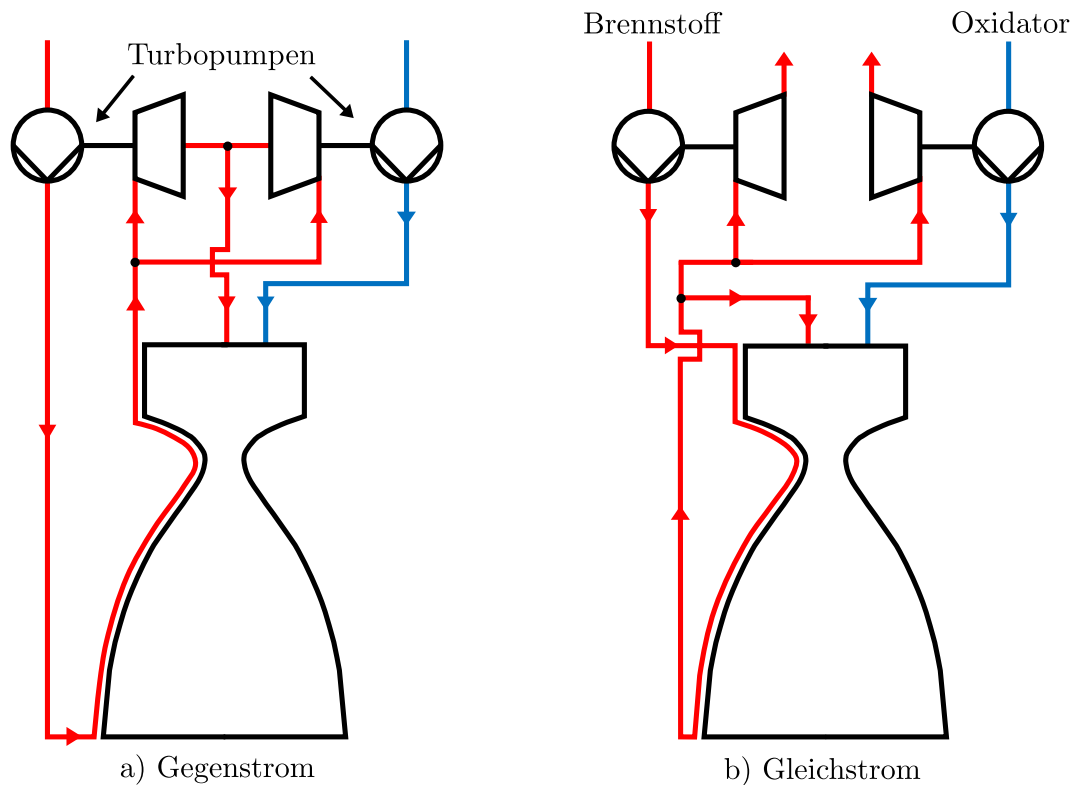


Abbildung 2.1.: Schematisch dargestellte Funktionsweisen des Expander-Zyklus in a) und des Expander-Bleed-Zyklus in b)

2.3. Kühlmethoden

Bei der Verbrennung in der Brennkammer können Temperaturen bis zu 4000 K erreicht werden [10]. Um die maximalen Materialtemperaturen der Strukturelemente des Triebwerks einzuhalten, müssen passende Kühlverfahren eingesetzt und entsprechend ausgelegt werden [10]. Hierzu gibt es verschiedene Möglichkeiten, welche sich in passive und aktive Kühlmethoden einteilen lassen. Zu den passiven Kühlungen gehören beispielsweise die Strahlungskühlung und die Ablationskühlung. Passive Kühlmethoden erreichen gegenüber den aktiven Kühlmethoden weniger hohe Wärmestromdichten. Dennoch kommen sie aufgrund der einfachen Umsetzbarkeit in einigen Fällen zum Einsatz. Zu den aktiven Kühlmethoden zählen die regenerative Kühlung, die Verlustkühlung, die Filmkühlung und die Transpirationkühlung.

In Brennkammern moderner Flüssigtreibstoffraketen kommt meist eine regenerative Kühlung zum Einsatz [10]. Bei der regenerativen Kühlung wird Treibstoff,

meist der Brennstoff, in Kühlkanälen entlang der Brennkammerwand geleitet und senkt durch die Abführung der Wärme die Temperatur der Brennkammerinnenwand. Die zugeführte thermische Energie wird daraufhin, wie schon in Kapitel 2.2 erläutert, im Expander-Zyklus zum Antrieb der Turbopumpen genutzt. Wird das Kühlfluid nach der Wärmeaufnahme in die Umgebung abgeführt, handelt es sich um eine Verlustkühlung. [6]

2.4. Methan als Brennstoff

Methan hat einige wesentliche Vorteile gegenüber den herkömmlichen Brennstoffen Kerosin und Wasserstoff. Gegenüber Kerosin liefert Methan einen höheren spezifischen Impuls und bessere Kühleigenschaften. Beides bedeutet für das Triebwerk eine höhere Leistungsfähigkeit. Außerdem hat Methan eine höhere Verkockungstemperatur, was gerade für die Wiederverwendbarkeit der Brennkammer und somit zur Senkung der Kosten von Vorteil ist. Im Vergleich zu Wasserstoff hat Methan eine höhere Dichte, wodurch Tankvolumina optimiert werden können. Dies bedeutet zugleich Gewichtsersparnis und somit Kostenvorteile. Durch die höhere Siedetemperatur von Methan, sind eine weniger starke Kühlung sowie weniger Isolation zwischen den verschiedenen Treibstofftanks erforderlich; dies spart Gewicht und Kosten. [6]

Methan hat gegenüber den bisherigen Treibstoffen aber auch einige Nachteile. Gegenüber Wasserstoff beispielsweise einen geringeren spezifischen Impuls. Eine wesentliche Herausforderung beim Einsatz von Methan ist das thermodynamische Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes. Bei der regenerativen Kühlung wird unter anderem aus dem thermodynamischen Verhalten des Kühlfluids der Wärmeübergang aus der Brennkammer in die Kühlkanäle bzw. in das Kühlfluid berechnet. Aus dem Wärmeübergang berechnet sich wiederum die Temperatur der Brennkammerinnenwand. Diese ist für die Lebensdauervorhersage einer Brennkammer ebenso wichtig wie für die Auslegung einer Brennkammer und beispielsweise die Wahl der Materialien.

Beim Durchlaufen eines Kühlkanals einer regenerativen Kühlung liegt Methan üblicherweise mit überkritischem Druck vor und heizt sich über die Lauflänge von unterkritischer Temperatur zu überkritischer Temperatur auf. Dabei kommt es zum Übergang von einem flüssigkeitsähnlichen Zustand in einen gasähnlichen Zustand.

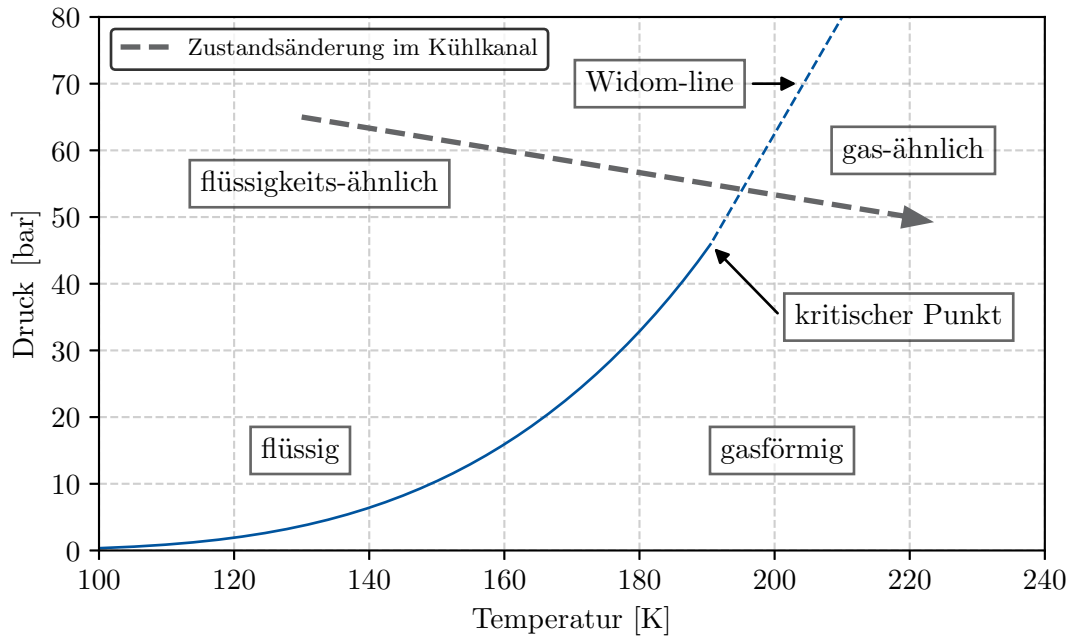


Abbildung 2.2.: p/T-Diagramm für Methan angepasst aus [6]

Die Problematik beim Einsatz von Methan besteht darin, dass es beim Aufheizen, wie in Abbildung 2.2 qualitativ dargestellt, die Widom-line, welche die Verlängerung der Siedelinie darstellt, meist in der Nähe des kritischen Punktes überschreitet [33]. In diesem Bereich ist das thermodynamische Verhalten von Methan sehr sensitiv gegenüber kleinen Zustandsänderungen. Im Bereich um den kritischen Punkt zwischen 190 K und 210 K haben, wie in Abbildung 2.3 zu erkennen, kleine Änderungen der Temperatur oder des Drucks einen großen Einfluss auf die Wärmeleitfähigkeit, die spezifische Wärmekapazität, die Dichte und die dynamische Viskosität des Methans. Diese Eigenschaften haben einen direkten oder indirekten Einfluss auf den Wärmeübergang und erschweren so durch ihr sensitives Verhalten gegenüber den Zustandsänderungen die exakte Modellierung.

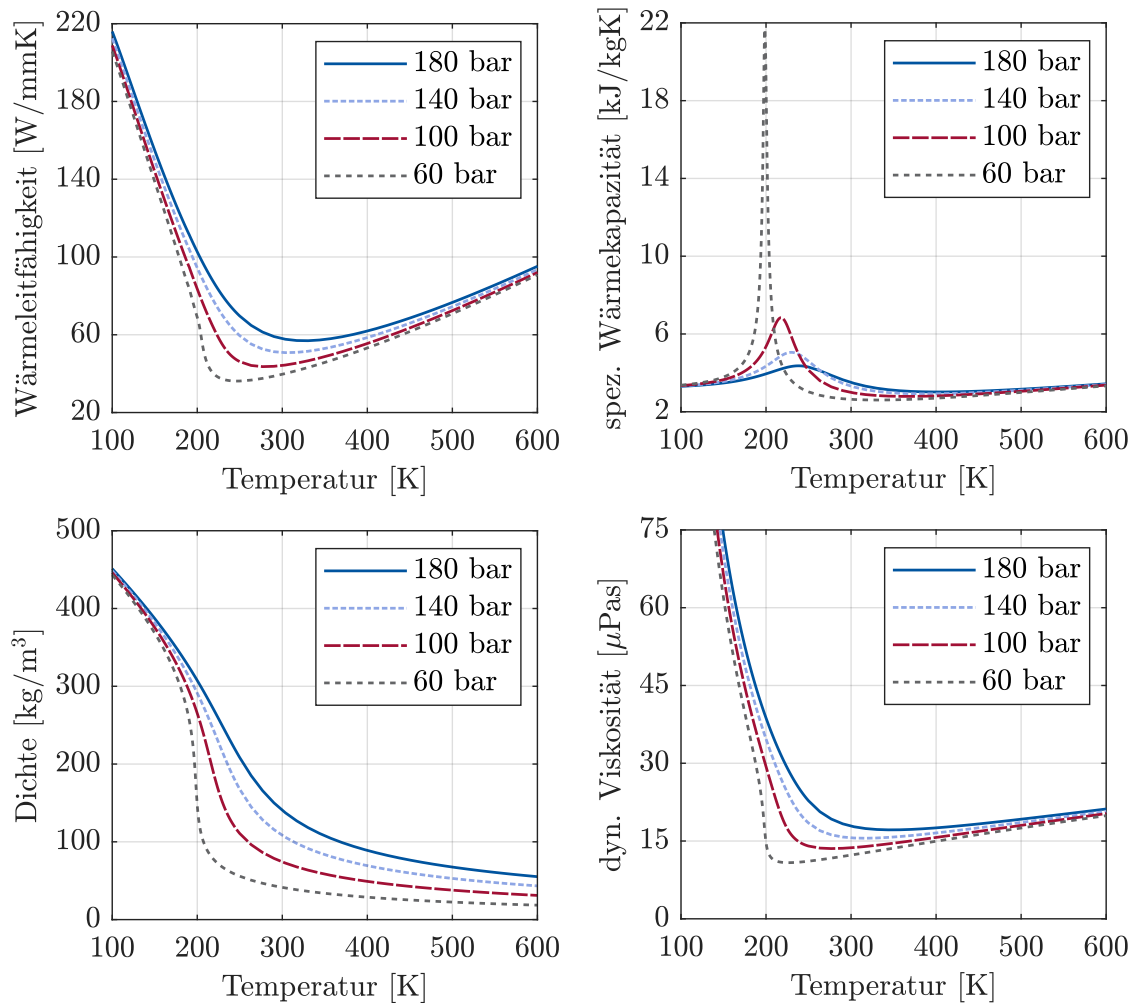


Abbildung 2.3.: Stoffeigenschaften Methan angepasst aus [18]

2.5. Effekte in der Kühlkanalströmung

Neben dem Einfluss der thermodynamischen Eigenschaften des Kühlfluids erschweren weitere Aspekte, wie die Strömungseigenschaften, auftretende physikalische Effekte sowie die Beschaffenheit der Kühlkanäle, die korrekte Modellierung des Wärmeübergangs.

2.5.1. Turbulenzen

Turbulenzen in der Strömung fördern den radialen Impulsaustausch und erhöhen somit die Durchmischung des Kühlfluids. Dabei verbessert sich der Wärmetrans-

port und somit auch die Kühleigenschaft. Gleichzeitig entsteht durch den erhöhten Impulsaustausch mehr Reibung, was für einen unerwünschten Druckabfall über die Kanallänge sorgt. Das Turbulenzverhalten wird durch die REYNOLDS-Zahl abgebildet. Diese dimensionslose Kennzahl berechnet sich aus der Strömungsgeschwindigkeit v , dem hydraulischen Durchmesser d_h , der Dichte ρ und der dynamischen Viskosität η .

$$Re = \frac{\rho v d_h}{\eta} \quad (2.1)$$

Der hydraulische Durchmesser berechnet sich im Allgemeinen aus dem Verhältnis von Fläche zu Umfang und somit hier bei einem rechteckigen Kühlkanal aus der Kühlkanalhöhe h und der Kühlkanalbreite b :

$$d_H = 4 \frac{A}{U} = \frac{2hb}{h+b} \quad (2.2)$$

Strömungen mit einer REYNOLDS-Zahl unter 2300 gelten als laminar, Strömungen mit einer REYNOLDS-Zahl über 2900 als turbulent. In den Kühlkanälen einer mit Methan regenerativ gekühlten Brennkammer werden REYNOLDS-Zahlen in einer Größenordnung von bis zu $\mathcal{O}(10^7)$ erreicht, sodass stark turbulente Strömungen vorliegen [18]. Daher müssen durch Turbulenzen auftretende Effekte bei einer exakten Modellierung des Wärmeübergangs berücksichtigt werden. Beeinflusst wird das Turbulenzverhalten und besonders die sich ausbildende Grenzschichtdicke durch die Rauheit der Kanaloberfläche. Eine erhöhte Rauheit erhöht den Impulsaustausch in radialer Richtung und fördert so die Effekte der Turbulenz.

2.5.2. Heat Transfer Deterioration

Heat Transfer Deterioration (HTD) ist ein Effekt, der den Wärmeübergang lokal verschlechtert. Befindet sich das Methan beim Durchlaufen des Kühlkanals im thermodynamischen Bereich des kritischen Punktes, kann sich an der der Brennkammer zugewandten Kühlkanalseite eine gasähnliche Fluidschicht bilden, die über eine geringere Wärmeleitfähigkeit verfügt. Dadurch wird der Wärmetransport in die flüssigkeitsähnliche Kernströmung reduziert, sodass sich die Temperatur der Randschicht ebenso wie die Heißgaswandtemperatur stark erhöht. Auch hier hat die Rauheit der Kanaloberfläche einen Einfluss. So zeigen PIZZARELLI ET AL. in [28], dass bei einer äquivalenten Sandkornrauheit von $4,5 \mu\text{m}$ bis $10 \mu\text{m}$ kein HTD auf-

tritt. Weiterführend zeigen VOTTA ET AL. [31], dass dies bei einer Sandkornrauheit von $10\ \mu\text{m}$ auch für niedrigen Drücke von 60 bar gilt.

2.5.3. Thermische Schichtung

Ein weiterer Effekt ist die thermische Schichtung. Diese tritt durch die asymmetrische bzw. stark einseitige Wärmebelastung der Kühlkanäle auf. Dabei heizt sich das Fluid an der der Brennkammer zugewandten Seite durch eine mangelnde Durchmischung stark auf, wodurch nicht die komplette Kühlkapazität des Kühlfluids genutzt werden kann. Es bilden sich geschichtete Bereiche unterschiedlicher Temperatur. Dieser Effekt wird durch ein steigendes Aspektverhältnis, dem Verhältnis von Höhe zu Breite, verstärkt. Den Effekt der thermischen Schichtung unbeachtet, verbessert ein steigendes Aspektverhältnis die Wärmeübertragung, durch die gleichzeitig größer werdende effektive Kühlfläche. Zudem lassen sich mehr Kühlkanäle über den Brennkammerumfang realisieren. Dadurch sinkt die Rippenstärke zwischen den Kanälen, was wiederum den Einfluss des Wärmetransport durch diese Rippen vergrößert und die gleichmäßige Erwärmung des Kühlfluids fördert. Diese sogenannte High Aspect Ratio Cooling Channel Technologie (HARCC), die durch Kühlkanäle mit großen Aspektverhältnissen gekennzeichnet ist, wird durch die bauliche Umsetzbarkeit und ab einem gewissen Punkt durch den beschriebenen Effekt der thermischen Schichtung begrenzt. Der genaue Einfluss von HTD und thermischer Schichtung im Zusammenhang mit der HARCC-Technologie wurde von HAEMISCH [12] untersucht.

2.5.4. Trägheitseffekte

Die Geometrie der Kühlkanäle beschränkt sich nicht auf gerade, stetige Verläufe. Da sich die Geometrie der Kühlkanäle an der Brennkammergeometrie orientiert, treten auch konvex oder konkav gekrümmte Abschnitte auf. In diesen gekrümmten Bereichen ist der Einfluss der Zentrifugalkraft auf das Fluid zu beachten. Durch diese wird ein Großteil des Kühlfluids vom jeweils inneren Radius zum äußeren gedrängt. Entgegengesetzt fließt das Fluid in der Nähe der Seitenwände aufgrund seiner geringen Trägheit entlang des entstehenden Druckgradienten vom äußeren zum inneren Radius. Die entstehende Zirkulation wird DEAN-Wirbel genannt und durch die di-

mensionslose DEAN-Zahl De beschrieben. Diese setzt sich aus der REYNOLDS-Zahl, dem hydraulischen Durchmesser d_h und dem Krümmungsradius r zusammen:

$$De = Re \sqrt{\frac{d_h}{2r}} \quad (2.3)$$

Durch die Ausbildung der DEAN-Wirbel wird in konvexen Abschnitten heißes Fluid von der Brennkammerwand weg und in konkaven Abschnitten kaltes Fluid zur Brennkammerwand hin gedrückt. In beiden Fällen wird so durch die erhöhte Zirkulation im Kühlkanalquerschnitt der Wärmeübergang gegenüber geraden Kühlkanalabschnitten verbessert. Außerdem wird durch die starke Durchmischung das Auftreten von thermischer Schichtung be- bzw. verhindert. Bei Sprüngen in der Krümmung, also beim Übergang von konvex in konkav oder umgekehrt sowie beim Übergang von gerade in gekrümmt bzw. umgekehrt treten zusätzlich Trägheitseffekte auf, die den Wärmübergang wieder verschlechtern und thermische Schichtung induzieren können. Eine ausführliche Studie zum Wärmeübergang in gekrümmten Kühlkanälen wurde von PIZZARELLI [27] durchgeführt.

Neben Sprüngen in der Krümmung treten auch Sprünge in der Höhe und der Breite der Kühlkanäle auf. Beispielhafte Geometrieverläufe der Kühlkanäle realer Triebwerke sind in Abbildung 2.4 dargestellt. Hinter solchen Geometriesprüngen können sogenannte Totwassergebiete entstehen [19]. Dieser Effekt ist in Abbildung 2.5 zu erkennen. Hinter dem Sprung in der Höhe ist die Geschwindigkeit des Fluids im oberen Teil des Kühlkanals sehr gering. Die Strömung bildet sich nicht voll aus, da sie dem sprunghaften Geometrieverlauf nicht folgen kann. Entsprechend ist die Strömung bei einem lokal betrachtet gleichen Kanalquerschnitt anders ausgebildet, als ohne einen Geometriesprung stromaufwärts. Dieses Verhalten muss für eine exakte Modellierung ebenfalls beachtet werden.

