

BACHELORARBEIT

Validierung und Dokumentation einer Schnittstelle zur Berechnung von Stoffeigenschaften in Mathematica

Einführung:

Die Entwicklungsumgebung Wolfram Mathematica vereint sowohl numerische Methoden als auch die Möglichkeit zur analytischen Lösung von mathematischen Problemstellungen in einer sehr leicht nachvollziehbaren Benutzeroberfläche. Sowohl am ITTK, wie auch in vielen anderen wissenschaftlichen und industriellen Einrichtungen, wird die Software für ingenieurtechnische Problemstellungen eingesetzt. Die Software ist für Studenten und Institute des KIT frei erhältlich. Um Mathematica auch in der Thermodynamik einsetzen zu können, werden sehr häufig Stoffdaten benötigt. Daher wurde am ITTK eine Schnittstelle zum Stoffdatenprogramm REFPROP erstellt, mit welcher innerhalb Mathematica auf dessen Stoffdatenroutinen zugegriffen werden kann.

Gegenstand der Arbeit:

Die Schnittstelle stellt eine Vielzahl an Aufrufen für die Berechnung der unterschiedlichen Stoffeigenschaften bereit. Diese sollen systematisch getestet und anhand eines Vergleichs der Rückgabewerte mit Literaturdaten validiert werden. Dabei soll ein Mathematica-Dokument erstellt werden, das zukünftigen Nutzern als Referenz für den Gebrauch der Schnittstelle dient. Insbesondere die Funktionen zur Berechnung von Phasengleichgewichten stehen im Fokus der Arbeit. Die Beherrschung von Mathematica wird nicht vorausgesetzt, allerdings sollte ein Interesse in die Einarbeitung die Entwicklungsumgebung vorhanden sein.

Aufgabenstellung

- Einarbeitung in die Entwicklungsumgebung Wolfram Mathematica
- Test aller vorhandenen Schnittstellenbefehle zur Berechnung der Stoffeigenschaften und Phasengleichgewichts für unterschiedliche Fluide
- Abgleich der berechneten Werte mit Literaturdaten
- Erstellung eines Referenzdokuments für den Gebrauch der Schnittstelle
- Darstellung der Ergebnisse in einem schriftlichen Bericht und einer mündlichen Präsentation

Aufgabensteller: Prof. Dr.-Ing. Steffen Grohmann

Betreuer: Dipl.-Ing. (FH) Matthias Schenk