

Masterarbeit

Stochastische Zustandsgleichungen für Kältemittelgemische und ihre Anwendung in der Auswahl geeigneter Gemischzusammensetzungen für spezifische technische Anwendungen

Für die Speicherung von großen Elektrizitätsmengen im industriellen Maßstab sind so genannte Carnot Batterien als Strom-Wärme-Strom-Speicher ein zukunftsweisendes Element. Die Effizienz der zugrundeliegenden thermodynamischen Prozesse in der Wärmepumpe und Wärmekraftmaschine wird aber entscheidend durch die Wahl eines geeigneten Arbeitsfluids bestimmt. Da verschiedenste Anforderungen von einem Arbeitsfluid erfüllt werden müssen, gewinnen auch Gemische zunehmend an Bedeutung, um die geforderte Kombination von Eigenschaften zu erreichen. In Systemsimulationen für die Auswahl eines Arbeitsfluids und für die Auslegung und Optimierung des thermischen Energiesystems werden die Eigenschaften des Fluids durch hochgenaue Multiparameter Helmholtz EOS (HEOS) beschrieben. Für viele potentiell geeignete Gemische sind aber keine Mischungsmodelle für diese HEOS verfügbar. Oft werden dann zur Berechnung der Gemischeigenschaften Wechselwirkungsparameter von ähnlichen Gemischen übertragen, oder an wenige Messdaten für das jeweilige Gemisch gefittet. Beides resultiert jedoch in Unsicherheiten bei der Berechnung der relevanten thermodynamischen Eigenschaften des Gemisches, was letztendlich bei der Auswahl eines geeigneten Gemisches oder der Bestimmung seiner optimalen Zusammensetzung für eine spezifische technische Anwendung berücksichtigt werden müsste.

Gegenstand dieser Masterarbeit ist die Entwicklung von Methodiken zur Auswahl einer geeigneten Gemischzusammensetzung unter Berücksichtigung der Unsicherheiten in der Modellierung der Stoffeigenschaften am Beispiel des Modellgemisches Propan-Dodecan. Das Gemisch wird bisher durch übertragene Wechselwirkungsparameter von einem anderen Alkangemisch beschrieben. Fittet man jedoch die Wechselwirkungsparameter an die wenigen verfügbaren Messdaten für das Gemisch Propan-Dodecan, ergeben sich Abweichungen in der Beschreibung der Stoffeigenschaften. Zudem wird deutlich, dass beide Modellierungsansätze nicht in der Lage sind, das kritische Gebiet des Gemisches korrekt wiederzugeben (siehe Abbildung). Um diese Unsicherheiten in der Beschreibung der Gemischeigenschaften berücksichtigen zu können, soll in dieser Masterarbeit der Ansatz einer stochastischen HEOS Modellierung verfolgt werden. Diese stochastische HEOS soll dann zur Berechnung der Stoffeigenschaften in einer Optimierung verwendet werden, um geeignete Gemischzusammensetzungen für die spezifische Anwendung eines Projektpartners im DFG-Schwerpunktprogramm 2403 „Carnot-Batterien“ (<https://www.uni-due.de/spp2403/>) zu identifizieren.

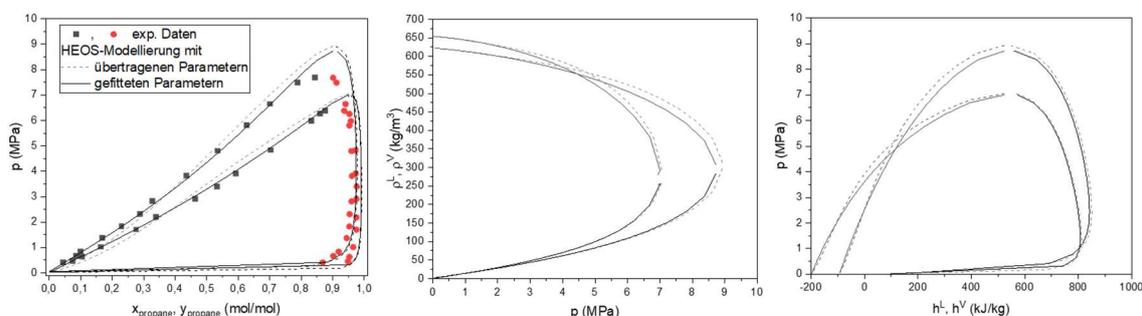


Abb.: Beschreibung des Dampf-Flüssig-Phasengleichgewichts, der Sättigungsdichten und der Enthalpien im Sättigungszustand des Gemisches Propan-Dodecan; Vergleich verschiedener Ansätze zur Beschreibung der Gemischparameter

Konkret sollen die folgenden Punkte im Rahmen der Arbeit adressiert werden:

1. Einarbeitung und Literaturstudie zur HEOS Modellierung und stochastischen Analyse
2. Deterministische HEOS Modellierung mit vorhandener Simulationsumgebung
3. Modellierung von Unsicherheiten im HEOS Modell durch Zufallsvariablen
 - a. Entwicklung von Schnittstellen zur nicht-invasiven stochastischen Simulation mit vorhandenem deterministischem Code
 - b. Kalibrierung der Verteilung der Zufallsvariablen anhand von Messdaten durch Bayes'schen Ansatz
 - c. Konvergenzuntersuchungen und Validierung des Vorgehens
4. Optimierung unter Berücksichtigung von Unsicherheiten mit vorhandenem Optimierer
 - a. Formulierung von Zielfunktion und Nebenbedingungen
 - b. Durchführung der robusten Optimierung
 - c. Diskussion der Ergebnisse
5. Dokumentation der Ergebnisse