



UNIVERSITÄT PADERBORN
Die Universität der Informationsgesellschaft

Fakultät für Maschinenbau
Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik

ThEt

Thermodynamik für die Energie- und Verfahrenstechnik mittels molekularer und experimenteller Methoden

Jadran Vrabec *et al.*

Forschungsgebiete am ThEt

1. Molekulare Modellierung und Simulation

- Stoffeigenschaften von Fluiden
- Nanoskalige Prozesse in Fluiden

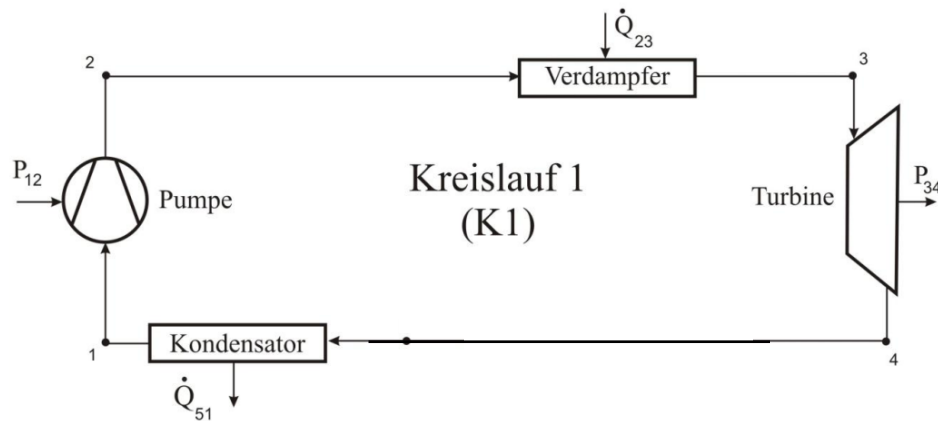
2. Angewandte experimentelle Thermodynamik

- Dampf-Flüssigkeits Gleichgewichte
- Schallgeschwindigkeit

3. Energietechnik

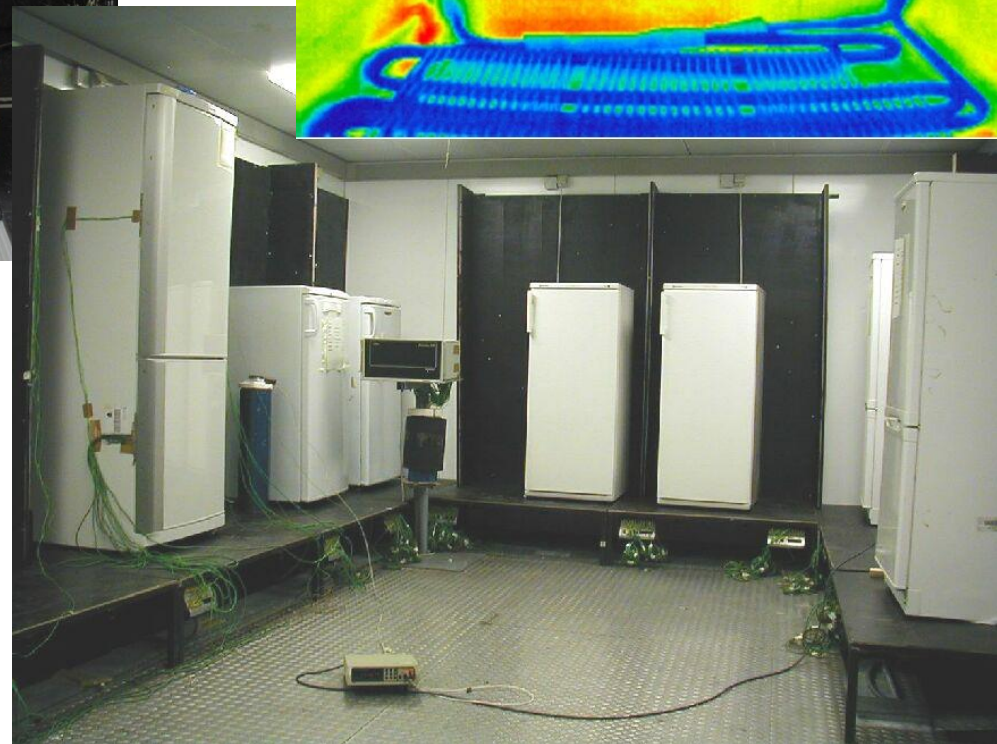
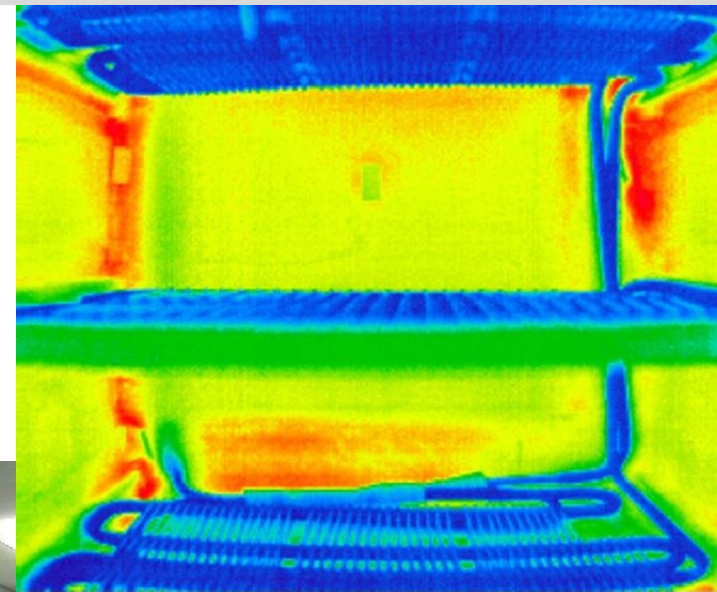
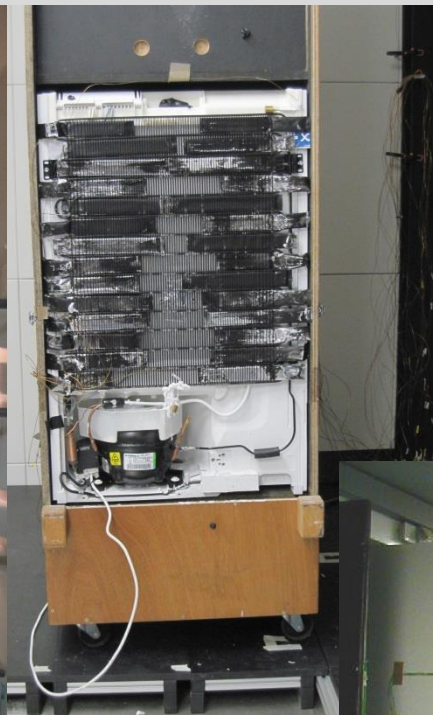
- Kühlturklabor
- ORC-Prozesse