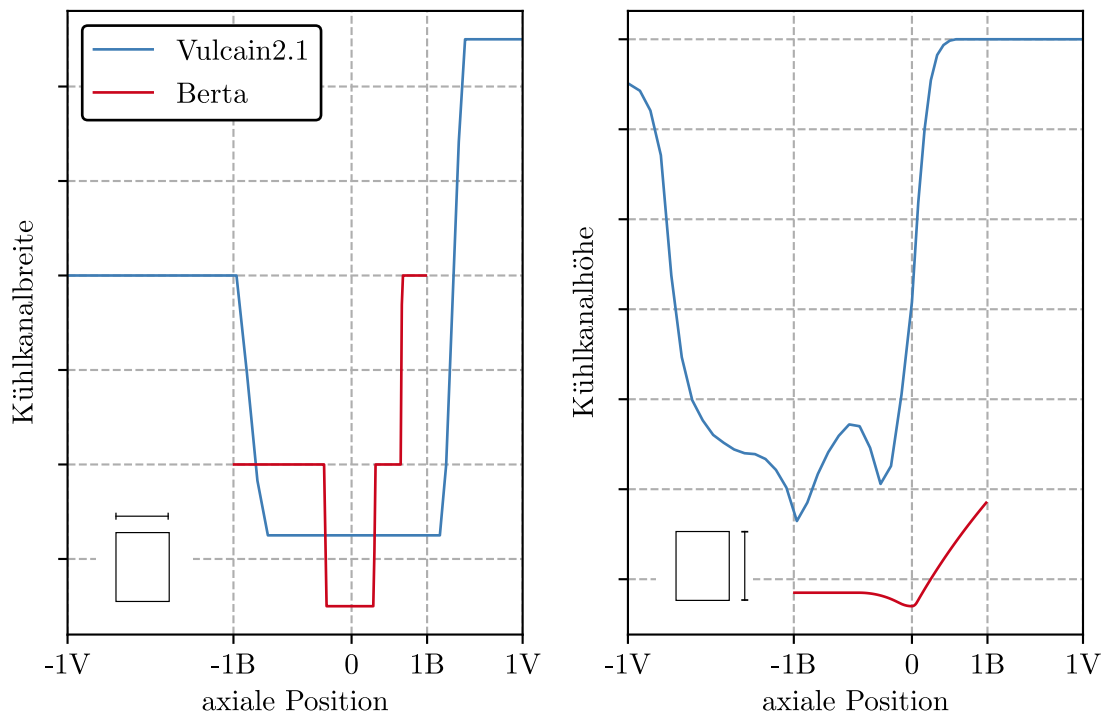


Abbildung 2.4.: Skalierte Geometrieverläufe der Kühlkanäle von Vulcain2.1 (V) und Berta (B) mit -1:Einspritzebene, 0:Düsenhals und 1:Brennkammerauslass (Quelle: ArianeGroup GmbH)

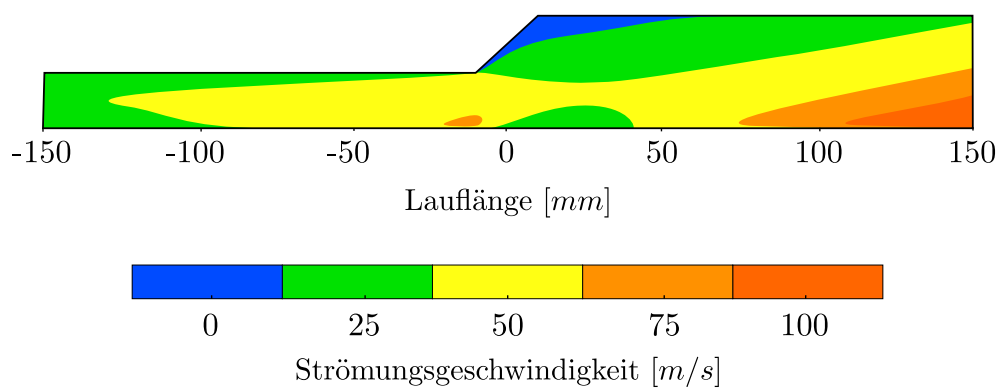


Abbildung 2.5.: Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit bei Sprung in der Höhe eines Kühlkanals [19]

3. Berechnung des Wärmeübergangs

3.1. Nusselt Korrelationen

NUSSELT-Korrelationen kommen bei der Berechnung des Wärmübergangs mittels eindimensionaler oder quasi-zweidimensionaler Modelle zum Einsatz. Hierbei spielen im wesentlichen zwei Mechanismen eine Rolle: die Wärmeleitung in und der konvektive Wärmeübergang an der Brennkammerwand. Letzterer ist jeweils zwischen Heißgas und Brennkammerwand sowie Brennkammerwand und Kühlfluid zu betrachten. Eindimensionale Wärmeleitung wird allgemein durch

$$\dot{q}_L = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.1)$$

beschrieben. Dabei entspricht λ der materialabhängigen Wärmeleitfähigkeit und \dot{q}_L dem durch die Wand fließenden Wärmestrom. Auf die Brennkammerwand, wie in Abbildung 3.1 dargestellt, angewandt ergibt sich aus den Wandtemperaturen an der Heißgas- und Kühlfluidseite, $T_{W,HG}$ und $T_{W,KF}$, sowie der Wandstärke s folgende Gleichung:

$$\dot{q}_L = \lambda \frac{T_{W,HG} - T_{W,KF}}{s} \quad (3.2)$$

Der konvektive Wärmeübergang wird im Allgemeinen durch

$$\dot{q}_K = \alpha(T_w - T_\infty) \quad (3.3)$$

beschrieben. Dabei ist α der Wärmübergangskoeffizient, T_w die Wandtemperatur und T_∞ die Temperatur des angrenzenden Fluids in hinreichender Entfernung zur Wand. Wiederum auf die Brennkammer angewandt ergeben sich die konvektiven Wärmeströme mit den jeweiligen Wärmübergangskoeffizienten α_{HG} und α_{KF} :

$$\dot{q}_{K,HG} = \alpha_{HG}(T_{W,HG} - T_{HG}) \quad (3.4)$$

3. Berechnung des Wärmeübergangs

$$\dot{q}_{K,KF} = \alpha_{KF}(T_{W,KF} - T_{KF}) \quad (3.5)$$

Wird Gleichung 3.2 wie folgt umgeformt,

$$T_{W,HG} = T_{W,KF} + \frac{\dot{q}_L s}{\lambda}$$

Gleichung 3.5, umgeformt nach $T_{W,KF}$, eingesetzt,

$$T_{W,HG} = T_{W,KF} + \frac{\dot{q}_L s}{\lambda} + \frac{\dot{q}_{K,KF}}{\alpha_{KF}}$$

so ergibt sich mit

$$\dot{q}_{K,HG} = \dot{q}_{K,KF} = \dot{q}_L$$

die Heißgaswandtemperatur zu:

$$T_{W,HG} = T_{KF} + \dot{q}_{K,HG} \left(\frac{s}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_{KF}} \right) \quad (3.6)$$

Alle für die Berechnung der Heißgaswandtemperatur nötigen Größen sind bekannt, außer der Wärmeübergangskoeffizient α_{KF} . Dieser lässt sich über die NUSSELT-Zahl berechnen. Die NUSSELT-Zahl ist eine dimensionslose Kennzahl, welche den konvektiven Wärmeübergang beschreibt. Sie setzt sich aus dem Wärmeübergangskoeffizienten α , einer charakteristischen Länge, in diesem Fall dem hydraulischen Durchmesser d_h und der Wärmeleitfähigkeit des Kühlfluids λ_{KF} zusammen:

$$Nu = \frac{\alpha d_h}{\lambda_{KF}} \quad (3.7)$$

Die NUSSELT-Zahl kann zur Modellierung des Wärmeübergangs mit Hilfe von NUSSELT-Korrelationen angenähert werden. Diese setzen sich aus der, schon unter 2.5.1 erläuterten, REYNOLDS-Zahl, der PRANDTL-Zahl, entsprechenden Exponenten und einem Korrekturfaktor C zusammen:

$$Nu = Re^a Pr^b C \quad (3.8)$$

Die PRANDTL-Zahl ist, wie die NUSSELT- und die REYNOLDS-Zahl, eine dimensionslose Kennzahl. Sie ergibt sich aus Stoffeigenschaften des Fluids; der spezifischen isobaren Wärmekapazität c_p , der dynamischen Viskosität η und der Wärmeleitfä-

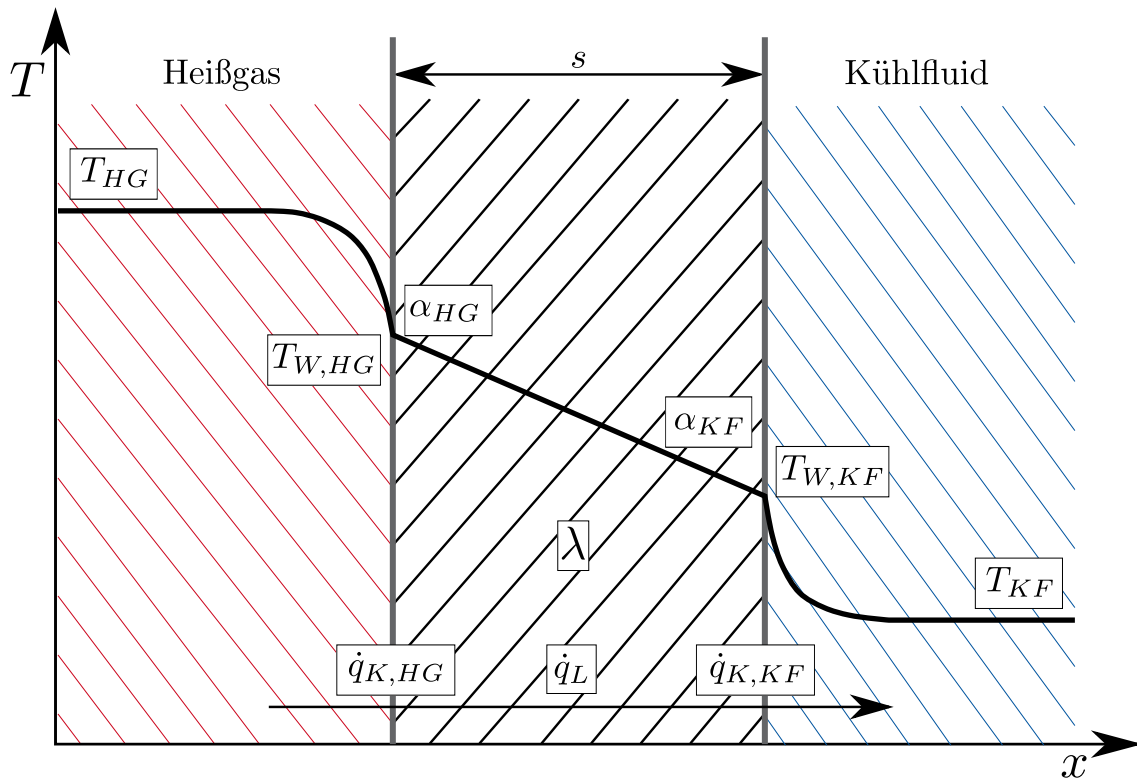


Abbildung 3.1.: Temperaturverlauf und Wärmeströme in und an einer Brennkammerwand nach Vorlage von SCHULZE [30]

higkeit λ :

$$Pr = \frac{c_p \eta}{\lambda} \quad (3.9)$$

Die Korrelationen bzw. die Exponenten und der Korrekturfaktor wurden meist auf Grundlage von experimentellen Daten bestimmt. Heutzutage werden zunehmend auch Daten aus numerischen Strömungssimulationen verwendet [26]. Eine oft verwendete NUSSELT-Korrelation für den Wärmeübergang in einer allgemeinen Kühlkanalströmungen ist die DITTUS- und BOELTER-Korrelation:

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4} \quad (3.10)$$

Eine speziell für überkritisches Methan entwickelte Korrelation wurde beispielsweise von NASUTI ET AL. [26] aufgestellt. Diese ist für gerade Kühlkanäle mit rundem Querschnitt gültig. Dabei wird HTD berücksichtigt und Auftriebskräfte vernachlässigt. Die Funktion Λ berücksichtigt dabei das Verhältniss verschiedener

Stoffeigenschaften sowie der Temperaturen von Kühlkanalwand und Methan:

$$Nu = 0,026Re^{0,8}Pr^{0,16}\Lambda^{0,28} \quad (3.11)$$

Neben dieser Korrelation gibt es eine Vielzahl an weiteren NUSSELT-Korrelationen, die jeweils in spezifischen Bereichen gültig sind und unterschiedliche Einflüsse und Effekte, wie HTD, Turbulenz oder thermische Stratifizierung berücksichtigen. Dazu gehören unter anderem Korrelationen von VOTTA, HALL & WANG, COOK oder JACKSON & HALL. Weiterführende Informationen zu diesen Korrelationen, deren Gültigkeitsbereiche und den verwendeten Korrekturfaktoren finden sich in der Literatur [6], [12], [19].

3.2. Numerische Strömungssimulationen

Neben den eindimensionalen und quasi-zweidimensionalen Berechnungen lässt sich der Wärmeübergang auch im Dreidimensionalen mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik (CFD - Computational Fluid Dynamics) berechnen. Hierbei können alle für den Wärmeübergang relevanten physikalischen Einflüsse berücksichtigt und so eine sehr genaue Modellierung erreicht werden. Zur Simulation der Kühlkanalströmung wird die Geometrie bzw. der Geometrieverlauf des Kühlkanals angegeben. Es werden die Stoffeigenschaften des Kühlkanals bzw. der Brennkammerwand und des Kühlfluids eingestellt. Für die komplette Länge des zu simulierenden Kühlkanals wird ein entsprechender Verlauf der Wärmestromdichte vorgegeben, sodass die Verbrennung in der Brennkammer nicht gleichzeitig simuliert werden muss. Für die Simulation der Strömung werden die NAVIER-STOKES-Gleichung in Kombination mit Modellen zur Berücksichtigung der Turbulenz genutzt. Hierbei kommen das $k - \epsilon$ Modell zur Modellierung der Kernströmung und das $k - \omega$ Modell zur Modellierung des wandnahen Bereichs bzw. der Grenzschicht zum Einsatz [2]. Abschließend wird ein Rechenetz definiert, welches die unendlich vielen Freiheitsgrade einer Fluidströmung auf eine begrenzte Menge an finiten Elementen reduziert und so die Simulation der Strömung und somit auch des Wärmeübergangs berechenbar macht. Zur Verkürzung der Berechnungsdauer wird nur eine Hälfte des Querschnitts vom Kühlkanal simuliert. Dies ist aufgrund der Symmetrie der Kühlkanäle ohne Verlust an Informationen bzw. ohne daraus resultierende Fehler in der Modellierung

möglich.

3.3. Künstliche neuronale Netzwerke

3.3.1. Grundlagen künstlicher neuronaler Netzwerke

Künstliche neuronale Netzwerke stellen Modelle dar, welche im Bereich des maschinellen Lernens eingesetzt werden. Sie können aus Datensätzen Muster erkennen und so lernen Lösungen für die mit den Daten verbundenen Probleme zu finden. Unterscheiden lässt sich dabei zwischen überwachtem und unüberwachtem Lernen.

Beim überwachten Lernen wird die Berechnung des KNN mit den tatsächlichen Lösungen verglichen, sodass aufgrund der auftretenden Abweichungen das Netz entsprechend der Problematik angepasst wird. Beim unüberwachten Lernen gibt es keine vorgegebene Lösung und das KNN verändert sich je nachdem welche Daten eingegeben werden. Das überwachte Lernen lässt sich wiederum in das Klassifikationsproblem und das Regressionsproblem aufteilen. Beim Klassifikationsproblem lernt das KNN zwischen verschiedenen Klassen zu unterscheiden. Beispielsweise kann es lernen aus Bildern von handschriftlich geschriebenen Ziffern zu erkennen, um welche Ziffer es sich handelt. Beim Regressionsproblem soll aus den Eingabedaten ein Wert berechnet werden. So kann ein KNN beispielsweise aus Daten wie Grundstücksfläche, Lage, Anzahl an Räumen usw. den zu erwartenden Wert eines Hauses vorhersagen.

KNNs bestehen, wie in Abbildung 3.2 dargestellt, aus verschiedenen Schichten: der Eingangsschicht, den sogenannten verborgenen Schichten und der Ausgangsschicht. Jede dieser Schichten verfügt über eine gewisse Anzahl an sogenannten Neuronen. Die Eingangsschicht verfügt über einer der Anzahl der Eingabeparameter entsprechenden Neuronenanzahl. Die Eingabeparameter bestimmen welche Informationen dem KNN zugeführt werden. Die Ausgangsschicht besteht aus der Ausgabe des KNN, also dem Wert der berechnet wird und somit, im Fall der Regression mit einer abhängigen Variablen, einem einzelnen Neuron. Der wesentliche Anteil der Berechnung und des Lernens findet in den verborgenen Schichten statt. Im Folgenden werden diese nur noch als Schichten bezeichnet. Es kann eine beliebige Anzahl an Schichten gewählt werden, wobei ab einer Anzahl von mehr als einer Schicht von Deep-Learning bzw. einem tiefen KNN gesprochen wird. Jede dieser

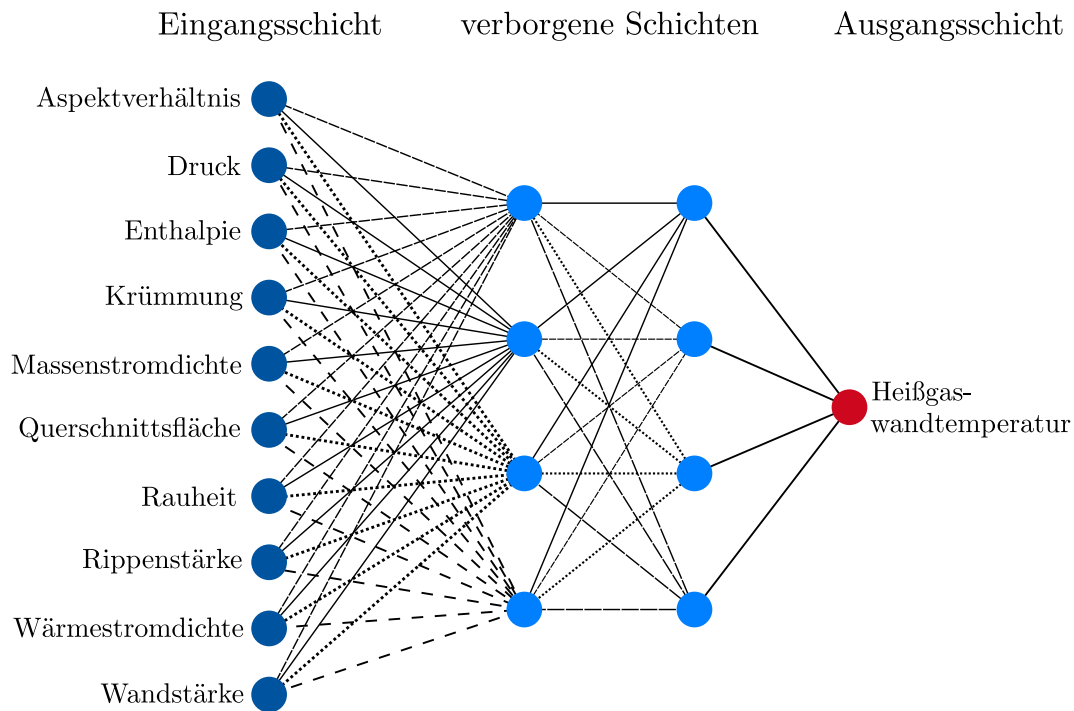


Abbildung 3.2.: Aufbau eines künstlichen neuronalen Netzwerks

Schichten besteht aus einer beliebigen Anzahl an Neuronen. Sind alle Neuronen einer Schicht mit denen der vorherigen bzw. nachfolgenden Schicht verbunden, so handelt es sich um eine dichte Schicht. Jedes Neuron wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$a = \Phi\left(\sum_{i=1}^n g_i a_i^0 + b\right) \quad (3.12)$$

Die jeweiligen Eingangsgrößen a_i^0 aus der vorherigen Ebene, bei der ersten Schicht also die Eingabeparameter, werden durch die Multiplikation mit einem jeweiligen Gewicht g_i gewichtet. Die gewichteten Eingangsgrößen werden aufsummiert und können noch über die Addition mit b , dem sogenannten Bias, verschoben werden. Über eine Aktivierungsfunktion Φ wird aus diesem Zwischenergebnis z die Ausgangsgröße a berechnet, welche an die nächste Schicht bzw. deren Neuronen weitergegeben wird. Zur Anwendung bei KNN gibt es verschiedene Aktivierungsfunktionen. Es werden bevorzugt nicht-lineare Funktionen genutzt, da diese auch komplexere Verhalten darstellen können. Aktivierungsfunktionen, wie zum Beispiel die Sigmoid-Funktion (3.13) oder die ReLU-Funktion (3.14) setzen die Ausgangsgröße entweder zu Null oder zu einem Wert. So reguliert die Aktivierungsfunktion,

wie ein Neuron im Gehirn eines Menschen, ob das jeweilige Neuron eine Information weitergibt oder nicht.

$$\Phi(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (3.13)$$

$$\Phi(z) = \max(0, z) \quad (3.14)$$

Das eigentliche Lernen eines KNN findet durch die Anpassung der Neuronen, bzw. deren Variablen Θ , bestehend aus den Gewichten und dem Bias, statt. Im Folgenden werden diese als Netzwerkvariablen bezeichnet. Zur Anpassung der Netzwerkvariablen auf das Problem wird eine Fehlerfunktion genutzt. Diese berechnet für einen Satz an Daten, bei denen das Ergebnis, also der Wahrheitswert y_i , für die Eingabeparameter x_i bekannt ist, den Unterschied zwischen diesem Wahrheitswert und der Vorhersage $f(x_i, \Theta)$ des KNN zum aktuellen Lernfortschritt. Eine oft verwendete Fehlerfunktion ist der mittlere quadratische Fehler (MSE - mean squared error):

$$J(\Theta) = \frac{1}{2m} \left(\sum_{i=1}^m (y_i - f(x_i, \Theta))^2 \right) \quad (3.15)$$

Ziel ist es, diese Fehlerfunktion und somit den Fehler der Vorhersage des KNN zu minimieren. Aus der gradientenbasierten Suche nach dem Minimum, ergeben sich die zu wählenden Veränderungen der Netzwerkvariablen. Die Rückpropagierung führt den Fehler des KNN bezüglich der Fehlerfunktion bzw. auf Grundlage der gradientenbasierten Suche auf die Netzwerkvariablen zurück und passt sie zur Minimierung der Fehlerfunktion an. Dieser Prozess findet im Training eines KNN statt.

Im Training werden die verwendeten Daten meist mehrfach genutzt. Die frei wählbare Epochenanzahl gibt an, wie oft der Trainingsdatensatz das KNN im Training durchläuft. Zudem kann über die sogenannte Batchsize reguliert werden, wie oft bzw. nach welcher Trainingsdatenanzahl die Netzwerkvariablen angepasst werden. Die Ausgabe der Fehlerfunktion wird dabei über eine der Batchsize entsprechenden Datenmenge gemittelt. Da die Netzwerkvariablen auf diese Weise nicht nach jedem einzelnen Datenpunkt geändert werden, wird die Rechenzeit verkürzt und das Training stabilisiert. Die zum korrekten Lernen der Daten benötigt Rechenzeit wird außerdem durch die sogenannte Lernrate beeinflusst. Über die Lernrate lässt sich steuern, wie stark die Gewichte pro Lernschritt durch den Gradienten der Fehlerfunktion verändert werden. Eine geringe Lernrate sorgt entsprechend für

ein langsames und eine große Lernrate für ein schnelles Training. Jedoch kann eine zu große Lernrate dafür sorgen, dass das Minimum der Verlustfunktion durch die zu groben Veränderungen der Gewichte pro Lernschritt nicht erreicht wird. Beim Training eines KNN besteht die Gefahr des Overfittings. Dabei lernt das KNN die Trainingsdaten quasi auswendig und schafft es nicht die eigentliche Problemstellung zu lösen. Im Gegensatz dazu gibt es das Phänomen des Underfittings, bei dem die Problemstellung komplexer als die vom KNN gefundene Lösung ist, wodurch das KNN nicht in der Lage ist den realen Zusammenhang präzise abzubilden. Unter anderem um diese Effekte zu identifizieren, wird beim Training ein Teil der Daten ausschließlich als Validierung während des Trainings genutzt. Ist der Fehler auf den Trainingsdaten sehr klein, aber auf dem Trainingsvalidierungsdaten hoch, kann Overfitting vorliegen. Ist der Fehler auf den Trainingsvalidierungsdaten klein, aber der Fehler auf den Trainingsdaten groß bzw. größer, kann Underfitting vorliegen. Verhindert werden kann Underfitting beispielsweise durch eine höhere Epochenzahl. Um das Overfitting zu verhindern kann eine Regularisierung angewandt werden. Dabei werden in der Fehlerfunktion über einen zusätzlichen Term, der über den Regularisierungsfaktor eingestellt wird, große Netzwerkvariablen, welche das Overfitting fördern, bestraft.

Letztendlich soll das KNN nach dem Training auch für Daten, die nicht im Training genutzt wurden, die richtige Vorhersage liefern. Dabei hängt der Trainingserfolg, neben der Qualität und der Menge der Daten, von der Wahl der sogenannten Hyperparameter ab. Zu diesen gehören theoretisch alle für das Training und die Netzwerkarchitektur einstellbaren Größen. Neben der Epochenanzahl, der Batchsize, der Lernrate und dem Regularisierungsfaktor gehören dazu beispielsweise auch die Anzahl der Schichten und die Anzahl an Neuronen pro Schicht. Da es keine allgemein gültige Lösung für die Wahl der besten Hyperparameter gibt, muss für jeden Trainingsdatensatz bzw. jedes darin definierte Problem die spezifisch beste Konfiguration gefunden werden. Dazu kann ein sogenanntes Hyperparameter-tuning durchgeführt werden. Bei der Gittersuche werden beispielsweise für jeden Hyperparameter verschiedene Werte vorgegeben und alle möglichen Kombinationen in Form eines durchgeführten Trainings eines neuronalen Netzes getestet. Bei der Zufallssuche werden zufällige Hyperparameterkonfigurationen getestet und so die besten Hyperparameter gefunden.

3.3.2. Berechnung des Wärmeübergangs mittels eines KNN

Maschinelles Lernen findet in der Forschung rund um Raumantriebe einen differenzierten Anwendungsbereich. So wurde von DRESIA ET AL. die Anwendbarkeit eines KNN zur Steuerung eines Raketentriebwerks im Expander-Bleed-Zyklus [7] und der Einsatz eines KNN zu Lebensdauervorhersage einer Brennkammer [8] untersucht. Speziell für die Berechnung der Heißgaswandtemperatur einer mit Methan regenerativ gekühlten Brennkammer mit rechteckigem Kühlkanalquerschnitt wurde ein KNN von DRESIA [6] entworfen und bereits von HAEMISCH ET AL. [14] zur Auslegung des LUMEN-Triebwerks verwendet.

