

# Studien- und Diplomarbeit

## Thema:

### ***Sanierung eines Softwaresystems zur Simulation von Reaktionskinetiken***

In Zusammenarbeit mit dem Leibniz-Institute für Katalyse (Sitz Wista-Gelände Adlershof, R. Willstaetter Str. 12) soll ein dort eingesetztes Fortran-Programm umfassend saniert werden, das zur Simulation der Kinetik von heterogen katalysierten Reaktionen in einem Festbettreaktor eingesetzt wird.

Das Programm ist ca. 10 Jahre alt, von mehreren Entwicklern unsystematisch modifiziert und lässt vor allem reichlich Spielraum zur Verbesserung der Nutzerfreundlichkeit und der schrittweisen Erweiterung der Fähigkeiten des Programms.

Insbesondere sollen folgende Verbesserungen bzw. Erweiterungen am System vorgenommen werden:

- Restrukturierung des Programms, Definition von Modulen, Schnittstellen und Datenformaten
- Programmierung in modernem Fortran 95 oder Fortran 2003 (statt Fortran 70) unter Ausnutzung der entsprechenden besseren Möglichkeiten
- Ersatz bzw. Neuimplementierung einzelner lizenzpflichtiger Routinen
- Test und Validierung der Software an existierenden Beispielen
- modulare Erweiterung der Software um Funktionen zur statistischen Analyse der Ergebnisse, der Visualisierung, einer teilautomatisierten Nutzung des Programms, Möglichkeiten aufwendigerer Modelle (nach Absprache)

### **Voraussetzungen:**

- Kenntnisse in Fortran sind hilfreich, jedoch nicht notwendig
- Interesse an Softwareanwendungen im wissenschaftlich-technischen Bereich
- Interesse an fachübergreifender Zusammenarbeit

Die Arbeit eignet sich hervorragend, um Einblicke in die praktische Umsetzung und Anwendung von technischer Modellierungssoftware zu gewinnen.

**Interessenten** melden sich bitte bei

Prof. K. Bothe  
Institut für Informatik  
Humboldt-Universität zu Berlin  
Rudower Chaussee 25  
Raum IV 201  
Tel. 2093 3007