Versuchsstand für ORC-Prozesse



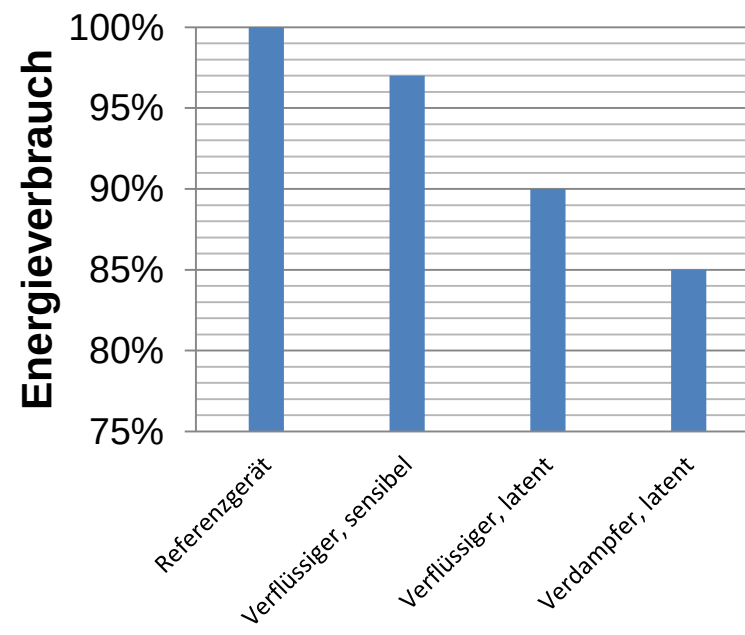
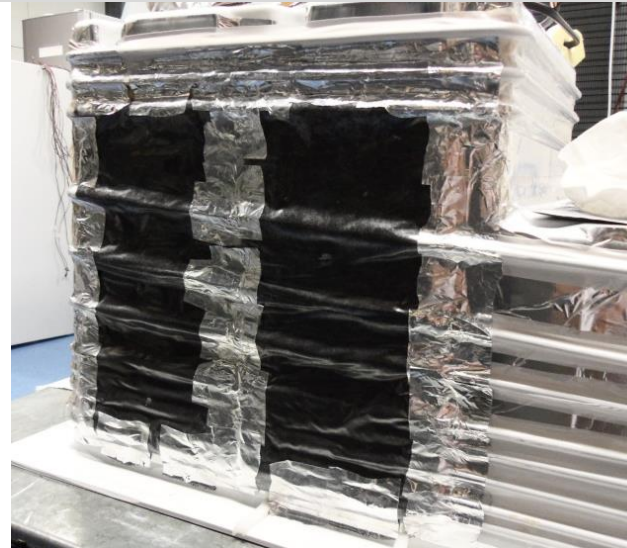
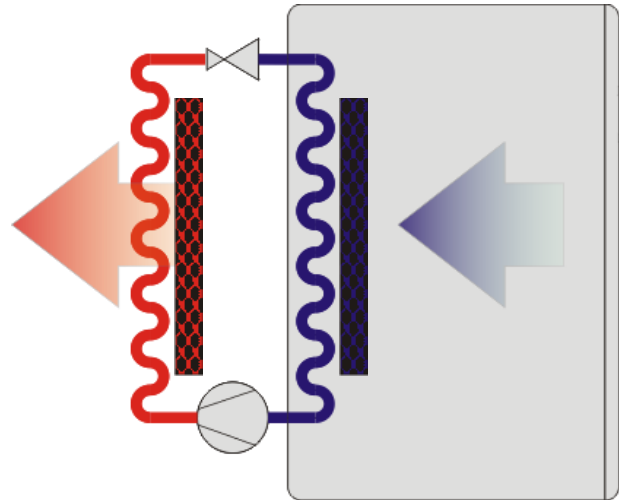
- ORC-Anlagen wandeln Wärme in Arbeit um
- Organische Arbeitsfluide können Wärme bei niedriger Temperatur (Abwärme) nutzen
- Versuchsanlage kombiniert zwei ORC-Anlagen als Kaskade
- Ziel ist die optimale Ausbeute von Wärmequellen durch Auswahl von Arbeitsfluid und Prozessbedingungen

Kühlschranklabor

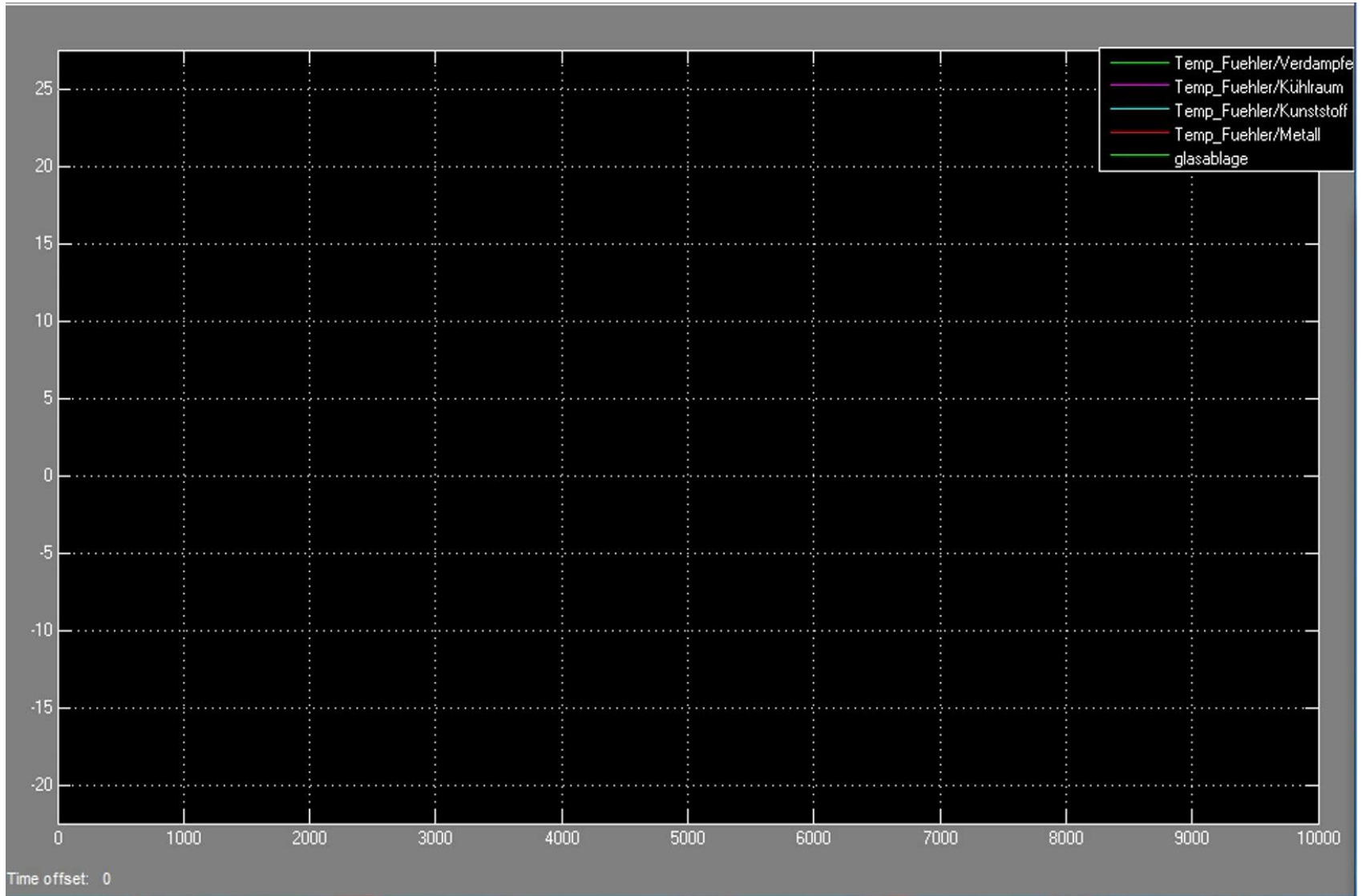


- Untersuchung von Haushalts-Kühl- und Gefriergeräten
- Einfluss verschiedener technischer Lösungen auf Betriebsverhalten und Energieverbrauch