Entwicklung des KNN

Für das Training dieses KNN wurden 20 500 CFD-Simulationen von geraden Kühlkanälen mit stetigem Geometrieverlauf erzeugt. Darüber hinaus wurden weitere 300 CFD-Simulationen zum Teil auch mit gekrümmten Kühlkanälen zur Validierung erzeugt. Diese Simulationen wurden entlang der Lauflänge des Kühlkanals alle 2 mm über den jeweiligen Querschnitt ausgewertet. Dabei wurden sämtliche Informationen eines jeweiligen Querschnitts bezüglich Geometrie, Zustandsgrößen und Randbedingungen des Kühlkanals bzw. der Kühlkanalströmung sowie die passende, durch die CFD-Simulation berechnete, Heißgaswandtemperatur, als Datenpunkt in einem sogenannten Dataframe gespeichert. Insgesamt wurde das Netz so mit circa 2,2 Millionen Datenpunkten trainiert. Als Eingabeparameter wurden dabei folgende neun Parameter gewählt: Querschnittsfläche, Aspektverhältnis und Oberflächenrauheit des Kühlkanals; Massenstromdichte, Druck, Enthalpie und Grenzschichtdicke des Kühlfluids; die durch das Heißgas aufgeprägte Wärmestromdichten sowie die Heißgaswandstärke. Für den Druck und die Enthalpie wurden dabei die jeweiligen Bulk-Größen, also die über den Massenstrom des jeweiligen Querschnitts gemittelte Größen, benutzt. Die Grenzschichtdicke, ging nicht aus der CFD-Simulation hervor und wurde vorab mit einem separatem KNN berechnet.

Das trainierte KNN zeigte in der Validierung bei geraden Kühlkanälen einen mittleren absoluten prozentualen Fehler (MAPE - mean absolute percentage error) sowie eine prozentuale Standardabweichung von unter 5 %. Für gekrümmte Kühlkanäle verschlechterte sich der MAPE auf circa 10 %. Dies wird darüber begründet, dass in das Training ausschließlich Daten von geraden Kühlkanälen eingegangen

sind. Insgesamt wird aber aufgezeigt, dass das KNN eine deutlich bessere Vorhersage als die herkömmlichen NUSSELT-Korrelationen liefert. Dies konnte auch durch WAXENEGGER-WILFING ET AL. [33] bestätigt werden. Hier wurden die gleiche Methodik und dieselben Daten verwendet, wobei bei den Eingabeparametern anstelle der Grenzschichtdicke, die Lauflänge der Kühlkanalströmung verwendet wurde. Es berechnete sich ein mittlere absoluter Fehler (MAE - mean squared error) von 16 K, wobei die Berechnung des Heißgaswandtemperaturverlaufs eines kompletten Kühlkanals 0,6 s dauerte und somit um $\mathcal{O}(10^3)$ schneller als eine CFD-Berechnung ist.

Validierung des KNN

Aufbauend auf der Arbeit von DRESIA wurde die bestehende Methodik von JAKOBS [18] wiederum angepasst und ausführlich validiert. Anstelle der Grenzschichtdicke wurden hier die Rippenstärke und die Krümmung des Verlaufes der Brennkammerkontur als Eingabeparameter hinzugefügt. Als Trainingsdaten wurden alle aus den bisherigen Arbeiten zur Verfügung stehenden Daten, sowohl gerade als auch gekrümmte Kühlkanäle, verwendet, sodass insgesamt mit 3,5 Millionen Datenpunkten trainiert wurde. Zur Validierung wurden hier CFD-Simulation von kompletten Kühlkanalgeometrien und nicht, wie bisher, nur von Abschnitten erzeugt. Dabei wurde sich an den Geometrien und Randbedingungen realer Triebwerke, wie beispielsweise dem LUMEN- oder dem VULCAIN-Triebwerk orientiert. So wurde ein deutlich komplexerer Validierungsdatensatz erzeugt, der auch veränderliche Geometrieverläufe und Unstetigkeiten, wie Sprünge in Höhe, Breite oder Krümmung aufweist. Weiterführende Informationen zum LUMEN-Triebwerk finden sich in den entsprechenden Projektübersicht von DEEKEN ET AL. [4], [5]. Informationen zum VULCAIN-Triebwerk finden sich in der Arbeit von KUHLE ET AL. [20].

Trotz der höheren Komplexität der Validierungsdaten gegenüber den Trainingsdaten wurde mit einem mittleren absoluten Fehler über alle Validierungsdaten von 20 K eine gute Vorhersagegenauigkeit des KNN nachgewiesen. Auch an Stellen großer Abweichung lieferte das KNN bessere Vorhersagen als die NUSSELT-Korrelationen. Beispielfhaft zeigt sich dies auch in Abbildung 3.3 bei der Vorhersage des KNN bezüglich der Heißgaswandtemperatur der Brennkammer des LUMEN-Triebwerks. Hier ist die Vorhersage des KNN im Vergleich zu den Berechnungen mittels NUSSELT-Korrelationen nach DITTUS & BOELTER sowie JACKSON & HALL

dargestellt. Als Referenz dienen die Berechnungen der CFD-Simulation.

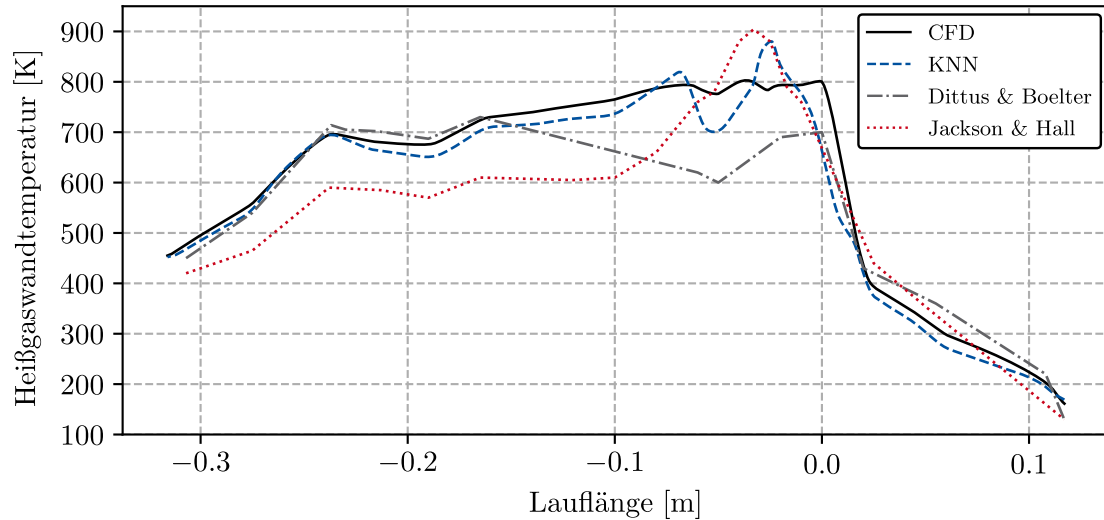


Abbildung 3.3.: Vorhersagen der Heißgaswandtemperatur des LUMEN-Triebwerks[19]

Für einige Parameterbereiche, wie große Rippenstärken oder große Kühlkanalquerschnittsflächen sowie geringe Wärmeströme mit kleinen Massenstromdichten, wurden überdurchschnittlich große Fehler in der Vorhersage festgestellt. Begründet wird dies damit, dass die Trainingsdaten innerhalb des durch die Eingabeparameter aufgespannten Parameterraums ungleichmäßig verteilt sind. So lernt das KNN Bereiche, in denen eine hohe Datenmenge vorliegt, besser als Bereiche mit geringer Datendichte. Der Grund für die ungleichmäßige Datenverteilung liegt in der Datenerzeugung, da für die einstellbaren Parameter in den CFD-Simulationen diskrete Werte und keine stetigen Verläufe ausgewählt wurden bzw. ausgewählt werden können.

Größere Fehler in der Vorhersage wurden besonders im Zusammenhang mit Geometriesprüngen identifiziert. Dabei wurde festgestellt, dass der Fehler mit steigender Sprunggröße steigt. Es wurde geschlossen, dass die in Kapitel 2.5.4 aufgeführten Trägheitseffekte vom KNN nicht abgebildet werden. Als mögliche Lösung wird vorgeschlagen dem KNN Informationen über die vorherigen Querschnitte stromaufwärts eines Datenpunkts zuzuführen, sodass es Effekte, die nach einem Geometriesprung auftreten, lernen und entsprechend berücksichtigen kann.

3. Berechnung des Wärmeübergangs

Des Weiteren schlägt JAKOBS vor weitere bzw. andere Eingabeparameter für das Training des KNN zu wählen. Beispielsweise die spezifische isobare Wärmekapazität des Methans. Da sich das KNN während des Trainings das Verhalten dieser Stoffeigenschaft selbst erschließt, soll durch die direkte Hinzugabe der Information das Training bzw. der Lernprozess vereinfacht und somit verbessert werden.

4. Verbesserung und Analyse

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der konkreten Verbesserung und der Analyse eines KNNs bzw. der dahinter steckenden Methodik. Hierbei soll das KNN die Heißgaswandtemperatur beim Wärmeübergang einer mit Methan regenerativ gekühlten Brennkammer mit rechteckigen Kühlkanalquerschnitten vorhersagen.

Einleitend wird ein Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Daten und die angewandte Methodik gegeben. Darauffolgend wird die Problematik der ungleichmäßigen Datenverteilung, der Einsatz zusätzlicher Parameter und der Einfluss der für das Training verwendeten Datenmenge untersucht. Als Letztes werden Möglichkeiten zur Berücksichtigung von Trägheitseffekten untersucht. Dies geschieht im Zusammenhang mit dem Einbau von experimentellen Daten in das Training des KNNs. Abschließend wird das verbesserte KNN mit dem KNN aus der Auswertung von JAKOBS verglichen.

4.1. Allgemeines Vorgehen

Die in dieser Arbeit verwendeten Daten stammen aus den in Kapitel 3.3.2 vorgestellten Arbeiten. Im Folgenden werden diese unterteilt in den EKA-Datensatz (einfache Kühlkanalabschnitte) von DRESIA und den KKK-Datensatz (komplexe komplette Kühlkanäle) von JAKOBS. Ein genauer Überblick über die durch die Datensätze abgebildeten Parameterbereiche findet sich im Anhang A.1.

Die verwendete Methodik zum Training und zu Auswertung des KNN wird weitestgehend neu aufgebaut, orientiert sich aber an der bisherigen Methodik von DRESIA. Implementiert wird die Methodik in der Programmiersprache PYTHON. Es werden verschiedene Software-Bibliotheken benutzt. Das KNN wird mit der speziell für Deep-Learning ausgelegten KERAS-Bibliothek aufgebaut. Als Backend, also als Grundlage dieser Bibliothek, wird TENSORFLOW, eine allgemeine Bibliothek für maschinelles Lernen, verwendet. Unterstützend wird dabei unter anderem

zur Datenverarbeitung `SCIKIT-LEARN` benutzt. Ebenfalls zur Verarbeitung, aber besonders zum Speichern der Daten dient `PANDAS`. So liegen die aus den CFD-Simulationen extrahierten Daten in einem sogenannten `Dataframe`, einer Klasse der `PANDAS`-Bibliothek, vor. Sowohl `PANDAS` als auch `SCIKIT-LEARN` basieren auf der `NUMPY`-Bibliothek, welche eine Grundlage für numerische Berechnungen bietet. Zur Visualisierung und grafischen Auswertung wird `MATPLOTLIB` verwendet. Zur erleichterten Durchführung des Hyperparametertunings kommt die `TALOS`-Bibliothek zum Einsatz.

Als Eingabeparameter des KNNs werden standardmäßig die schon in Abbildung 3.2 aufgelisteten Parameter verwendet: Aspektverhältnis, Querschnittsfläche, Krümmung, Rippenstärke und Rauheit des Kühlkanals, Druck, Enthalpie und Massenstromdichte des Kühlfluids, die durch das Heißgas aufgeprägte Wärmestromdichte und die Wandstärke der Heißgaswand. Druck, Enthalpie und Massenstromdichte liegen dabei als über den lokalen Massenstrom gemittelte Größen vor. Vor Eingabe der Daten in das Training werden diese mithilfe des `STANDARDSCALERS` der `SCIKIT-LEARN`-Bibliothek skaliert und standardisiert, sodass für jeden Parameter der Mittelwert null und die Standardabweichung eins beträgt. Durch die so kleineren Werte soll ein schnelleres Lernen ermöglicht werden. Standardmäßig wird eine Aufteilung der Daten in 95 % Trainingsdaten und 5 % Trainingsvalidierungsdaten vorgenommen. Als Fehlerfunktion wird der in Gleichung (3.15) gezeigte MSE gewählt. Zur Gewichtsregulierung wird der L2-Regulierer verwendet. Zur gradientenbasierten Suche des Minimums der Fehlerfunktion wird als Optimierer der `ADAM`-Optimierer ausgewählt.

Als Hyperparameter werden im Wesentlichen die Anzahl an Schichten, die Anzahl an Neuronen, die Lernrate, die Epochenanzahl, die Batchsize und der Regularisierungsfaktor variiert. Dabei wird mithilfe des `TALOS-SCANS` der `TALOS`-Bibliothek eine Gittersuche durchgeführt. Es wird für jede mögliche Hyperparameterkombination, die sich aus den angegebenen Werten der Parameter bilden lässt, ein KNN trainiert und ausgewertet. Das beste KNN wird anhand des kleinsten MAE bezüglich der Trainingsvalidierungsdaten ausgewählt und abgespeichert. Weiterführend werden die aus dem Hyperparametertuning resultierenden Ergebnisse und insbesondere die besten KNN, je nach separat ausgewertet und validiert.

Das Training bzw. das Hyperparametertuning wird auf den Hochleistungsrechnern der RWTH-Aachen durchgeführt. Hier stehen zur Berechnung zwei `NVIDIA`

TESLA V100-SXM2-16GB GPUs zur Verfügung. Eine Epoche im Trainingsprozess dauert mit dieser Hardware bei der Verwendung aller EKA-Daten, also circa 3,8 Millionen Datenpunkten, durchschnittlich 2s. Das Training eines einzelnen KNNs beläuft sich somit circa auf 5 min und ein Hyperparametertuning mit beispielsweise 50 Parameterkombinationen auf circa 4h. Im Rahmen dieser Arbeit wurden insgesamt circa 4500 verschiedene KNN trainiert.

4.2. Problem der ungleichmäßigen Datenverteilung

Da die Wahl der Parameter bei der Erstellung der CFD-Simulationen über die jeweiligen Bereiche hinweg nicht kontinuierlich erfolgt, entstehen Parameterbereiche, die stärker in den Daten vertreten sind als andere. Daraus kann ein schlechtes Training auf den wenig vertretenden Parameterbereichen resultieren. Denn durch die niedrige Datendichte ist der Einfluss auf die zu optimierende bzw. minimierende Fehlerfunktion geringer und die entsprechenden Bereiche werden im Lernprozess weniger berücksichtigt.

4.2.1. Lösungsansätze

In der Literatur finden sich zu diesem, für das maschinelle Lernen typischen Problem, verschiedene Lösungsansätze. Ein allgemeiner Überblick über die Thematik und die bestehenden Ansätze wurde bereits von HE und GARCIA [16] zusammengetragen. Meist behandeln Lösungsansätze die Problematik im Zusammenhang mit Klassifikation, jedoch lassen sich diese Methodiken zum Teil auch auf die Regression übertragen. Unterscheiden lässt sich zwischen Methoden, die den Datenansatz anpassen, Methoden, die den Lernalgorithmus anpassen, und Hybridmethoden, die Beides tun.

Oversampling und Undersampling sind Methoden, bei denen der Datensatz angepasst wird. Beim Undersampling wird in Bezug auf Klassifikation die stärker vertretene Klasse verkleinert, indem nur eine der Anzahl der weniger vertretenen Klasse entsprechende Anzahl repräsentativer Datenpunkte ausgewählt wird. Dazu kann der K-NEAREST-NEIGHBOR-Algorithmus [1] genutzt werden, welcher die Datenmenge in Gruppen aufteilt, die in ähnlichen Bereichen des Parameterraums liegen. So lassen sich jeweils repräsentative Datenpunkte auswählen. Ein Nach-

teil des Datensatzes ist, dass nicht der volle Datensatz und somit die volle zur Verfügung stehende Informationsmenge genutzt wird. Im Gegensatz zum Under-sampling wird beim Oversampling die weniger vertretene Klasse durch künstlich erzeugte Daten vergrößert. Die SMOTE-Methode (Synthetic Minority Oversampling Technique) [1] nutzt beispielsweise den K-NEAREST-NEIGHBOR-Algorithmus, um durch Interpolation zwischen den bestehenden Daten neue künstliche Daten zu erzeugen. Dieses künstliche Erzeugen von Daten ist gerade für mehrdimensionale Datensätze schwierig, da durch Interpolation auch Datenpunkte entstehen können, die im Sachzusammenhang keinen Sinn ergeben. Weiterführende Informationen zu diesen und anderen Methoden zur Handhabung von ungleichmäßig verteilten Daten in der Klassifikation finden sich in der Arbeit von ALI ET AL. [1].

Das kostensensitive Lernen ist eine Methodik, die den Lernalgorithmus anpasst. Dazu zählt der Einsatz einer Gewichtung mittels sogenannter Sampleweights. Mit diesen kann jedem einzelnen Datenpunkt ein Gewicht für das Training des KNN zugeordnet werden. Dabei wird das Sampleweight im Training in die Fehlerfunktionen eingebaut und manipuliert den Einfluss einzelner Datenpunkte auf die zu optimierende Fehlerfunktion, indem es diesen entweder erhöht oder erniedrigt. So steigt oder sinkt die Bedeutung einzelner Datenpunkte und das Problem des ungleichmäßigen Lernens kann ohne eine eigentliche Veränderung der Daten behoben werden. Herausforderung bei dieser Methode ist die Wahl der Sampleweights. Eine Möglichkeit zur Bestimmung dieser ist, wie ähnlich von WAXENEGGER-WILFING ET AL. [33] durchgeführt, die Aufteilung der Datenmenge in Teilräume, sogenannte Cluster. Das jeweilige Sampleweight eines Datenpunktes berechnet sich dann beispielsweise als Kehrwert der Gesamtanzahl der Datenpunkte des zugehörigen Clusters.

Clusterverfahren

Zur Wahl der Cluster gibt es wiederum verschiedene Methoden der Clusteranalyse. Dazu zählen partitionierende, hierarchische und dichtebasierte Analysen. Zu den partitionierenden oder auch zentrumbasierten genannten Clusterverfahren gehört der K-MEANS-Algorithmus. Hierbei wird die Anzahl der zu bildenden Cluster vorgegeben. Zu Beginn werden zufällige Zentren, in der Anzahl der vorgegebenen Cluster, festgelegt und der euklidische Abstand der einzelnen Datenpunkte zu den jeweiligen

Zentren berechnet. So wird jeder Punkt einem Zentrum zugeordnet. Daraufhin wird innerhalb der gebildeten Cluster das tatsächliche Zentrum errechnet und der Prozess wiederholt. Dies geschieht so lange, bis sich die Zentren nicht mehr ändern. Bei den hierarchischen Clusterverfahren werden zu Beginn entweder jeder Datenpunkt als einzelner Cluster (Bottom-up-Verfahren) oder alle Datenpunkte zusammen als ein Cluster (Top-down-Verfahren) gewertet. Dann wird schrittweise anhand der Distanzen zu den jeweilig nächsten Datenpunkten entweder verallgemeinert, also größere Cluster gebildet, oder spezifiziert, also in kleinere Cluster unterteilt. Zu den dichte-basierten Verfahren gehört der sogenannte DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise) [9]. Dabei werden zwei Parameter vorgegeben. Zum einen der euklidische Abstand eps , den ein Datenpunkte maximal zum nächsten Nachbarn des gleichen Clusters haben darf. Zum anderen die Anzahl an Datenpunkte $min.samples$, die ein Cluster mindestens benötigt, um als solche gewertet zu werden. Lässt sich ein Datenpunkt aufgrund einer der beiden Parameter nicht zu einem Cluster zuordnen, wird er als Datenrauschen gewertet. Informationen zu dichte-basierten Clusteranalysen und speziell zum DBSCAN und dem dahinter steckendem Algorithmus finden sich in den Arbeiten von MUMTAZ [25] und SCHUBERT ET AL. [29].

4.2.2. Anwendung DBSCAN und Gewichtung

In diesem Kapitel soll der negative Einfluss der ungleichmäßigen Datenverteilung auf das Training des KNNs mithilfe einer Gewichtung, also dem Einsatz von Sampleweights, behoben werden. Dabei wird ausschließlich mit dem EKA-Datensatz gearbeitet. Die für die Bestimmung der Sampleweights nötige Clusteranalyse wird mit dem DBSCAN durchgeführt. Diese Methodik erscheint hier am sinnvollsten und am besten umsetzbar, da beim Undersampling ein Großteil der Daten und somit Informationen verloren gehen würden und beim Oversampling aufgrund der hohen Mehrdimensionalität des Parameterraums das Problem der Erzeugung im Sachzusammenhang falscher künstlicher Daten bestünde.

Datenanalyse

Vor Durchführung des DBSCAN werden die Daten mithilfe des STANDARDSCALERS standardisiert und mithilfe des MINMAXSCALERS auf Werte zwischen null und eins skaliert. Beide Methoden sind Teil der SCIKIT-LEARN-Bibliothek und sollen dafür sorgen, dass alle Parameter den gleichen Einfluss auf die Clusteranalyse haben. Beim DBSCAN ist zu beachten, dass die benötigte Rechenzeit und Rechenkapazität mit zunehmender Dimensionalität also Parameteranzahl und steigendem maximalen Abstand zweier Datenpunkte des gleichen Clusters stark ansteigt. Daher werden als Parameter nur acht der zehn standardmäßigen Eingabeparameter des KNNs verwendet. Es wird auf den Druck und die Enthalpie verzichtet, da diese Parameter in der Erstellung der CFD-Simulation nicht, wie alle anderen Größen, manuell vorgegebene wurden, sondern aus der Simulation resultieren. Als *min.samples* wird eins gewählt, sodass jeder Datenpunkt einem Cluster zugeordnet wird. Dies erleichtert die Auswertung, da innerhalb der verwendeten Methodik ansonsten alle Datenpunkte, die keinem Cluster zugeordnet werden, den gleichen Index erhalten. Die Wahl des *eps*-Parameters stellt die größte Herausforderung dar.

Um einen Anhaltspunkt für die Wahl von *eps* zu erhalten wird die vorliegende Datenmenge mithilfe der NEAREST-NEIGHBORS-Methode aus der SCIKIT-LEARN-Bibliothek analysiert. Mit dieser Methode lässt sich für jeden Datenpunkt der ihm nächste Datenpunkt sowie die dazu gehörige euklidische Distanz berechnen. Wird die NEAREST-NEIGHBORS-Methode auf die Trainingsdaten angewendet berechnet sich für einen Großteil der Datenpunkte die Distanz zum nächsten Datenpunkt zu Null. Es wird geschlussfolgert, dass viele Datenpunkte auf dem jeweils selben Punkt im Parameterraum liegen. Mit dieser Information lässt sich kein sinnvolles *eps* wählen. Vielmehr wird eine Aussage über den Abstand der mit der NEAREST-NEIGHBORS-Methode identifizierten Datenpunkttagglomerationen benötigt. Um den Abstand dieser Agglomerationen herauszufinden wird zunächst, zur Zuordnung der Datenpunkte zur jeweiligen Agglomeration, ein DBSCAN mit einem sehr kleinem *eps* von 10^{-10} durchgeführt. Auf diese Weise sollen einzelne Datenpunkte und Datenpunkte die als Agglomeration vorkommen jeweils als Cluster gewertet werden. Um zu prüfen, ob diese Bedingung erfüllt ist, wird ein weiterer DBSCAN für ein *eps* gleich 10^{-20} durchgeführt. Da die Anzahl an insgesamt ermittelten Clustern, dieselbe bleibt, kann davon ausgegangen werden, dass alle Ag-

glomeration identifiziert wurden. Nun wird die Clusterzuordnung genutzt, um die Datenpunktagglomerationen auf jeweils einen Datenpunkt am jeweiligen Punkt im Parameterraum zu reduzieren. So ergeben sich in Bezug auf die acht ausgewählten Parameter 25 503 unabhängige Datenpunkten im gesamten 3,8 Millionen Datenpunkt großen EKA-Datensatz. Nun wird auf den reduzierten Datensatz erneut die NEAREST-NEIGHBORS-Methode angewandt, um eine Aussage über die Abstände der Datenpunkte bzw. der eigentlichen Datenpunktagglomerationen zu bekommen. Die Anzahl an Datenpunkt sind über die jeweiligen Abstände zum nächsten Nachbarn eines Datenpunktes in Abbildung 4.1a aufgetragen. Bei Missachtung einzelner Ausreißer ist eine Verteilung mit einem globalen Maximum bei einem Abstand von 0,0024 und einem lokalen Maximum bei einem Abstand von 0,026 zu erkennen. In Abbildung 4.1b sind gekoppelt mit Abbildung 4.1a die zu den jeweiligen Abständen gehörenden Perzentile dargestellt. Es ist zu erkennen, dass 95 % aller Daten zu ihrem nächsten Nachbarn einen maximalen Abstand von 0,044 haben. Diese Auswertung dient ausschließlich als Anhaltspunkt zur Wahl des *eps* für den DBSCAN und bietet keine allgemeine Aussage über das beste zu wählende *eps*.

