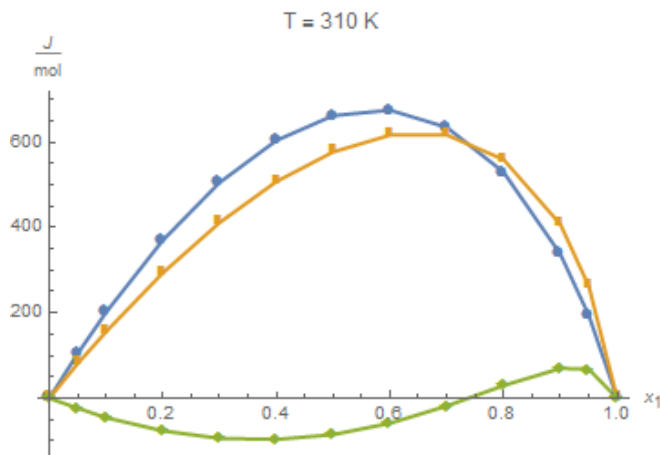


- | | |
|--|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> Bachelorarbeit | <input checked="" type="checkbox"/> simulativ |
| <input checked="" type="checkbox"/> Konstruktionsübung | <input type="checkbox"/> experimentell |
| <input type="checkbox"/> bezahlte Masterarbeit | <input type="checkbox"/> konstruktiv |

Vergleich von Modellen mit Monte-Carlo Simulationsdaten

Im Rahmen der Entwicklung thermodynamischer Modelle für kondensierte Phasen werden häufig Monte-Carlo Simulationen von Gittersystemen verwendet, um grundlegende Eigenschaften, Anwendungsgrenzen sowie Möglichkeiten zur Weiterentwicklung solcher Modelle aufzuzeigen.



Als Grundlage für diese Arbeit wurden Monte-Carlo Simulationen für Moleküle mit unterschiedlichen Oberflächeneigenschaften durchgeführt, mit denen das prinzipielle Verhalten typischer Gemische, wie z.B. Alkan + Keton oder

Alkan + Alkohol, abgebildet werden kann. Ziel der Arbeit ist ein kritischer Vergleich dieser Monte-Carlo Daten mit verschiedenen Modellen (z.B. UNIQUAC, GEQUAC) in Wolfram Mathematica im Sinne einer Stärken-Schwächen-Analyse.

Kontakt: Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Thomas Wallek
 Tel.: +43 (0)316 873-7966
 thomas.wallek@TUGraz.at



Anfangstermin: ab Juli 2017