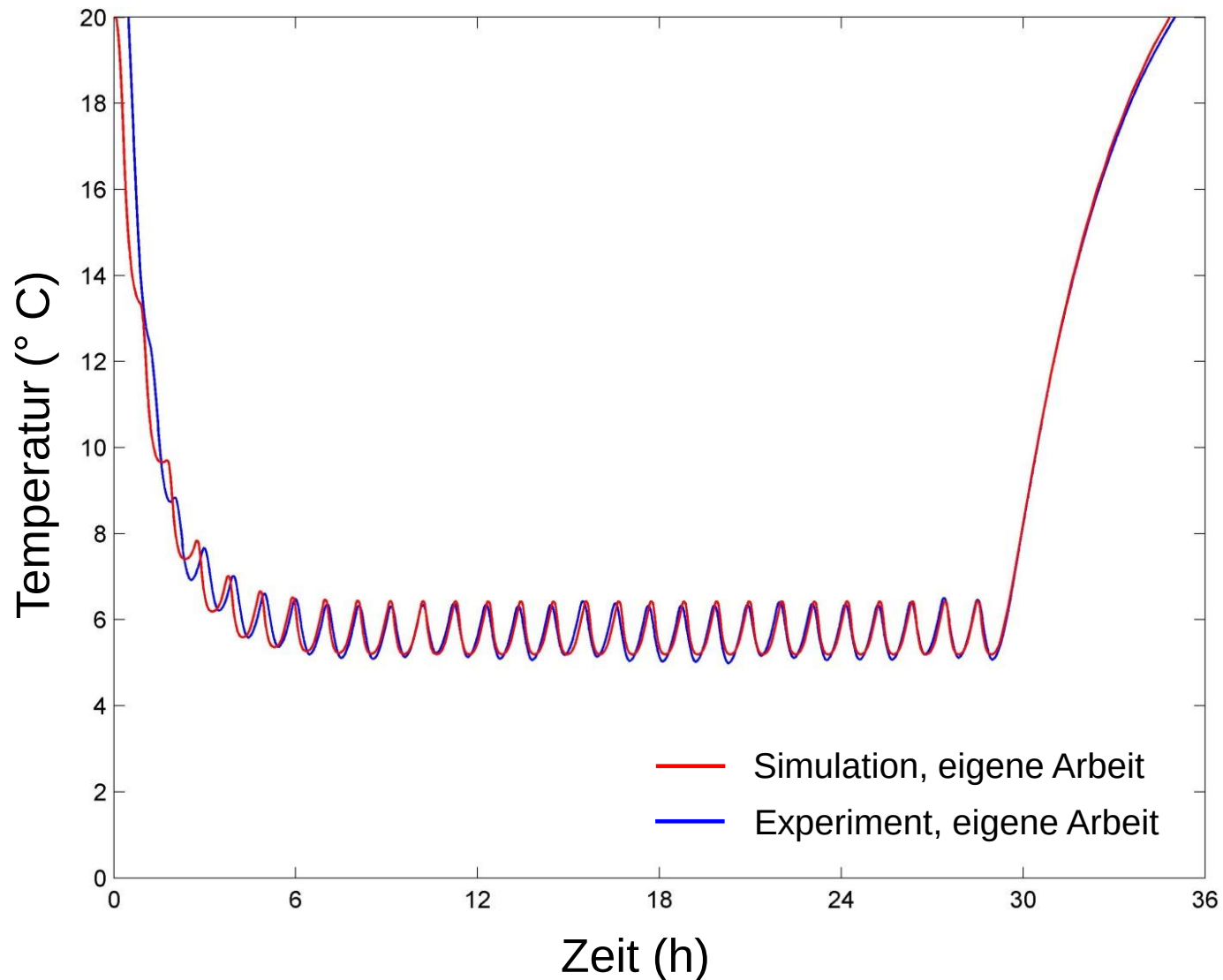
Kühlschranklabor: Latentwärmespeicher



Simulation eines Kühlschranks

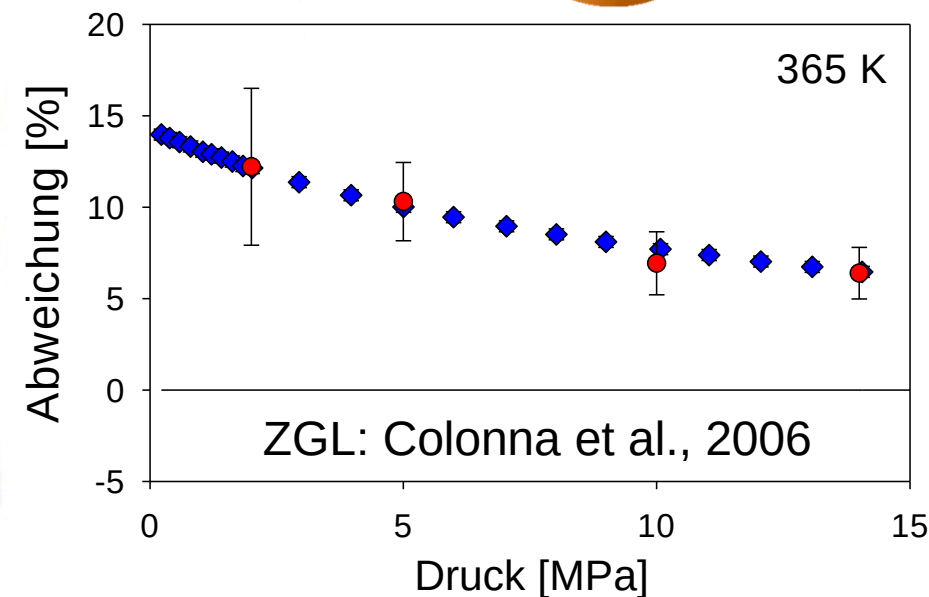
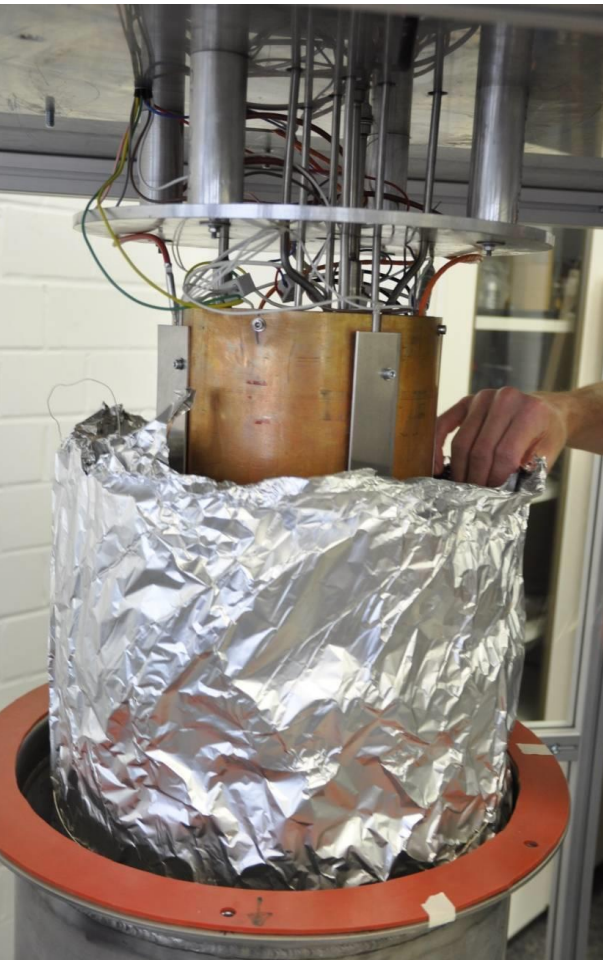
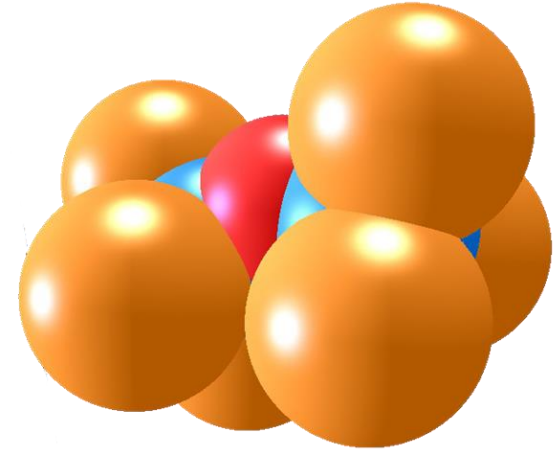


