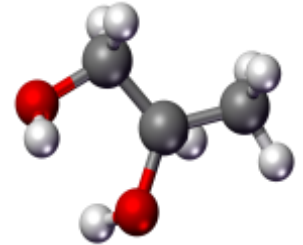


Energiesystemtechnik trifft auf Sorptionstechnik – Validierung und Weiterentwicklung einer Modelica-Schnittstelle zur Stoffdatenberechnung mit PC-SAFT

Unser Profil:

Der Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der RWTH Aachen beschäftigt sich in der Energie- und Verfahrenstechnik mit dem „thermodynamischen Fahrstuhl“: Vom Molekül über die Stoffdatenbestimmung bis hin zur Prozessbewertung. In der Arbeitsgruppe „Energiesystemtechnik“ werden dabei Methoden zur rechnergestützten Analyse, Bewertung und Optimierung von Energiesystemen entwickelt, während in der Arbeitsgruppe „Sorptionstechnik“ unterschiedliche energietechnische Anwendungen wärmetechnischer Systeme sowohl experimentell als auch simulativ untersucht werden. Dabei sind für beide Arbeitsgruppen valide Modelle zur Stoffdatenberechnung essenziell.



Hintergrund:

Die konsistente und prädiktive Berechnung von Stoffdaten stellt eine herausfordernde Aufgabe dar. Hier stellt die physikalisch basierte Zustandsgleichung „Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory“ (PC-SAFT) einen in der Forschung weit verbreiteten und sehr vielversprechenden Lösungsansatz dar. Daher wurde bereits eine erste Schnittstelle der PC-SAFT Zustandsgleichung zu der am LTT verwendeten Modellierungssprache Modelica entwickelt. Die Validierung und Weiterentwicklung dieser Schnittstelle steht allerdings noch aus und soll nun im Rahmen dieser Arbeit erfolgen.

Deine Aufgabe:

Im Rahmen dieser Arbeit soll eine bereits bestehende Modelica-Schnittstelle zur Stoffdatenberechnung mit PC-SAFT validiert und weiterentwickelt werden:

- Die Validierung der Schnittstelle soll in zwei Stufen für einige ausgewählte Stoffe erfolgen: (1) Abgleich der Modelica-Ergebnisse mit Ergebnissen des originalen PC-SAFT-Codes um systematische Implementierungsfehler auszuschließen; und (2) Abgleich der Modelica-Ergebnisse mit Referenzstoffdaten (z.B. aus REFPROP) um die Güte von in der Literatur vorhandener PC-SAFT-Parametrierungen zu bestimmen.
- Die PC-SAFT-Parametrierung besitzt einen signifikanten Einfluss auf die Güte der berechneten Stoffdaten. Daher soll eine bereits bestehende GAMS-Schnittstelle zur Stoffdatenberechnung mit PC-SAFT so erweitert werden, dass mittels mathematischer Optimierung (z.B. Minimierung von Fehlerquadraten) eigene, auf den jeweiligen Anwendungsfall maßgeschneiderte, PC-SAFT-Parametrierungen ermittelt werden können.
- Damit die Modelica-Schnittstelle auch für dynamischen Simulationen verwendbar ist, muss die Schnittstelle erweitert werden: Beispielsweise ist die (numerische) Berechnung verschiedener partieller Ableitungen in die Schnittstelle zu integrieren. Darüber hinaus ist die Implementierung von bestehenden Berechnungsansätzen für Transportgrößen in die Schnittstelle erforderlich.

Dein Profil:

- Studienrichtung Maschinenbau/Wirt.-Ing. MB/CES mit Vertiefung Energie-/Verfahrenstechnik oder Vergleichbares
- Gute Kenntnisse der Thermodynamik sowie großes Interesse an Programmierung und Optimierung
- Erfahrungen mit Fortran und Modelica/Dymola sind hilfreich, aber nicht zwingend erforderlich
- Selbstständige und zielorientierte Arbeitsweise

Unser Angebot:

Du arbeitest in einem netten interdisziplinären Team an einem innovativen Thema, da die Zustandsgleichung PC-SAFT ein aktueller und in der Forschung weit verbreiteter Ansatz zur Stoffdatenmodellierung ist. Neben guten Einblicken in die Stoffdatenberechnung erlernst Du zudem weitergehende Kenntnisse in der Programmierung mit Fortran sowie der Modellierung mit Modelica. Wenn Du Interesse hast, melde Dich per Mail ([mit Lebenslauf und aktueller Notenübersicht](#)) bei uns.