DBSCAN und KNN Training mit Gewichtung

Um das bestmögliche Clustering und somit die beste Berechnung der Sampleweights für das Training des KNN zu bestimmen werden verschiedene Sampleweights, wie in Gleichung 4.1 dargestellt, berechnet. Es werden für eine Reihe von *eps* jeweils ein DBSCAN durchgeführt, die Sampleweights SW anhand der Clusterzuordnung C_i , mit eins durch die Datenanzahl N_{C_i} des zugehörigen Clusters berechnet und ein KNN trainiert.

$$SW_{C_i} = \frac{1}{N_{C_i}} \quad (4.1)$$

Als *eps* werden alle zu den Perzentilen aus Abbildung 4.1 gehörigen Abstände gewählt. So soll gesteuert werden, wie viele Datenpunkte einem Cluster mit mehr als einem Datenpunkt zugeordnet werden. Bei der Wahl eines dem 50 %-igem Perzentil entsprechendem Abstandes als *eps*, sollten beispielsweise mindestens 50 % aller 3,8 Millionen Daten, mit zumindest einem anderen Datenpunkt einen Cluster bilden. Zudem werden als Grenzwerte die in Tabelle 4.1 aufgelisteten Abstände als *eps* gewählt. Die für das jeweilige *eps* bzw. das jeweilige Perzentil vom DBSCAN

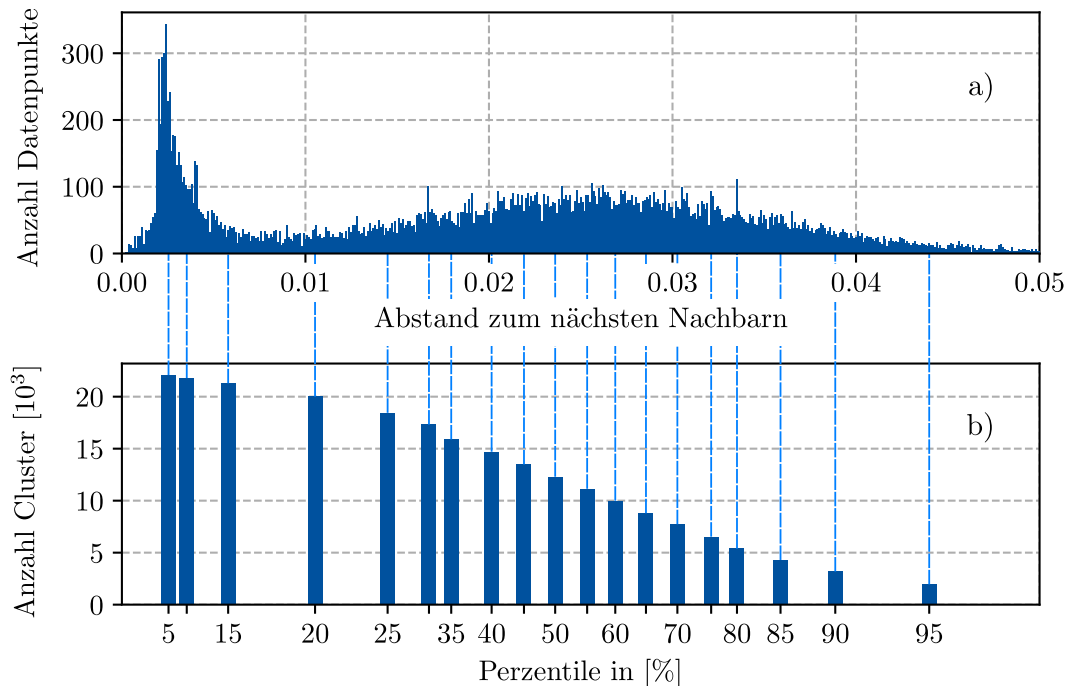


Abbildung 4.1.: Auswertung Datenanalyse - a) Anzahl an Datenpunkten mit gleichem Abstand zum jeweils nächsten Nachbarn, b) Anzahl an Clustern aus DBSCAN mit jeweilig aus dem Perzentil resultierendem eps

berechnete Anzahl an Clustern ist sowohl in Abbildung 4.1 als auch in Tabelle 4.1 abgebildet. Trivialer Weise wird die Clusteranzahl mit steigendem eps kleiner. Für das Training des KNNs wird erwartet, dass sich für eine speziell Wahl des eps und somit einen speziellen Sampleweightsatz ein Maximum in der Vorhersagegenauigkeit bzw. ein Minimum bezüglich des MAE erkennen lässt.

Grenzwerte	G1	G2	G3	G4
Abstand (eps)	10^{-10}	10^{-20}	0,1	0,2
Anzahl Cluster	25 503	25 503	351	288

Tabelle 4.1.: Grenzwerte und zugehörige Clusteranzahl berechnet durch DBSCAN

In Abbildung 4.2 sind für die trainierten KNN der MAE bezüglich der Vorhersage der Heißgaswandtemperatur auf der gesamten Datenmenge EKA sowie einzelnen daraus extrahierten Datensätzen dargestellt. Genauere Informationen über

die extrahierten Datensätze, deren jeweiligen Parameterbereiche sowie die jeweilige Anzahl an Datenpunkten, finden sich in Tabelle 4.2. Anhand dieser Teildatensätze kann eine Aussage über die Gewichtung getroffen werden. Je näher die Fehler der Datensätze beieinander liegen, desto gleichmäßiger wurde der Datensatz gelernt und desto besser hat die Gewichtung funktioniert. Die Bezeichnungen der KNN in Abbildung 4.2 sind entsprechend der Grenzwert- und Perzentilbeschreibungen gewählt. Von links nach rechts steigt der für den jeweiligen DBSCAN genutzte Abstand ϵ an. Zum Vergleich ist separat rechts im Bild ein KNN mit der Bezeichnung N2 abgebildet, welches ohne Sampleweights trainiert wurde.

Bezeichnung	Parameterbereich	Anzahl Datenpunkte [10^6]
EKA	alle	3,80
GR1	gerade & Rippenstärke = 1	2,36
GRR	gerade & Rippenstärke \neq 1	0,36
KR1	gekrümmt & Rippenstärke = 1	0,94
KRR	gekrümmt & Rippenstärke \neq 1	0,14

Tabelle 4.2.: Informationen zu den Testdatensätzen für die Auswertung der Gewichtung

Entgegen der Erwartung ist kein spezifischer Verlauf bzw. kein Minimum des MAE zu erkennen. Die Vorhersagegenauigkeit ist für das KNN G1 am besten. Der MAE auf der Gesamtdatenmenge, also EKA, ist hier am geringsten und die Streuung des MAE auf den anderen Datensätzen ist im Vergleich zu allen anderen KNN sehr gering. Gerade auf dem, bezüglich der Anzahl an Datenpunkten, kleinen KRR-Datensatz ist die Vorhersage sehr gut. Die Gewichtung hat hier also am besten funktioniert. Im Vergleich zum ohne Gewichtung trainierten N2 ist die Vorhersagegenauigkeit für alle KNN mit Gewichtung auf jedem Datensatz schlechter. Ein möglicher Grund hierfür ist, dass durch die Gewichtung viele einzelne Datenpunkte oder deutlich kleinere Datensätze als die hier geprüften stärker berücksichtigt wurden. Dadurch wird der MAE auf den hier ausgewerteten, größeren Datensätzen insgesamt schlechter. Obwohl die verwendeten Sampleweights für die KNN G1 und G2 die gleichen sind, da der DBSCAN für beide die gleiche Clusterzuordnung liefert, gleichen sich die Vorhersagegenauigkeiten nicht exakt. Diese Abweichung tritt auf, da im Training eines KNNs die Daten nach jeder Epoche zufällig neu gemischt

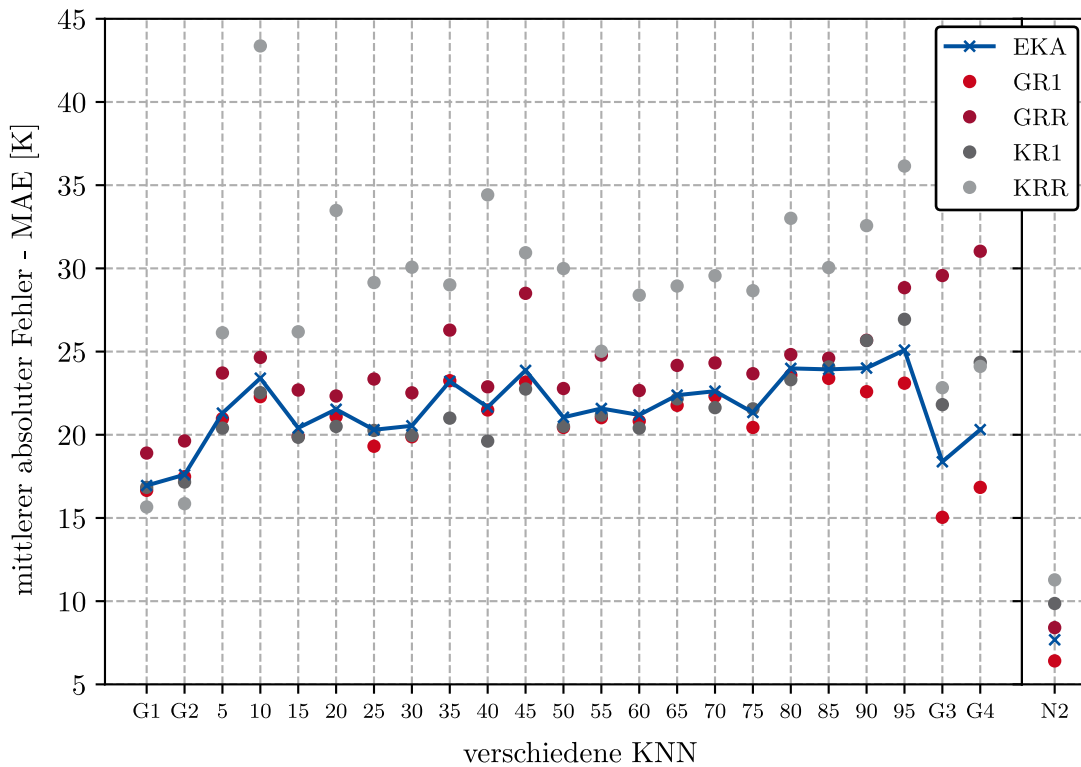


Abbildung 4.2.: MAE auf verschiedenen Datensätzen (siehe Tabelle 4.1) für KNN mit unterschiedlicher Gewichtung im Training

ins KNN eingespeist werden und so bei der Anpassung der Netzwerkvariablen bei der Rückpropagierung Unterschiede auftreten können. Dies bedeutet, dass mehrere KNN die mit denselben Daten und Hyperparametern trainiert wurden dennoch unterschiedlich Netzwerkvariablen und somit unterschiedliche Vorhersagegenauigkeiten liefern können.

Insgesamt zeigt sich, dass das KNN, auch ohne eine Gewichtung, das Problem der ungleichmäßigen Datenverteilung gut lösen kann. In Bezug auf die betrachteten Parameterbereiche ist die Vorhersagegenauigkeit ohne Gewichtung besser. In den folgenden Kapiteln wird daher auf eine Gewichtung der Daten verzichtet. Außerdem konnte durch die Datenanalyse gezeigt werden, dass nur 25503 Datenpunkte - das sind weniger als 0,7% der Daten des EKA-Datensatzes - bezüglich der ausgewerteten Parameter unterschiedlich sind. Dies spricht für eine geringe Vielfalt der Daten und sollte im Falle einer Erstellung neuer Trainingsdaten mehr beachtet werden.

4.3. Einsatz zusätzlicher Parameter

In diesem Kapitel wird der Einsatz zusätzlicher Eingabeparameter in das Training des KNN untersucht. Als neue Parameter werden die spezifische isobare Wärmekapazität c_p des Methans, im Folgenden nur als spezifische Wärmekapazität bezeichnet, und die REYNOLDS-Zahl der Kühlfluidströmung getestet. Durch diese zusätzlichen Informationen soll der Lernprozess vereinfacht und die Vorhersagegenauigkeit erhöht werden.

Beide Parameter sind bisher nicht in den Datensätzen vorhanden und müssen bestimmt werden. Die REYNOLDS-Zahl wird, wie in Gleichung (2.1) dargestellt, berechnet. In diesem Fall liegen die Geschwindigkeit, die Dichte und die dynamische Viskosität als über den Massenstrom gemittelten Größen vor, wodurch sich auch eine über den Massenstrom gemittelte REYNOLDS-Zahl ergibt. Die spezifische Wärmekapazität wird mithilfe der PYTHON-Bibliothek COOLPROP berechnet. Dabei werden die über den Massenstrom gemittelten Parameter Temperatur und Druck angegeben und die dadurch ebenfalls über den Massenstrom gemittelte Wärmekapazität bestimmt. Beim Training bzw. Hyperparametertuning werden die bisherigen Eingabeparameter durch die beiden neuen jeweils einzeln sowie zusammen ergänzt. Als Training- und Trainingsvalidierungsdaten werden die Daten aus dem EKA-Datensatz verwendet. Zur weiteren Validierung wird auch der KKK-Datensatz hinzugezogen.

Die Ergebnisse der Auswertung der trainierten KNN sind in Tabelle 4.3 zu sehen. Dort sind die im Folgenden genutzten Bezeichnungen, die dazugehörigen zusätzlichen verwendeten Parameter und der jeweilige MAE auf dem gesamten EKA- bzw. KKK-Datensatz zu sehen. Im Vergleich zum ohne zusätzliche Eingabeparameter trainierte N2 zeigen alle drei KNN mit zusätzlichen Eingabeparameter auf dem EKA-Datensatz eine verbesserte Vorhersagegenauigkeit. Dabei liefert CR mit einer Verbesserung von circa 3 K gegenüber N2 die beste Vorhersage und C eine etwas bessere als R. Auf dem KKK-Datensatz verschlechtert sich in allen drei Fällen die Vorhersagegenauigkeit gegenüber N2. Dabei verschlechtert sich die Vorhersage bei R kaum, bei C deutlich und bei CR mit circa 30 K am stärksten.

Auf dem EKA-Datensatz haben die beiden zusätzlichen Parameter, wie erwartet, einen positiven Einfluss auf das Training bzw. die Vorhersagegenauigkeit. Dabei hat die spezifische Wärmekapazität einen größeren Einfluss als die REYNOLDS-Zahl.

KNN	zusätzliche Parameter	MAE für EKA [K]	MAE für KKK [K]
C	c_p	4,9	64,7
R	Re	5,2	41,1
CR	c_p & Re	4,3	70,3
N2	keine	7,7	40,8

Tabelle 4.3.: Auswertung KNN mit zusätzlichen Eingabeparametern

Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass die spezifische Wärmekapazität einen direkteren Einfluss auf den Wärmeübergang und somit auf die Berechnung der Heißgaswandtemperatur hat. Der stärkere Einfluss ist entsprechend auch auf dem KKK-Datensatz zu erkennen. Die hier auftretende Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit aller drei KNN mit zusätzlichen Eingabeparametern kann über die höhere Komplexität des KKK-Datensatzes erklärt werden. In diesem Datensatz treten vermehrt Trägheitseffekte auf, die wiederum andere Effekte wie Turbulenz, HTD und thermische Schichtung beeinflussen. Die präzise Modellierung dieses komplexeren, dreidimensionalen Verhaltens ist mit über den Massenstrom gemittelten Größen trivialerweise nicht möglich. Somit sorgt die Hinzugabe der über den Massenstrom gemittelten Größen c_p und Re für eine Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit auf dem KKK-Datensatz.

Da sich die Vorhersage auf dem EKA-Datensatz nur leicht verbessert, jedoch für eine starke Verschlechterung auf dem unabhängigen KKK-Datensatz sorgt und im weiteren Verlauf der Arbeit unabhängig von den Einflüssen dieser beiden Parameter auf das Training gearbeitet werden soll, wird im Folgenden auf den Einsatz zusätzlicher Eingabeparameter verzichtet.

4.4. Einfluss der Datenmenge

Bei der Übertragung der Methodik des Einsatzes eines KNN auf einen anderen Anwendungsfall mit gleicher Problematik müssten neue Daten erzeugt werden. Da dies, besonders bei CFD-Simulationen aufwendig und rechenintensiv ist, wäre es von Vorteil im Voraus zu wissen, wie viele Trainingsdaten für eine gewisse Vorhersagegenauigkeit nötig sind. Außerdem wäre es für die Wahl der Hyperparameter bzw. der benötigten Netzwerkarchitektur hilfreich zu wissen, inwieweit diese von

der Datenmenge beeinflusst werden.

Der Einfluss der Datenmenge wird in diesem Kapitel mithilfe des EKA-Datensatzes untersucht. Dazu wird der Datensatz zufällig durchmischt und 5 % der Daten werden als Trainingsvalidierungsdaten festgelegt. Mit den verbleibenden Daten wird mit 5 %, 10 % und ab dann in 10 %-Schritten aufsteigend bis 100 % der Daten jeweils ein Hyperparametertuning durchgeführt. Durch das Hyperparametertuning wird sichergestellt, dass die bestmögliche Netzwerkarchitektur und damit das bestmögliche Netz für die jeweilige Datenmenge gefunden wird. Dabei enthält der jeweils größere Datensatz immer auch die Daten der kleineren Datensätze, sodass in jedem Schritt die Trainingsdatenmenge erweitert und nicht neu ausgewählt wird. Die im Hyperparametertuning getesteten Hyperparameter sind in Tabelle 4.4 dargestellt.

Hyperparameter	Werte
Schichten	1, 2, 3, 4
Neuronen	10, 100, 200, 300, 500
Epochen	50, 150
Batchsize	1000, 4096, 10000

Tabelle 4.4.: Parameter für das Hyperparametertuning

4.4.1. Einfluss auf die Vorhersagegenauigkeit

Zur Auswertung des Einflusses der Datenmenge auf die Vorhersagegenauigkeit wird neben dem MAE auf der gesamten Trainingsvalidierung auch der MAE für zehn jeweils ein Zehntel große Teilmengen dieses Trainingsvalidierungsdatensatzes berechnet. Dies dient zur Kontrolle der Abweichung des MAE über den Datensatz.

Die Ergebnisse der Auswertung sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Zur besseren Bewertung wird ein möglicher idealer Verlauf eingefügt. Es ist zu erkennen, dass die Vorhersagegenauigkeit, mit Ausnahme des Schrittes von 50 % zu 60 %, mit steigender Datenmenge verbessert wird. Dabei nimmt die Verbesserung der Vorhersage mit zunehmender Datenmenge ab. Besonders im Bereich von 5 % bis 30 % ist die Verbesserung pro Schritt stärker als für die folgenden Schritte. Bei 5 % der Daten-

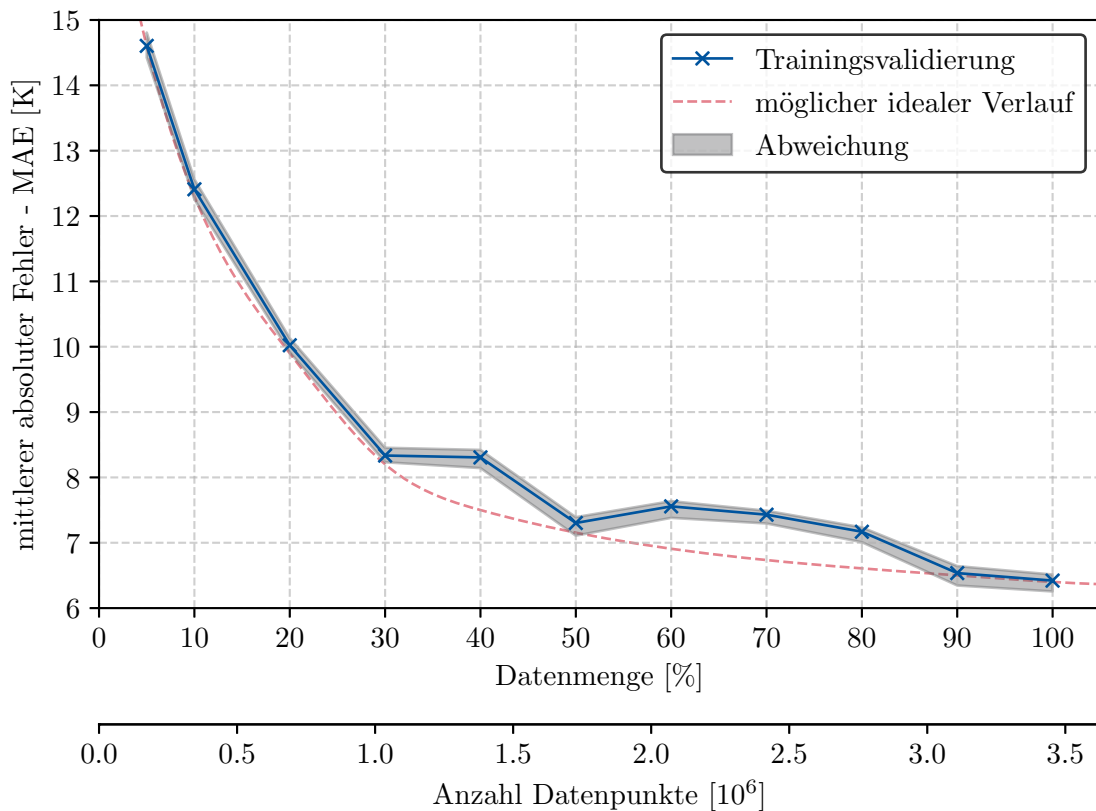


Abbildung 4.3.: Einfluss der Datenmenge auf die Vorhersagegenauigkeit

menge wird ein MAE von 14,6 K erreicht. Dem gegenüber liegt bei der Nutzung aller Daten ein MAE von 6,4 K vor. Für alle Datenmengen beträgt die absolute Abweichung des MAE innerhalb der Trainingsvalidierungsdaten nicht mehr als 0,2 K.

Aufgrund der geringen Abweichung kann von einer aussagekräftigen Auswertung ausgegangen werden. Die Vorhersagegenauigkeit bei der Nutzung von 5 % der Gesamtdatenmenge ist im Sachzusammenhang, also im Bezug auf die Heißgaswandtemperaturen, die hier grob zwischen 200 K und 1500 K liegen können, als gut zu bewerten. Abweichungen bezüglich des möglichen idealen Verlaufs bei einer Datenmenge von 40 % und bei einer Datenmenge von 60 % bzw. den beiden darauf folgenden, können durch Unterschiede in den Daten erklärt werden. Werden in einem Schritt Daten hinzugefügt, die trotz des Eingangs erwähnten Durchmischens des Gesamtdatensatzes komplexere oder gegenüber den bisherigen Daten deutlich

andere Zustände abbilden, kann das Training gegenüber dem vorherigen Schritt erschwert werden. Dies kann sich entsprechend auch auf das Training mit den jeweils größeren Datenmengen in den Schritten danach, wie bei 70 % und 80 %, auswirken. Bei einer Abwägung zwischen minimaler Datenmenge und maximaler Vorhersagegenauigkeit lässt sich in diesem Fall 30 % der Datenmenge wählen, da bis zu diesem Punkt der MAE pro Schritt signifikant stärker sinkt, als bei den darauf folgenden.

Insgesamt zeigt sich, dass die Vorhersagegenauigkeit mit einer Erhöhung der für das Training genutzten Datenmenge steigt, jedoch die Verbesserung mit zunehmender Datenmenge abnimmt. Auch für eine prozentual sehr geringe Datenmenge, wird ein gute Vorhersage erreicht. Für dieses Problem wird eine sinnvolle Trainingsdatenmenge von circa 1,1 Millionen Datenpunkten festgestellt.

4.4.2. Einfluss auf die Netzwerkarchitektur

In Bezug auf die Netzwerkarchitektur sind im wesentlichen die Anzahl an Schichten und die Anzahl an Neuronen pro Schicht gemeint. Diese definieren die Anzahl an Netzwerkvariablen und somit die Anzahl an veränderlichen Parametern eines KNN. Es wird erwartet, dass die Menge an benötigten Netzwerkvariablen, also auch die Anzahl an Schichten und Neuronen, mit steigender Datenmenge größer wird.

