



Aufgabenstellung Interdisziplinäre Projektarbeit für Herrn Daniel Fischer, Beleg-Nr. 02/2021

Thema: Vergleich prädiktiver Zustandsgleichungen für Gemische anhand einer Benchmark-Datenbank für binäre Gemische

Comparison of Predictive Equations of State for Mixtures Using a Benchmark Database for Binary Mixtures

Motivation:

An der Professur für Technische Thermodynamik wurden in den letzten Jahren prädiktive Zustandsgleichungen für Gemische entwickelt und anhand ausgewählter binärer Gemische ausgewertet und mit anderen prädiktiven Ansätzen verglichen. In dieser Arbeit soll ein umfangreicher Vergleich der entwickelten Zustandsgleichungen mit anderen prädiktiven Zustandsgleichungen anhand einer kürzlich von Jaubert et al. [1] veröffentlichten Benchmark-Datenbank für binäre Gemische durchgeführt werden.

Zielstellung:

Herr Fischer programmiert die von Jaubert et al. [1] vorgeschlagene Methode zum methodischen Vergleich von Zustandsgleichungen anhand einer Benchmark-Datenbank in der Programmiersprache Python unter Einbeziehung der Stoffdatenbank TREND. Folgende Arbeitsschritte sind durchzuführen:

- Programmiertechnische Umsetzung der Benchmark in Python für alle in der Datenbank von Jaubert et al. [1] enthaltenen experimentellen Daten
- Einbindung der Stoffdatensoftware TREND in Python für den automatisierten Vergleich von Zustandsgleichungen mit den experimentellen Daten der Datenbank
- Berechnung der Benchmark für das Multifluid-Gemischmodell mit Standardmischungsregeln und für die Kombination des Multifluid-Gemischmodells mit UNIFAC und COSMO-SAC

Betreuende Hochschullehrerin:

Prof. Dr. Cornelia Breitkopf

Betreuer:

Dr.-Ing. Andreas Jäger, Dipl.-Ing. Erik Mickoleit

Ausgabedatum:

05.04.2021

Einreichdatum:

04.10.2021


Institut für Energietechnik
Professur für Techn. Thermodynamik
Prof. Dr. C. Breitkopf

Literatur

- [1] J.-N. Jaubert, Y. Le Guennec, A. Piña-Martinez, N. Ramirez-Velez, S. Lasala, B. Schmid, I.K. Nikolaidis, I.G. Economou, R. Privat, Ind. Eng. Chem. Res. 59 (2020) 14981–15027. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c01734>.