Vergleich von Simulation und Experiment



Schallgeschwindigkeit von Hexamethylsiloxan

- Arbeitsmedium in ORC-Prozessen



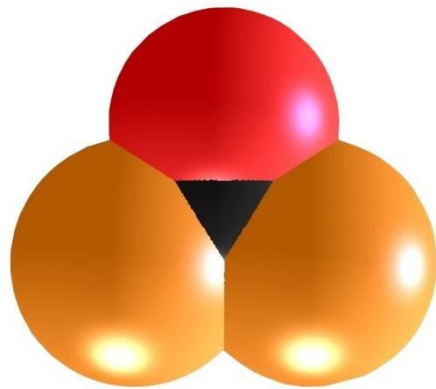
- Simulation, eigene Arbeit
- Experiment, eigene Arbeit

Aceton in N_2 und O_2 unter extremen Bedingungen



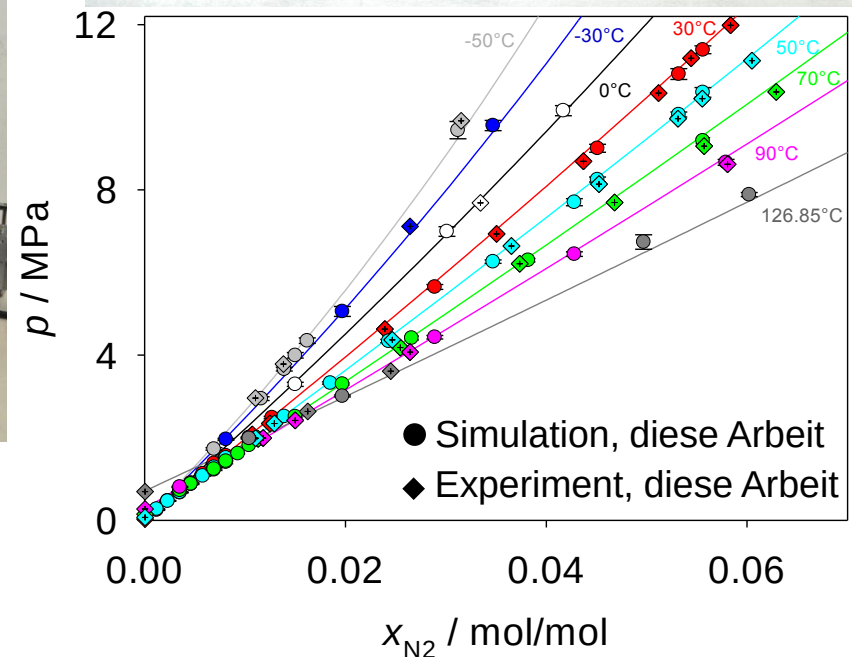
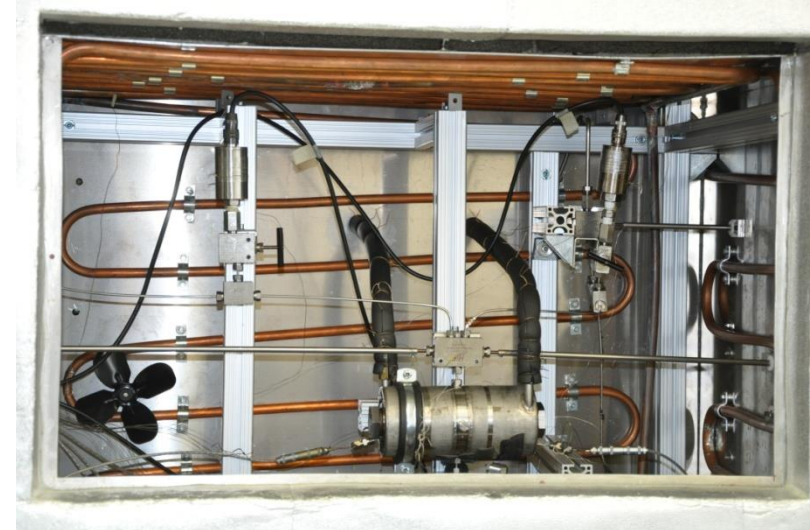
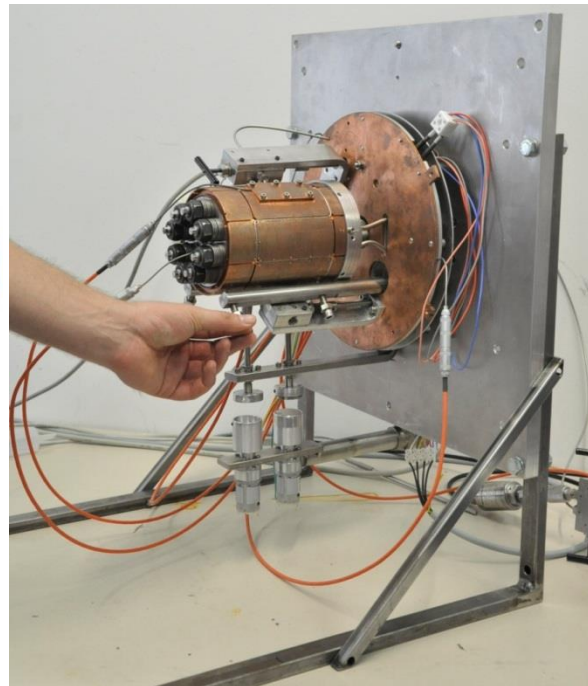
SFB-TRR 75

Tropfendynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen



Aceton

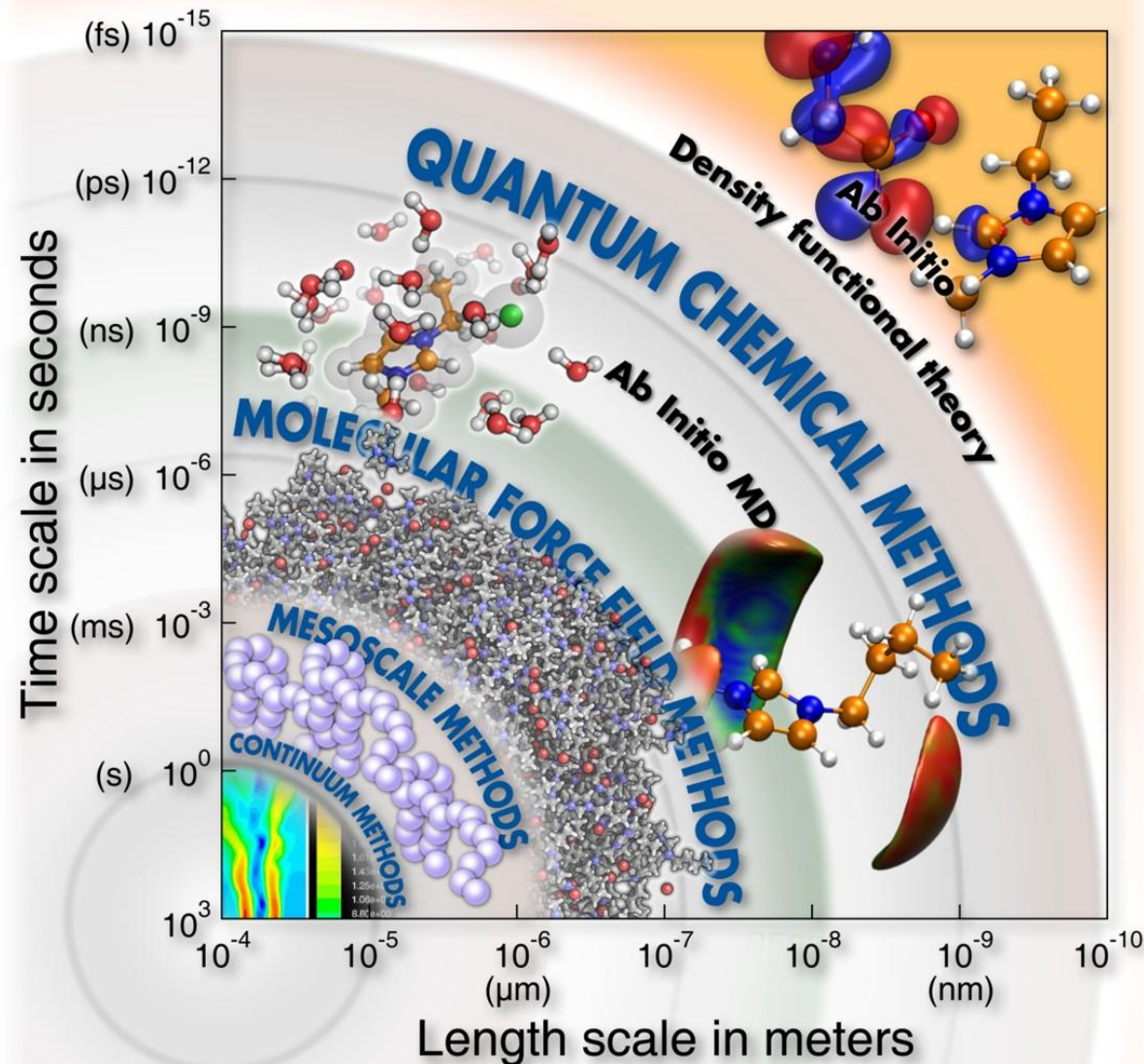
$T = 200 - 600 \text{ K}$
 $p = 0 - 70 \text{ MPa}$