Bei Betrachtung der in Tabelle 4.5 aufgeführten Hyperparameter der jeweils besten KNN zeigt sich, dass bei allen Datenmengen, mit Ausnahme von 5 %, die gleichen Hyperparameter aus dem Hyperparametertuning resultieren. Diese entsprechen, wie im Vergleich mit Tabelle 4.4 zu sehen, bei der Batchsize den kleinstmöglich und bei allen anderen den größtmöglich wählbaren Hyperparametern. Bei 5 % der Datenmenge ist die Anzahl an Neuronen mit 300 kleiner als bei allen anderen.

Datenmenge	Schichten	Neuronen	Epochen	Batchsize
5 %	4	300	150	1000
10 %	4	500	150	1000
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
95 %	4	500	150	1000
100 %	4	500	150	1000

Tabelle 4.5.: Hyperparameter der jeweils besten KNN

Es zeigt sich bis auf die Ausnahme bei 5%, ein unerwartetes Ergebnis. Das Ausnutzen der maximalen Netzwerkarchitektur könnte an der im Hyperparameter-tuning getesteten Auswahl von zu kleinen auswählbaren Hyperparametern in Bezug auf die Anzahl an Schichten und Neuronen liegen. Da die Trainingsvalidierungs- und Trainingsdaten beide aus dem EKA-Datensatz stammen und somit eine recht hohe Ähnlichkeit der Daten vorhanden ist, liegt jedoch eher die Vermutung nahe, dass das Auswendiglernen der Daten ohne erkennbares Auftreten von Overfitting im Training begünstigt wurde. Dies bedeutet, dass auch für ein Hyperparameter-tuning mit größeren auswählbaren Parametern immer die maximale Anzahl an Schichten und Neuronen für das beste KNN gewählt würde und somit eine Untersuchung in diese Richtung keinen Sinn ergibt.

Um dennoch eine Aussage über den Einfluss der Datenmenge auf die Netzwerkarchitektur treffen zu können, wird geprüft bei welchen Datenmengen auch kleinere Netzwerkarchitekturen gute Vorhersagegenauigkeiten relativ zum jeweils besten KNN liefern. Dazu wird die durchschnittliche Anzahl an Netzwerkvariablen für die jeweils 15 besten KNN berechnet. Die Anzahl an Netzwerkvariablen beschränkt sich in diesem Fall auf der Anzahl der Gewichte, also aller Verbindungen zwischen den Neuronen im gesamten KNN. Der BIAS fließt nicht in die Berechnung ein, da er aufgrund einer hier angewandten Batchnormalisierung nicht verwendet wurde. Somit berechnet sich die Anzahl an Netzwerkvariablen V_N aus der Anzahl an Schichten n und der Anzahl an Neuronen der jeweiligen Schicht N_i . Dabei entspricht N_0 der Anzahl der Neuronen der Eingabeschicht, also zehn, und N_{n+1} der Anzahl der Neuronen der Ausgabeschicht, also eins:

$$V_N = \sum_{i=0}^{n+1} N_i N_{i+1} \quad (4.2)$$

Die Auswertung der durchschnittlichen Anzahl an Netzwerkvariablen für die jeweils 15 besten KNN bei jeweilig unterschiedlicher Datenmenge ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Es zeigt sich kein klarer Verlauf. Jedoch ist der Trend erkennbar, dass für eine steigende Datenmenge eine größere Anzahl an Netzwerkvariablen benötigt wird. Abweichungen von diesem Trend sind dadurch zu erklären, dass durch Zufall im Training, wie schon in Kapitel 4.2.2 erklärt, für das gleiche KNN unterschiedliche Vorhersagegenauigkeiten resultieren können. Diese Unterschiede können

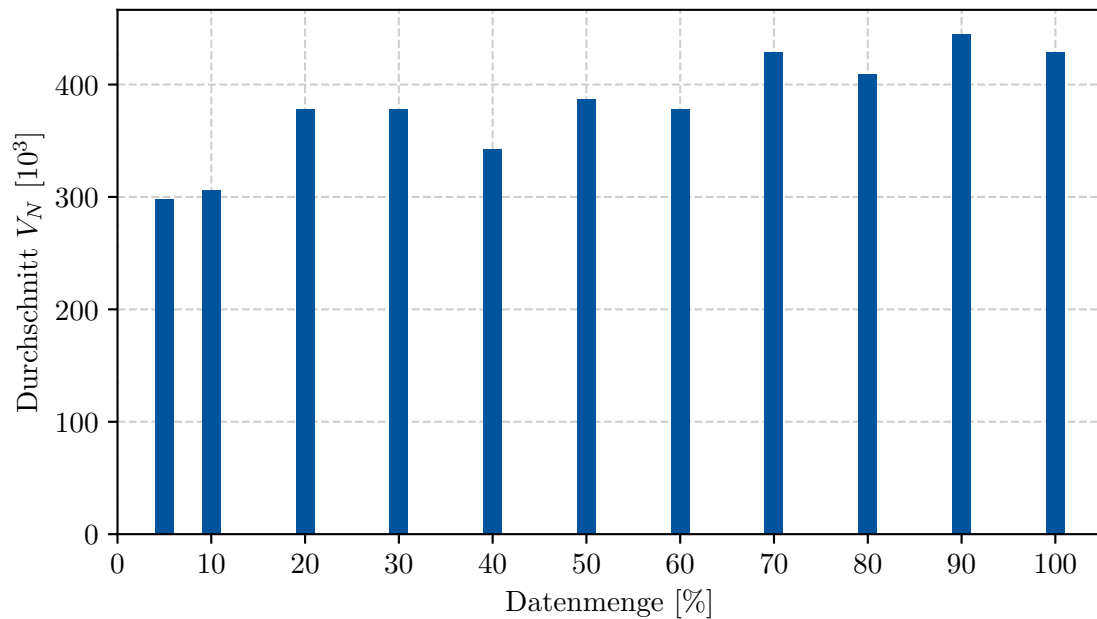


Abbildung 4.4.: Einfluss der Datenmenge auf die Anzahl der Netzwerkvariablen

hier darüber entscheiden, ob sich das jeweilige KNN unter den 15 besten befindet oder nicht. Da die Anzahl an Netzwerkvariablen für die einzelnen KNN bzw. Hyperparameterkonfigurationen stark unterschiedlich und vor allem ungleichmäßig verteilt sind kann diese kleine Abweichung in der Vorhersagegenauigkeit einen großen Einfluss auf die Berechnung der durchschnittlichen Anzahl an Netzwerkvariablen haben.

Einfluss durch die Netzwerkarchitektur

Abschließend wird der Einfluss der Anzahl der Netzwerkvariablen auf die Vorhersagegenauigkeit unabhängig von der Datenmenge untersucht. Dazu wird hier, aufgrund der zur Verfügung stehenden Auswertungsdaten, der MSE als Maß für die Vorhersagegenauigkeit verwendet. Dieser führt zu vergleichbaren Ergebnissen bzw. Aussagen wie der MAE. Abbildung 4.5 stellt den MSE der im Hyperparameter-tuning mit 100 % der Datenmenge trainierten KNN über die jeweilige Anzahl der Netzwerkvariablen dar. Diese Hyperparameter-tuning mit 100 % der Datenmenge wird exemplarisch gewählt, wobei die anderen Hyperparameter-tuning mit jeweils

kleineren Datenmengen ein ähnliches Verhalten aufzeigen.

Es wird deutlich, dass eine gewisse Anzahl an Netzwerkvariablen benötigt wird, damit sich eine hinreichend genaue Vorhersagegenauigkeit einstellt. Außerdem zeigt sich, dass der MSE bezüglich der Daten der Trainingsvalidierung mit steigender Anzahl an Netzwerkvariablen sinkt. Eigentlich wäre besonders für KNN, die mit kleineren Datenmengen trainiert wurden, ab einer gewissen Anzahl an Netzwerkvariablen eine Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit, also typisches Overfitting, zu erwarten. Dies tritt hier jedoch im Rahmen der untersuchten Hyperparameter aus den bereits beschriebenen Gründen nicht auf.

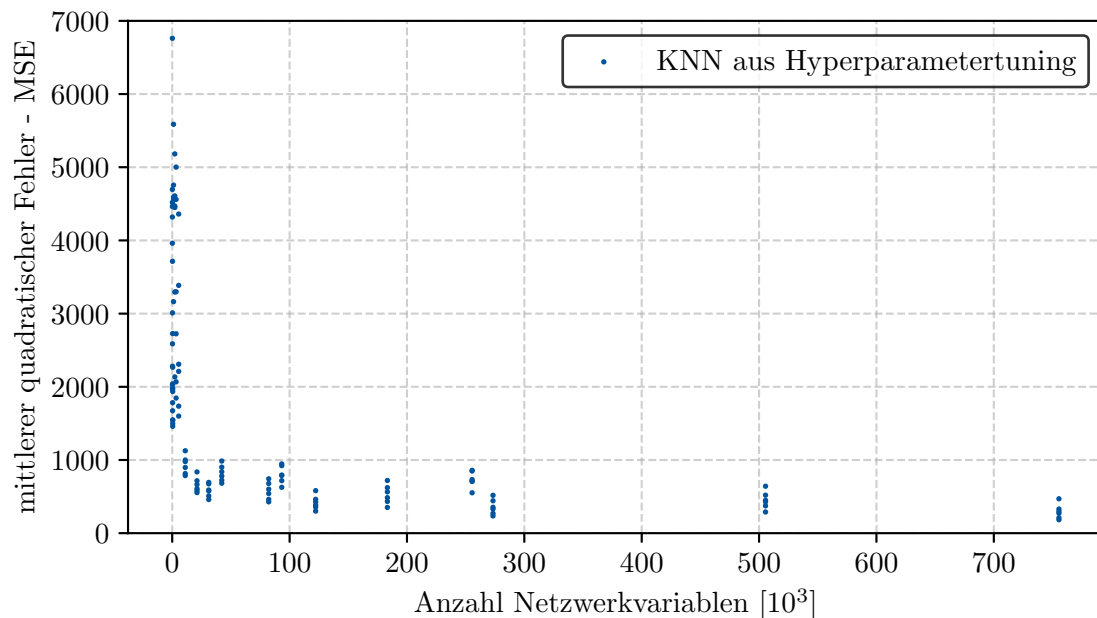


Abbildung 4.5.: Einfluss der Anzahl der Netzwerkvariablen auf die Vorhersagegenauigkeit

Insgesamt zeigt sich in diesem Kapitel, dass die benötigte Netzwerkarchitektur mit Erhöhung der für das Training genutzten Datenmenge tendenziell steigt. In dieser Untersuchung resultieren jedoch auch für kleinere Datenmengen große Netzwerkarchitekturen, da durch die Ähnlichkeit der Trainingsvalidierungs- und Trainingsdaten das Auswendiglernen begünstigt wird ohne dass sich Overfitting erkennbar einstellt. Weiterführend zeigt sich, dass unabhängig von der Datenmenge eine gewisse Mindestanzahl an Netzwerkvariablen nötig ist, um eine hinreichend gu-

te Vorhersagegenauigkeit zu erzielen und sich diese durch Erhöhung der Anzahl der Netzwerkvariablen zumindest bis zum theoretisch auftretenden Overfitting erhöhen lässt.

4.5. Einbindung KKK-Datensatz

In diesem Kapitel werden zwei Aspekte untersucht, die unmittelbar mit dem KKK-Datensatz zusammenhängen. Zum einen soll der KKK-Datensatz in das Training eingebunden werden, wobei dessen Daten als Daten aus Experimenten betrachtet werden. Zum anderen soll nach der Einbindung des KKK-Datensatz die Berücksichtigung von hier vermehrt auftretenden Trägheitseffekten ermöglicht werden.

4.5.1. Einbindung experimenteller Daten

Da der KKK-Datensatz gegenüber dem EKA-Datensatz über komplexere Geometrieverläufe verfügt, treten Trägheitseffekte auf, die das Strömungsverhalten und somit den Wärmeübergang beeinflussen. Dadurch kann es vorkommen, dass in beiden Datensätze Datenpunkte existieren, deren Werte bezüglich der Eingabeparameter gleich, aber deren Heißgaswandtemperaturen ungleich sind. Es sollen also Daten hinzugegeben werden, die aus Sicht des bisherigen Trainings mit dem EKA-Datensatz über einen systematischen Fehler verfügen. Dieses Problem ist auch bei Daten aus realen Experimenten denkbar, weshalb die Daten des KKK-Datensatz hier wie experimentelle Daten betrachtet werden können. Da in der Realität potentiell eine größere Menge an experimentellen Daten vorliegt und nicht alle Effekte mit CFD Rechnungen berechnet werden können, bietet die Möglichkeit diese im Training des KNN zu nutzen ein großes Potential zur Reduzierung der künstlich mit CFD-Simulationen zu erzeugenden Daten, zur Steigerung der Vorhersagegenauigkeit und zur Erhöhung des Gültigkeitsbereiches.

Die Vorhersagegenauigkeit des bisher mit dem EKA-Datensatz trainierte KNN soll mithilfe des KKK-Datensatz verbessert werden. Wird das mit dem EKA-Datensatz trainierte KNN als ein weitestgehend valides Modell und die Daten des KKK-Datensatzes, wie beschrieben, als Daten aus Experimenten bzw. Beobachtungen betrachtet, so beschreibt das geplante Vorgehen eine Methode, die in der Literatur als Datenassimilation verstanden wird. Bei der Datenassimilation geht es

allgemein um die fortlaufende Verbesserung eines physikalischen Modells mithilfe von Beobachtungsdaten. Ein in der Literatur, wie auch von WERGEN [34] beschriebenes, oft genanntes Beispiel ist das Problem der Wettervorhersage. Aufgrund der physikalischen Komplexität kann hier keine analytische Lösung gefunden werden, sodass stattdessen ein bestehendes physikalisches Grundmodell immer wieder durch neue Beobachtungen des Wetters angepasst wird. Letztendlich ist dabei das Problem, die richtige Gewichtung zwischen experimentellen bzw. beobachteten Daten und der Vorhersage des Modells zu finden. Dieses Problem wird zunehmend auch mit Methoden des maschinellen Lernens gelöst. Beispielsweise untersuchen LOH ET AL. [21] die Kombination von Methoden des maschinellen Lernens mit Methoden der Datenassimilation zur Vorhersage des Gasausstoßes von Erdgasbrunnen. Ebenso wenden BRAJARD ET AL. [3] eine Kombination beider Methodiken zur Aufstellung eines Ersatzmodells zur Beschreibung von chaotischem Verhalten an. Wie GEER [11] erklärt, gewinnt das maschinelle Lernen durch die rein auf Daten basierende Herangehensweise gegenüber der Datenassimilation zunehmend an Bedeutung. Dies liegt an der steigenden Komplexität von Problemen, die nur sehr aufwendig physikalisch zu modellieren sind. In den aufgezählten Beispielen wird gezeigt, dass das maschinelle Lernen ebenso wie die herkömmlichen Methoden der Datenassimilation die Einbindung von experimentellen Daten, gerade bei steigender Komplexität und Menge, ermöglichen kann. Daher wird der KKK-Datensatz im Folgenden ohne besondere Anpassung zusammen mit dem EKA-Datensatz in das Training eingegeben.

Die Auswertung des trainierten KNN F1 erfolgt im Vergleich mit dem KNN N2 anhand des MAE auf den jeweiligen gesamten Datensätzen. Die Ergebnisse der Auswertung sind in Tabelle 4.6 zu sehen. Gegenüber N2 verbessert sich bei F1 die Vorhersagegenauigkeit auf dem EKA-Datensatz um 0,6K und auf dem KKK-Datensatz um 35K. Die Verbesserung auf dem EKA-Datensatz ist im Rahmen möglicher Trainingsabweichungen nicht besonders groß. Da hier jedoch umgekehrt keine Verschlechterung auftritt, bestätigt sich, dass das KNN ohne Anpassungen experimentelle Daten in das Training aufnehmen kann. Die Verbesserung auf dem KKK-Datensatz macht Sinn, da die entsprechenden Daten nun auch im Training vorhanden sind. Dennoch ist es bemerkenswert, dass sich, obwohl die KKK-Daten nur etwas mehr als 1% der gesamten Trainingsdatenmenge ausmachen, eine solch starke Verbesserung einstellt.

KNN	Trainingsdaten	MAE für EKA [K]	MAE für KKK [K]
F1	EKA und KKK	7,1	5,8
N2	EKA	7,7	40,8

Tabelle 4.6.: Auswertung KNN mit KKK und EKA als Trainingsdaten

Um zu prüfen, ob die KKK-Daten auswendig gelernt wurden, wird ein Teil der Daten extrahiert und nicht mehr im Training aufgenommen. Es werden neun-mal jeweils 16 der 146 unterschiedlichen Kühlkanäle des KKK-Datensatzes als externe Validierung verwendet. Die Daten von jeweils ganzen Kühlkanälen werden entnommen, sodass bei der Validierung nach dem Training des KNN alle Datenpunkte eines betrachteten Kühlkanals unabhängig vom Training sind. Es ergeben sich neun externe Validierungssätze mit den jeweils passenden Trainingsdatensätzen für die je ein Hyperparametertuning durchgeführt bzw. das beste KNN gefunden wird. Beispielfhaft ist in Abbildung 4.6 die Vorhersage des mit dem Validierungssatz Nummer 4 trainierten KNNs FV4 im Vergleich zur Vorhersage von N2 dargestellt. Weitere Auswertungen dieses KNNs anhand Kühlkanälen des entsprechenden Validierungssatzes finden sich im Anhang A.2.

Bei der Auswertung aller trainierten KNN ergibt sich ein über die Validierungssätze gemittelten MAE von 21 K. Die Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit gegenüber N2 von 19,8 K bleibt demnach auch bei Betrachtung einer externen Validierung erheblich. Somit zeigt sich insgesamt, dass das KNN auch ohne Anpassungen die experimenteller Daten sinnvoll in das Training einbinden kann.

4.5.2. Berücksichtigung Trägheitseffekte

Da nun Klarheit besteht inwieweit sich der KKK-Datensatz in das Training einbinden lässt, können Möglichkeiten untersucht werden die dort auftretenden Trägheitseffekte zu berücksichtigen. So soll die Vorhersagegenauigkeit besonders in Bereichen, in denen die Kühlkanalgeometrie nicht konstant oder der Verlauf unstetig oder nicht differenzierbar ist, verbessert werden.

Zur Berücksichtigung der Trägheitseffekte sollen dem KNN bei jedem Datenpunkt Information über die jeweiligen Datenpunkte stromauf mitgeliefert werden. So soll das KNN den Einfluss der geometrischen bzw. thermodynamischen Zustän-

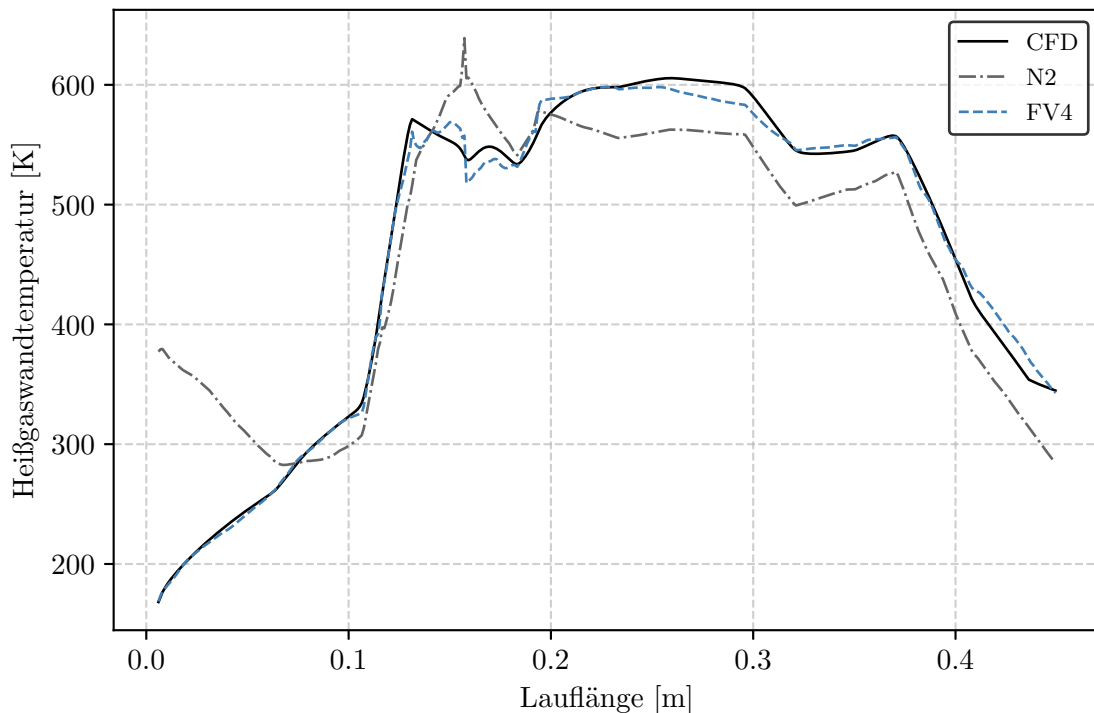


Abbildung 4.6.: Vergleich der Vorhersagen von FV4 und N2 anhand eines Kühlkanals aus dem Validierungssatz 4

de der Querschnitte stromauf berücksichtigen können. Bei der Wahl der zu berücksichtigenden Anzahl an Querschnitten spielen zwei Aspekte eine Rolle: zum einen sollen dem KNN Information von möglichst vielen Querschnitten stromauf geliefert werden, zum anderen kann die gewählte Anzahl an Datenpunkten eines jeden Kühlkanals bzw. Kühlkanalabschnittes für das Training nicht genutzt werden, da an den bezüglich der simulierten Lauflänge ersten Datenpunkten keine Information über die jeweilig gewählte Anzahl an Querschnitten stromauf existiert. Es wird sich dafür entschieden die jeweils fünf vor einem Datenpunkt liegenden Querschnitte zu berücksichtigen. Dies bedeutet aufgrund der Auswertung der CFD-Daten, welche alle 2 mm erfolgte, dass die Querschnitte bis insgesamt 10 mm stromauf berücksichtigt werden können. Des Weiteren werden entsprechend fünf Datenpunkte pro Kühlkanal- bzw. Kühlkanalabschnitt aus dem entsprechenden Datensatz gelöscht. In Summe gehen so Informationen von 250 000 Datenpunkte verloren.

Es werden zwei Möglichkeiten untersucht und verglichen. Einmal werden jedem

Datenpunkt alle Informationen bezüglich der Eingabeparameter der letzten fünf Querschnitte hinzugefügt, sodass sich insgesamt 50 Eingabeparameter beim Training ergeben. Als Zweites werden nur Informationen über den Geometrieverlauf der letzten fünf Querschnitte in Form von Sprungkennwerten hinzugefügt. Diese Sprungkennwerte geben an inwieweit und wie stark sich die Geometrie stromauf ändert. Da für die Krümmung, die Breite und die Höhe jeweils ein Sprungkennwert berechnet und hinzugefügt wird, ergeben sich hier insgesamt 13 Eingabeparameter. Die Sprungkennwerte SK_X berechnen sich gemäß Gleichung 4.3 aus den jeweilig fünf hinter dem betrachteten Datenpunkt X_0 liegenden Datenpunkten X_i . Dabei stellt X die Krümmung K , Höhe H oder Breite B dar. Da im EKA-Datensatz keine Veränderungen in der Geometrie auftreten, ergeben sich hier alle Sprungkennwerte zu null.

$$SK_X = 5X_0 - \sum_{i=-5}^{-1} X_i \quad \text{mit } X = (K, B, H) \quad (4.3)$$

Quantitative Auswertung

Im Hyperparametertuning werden für beide beschriebenen Möglichkeiten KNN trainiert. Als Trainingsdaten werden, wie beim Vergleichs-KNN S9 der komplette EKA-Datensatz und der zum externen Validierungssatz Nummer neun gehörende KKK-Datensatz verwendet. Entsprechend werden die beiden KNN SK und P5 mit dem KNN S9 anhand der Vorhersagegenauigkeiten auf den üblichen Gesamtdatensätzen sowie dem externen Validierungsdatensatz VS9 verglichen. Die Ergebnisse der Auswertung finden sich in Tabelle 4.7.

