

Stellentyp: Projekt-/Bachelor-/Masterarbeit

Ausschreibungsdatum: ab 04.05.2020

## Numerische Stabilität in molekularer Thermodynamik

### Unser Profil:

In der Forschungsgruppe „Molekulare Thermodynamik“ um Prof. Leonhard können Stoffmodelle und Stoffdaten vorherberechnet werden, was zahlreiche Anwendungen für das Design und die Analyse von Gasen und Flüssigkeiten ermöglicht. Eine besondere Herausforderung stellt die Berechnung von gekoppelten Bewegungen verschiedener Teile eines Moleküls dar. In unserem Haus wurde ein neuartiges Verfahren entwickelt, um solche Bewegungen zu berechnen. Dabei tritt unter Umständen Verstärkung von Rundungsfehlern auf, was der breiten Anwendung noch im Weg steht.

### Deine Aufgabe:

Du setzt Datentypen ein, die mehr Nachkommastellen erlauben und vergleichst Zwischenergebnisse verschiedener Präzision, um zu ermitteln, bei welchen Rechenschritten Rundungsfehler besonders verstärkt werden. Du vergleichst verschiedene vorhandene Methoden zur Addition und Matrixmanipulation bezüglich ihrer Stabilität. Letztlich kann mit der verbesserten Methode die Thermochemie eines realen Stoffes genauer berechnet werden.

### Wir bieten dir:

Schreibe deine Masterarbeit mit exzellenter Betreuung in einem motivierten Team. Du bekommst einen Einblick in wissenschaftliche Arbeitsweisen und vertiefst deine Kenntnisse im Programmieren und molekularer Thermodynamik.

### Dein Profil:

Idealerweise interessierst du dich für molekulare Thermodynamik und Programmierung. Wenn dich das beschriebene Thema begeistert, melde dich bitte bei:

[wassja.kopp@litt.rwth-aachen.de](mailto:wassja.kopp@litt.rwth-aachen.de)