Windmann et al.,
J. Chem. Eng. Data 58 (2013) 3420

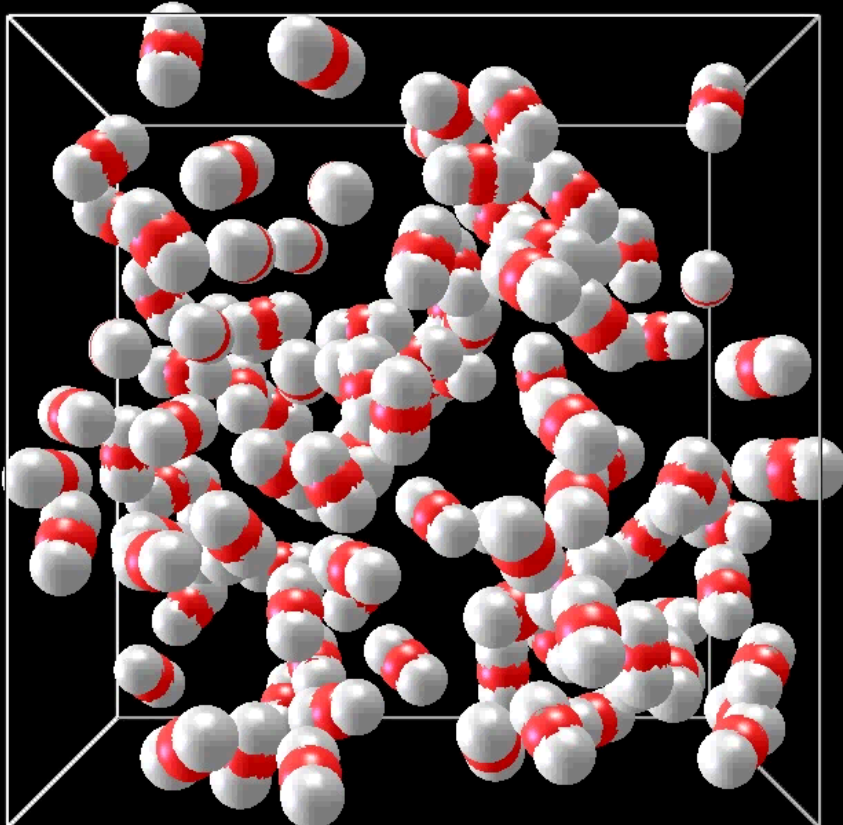
Numerische Simulationsmethoden

- Simulationsmethoden haben unterschiedliche Detaillierungsgrade
- Je detaillierter, desto mehr Vorhersagekraft
- Quantenmechanische Methoden skalieren mit $O(M^3) - O(M^7)$ [M : Basisfunktionen]
- Kraftfeldmethoden sind sowohl hinsichtlich Skalierung $O(N)$ als auch Stoffeigenschaften günstig