KNN	zusätzliche Parameter	MAE [K]		
		EKA	KKK	VS9
SK	SK_K & SK_H & SK_B	4,2	6,1	13,0
P5	5 je Standardparameter	4,8	5,6	12,8
S9	keine	7,0	7,0	13,9

Tabelle 4.7.: Auswertung KNN mit Information stromauf

In jedem Fall verbessert sich die Vorhersagegenauigkeit gegenüber S9 um mindestens 0,9K. Im Rahmen von möglichen Trainingsabweichung sind SK und P5 bezogen auf den MAE ähnlich. Bemerkenswert ist, dass die stärkste Verbesserung

auf dem EKA-Datensatz stattfindet, obwohl bei diesem die durch die neuen Parameter zu berücksichtigenden Effekte keine Rolle spielen. Eine mögliche Erklärung ist, dass durch die Hinzugabe der Informationen der Querschnitte stromauf beim Lernen zwischen Datenpunkten unterschieden werden kann, die durch Trägheitseffekte beeinflusst wurden und solche die es nicht wurden. So können bei der Hinzugabe des KKK-Datensatzes, Datenpunkte identifiziert werden, die in Bezug auf den EKA-Datensatz fehlerfrei sind. Somit bieten diese eine neue hilfreiche Information, die die Vorhersagegenauigkeit steigert.

Qualitative Auswertung

Um neben der bisherigen quantitativen Auswertung auch eine qualitative Aussage bezüglich der Vorhersage der KNN zu erlangen, werden die Vorhersagen von P5, SK und S9 im Vergleich zur CFD-Simulation grafisch dargestellt. Dabei werden die vorhergesagten Heißgaswandtemperaturen über die Lauflänge des Kühlfluids in Kühlkanäle aus dem KKK-Datensatz aufgetragen. Besonders sollen so die Unterschiede zwischen den KNN an Geometriesprüngen bzw. nicht differenzierbaren Stellen im Geometrieverlauf untersucht werden.

Zur Untersuchung der Vorhersage an Sprungstellen bezüglich der Krümmung ist in Abbildung 4.7 neben den entsprechenden Heißgaswandtemperaturen auch die Krümmung sowie der daraus resultierende Sprungkennwert SK_K über die entsprechende Lauflänge für einen repräsentativen Kühlkanal dargestellt. In sprunghfreien Bereichen zeigen SK und P5 eine ähnlich gute Vorhersage wie S9. An allen drei Sprungstellen bei 0,05 m, 0,155 m und 0,21 m treffen SK und P5 ein erkennbar andere Vorhersage als S9. Dabei korrelieren die Vorhersage beider KNN erkennbar mit dem dargestellten Sprungkennwert. Schlägt dieser negativ aus sagen die KNN eine relativ höhere Heißgaswandtemperatur voraus. Umgekehrt sagen sie bei einem positiven Ausschlag eine relativ niedrigere Heißgaswandtemperatur voraus. An den beiden äußeren Sprungstellen oszillieren die Vorhersagen beider KNN entsprechend den Ausschlägen des Sprungkennwertes. Die Reaktion auf die Sprungstellen sind bei SK deutlich stärker als bei P5. Bei allen Sprüngen weichen die Vorhersagen von SK mit bis zu 30 K von der tatsächlichen Heißgaswandtemperatur ab. P5 zeigt an allen Sprungstellen eine bessere Vorhersage als SK und vor allem auch als S9. Die Oszillation der Vorhersage, welche mit der Oszillation des Sprungkennwertes

korreliert liegt an dem Verlauf der Krümmung an den Stellen 0,05 m und 0,21 m. Der in der Abbildung an diesen Stellen sichtbare Verlauf macht in Bezug auf einen realen Kühlkanal keinen Sinn. Daher wird geschlussfolgert, dass bei der Extraktion der Daten aus den CFD-Simulationen ein Fehler unterlaufen ist.

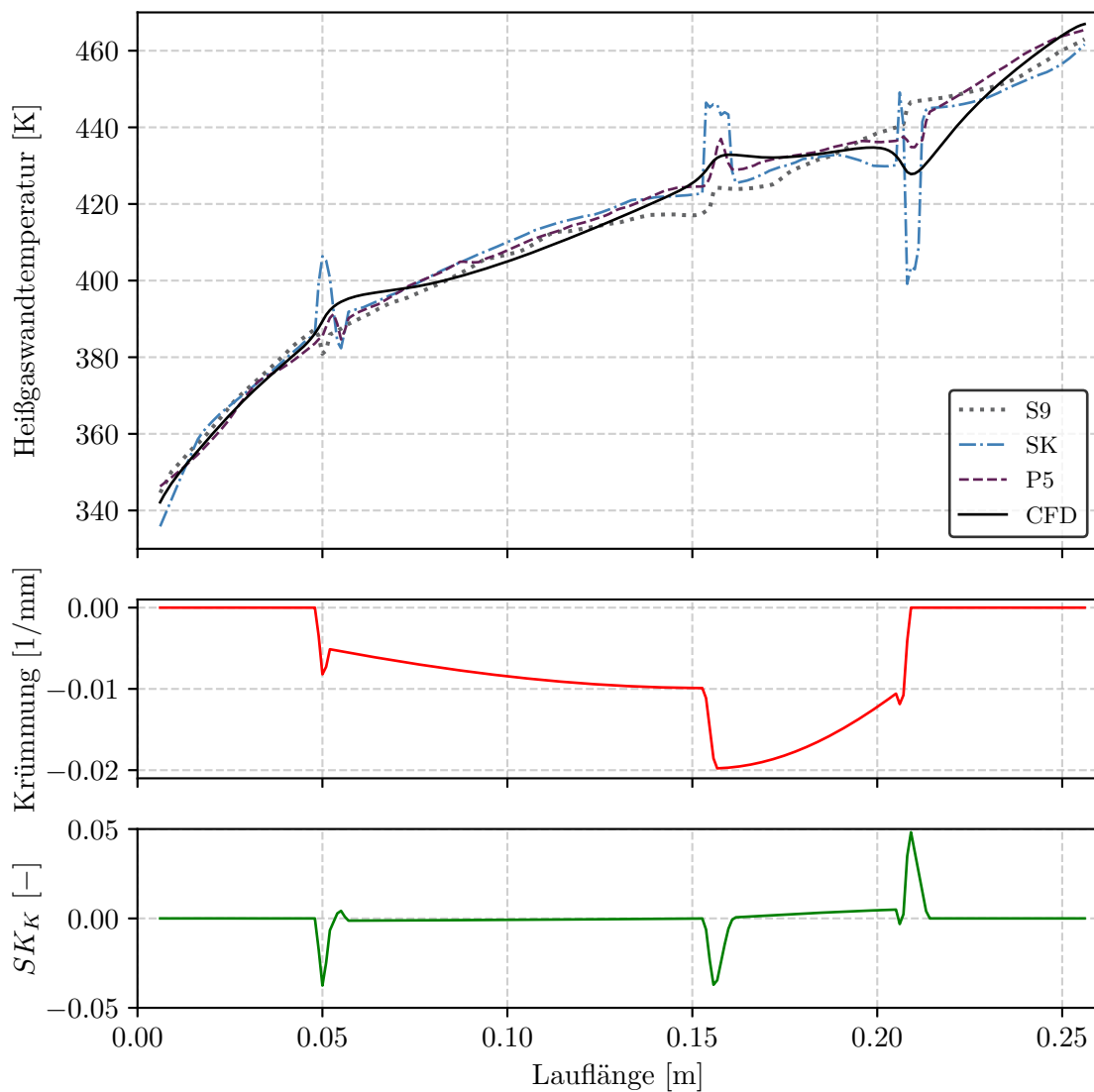


Abbildung 4.7.: Vergleich der Vorhersagen von SK und P5 mit S9 an Sprungstellen in der Krümmung

Die Vorhersagen der KNN werden an diesen kleineren Sprungstellen daher nicht weiter ausgewertet. Einzig ist anzumerken, dass P5 an diesen Stellen gegenüber

SK dennoch eine recht gute Vorhersage liefert, was für eine gute Robustheit der hier angewandten Methodik gegenüber Fehlern in den Daten spricht. Bei Missachtung der besagten Stellen korrigieren P5 und SK im Gegensatz zu S9 an allen Sprungstellen den Verlauf der Heißgaswandtemperatur in die richtige Richtung, also in Richtung des CFD-Verlaufs. Dabei korrigieren beide KNN nach einem Sprung über einen erkennbar zu kleinen, entsprechend der ausgewählten Anzahl an berücksichtigten Querschnitten, 10 mm großen Bereich. Dieser Bereich könnte und sollte entsprechend durch die Erhöhung der Anzahl an berücksichtigten Querschnitten stromauf eines Datenpunktes erhöht werden.

Am Verlauf der CFD-Heißgaswandtemperatur lässt sich besonders bei den beiden letzten Sprüngen erkennen, dass die Sprünge auch Einfluss auf die Heißgaswandtemperatur vor dem entsprechenden Querschnitt nehmen. Ein möglicher Grund ist die axiale Wärmeleitung in der Brennkammerwand oder auch im Fluid. Um diese Effekte mit zu berücksichtigen müsste den Datenpunkten auch Informationen über die Querschnitte stromab hinzugefügt werden. Die weniger präzisen Vorhersagen von SK an Sprungstellen sind damit zu erklären, dass diesem Modell nur Informationen über die Geometrie hinzugefügt wurden. Bei gleicher Geometrieänderung und entsprechend gleichem Krümmungs-Sprungkennwert, können stark unterschiedliche thermodynamischen Zustände stromauf vorliegen. Entsprechend kann sich die Stärke des Einflusses, der durch den Sprungkennwert auf die Änderung der Heißgaswandtemperatur hervorgerufen wird, stark unterscheiden. Das KNN SK kann somit nicht präzise lernen, wie stark sich die Heißgaswandtemperatur bei gleichen Sprungkennwerten mit unterschiedlichen thermodynamischen Zuständen stromauf verändert. P5 hingegen hat diese Information, wodurch es hier insgesamt die beste Vorhersage liefert.

Die Vorhersage der KNN an Sprungstellen bzw. nicht differenzierbaren Stellen im Verlauf der Höhe und der Breite wird anhand des in Abbildung 4.8 dargestellten Kanalabschnittes analysiert. Hier zeigt sich ebenfalls, dass P5 und SK in Bereichen konstanter Geometrie eine ähnlich gute Vorhersage wie S9 liefern. An den beiden nicht differenzierbaren Stellen im Verlauf der Höhe und Breite bei 0,14 m und 0,16 m sowie im Bereich dazwischen unterscheidet sich vor allem die Vorhersage von SK gegenüber den ähnlichen Vorhersagen von P5 und S9. An diesen Stellen zeigt die Vorhersage von P5 im Gegensatz zur vorangegangenen Betrachtung von Sprüngen bezüglich der Krümmung keine besondere Veränderung. Auffällig ist, dass P5 die

Heißgaswandtemperatur vor der ersten nicht differenzierbaren Stelle bezüglich des Verlaufes von Höhe und Breite in einem Bereich von 20 mm deutlich unterschätzt.

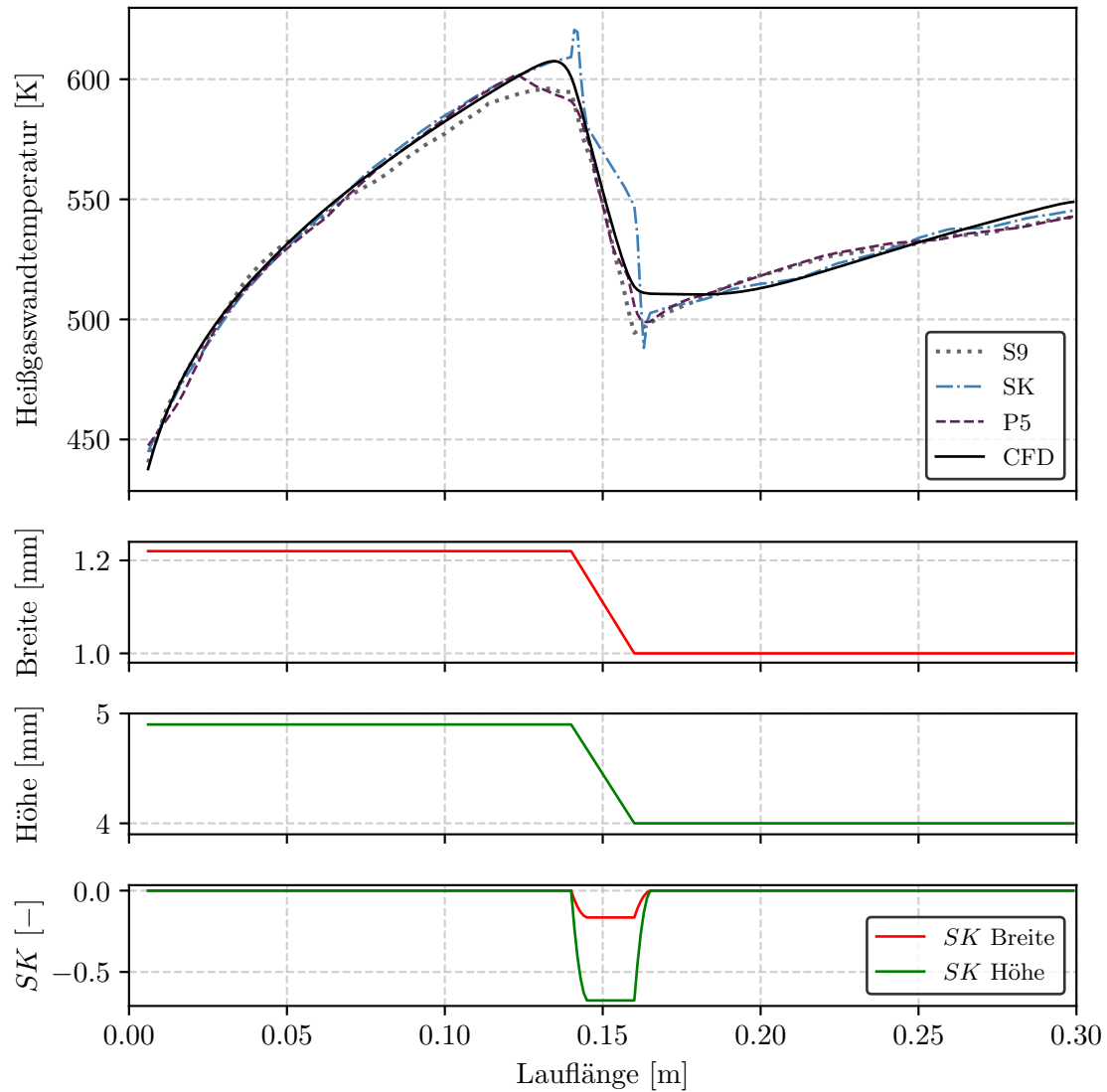


Abbildung 4.8.: Vergleich der Vorhersagen von SK und P5 mit S9 an Sprungstellen in der Höhe und Breite

Die Vorhersage von SK korreliert auch hier mit den Sprungkennwerten und zeigt aus den bereits erklärten Gründen an den nicht differenzierbaren Stellen größere Abweichungen. Anders als bisher, tritt jedoch hier kein klarer Sprung, sondern eher ein steiler Verlauf der Höhe und Breite hin zu einem kleineren Querschnitt

auf. Dies sorgt dafür, dass der Sprungkennwert ausschlägt, aber nicht direkt wieder abnimmt, sondern über die Länge der Abnahme des Querschnittes konstant bleibt.

Beim Training der KNN kann jedoch nicht identifiziert werden, ob es sich beim entsprechenden Sprungkennwert um einen klaren Sprung oder einen sich kontinuierlich verändernden Verlauf des Querschnittes handelt. Entsprechend führt dies, wie zwischen 0,14 m und 0,16 m zu sehen zu einer unpräzisen Vorhersage von SK. Der benannte auffällige Bereich in dem die Heißgaswandtemperatur durch P5 unterschätzt wird, ist durch das Auftreten von einem Totwassergebiet zu erklären. Da sich der Querschnitt nicht wie in Abbildung 2.5 vergrößert, sondern verkleinert, tritt das Totwassergebiet bei 0,14 m vor der Querschnittsänderung auf. Dies kann vom KNN nicht berücksichtigt werden, da auch hier die Information von Querschnitten stromab fehlen.

Insgesamt zeigt sich, dass SK bzw. das Benutzen von Sprungkennwerten als zusätzliche Parameter einige Problemstellen aufwirft, die eine präzise Vorhersage erschweren. Entsprechend werden in einer abschließenden Betrachtung nur P5 und S9 verglichen. Es soll gezeigt werden, dass die anhand der zwei grafisch ausgewerteten Kühlkanäle festgestellte verbesserte Vorhersagegenauigkeit von P5 gegenüber S9 für alle Daten des KKK-Datensatzes gerade in Bereichen um Sprungstellen herum gilt. Es wird für jeden Datenpunkt die Differenz zwischen den beiden absoluten Abweichungen der Vorhersagen beider KNN berechnet. Dabei wird die absolute Abweichung der Vorhersage von S9 von der von P5 abgezogen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.9 bezüglich der Sprungkennwerte für die Krümmung und die Kanalquerschnittsfläche dargestellt. Letzterer berechnet sich dabei als Addition von SK_B und SK_H . Ist die Differenz negativ, also bläulich gekennzeichnet, so ist die Vorhersage von P5 besser als die von S9.

Es ist zu erkennen, dass bis auf einige Ausreißer für absolut größere Sprungkennwerte die Vorhersage von P5 besser ist. Die Ausreißer sind über die bereits erklärten Schwachstellen von P5 erklärbar. Im Bereich des Ursprungs, also für kleine Sprünge ist die Vorhersage weniger gut und zum Teil schlechter als die von S9. Besonders für Sprünge bezüglich der Krümmung zeigt sich eine deutliche Verbesserung. Somit bestätigt diese Auswertung die anhand der grafisch betrachteten Kühlkanäle getroffenen bisherigen Ergebnisse.

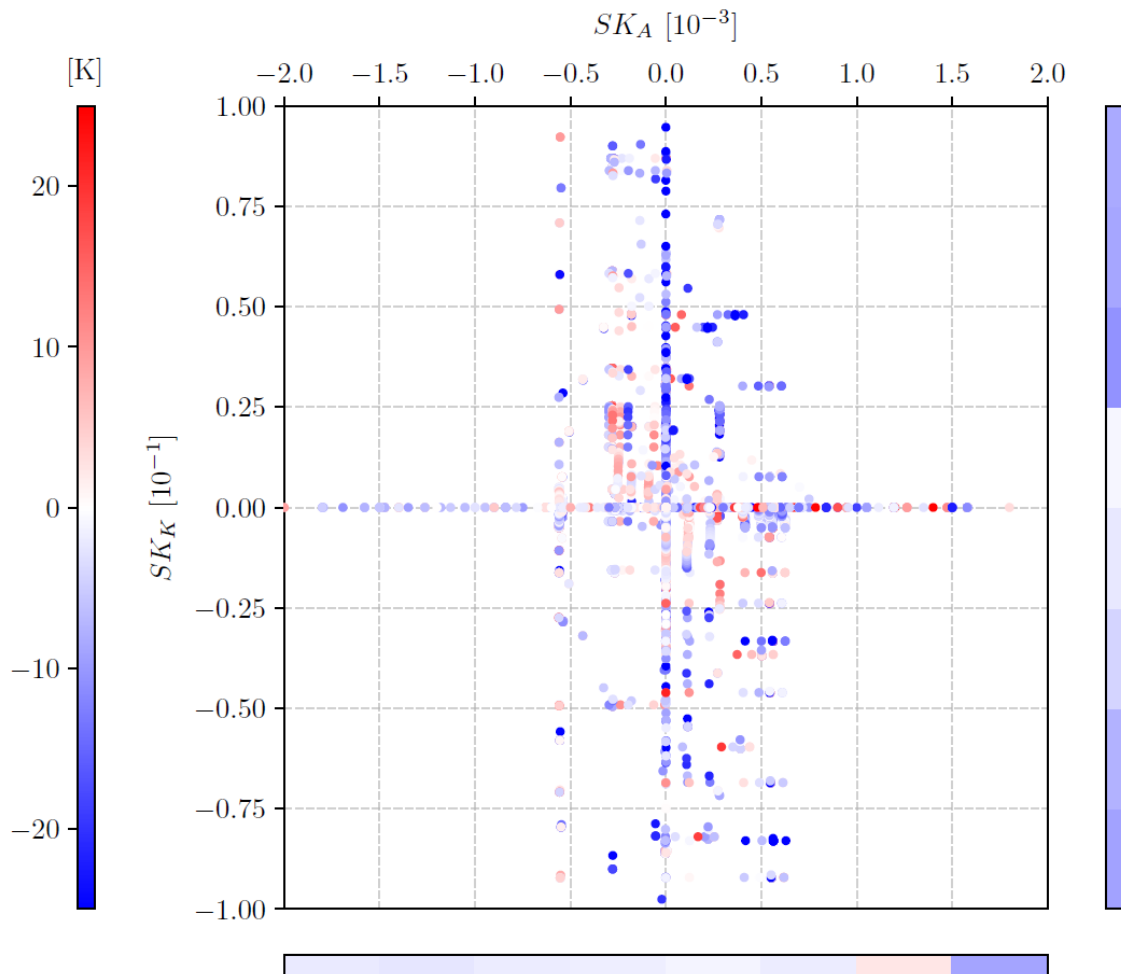


Abbildung 4.9.: Differenz zwischen absoluten Abweichung von P5 und S9. Über Teilbereiche gemittelten Differenzen rechts und unten

Insgesamt verbessert es die Vorhersage, wenn Informationen stromauf hinzugenommen werden. Dadurch können Trägheitseffekte, die insbesondere bei starken Geometrieänderungen auftreten, besser abgeschätzt werden. Weiterführend sollte die Anzahl der berücksichtigten Querschnitte stromauf, zur vollständigen Berücksichtigung der Einflüsse durch Trägheitseffekte, verdoppelt werden. Darüber hinaus ist es zur präzisen Vorhersage notwendig, auch Querschnitte stromab zu berücksichtigen. Hier sollte eine kleinere Anzahl an berücksichtigten Querschnitten ausreichen.

4.6. Validierung

Abschließend wird zur Validierung der durchgeführten Verbesserung der Methodik das bestmöglich trainierte KNN mit dem aus der Arbeit von JAKOBS vorliegenden KNN, im Folgenden als VG bezeichnet, verglichen. Das bestmögliche KNN wird im Hyperparametertuning mit den gleichen Eingabeparametern wie beim KNN P5 trainiert. Als Trainingsdaten werden alle zur Verfügung stehenden Daten aus dem EKA- und KKK-Datensatz verwendet. Es ergibt sich das im Folgenden AP5 genannte KNN, welches aus vier Schichten mit je 500 Neuronen besteht. Zum Vergleich der beiden KNN werden die Vorhersagen bezüglich der Heißgaswandtemperatur in Abbildung 4.10 aufgetragen. Es wird, wie schon in Abbildung 3.3, ein Kühlkanal des LUMEN-Triebwerks in einem spezifischen Betriebspunkt betrachtet, der so in den Trainingsdaten nicht vorkommt. Neben den Vorhersagen der Heißgaswandtemperaturen sind die Krümmung und die Höhe des Kühlkanals sowie die Kontur der Brennkammerwand über die z-Koordinate dargestellt. Die z-Koordinate hat ihren Ursprung an der Stelle des Düsenhalses, wird in Richtung des Heißgasausstoßes größer und in Richtung des Einspritzkopfes kleiner. Da das LUMEN-Triebwerk in Gegenstromkühlung ausgelegt ist und das Kühlfluid somit von der Düse Richtung Einspritzkopf strömt, ist die Lauflänge des Kühlfluids vor allem hinsichtlich der Krümmung und Höhe entgegengesetzt, also von rechts nach links, zu betrachten.

Das KNN VG hat auf dem abgebildeten Kühlkanal einen MAE von 25,5 K. AP5 erreicht mit einem MAE von 9,3 K eine deutlich höhere Vorhersagegenauigkeit. Gerade im Bereich des Düsenhalses, wo die exakte Vorhersage aufgrund der maximal erreichten Heißgaswandtemperatur am kritischsten ist, zeigt AP5 eine deutlich bessere Vorhersage als VG. In diesem Bereich treten Sprünge in der Krümmung und somit Trägheitseffekte auf, die durch AP5 aufgrund der im Training eingeflossenen zusätzlichen Informationen über die Querschnitte stromauf, berücksichtigt werden. Die hohe Vorhersagegenauigkeit von AP5 relativiert sich etwas durch die Tatsache, dass die hier untersuchte Kanalgeometrie auch in den Trainingsdaten vorkommt. Jedoch wird hier ein Lastpunkt betrachtet, der so von den Trainingsdaten nicht abgebildet wird. Somit lässt sich in Kombination mit den anderen in dieser Arbeit erbrachten Untersuchungen und Ergebnissen, dennoch eine deutliche Verbesserung identifizieren, die durch die Einbindung experimenteller Daten und die Berücksichtigung von Trägheitseffekten erreicht wurde.