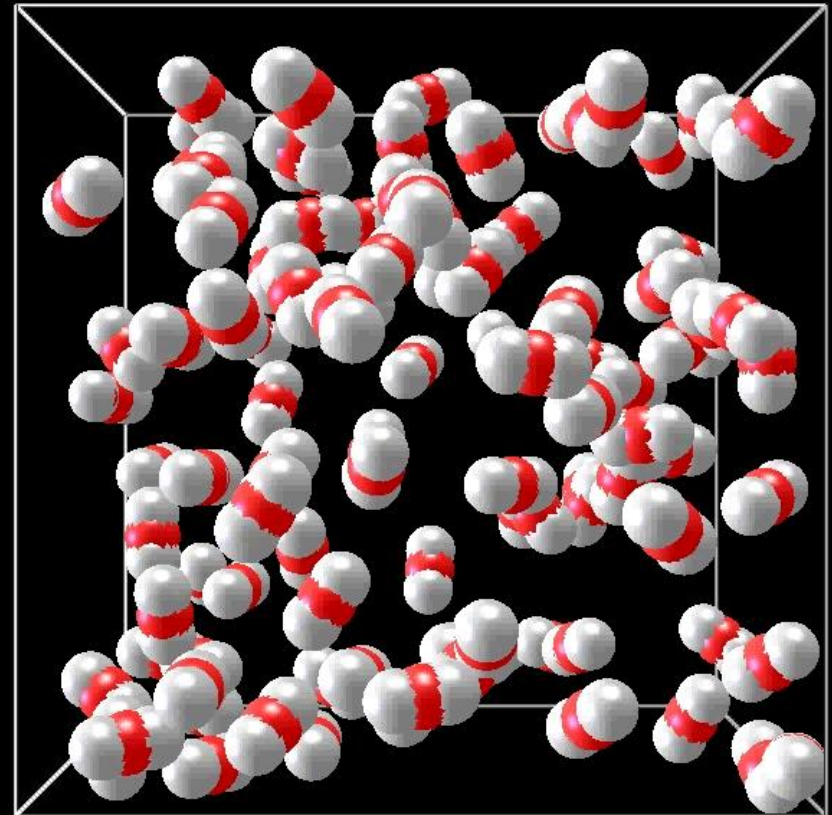


Auswertung von molekularen Kraftfeldern

Molekulardynamik



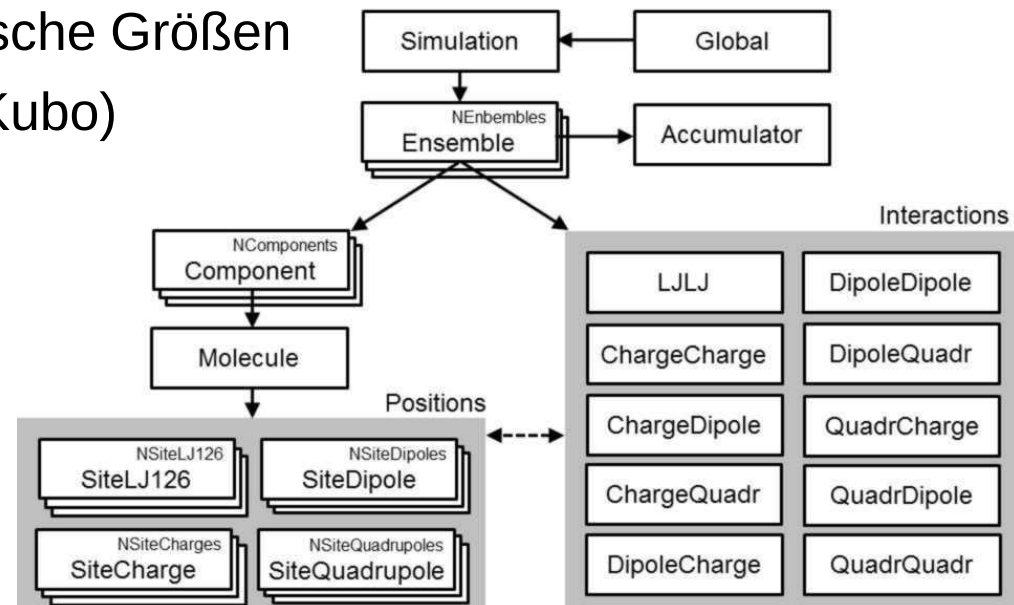
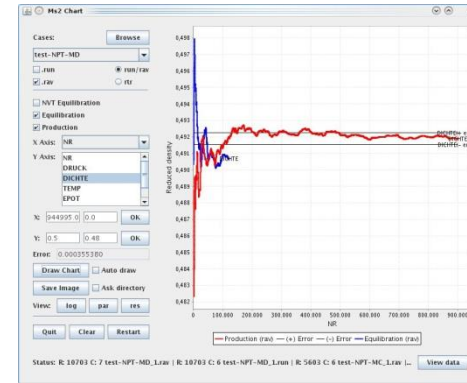
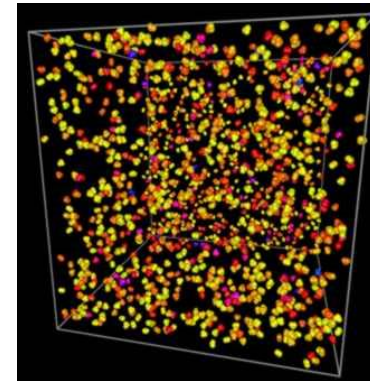
Monte Carlo



ms2: Simulationswerkzeug für die Thermodynamik

Deublein et al., *Comp. Phys. Commun.* 182 (2011) 2350

- Molekulardynamik / Monte Carlo
- Beliebige Mischungen starrer Moleküle
- Grand Equilibrium Methode (VLE)
- Mehrere Ensembles
- Alle statischen Eigenschaften
- Graduelle Einsetzung für entropische Größen
- Transporteigenschaften (Green-Kubo)
- Konsistenter FORTRAN90 Code
- Objektorientiert
- Vektorisiert
- Parallelisiert
- 3D Visualisierung

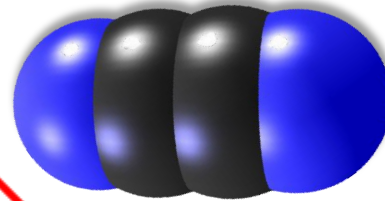


Sicherheitsrelevante Stoffe

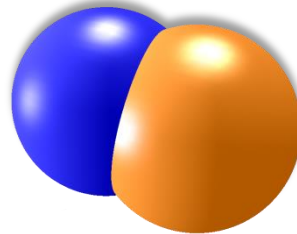
4800 K in O₂



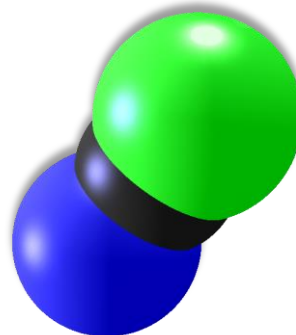
Rauch enthält
Benzol,
Nitrosamine,
Formaldehyd
und Blausäure.



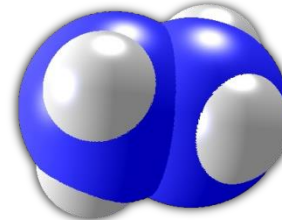
Dicyan



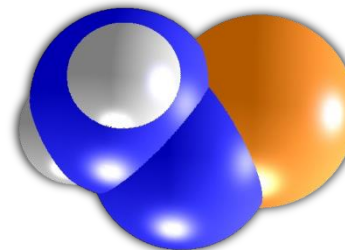
Blausäure



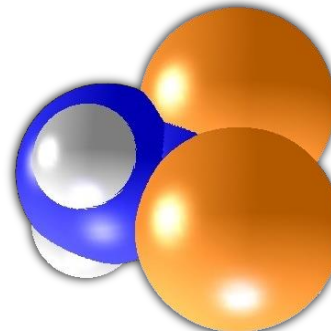
Chlorcyan



Hydrazin



Monomethyl-
hydrazin



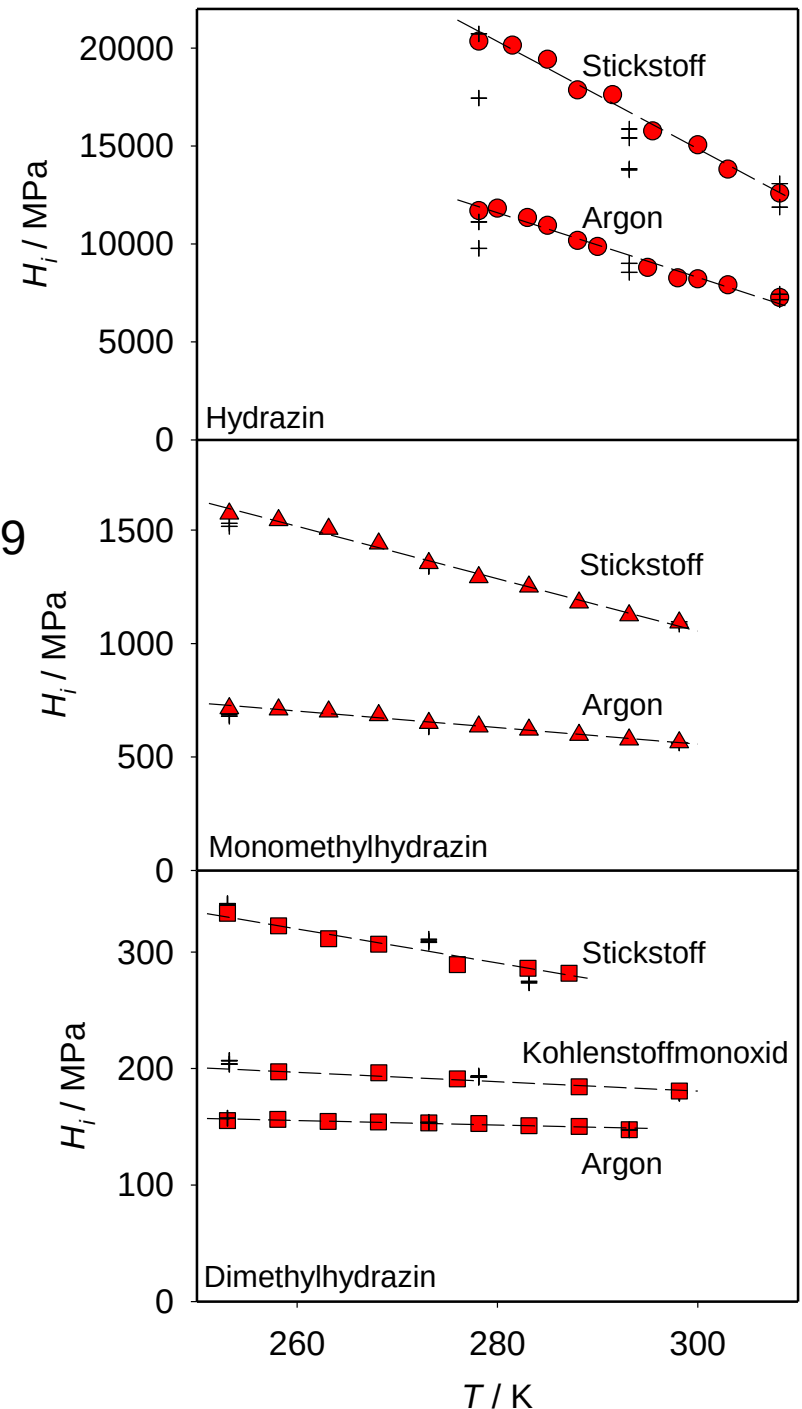
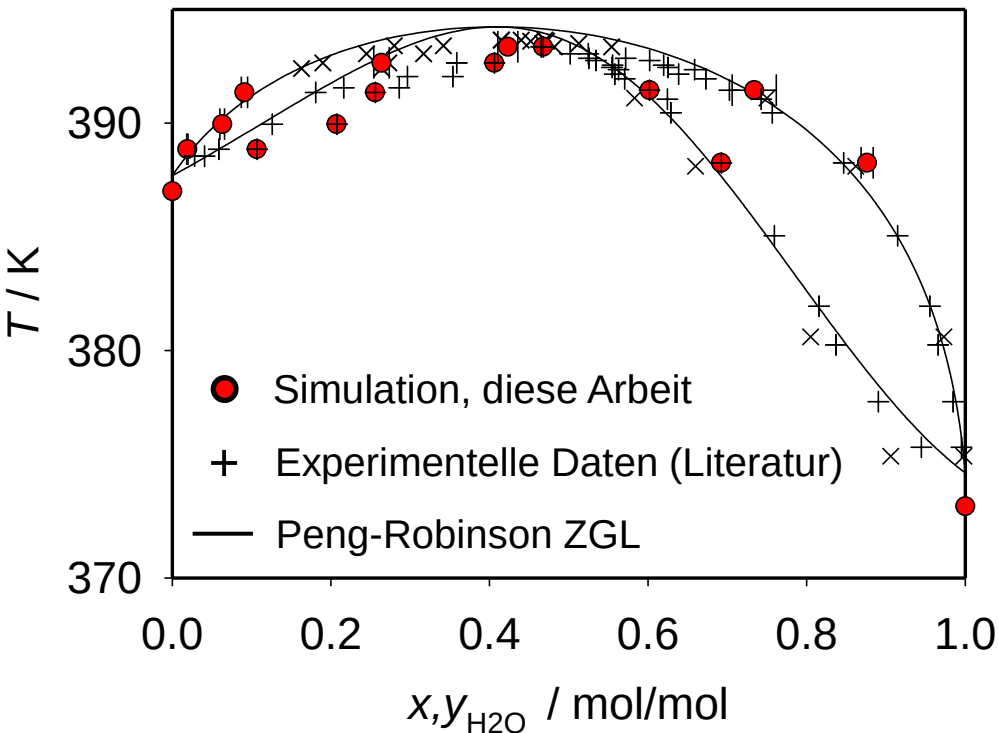
Dimethyl-
hydrazin



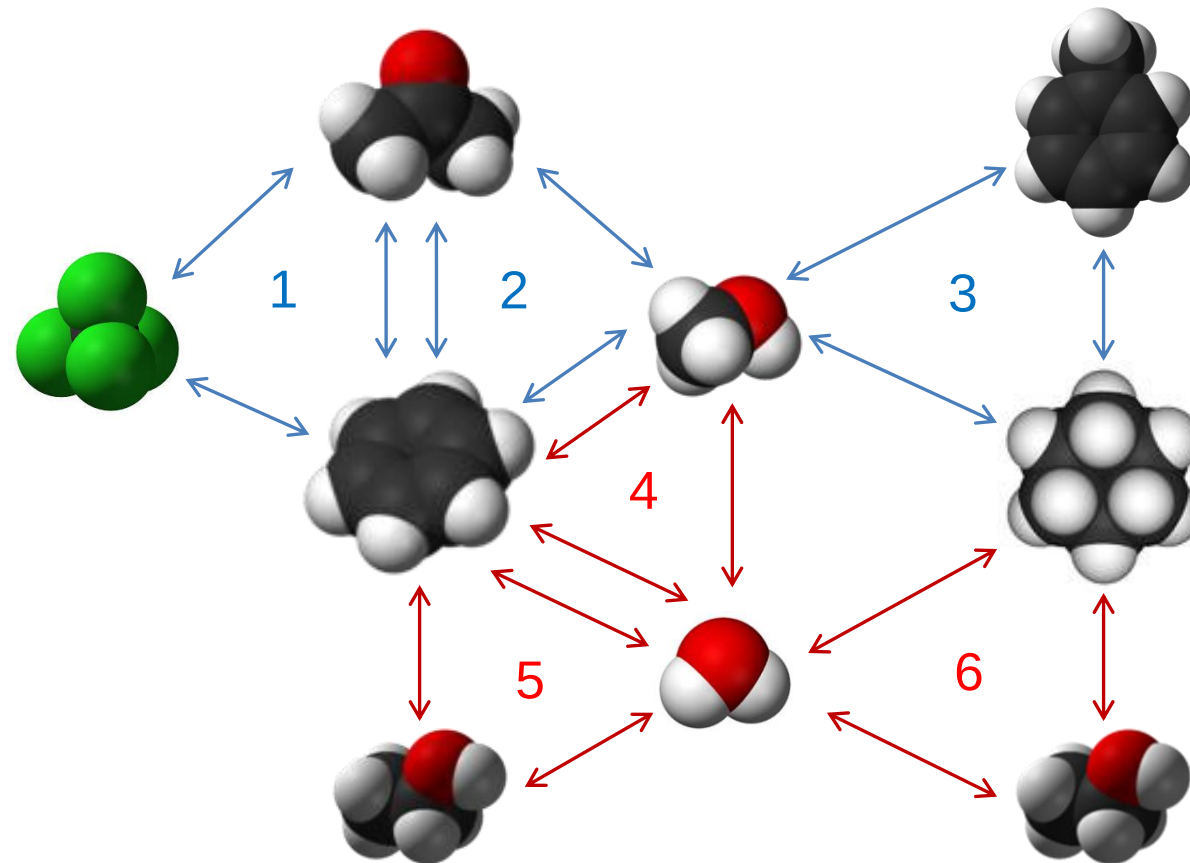
VLE und Gaslöslichkeit von Systemen mit Hydrazin, Monomethylhydrazin und Dimethylhydrazin

Eltis et al., *Fluid Phase Equilib.* 322-323 (2012) 79

Wasser + Hydrazin @ 1 bar



Vorhersage von Transportdiffusionskoeffizienten von flüssigen Mehrkomponentenmischungen