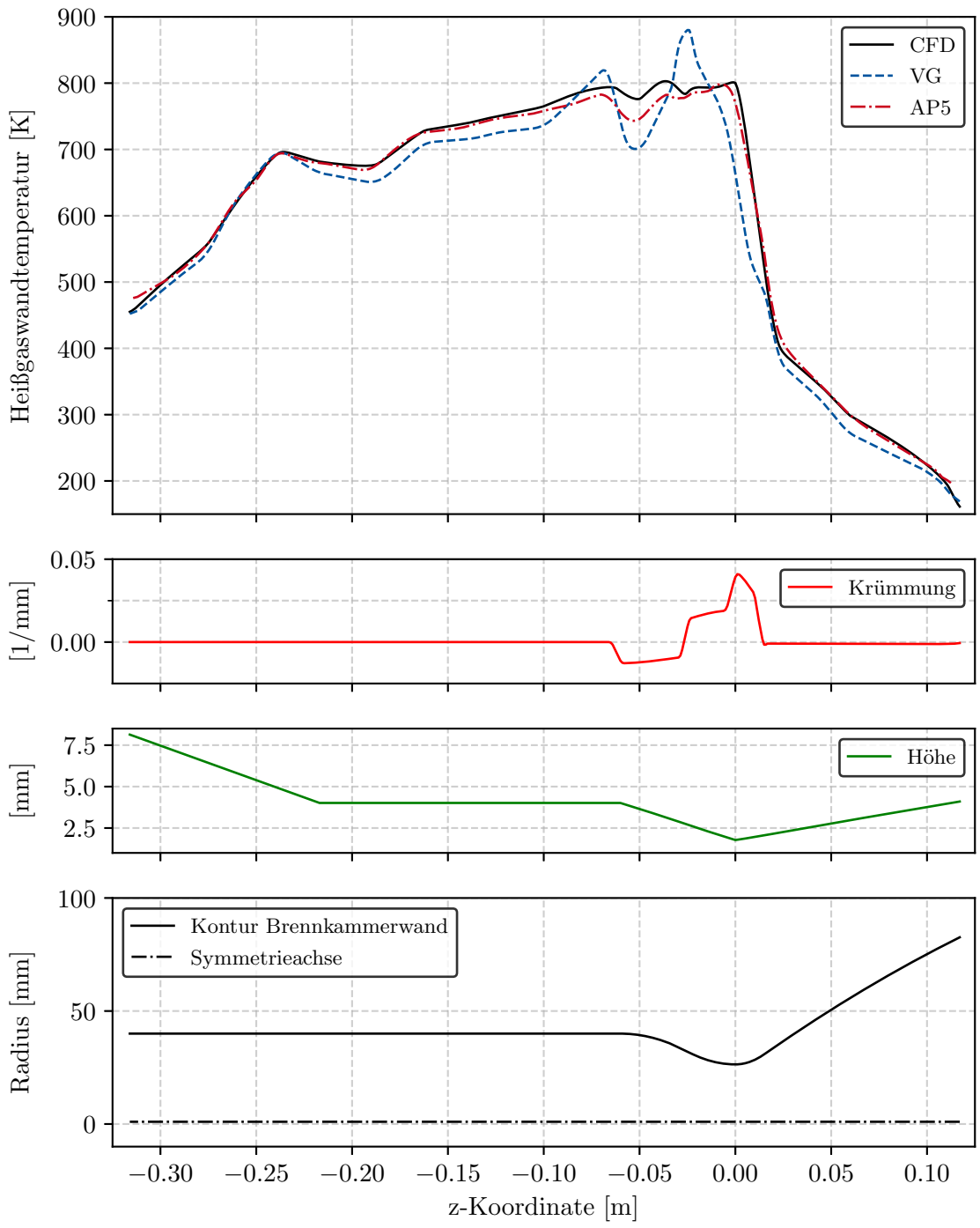


Abbildung 4.10.: Vergleich des verbesserten KNNs anhand LUMEN im Gegenstrom

5. Anwendung auf reales Triebwerk

In den vorangegangenen Kapiteln wurde mit abstrakten Datensätzen gearbeitet, bei denen die Kühlkanalgeometrie sowie der Lastpunkt frei gewählt wurden. Auch die Eingabeparameter wurden basierend auf einem abstrakten Problem gewählt. In diesem Kapitel soll die Anwendbarkeit der analysierten und verbesserten Methodik auf einen realen Anwendungsfall des Unternehmens ArianeGroup GmbH untersucht werden.

5.1. Motivation und Gültigkeitsbereich

Für eine strukturmechanische Lebensdaueranalyse zur Bestimmung der Anzahl an Zyklen bis zum Versagen der Brennkammer werden fünf Größen für jeweils definierte Stellen entlang der Brennkammerlänge benötigt: die Heißgaswandtemperatur, der statische Druck an der Heißgaswand, die durch das Heißgas aufgeprägte Wärmestromdichte und der statische Druck sowie die Bulk-Temperatur des Kühlfluids. Für die Berechnung stehen die Geometriedaten sowie der angelegte Lastpunkt zur Verfügung. Das trainierte KNN soll die fehlenden Größen für das VULCAIN2.1-Triebwerk bestimmen können. Dieses wird im Gasgenerator-Zyklus mit Gegenstromkühlung betrieben, wobei als Brennstoff bzw. auch als Kühlfluid Wasserstoff zum Einsatz kommt. Der Gültigkeitsbereich des KNN soll sich dabei nicht nur auf die standardmäßige Brennkammergeometrie begrenzen, sondern auch Variationen gegenüber den Standardwerten für Höhe und Breite des Kühlkanals, Rippenstärke, Wandstärke und Rauheit der Heißgaswand umfassen. Neben Variationen bezüglich der Geometrie soll die Vorhersage des KNN auch außerhalb des für VULCAIN2.1 validierten und angewendeten Lastbereiches hin zu kleineren Schubklassen gültig sein. Der angestrebte Gültigkeitsbereich mit den jeweiligen Variationsbereichen findet sich in Tabelle 5.1.

Parameter	min	max	Einheit
Geometrie - relativ zum Standard			
Höhe Kühlkanal	-50	50	[%]
Breite Kühlkanal	-10	100	[%]
Rippenstärke	-50	50	[%]
Wandstärke Heißgaswand	-50	50	[%]
Rauheit Heißgaswand	1	35	[Faktor]
Lastpunkt - absolute Werte			
Mischungsverhältnis	4	7,6	[-]
Druck Brennkammer	50	130	[bar]

Tabelle 5.1.: Angestrebter Gültigkeitsbereich des KNN

5.2. Datengenerierung

Zur Erzeugung von Daten für das Training des KNN werden Rechnungen mit RCFS-II (Regenerative Coolant Flow Simulation) [23], einer eindimensionale Berechnungsmethodik der ArianeGroup GmbH, durchgeführt. Die Kühlfluidströmung und der Heißgasstrom werden innerhalb dieser Methodik getrennt gerechnet und sind neben Bedingungen bezüglich des Wärmedurchgangs nur über die Kopplungsbedingung, Gleichung 5.1, verbunden. Diese setzt die Drücke vor und hinter dem Einspritzkopf in Beziehung. Sie sorgt dafür, dass der Druck des Kühlfluids $p_{out,KF}$ am Austritt des Kühlkanals in einem 10 bar großen Bereich liegt, der um einen dem Druckverlust im Einspritzkopf entsprechenden Faktor größer ist als der Druck $p_{in,HG}$ am Eintritt in die Brennkammer.

$$1,1p_{in,HG} < p_{out,KF} \leq 1,1p_{in,HG} + 10 \text{ bar} \quad (5.1)$$

Außerdem wird bei der Berechnung eines vorgegebenen Berechnungsfalls, bestehend aus Geometrie und Lastpunkt, der Eintrittsdruck des Kühlfluids iterativ bestimmt. Dabei wird die Rechnung mit einem fixen sehr hohem Eintrittsdruck von 380 bar gestartet und durchgerechnet. Konvergiert die Rechnung wird die gleiche Rechnung mit einem 5 bar geringem Eintrittsdruck wiederholt. Dies geschieht solange bis die Kopplungsbedingung nicht mehr erfüllt wird oder die Rechnung aus anderen Gründen nicht mehr konvergiert. Dann wird die letzte konvergierte Rechnung, also die

mit dem kleinsten Kühlfluideintrittsdruck, ausgewählt.

Wie unter 4.2.2 festgestellt, ergibt es Sinn bei der Erzeugung neuer Daten auf eine gute Verteilung bzw. Vielfalt zu achten, um ein optimales Training zu ermöglichen. Dies wird in diesem Fall durch ein LATIN-HYPERCUBE SAMPLING [22] der PYTHON PYDOE-Bibliothek umgesetzt. Dabei wird eine Datenmenge gefunden, bei der der minimale Abstand eines Datenpunktes zum nächsten Datenpunkt maximiert und der Korrelationsfaktor der Datenmenge minimiert wurde. Mithilfe dieser Methode werden 100 Lastpunkte und 100 Geometrien innerhalb der jeweilig definierten Variationsbereiche aus Tabelle 5.1 ausgewählt. Die ausgewählten Lastpunkte finden sich zusammen mit dem Anwendungsbereich des VULCAIN2.1-Triebwerks in Abbildung 5.1. Es ist anzumerken, dass für die Rechnung RCFS-II die Rippenstärke über die Gesamtanzahl an Kühlkanälen und die Rauheit der Heißgaswand über einen Korrekturfaktor implizit eingestellt werden.

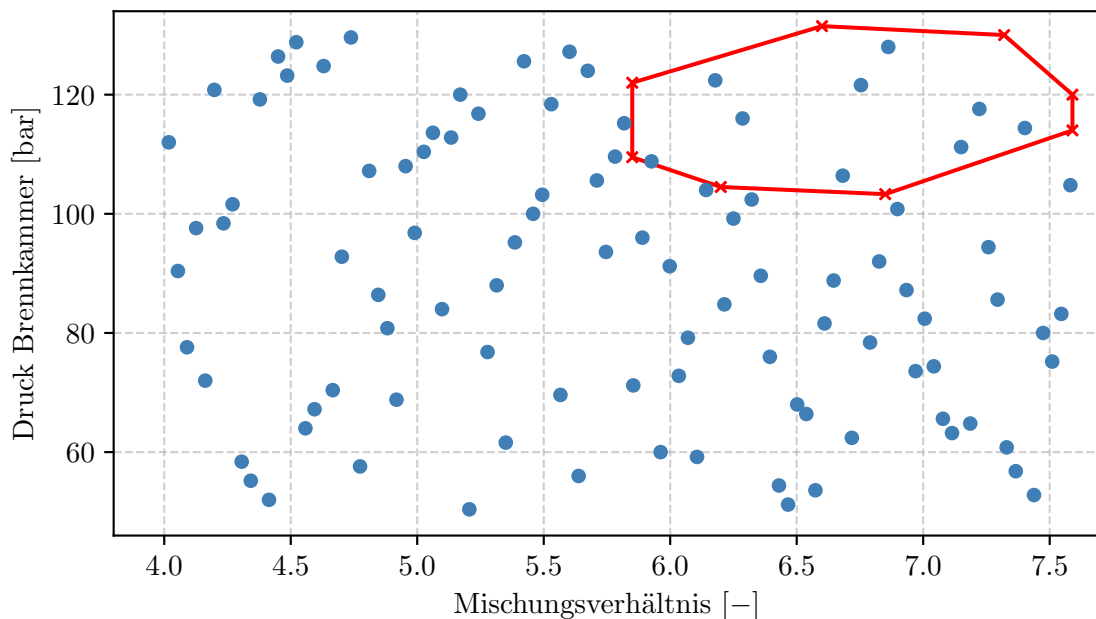


Abbildung 5.1.: Lastpunkte für die Datengenerierung (blau) und Anwendungsbereich des VULCAIN2.1-Triebwerks (rot)

Durch die Kombination der Geometrien mit den jeweils möglichen Lastpunkten ergeben sich insgesamt 10 000 Fälle die in RCFS-II gerechnet werden können. Bei der Durchführung der RCFS-II-Rechnungen konvergieren circa 10 % der

Berechnungsfälle nicht. Grund hierfür sind die vorgenommenen Variationen bezüglich der Standardwerte für Geometrie und Lastpunkt. Beispielsweise können kleine Kühlkanalquerschnittsflächen einen hohen Druckabfall über den Kühlkanal hinweg bewirken, was in Kombination mit einem hohen zu erreichenden Druck in der Brennkammer dafür sorgt, dass keine Lösung gefunden wird. Insgesamt bleiben rund 9000 nutzbare Datensätze, die alle 2 mm ausgewertet werden, sodass eine Gesamtdatenmenge von 3,15 Millionen Datenpunkten zur Verfügung steht.

5.3. Training und Auswertung des KNN

Für das Training des KNN werden 5 % der zur Verfügung stehenden Datensätze als Validierung genutzt. Der Rest der Daten wird für das Training verwendet. Als Eingabeparameter werden die axiale Position des betrachteten Querschnitts, der Brennkammerinnenradius, die Höhe sowie Breite des Kühlkanals, die Wandstärke sowie die Oberflächenrauheit der Heißgaswand, die Gesamtanzahl an Kühlkanälen und der Lastpunkt, also der Totaldruck am Brennkammerhals und das Mischungsverhältnis benutzt. Das beste KNN wird im Hyperparametertuning gefunden und besteht aus 4 Schichten mit je 400 Neuronen. Die Auswertung dieses KNN anhand der Validierungsdaten findet sich in Tabelle 5.2.

Parameter	MAE	std	Einheit
Heißgaswandtemperatur	1,7	1,7	[K]
Kühlfluidtemperatur	0,5	0,4	[K]
Druck Heißgaswand	0,3	0,3	[bar]
Druck Kühlfluid	2,1	1,6	[bar]
Wärmestromdichte	0,4	0,3	[MW m ⁻²]

Tabelle 5.2.: Auswertung KNN auf den gesamten Validierungsdaten

Unter Berücksichtigung der Größenordnungen in den sich die jeweiligen Parameter bewegen zeigen sich für alle fünf zu bestimmenden Parameter geringe Fehler. In Kombination mit der grafischen Auswertung eines einzelnen Kühlkanals des Validierungsdatensatzes in Abbildung 5.2 lässt sich die Vorhersage des KNN insgesamt als sehr gut bezeichnen.

5. Anwendung auf reales Triebwerk

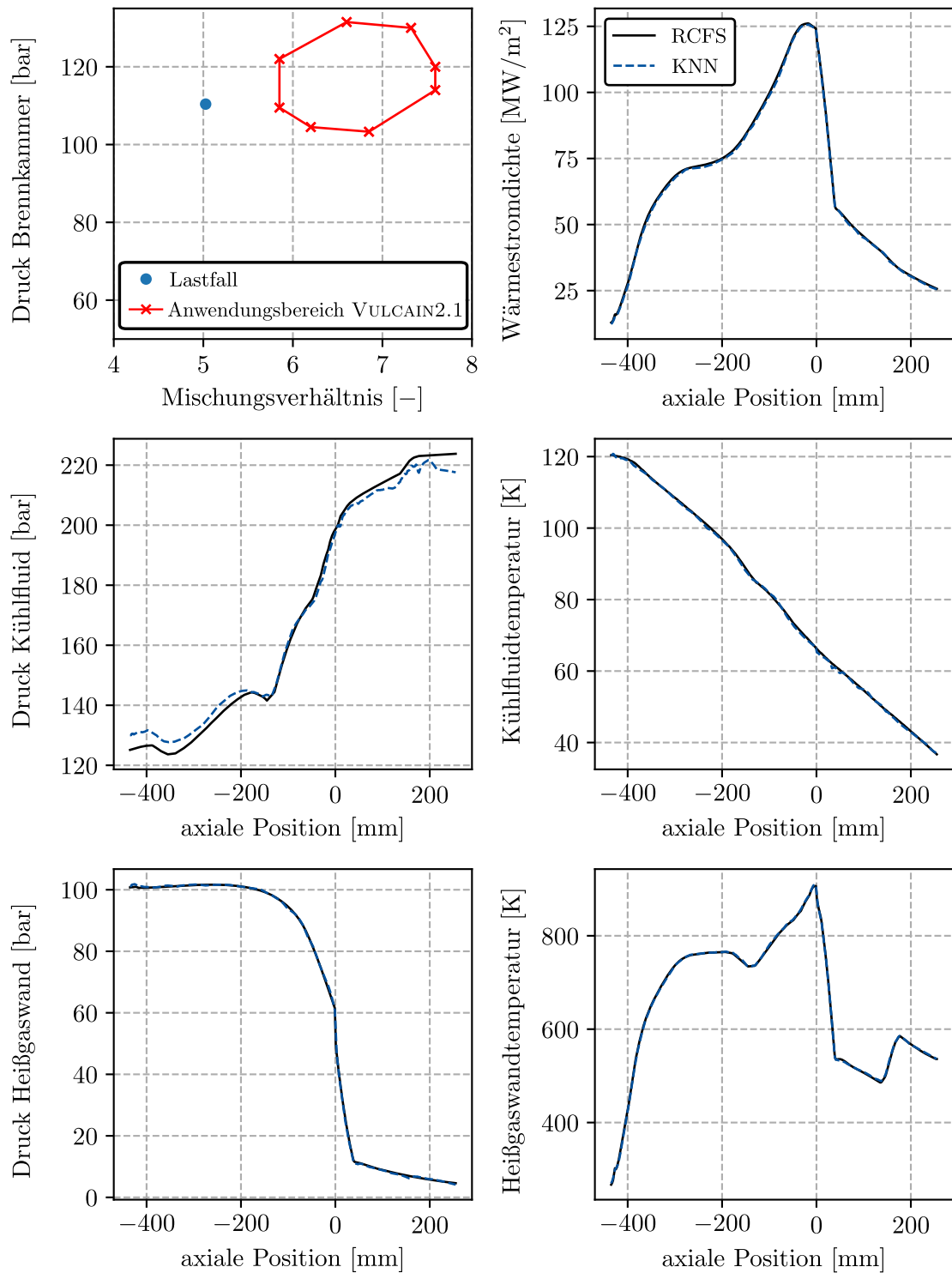


Abbildung 5.2.: Auswertung des KNNs anhand eines Kühlkanals des Validierungsdatensatzes

Einen Überblick über die Verteilung der Fehler auf den fünf unterschiedlichen Parametern für alle zur Verfügung stehenden Daten gibt Abbildung 5.3. Es zeigt sich eine gleichmäßige Verteilung der Fehler über den Lastbereich, was für gutes Training spricht. Hier, wie auch in Abbildung 5.2, fällt auf, dass die Vorhersage des KNN bezüglich des Kühlfluiddrucks etwas schlechter ist, als bei den übrigen Parametern. Erklären lässt sich diese Abweichung durch die Art der Datengenerierung mit RCFS-II. Die iterative Bestimmung des geringsten Kühlfluideintrittsdrucks in 5 bar-Schritten führt zu einer vergleichsweise unpräzisen Abbildung dieses Druckes in den Daten. Da der Kühlfluiddruck im restlichen Kanal stark vom Eintrittsdruck abhängt beeinflusst diese Ungenauigkeit die Vorhersage des KNN bezüglich des Kühlfluiddrucks stärker als bei den anderen Parametern. Darüber hinaus sorgt auch die Größe des Gültigkeitsbereiches der Kopplungsbedingung für eine Ungenauigkeit in den Daten. Unter Beachtung dieser mangelnden Präzision der Daten bezüglich des Kühlfluiddrucks, ist die Vorhersage des KNNs dennoch bemerkenswert genau.

Um herauszufinden, wie groß der Einfluss der Fehler des KNN auf die Lebensdaueranalyse ist, werden zunächst für die Standardgeometrie und den Referenzlastpunkt des VULCAIN2.1-Triebwerks die fünf für die Lebensdaueranalyse nötigen Parameter mithilfe des KNN berechnet. Anschließend wird basierend auf den errechneten Parametern eine Lebensdaueranalyse durchgeführt. Zudem werden für jeden der fünf Parameter zwei weitere Lebensdaueranalysen mit manipulierten Werten durchgeführt. Einmal wird die maximale Abweichung, bestehend aus der Addition der jeweiligen Werten für MAE und Standardabweichung aus Tabelle 5.2, vom Standardwert subtrahiert und einmal addiert. Bei der Auswertung zeigen sich für alle Parameter keine wesentlichen Unterschiede bezüglich der berechneten Anzahl an Zyklen bis zum Versagen. Es kann auf eine geringe Sensitivität der Lebensdaueranalyse auf die vorhandenen Fehler des KNN geschlossen werden.

Demnach kann das trainierte KNN benutzt werden, um die fehlenden Größen für die strukturmechanische Lebensdaueranalyse zu bestimmen. Dabei ist die Vorhersage über den gesamten Gültigkeitsbereich, wie nachgewiesen, gleichmäßig und für die Lebensdaueranalyse valide. Eine beispielhafte Auswertung von 26 Berechnungsfällen aus dem Validierungsdatensatz findet sich im Anhang A.3.

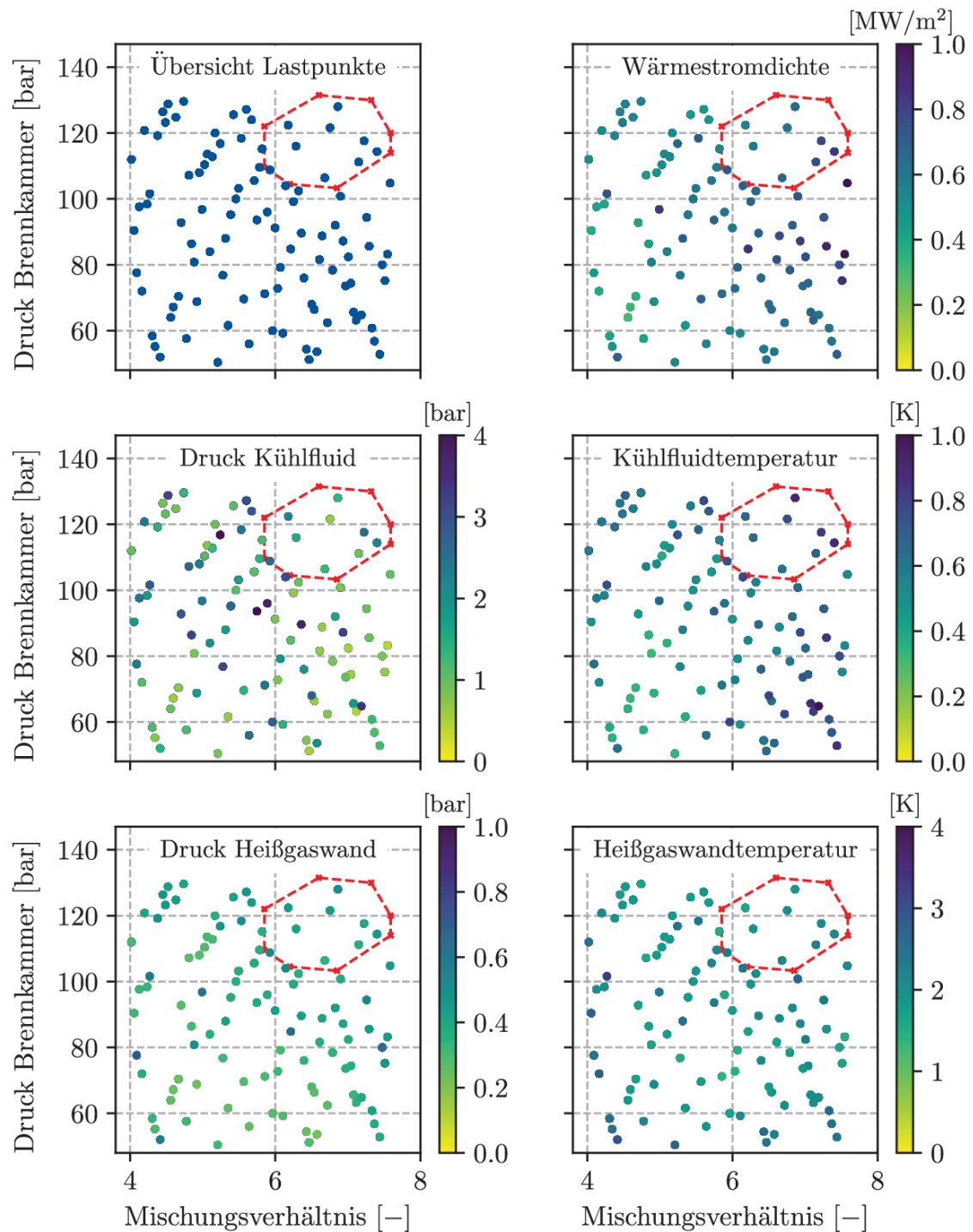


Abbildung 5.3.: Auswertung des KNNs anhand des jeweiligen MAE der Datensätze

6. Zusammenfassung und Ausblick

Aus wirtschaftlichen Gründen und den spezifischen thermodynamischen Eigenschaften gewinnt Methan als Brennstoff für Raketentriebwerke zunehmend an Bedeutung. Aufgrund der komplexeren Stoffeigenschaften von Methan, ist die Modellierung des Wärmeübergangs in regenerativ gekühlten Brennkammern aber deutlich aufwändiger. Gegenüber herkömmlichen Berechnungsmethodiken bieten künstliche neuronale Netzwerke (KNN) hier eine Möglichkeit zur schnellen und dennoch präzisen Modellierung.