Bewilligtes DFG-Projekt,
 noch nicht begonnen,
 vorgesehene Laufzeit
 6 Jahre

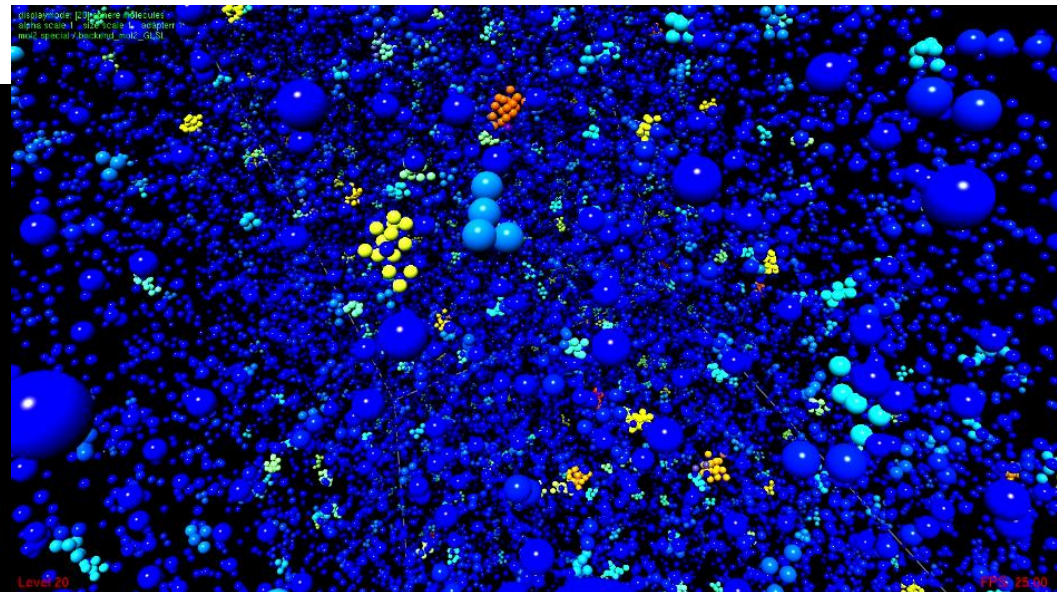
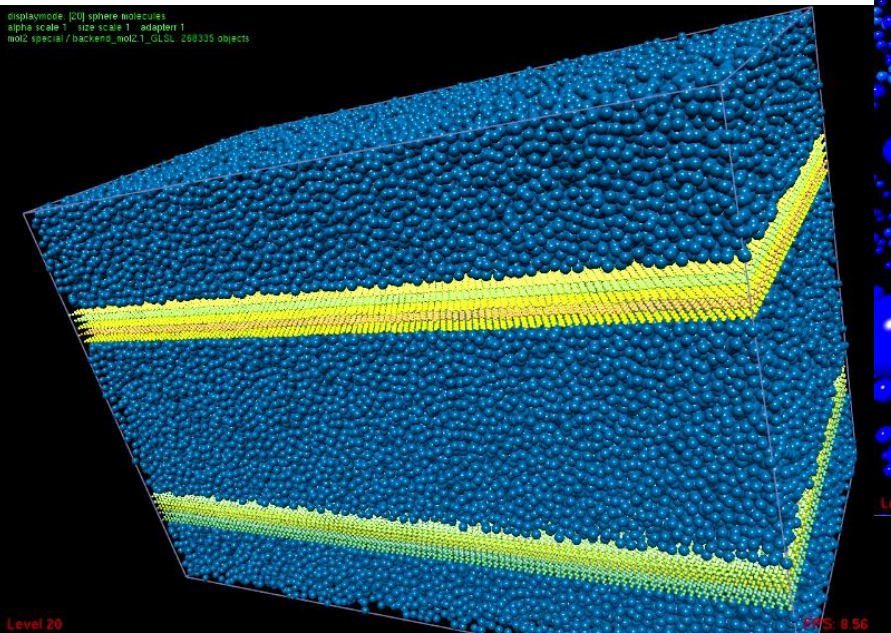
1. Azeton + Benzol + Chlorkohlenstoff
2. Azeton + Benzol + Methanol
3. Cyclohexan + Toluol + Methanol

4. Ethanol + Benzol + Wasser
5. Methanol + Benzol + Wasser
6. Ethanol + Cyclohexan + Wasser

Massiv parallele Molekulardynamik: *ls1 mardyn*

- Identische Kraftfeldtypen wie *ms2*
- Zusätzlich, Tersoff-Potential für Festkörper
- „Große“ Systeme, „lange“ Zeiträume
- Nebenläufigkeit im Raum, nicht in der Zeit

Strömung

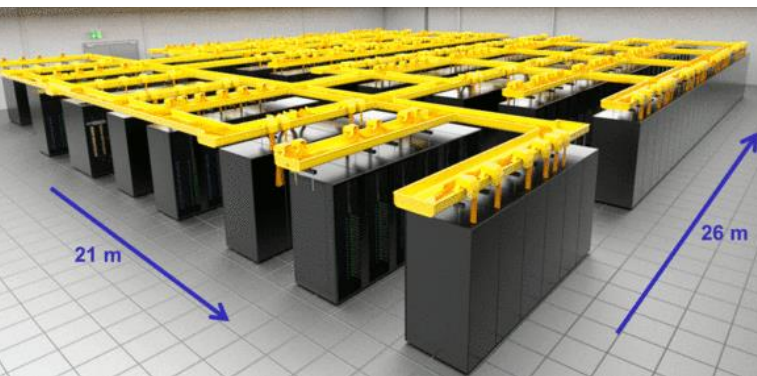


Nukleation

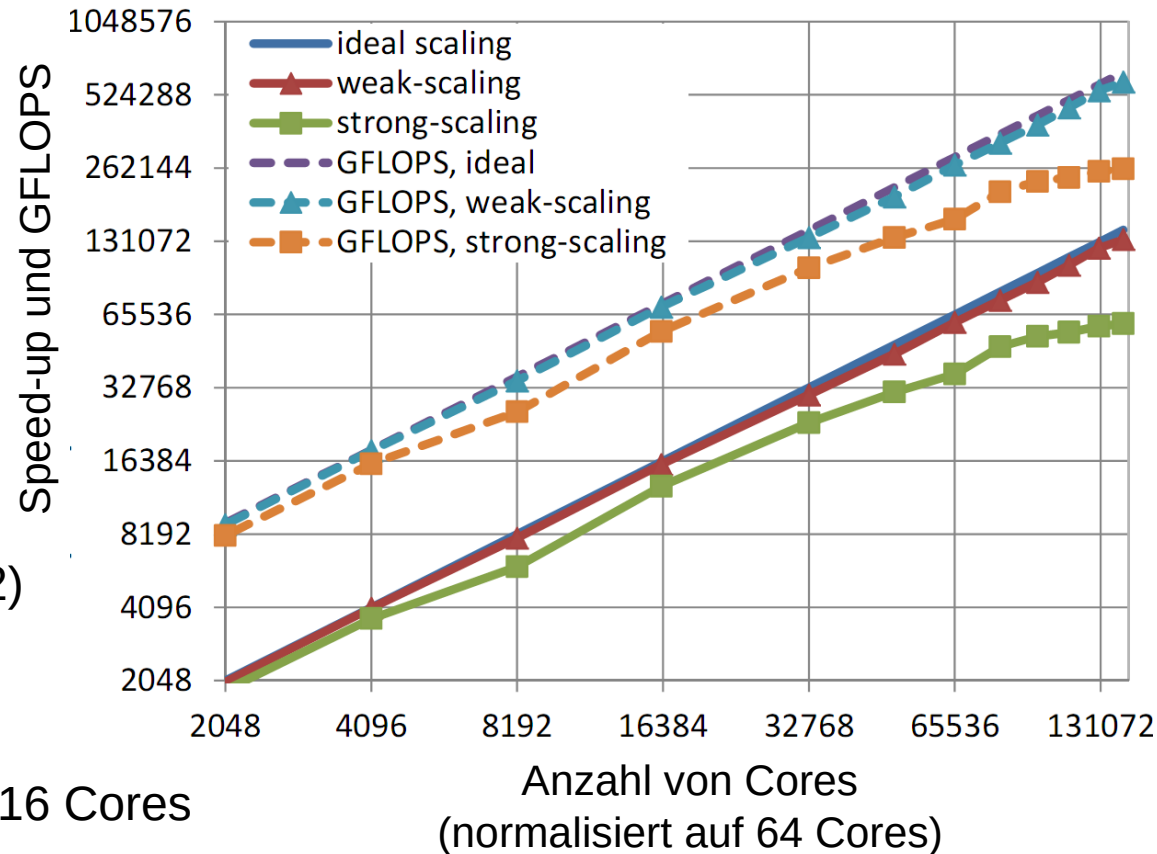
Simulation von 4 Billionen Molekülen auf SuperMUC

in Kooperation mit Bungartz, TU München

Sandy Bridge Cluster



#6 (November 2012)



➤ **Max. $4.125 \cdot 10^{12}$ Moleküle**

➤ Speed-up von 133183 auf 146016 Cores

➤ 591.2 TFLOPS absolute Leistung

➤ 9.8% der theoretischen Peakleistung