In der vorliegenden Arbeit wurden KNN und die dazu gehörige Methodik zur Vorhersage der Heißgaswandtemperatur in regenerativ gekühlten Raketenbrennkammern angewendet, analysiert und optimiert. Zugrunde lagen Daten aus CFD-Simulationen des Wärmeübergangs verschiedener Methan-durchströmter Kühlkanäle. Zunächst wurden die für das Training des KNN benutzten Daten einer Datenanalyse unterzogen. Dabei wurde festgestellt, dass eine ungleichmäßige Verteilung der Daten über die untersuchten Parameter vorliegt. Dies ist hinsichtlich der Vorhersagegenauigkeit ungünstig. Zur Kompensation dieser ungleichmäßigen Datenverteilung wurde eine Gewichtung der Trainingsdaten basierend auf einem Clusterverfahren vorgenommen. Dadurch konnte allerdings keine Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit festgestellt werden. Es wurde geschlussfolgert, dass schon bei der Generierung der Daten auf eine gleichmäßige Verteilung geachtet werden muss.

Im Weiteren wurde der Einsatz der REYNOLDS-Zahl sowie der isobaren spezifischen Wärmekapazität als zusätzliche Eingabeparameter untersucht. Durch die Hinzugabe der Informationen der beiden Parameter konnte erwartungsgemäß für einfache Kühlkanalgeometrien eine Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit festgestellt werden. Dagegen ergab sich für komplexere Kühlkanalgeometrien eine Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit, da die beiden über den Massenstrom gemittelten Größen die vorliegende dreidimensional ausgeprägte Strömung vereinfacht und somit nicht präzise abbilden.

Anschließend wurde der Einfluss der Datenmenge auf die Vorhersagegenauigkeit analysiert. Es zeigte sich, dass sich mit wachsender Datenmenge die Vorhersagegenauigkeit verbessert, wobei allerdings mit zunehmender Datenmenge die Verbesserung abnimmt. Gleichzeitig erfordert eine größere Datenmenge auch mehr Netzwerkvariablen. Zur Optimierung der Trainingszeit eines KNN sollte die Netzwerkarchitektur auf die gewünschten Vorhersagegenauigkeit abgestimmt werden.

Zur Steigerung der Vorhersagegenauigkeit wurde die Einbindung experimenteller Daten in das Training eines KNN untersucht. Trotz der von diesen Daten zusätzlich abgebildeten physikalischen Effekte, konnte die Vorhersagegenauigkeit gesteigert werden. Bemerkenswert ist zudem, dass die eingebundenen experimentellen Daten nur einen geringen Anteil der gesamten Trainingsdatenmenge ausmachten. Weiterführend konnte durch die Einbindung der experimentellen Daten auch die Berücksichtigung von Trägheitseffekten durch das KNN untersucht werden. Trägheitseffekte wurden hierbei über die Hinzugabe von Informationen über die Zustände der Querschnitte bis 10 mm stromauf berücksichtigt. Dadurch wurde eine erhöhte Vorhersagegenauigkeit erreicht. Weiterhin deutete sich an, dass eine Verdopplung der betrachteten Kanallänge stromauf sowie die Hinzugabe von Informationen über die Querschnitte stromab die Vorhersage verbessern können.

Abschließend wurde das verbesserte KNN mit dem vor dieser Arbeit vorliegenden KNN verglichen. Insgesamt zeigt sich eine mehr als doppelt so hohe Vorhersagegenauigkeit. Weiterführend sollte das verbesserte KNN zur weiteren Validierung anhand verschiedenen Geometrien und Betriebspunkten ausgewertet und mit Daten aus neuen CFD-Rechnungen verglichen werden.

Ergänzend die in dieser Arbeit analysierte und verbesserte Methodik wurde im letzten Schritt an einem realen Anwendungsfall der ArianeGroup GmbH getestet. Für alle fünf hier zu bestimmenden thermodynamische Parameter wurde eine sehr gute Vorhersagegenauigkeit erreicht. Die Heißgaswandtemperatur konnte beispielsweise mit einem MAE von 1,7 K bestimmt werden. Aufbauend auf diese Ergebnisse sollten weitere, komplexere Daten aus beispielsweise CFD-Rechnungen oder Experimenten in das Training eingebunden werden. Je nach Anwendungsbreite sollten die Eingabeparameter dann angepasst bzw. erweitert werden, um die Daten aus den verschiedenen Quellen sinnvoll gemeinsam verwenden zu können.

Das Potential von neuronalen Netzwerken bzw. des maschinellen Lernens ist groß. Wie WAXENEGGER ET AL. [32] zeigt, gibt es neben den in dieser Arbeit be-

handelten Anwendungen eine Vielzahl an Anwendungsmöglichkeiten bei der Entwicklung von Raketenantrieben. Die vorliegende Arbeit zeigt, dass künstliche neuronale Netzwerke ein effektives Werkzeug zur Nutzbarmachung von Daten aus unterschiedlichsten Quellen sind. Dieses Potential sollte genutzt werden, um Informationen aus vorhandene Daten, wie zum Beispiel aus Experimenten und Auslegungsrechnungen realer Triebwerke, zu erschließen.

Literaturverzeichnis

- [1] Haseeb Ali, Mohd Najib Mohd Salleh, Kashif Hussain, Arshad Ahmad, Ayaz Ullah, Arshad Muhammad, Rashid Naseem, and Muzammil Khan. A review on data preprocessing methods for class imbalance problem. *International Journal of Engineering*, 2019. doi:10.14419/ijet.v8i3.29508.
- [2] Ansgar Bachmann. *Numerische Simulation Der Strömung Und Verbrennung in Einem Green Propellant Raketentriebwerk*. Bachelor thesis, Technische Universität Kaiserslautern, 2021.
- [3] Julien Brajard, Alberto Carassi, Marc Bocquet, and Laurent Bertino. Combining data assimilation and machine learning to emulate a dynamical model from sparse and noisy observations: A case study with the Lorenz 96 model. 2020. arXiv:2001.01520, doi:10.1016/j.jocs.2020.101171.
- [4] Jan Deeken and Günther Waxenegger-Wilfing. LUMEN: Engine cycle analysis of an expander-bleed demonstrator engine for test bench operation. In *Deutscher Luft- Und Raumfahrtkongress 2016*, 2016.
- [5] Jan Deeken, Günther Waxenegger-Wilfing, Michael Oswald, and Stefan Schlechtriem. Lumen Demonstrator – Project Overview. In *Space Propulsion 2020+1*, 2021.
- [6] Kai Dresia. *Prediction of Heat Transfer in Methane for Liquid Rocket Engines Using Artificial Neural Networks*. Master thesis, RWTH Aachen, 2018.
- [7] Kai Dresia, Günther Waxenegger-Wilfing, Robson Dos Santos Hahn, Jan Deeken, and Michael Oswald. Nonlinear Control of an Expander-Bleed Rocket Engine using Reinforcement Learning. In *Space Propulsion 2020+1*, 2021.

- [8] Kai Dresia, Günther Waxenegger-Wilfing, Joerg Riccius, Jan Deeken, and M. Oswald. Numerically Efficient Fatigue Life Prediction of Rocket Combustion Chambers using Artificial Neural Networks. In *8th European Conference for Aeronautics and Space Sciences EUCASS*, 2019. doi:10.13009/EUCASS2019-264.
- [9] Martin Ester, Hans-Peter Kriegel, Xiaowei Xu, and Jörg Sander. A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise. 1996. doi:10.5555/3001460.3001507.
- [10] Gabriele Frank. *Reaktive Kühlfilme Und Flamme- Wand-Interaktionen in Raketebrennkammern*. PhD thesis, Universität der Bundeswehr München, 2017.
- [11] Alan J. Geer. Learning earth system models from observations: Machine learning or data assimilation? *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2020. doi:10.1098/rsta.2020.0089.
- [12] Jan Haemisch. *Wärmeübergang von Wasserstoff Und Methan in Kühlkanälen Regenerativ Gekühlter Schubkammern Kryogener Raketentriebwerke*. PhD thesis, RWTH Aachen, 2020.
- [13] Jan Haemisch, Dmitry Suslov, and Michael Oswald. Experimental and Numerical Investigation of Heat Transfer Processes in Rocket Engine Cooling Channels Operated with Cryogenic Hydrogen and Methane at Supercritical Conditions. *Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Aerospace Technology Japan*, 19(1):96–105, 2019. doi:10.2322/tastj.19.96.
- [14] Jan Haemisch, Dmitry Suslov, Günther Waxenegger-Wilfing, Kai Dresia, and Michael Oswald. LUMEN – Design of the regenerative cooling system for an expander bleed cycle engine using methane. In *7th International Space Propulsion Conference*, 2021.
- [15] Oskar J. Haidn. *Advanced Rocket Engines*, 2007.

- [16] Haibo He and Edwardo A. Garcia. Learning from Imbalanced Data. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 21(9):1263–1284, 2009. doi:10.1109/TKDE.2008.239.
- [17] Felix Hötte, Christoph v. Sethe, Torben Fiedler, Matthias C. Haupt, Oskar J. Haidn, and Michael Rohdenburg. Experimental lifetime study of regeneratively cooled rocket chamber walls. *International Journal of Fatigue*, 138, September 2020. doi:10.1016/j.ijfatigue.2020.105649.
- [18] Lukas Jakobs. *Modellierung Des Wärmeübergangs in Regenerativ Gekühlten Raketebrennkammern Mittels Nusselt-Korrelation*. Bachelor thesis, RWTH Aachen, 2019.
- [19] Lukas Jakobs. *Validierung Eines Neuronalen Netzes Zur Wärmeübergangsvorhersage in Kühlkanälen Anhand Realistischer Brennkammeranordnungen Unter Berücksichtigung von Krümmungseffekten Und Variablen Rippenstärken*. Master thesis, RWTH Aachen, 2020.
- [20] Detlef Kuhl, Jorg Riccius, and Oskar J. Haidn. Thermomechanical Analysis and Optimization of Cryogenic Liquid Rocket Engines. *Journal of Propulsion and Power*, 18(4):835–846, 2002. doi:10.2514/2.6007.
- [21] Kelvin Loh, Pejman Shoeibi Omrani, and Ruud van der Linden. Deep Learning and Data Assimilation for Real-Time Production Prediction in Natural Gas Wells. 2018. arXiv:1802.05141.
- [22] Wei-Liem Loh. On Latin Hypercube Sampling. *The Annals of Statistics*, 24(5):2058–2080, 1996. doi:10.1214/aos/1069362310.
- [23] Chris Maeding, Dietmar Wiedmann, Katharina Quering, and Oliver Knab. Improved heat transfer prediction engineering capabilities for rocket thrust chamber layout. In *Progress in Propulsion Physics*, volume 2, pages 239–250, Versailles, France, 2011. EDP Sciences. doi:10.1051/eucass/201102239.
- [24] Alexander Miranda and Mohammad Naraghi. Analysis of Film Cooling and Heat Transfer in Rocket Thrust Chamber and Nozzle. In *49th AIAA*

- Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2011. doi:10.2514/6.2011-712.
- [25] K Mumtaz and K Duraiswamy. An Analysis on Density Based Clustering of Multi Dimensional Spatial Data. *Indian Journal of Computer Science and Engineering*, 2010.
- [26] Francesco Nasuti and Marco Pizzarelli. Pseudo-boiling and heat transfer deterioration while heating supercritical liquid rocket engine propellants. *The Journal of Supercritical Fluids*, 168, 2020. doi:10.1016/j.supflu.2020.105066.
- [27] Marco Pizzarelli, Francesco Nasuti, and Marcello Onofri. CFD Analysis of Curved Cooling Channel Flow and Heat Transfer in Rocket Engines. *46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2010. doi:10.2514/6.2010-6722.
- [28] Marco Pizzarelli, Francesco Nasuti, Marcello Onofri, Pietro Roncioni, Raffaele Votta, and Francesco Battista. Heat transfer modeling for supercritical methane flowing in rocket engine cooling channels. *Applied Thermal Engineering*, 75:600–607, 2015. doi:10.1016/j.applthermaleng.2014.10.008.
- [29] Erich Schubert, Jörg Sander, Martin Ester, Hans Peter Kriegel, and Xiaowei Xu. DBSCAN Revisited, Revisited: Why and How You Should (Still) Use DBSCAN. *ACM Transactions on Database Systems*, 42(3):1–21, 2017. doi:10.1145/3068335.
- [30] Sebastian Schulze. *Modellierung Der Heißgasströmung in Einer Raketenbrennkammer Hinsichtlich Des Wandwärmestromverlaufs*. Master thesis, Ruhr Universität Bochum, 2019.
- [31] Raffaele Votta, Francesco Battista, Vito Salvatore, Marco Pizzarelli, Giuseppe Leccese, Francesco Nasuti, and Scott Meyer. Experimental investigation of transcritical methane flow in rocket engine cooling channel. *Applied Thermal Engineering*, 101:61–70, 2016. doi:10.1016/j.applthermaleng.2015.12.019.

- [32] Günther Waxenegger-Wilfing, Kai Dresia, Jan Deeken, and M. Oswald. Machine Learning Methods for the Design and Operation of Liquid Rocket Engines - Research Activities at the DLR Institute of Space Propulsion. In *Space Propulsion Conference*, 2021.
- [33] Günther Waxenegger-Wilfing, Kai Dresia, Jan Deeken, and Michael Oswald. Heat Transfer Prediction for Methane in Regenerative Cooling Channels with Neural Networks. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(2):347–357, 2020. doi:10.2514/1.T5865.
- [34] Werner Wergen. Datenassimilation – ein Überblick. *Promet*, 27(3):142–149, 2002.

A. Anhang

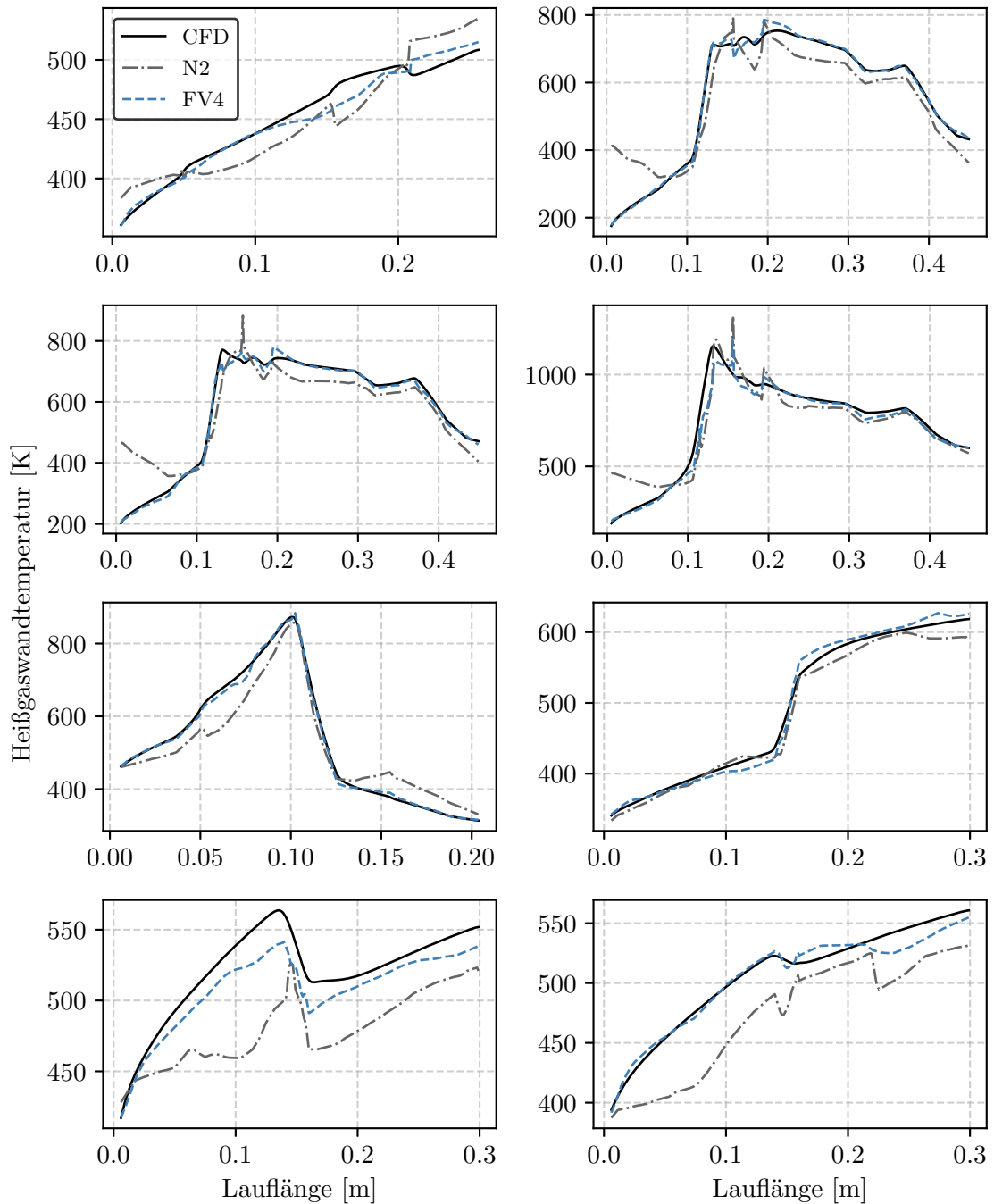
A.1. Parameterbereiche der verwendeten Daten

Parameter		KKK-Datensatz	EKA-Datensatz	Einheit
Datenpunkte	Anzahl	43 828	3 817 468	[-]
Aspektverhältnis	min	1,39	1,00	[-]
	1 %	1,94	1,00	
	mean	4,19	4,40	
	std	1,27	3,01	
	99 %	7,84	9,79	
	max	11,43	9,79	
Druck	min	50	47	[bar]
	1 %	67	54	
	mean	103	142	
	std	37	59	
	99 %	249	314	
	max	532	350	
Enthalpie	min	40	1	[J kg ⁻¹]
	1 %	47	57	
	mean	343	628	
	std	258	380	
	99 %	1215	1708	
	max	1480	3118	
Krümmung	min	-0,04	-0,04	[mm ⁻¹]
	1 %	-0,02	-0,03	
	mean	0,00	0,00	
	std	0,01	0,01	
	99 %	0,03	0,03	
	max	0,04	0,04	
Massenstromdichte	min	2458	2017	[kg m ⁻² s ⁻¹]
	1 %	4111	3028	
	mean	11526	18534	
	std	6075	9138	
	99 %	36925	45000	
	max	50328	151439	
Querschnittsfläche	min	1,00	1,00	[mm ²]
	1 %	1,94	1,00	
	mean	4,24	5,87	
	std	1,39	3,07	
	99 %	9,02	10,06	
	max	19,73	10,06	

A.1. Parameterbereiche der verwendeten Daten

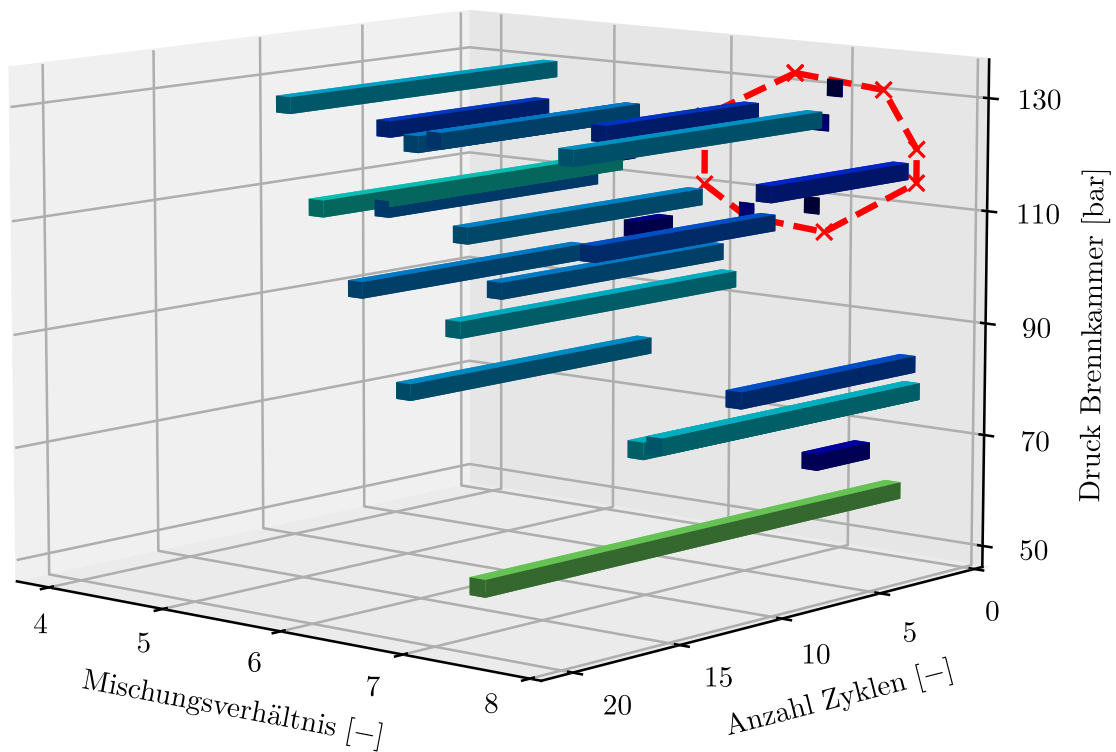
Parameter		KKK-Datensatz	EKA-Datensatz	Einheit
Rauheit	min	2,5	0,2	[μm]
	1 %	2,5	0,2	
	mean	5,1	7,2	
	std	1,2	5,6	
	99 %	15,0	19,9	
	max	15,0	20,2	
Rippenstärke	min	0,59	0,75	[mm]
	1 %	0,78	0,75	
	mean	1,67	1,13	
	std	0,77	0,46	
	99 %	4,66	3,50	
	max	5,26	3,50	
Wärmestromdichte	min	0,04	3,01	[MW m ⁻²]
	1 %	2,43	6,33	
	mean	26,45	41,36	
	std	12,98	25,01	
	99 %	69,52	81,86	
	max	102,40	84,99	
Wandstärke	min	0,70	0,80	[mm]
	1 %	1,00	0,80	
	mean	1,00	1,00	
	std	0,01	0,10	
	99 %	1,00	1,20	
	max	1,59	1,20	
Reynoldszahl	min	19 688	29 626	[-]
	1 %	78 033	136 441	
	mean	535 677	1 538 107	
	std	370 940	1 160 216	
	99 %	1 645 997	5 302 377	
	max	2 177 023	9 427 691	
isobare spezifische Wärmekapazität	min	2556	2562	[J/kgK]
	1 %	2734	2750	
	mean	4234	4004	
	std	1245	1329	
	99 %	8400	9578	
	max	12 692	58 628	
Heißgaswandtemperatur	min	121	145	[K]
	1 %	171	230	
	mean	536	716	
	std	170	298	
	99 %	972	1487	
	max	1163	1965	

A.2. Auswertung KNN FV4



Vergleich der Vorhersage von FV4 mit N2 anhand von Kühlkanälen aus dem Validierungssatz 4

A.3. Lebensdauerrechnung mit vom KNN berechneten Eingabegrößen



Ergebnisse beispielhafter Lebensdauerberechnung für 26 Berechnungsfälle des Validierungsdatensatzes mit unterschiedlichen Geometrien und Lastpunkten. Die Balkenfarbe verdeutlicht die Anzahl an Zyklen bis zum Versagen.