

Inhaltsverzeichnis

Lösungsverfahren werden hierzu nur das Gauß-Jordan- bzw. das modifizierte Newton-Verfahren oder das Euler-Verfahren bzw. finite Differenzenverfahren, obwohl fast immer in gewisser Hinsicht "bessere" Methoden zu benutzen sind.

Dem Hintergrund ist deutlich, was dieses Buch nicht zu leisten vermag: es ist kein Lehrbuch der Chemischen Reaktionstechnik noch als ein Einheitswerk der numerischen Mathematik konzipiert, und insbesondere stellt es keinen Leitfaden zum Umgang mit Kleinrechnern dar. Es wendet sich infolgedessen an einen Universitätsvorlesung - verfügt, der ein Grundwissen über Verfahren aufzuweisen, und der schließlich in der Programmierung von Verfahren einige Erfahrung gewonnen hat. Es bleibt aber dennoch zu hoffen, dass die hier gegebene Darstellung sowohl dem Anfänger als auch dem Profi eine Anregung bietet.

Kapitel 1 stellt einleitend allgemeine Reaktionsmodelle zusammen. In Kapitel 2 werden die in der Folge verwendeten Reaktionsmodelle behandelt, die zu ihrer Lösung erforderlichen numerischen Verfahren. In Kapitel 3 werden die betrachteten Reaktionsmodelle mit den entsprechenden Lösungsmethoden für Simulationsrechnungen bearbeitet, während in Kapitel 4 die Bestimmung kinetischer Parameter nachgegangen wird. Die Programme sind in GFA-Basic (GFA-Systemtechnik, Heidelberg) auf einem Atari 1040 STF geschrieben. Ein Beitrag vieler Freunde, Kollegen und Studenten wäre das Buch nicht gekommen. Mein besonderer Dank gebührt Herrn Dr. R. Broucek, der zur Entstaltung beigetragen hat, sowie den Herren Dr. T. Hauberle und Dr. E. Müller-Erlwein, die zahlreiche Diskussionen und Anregungen. Auf die Teilnehmer der Tagung "Computeranwendung in der Technischen Chemie" an der Technischen Hochschule Berlin geht eine Reihe wertvoller Hinweise zurück. Schließlich dem Verlag für die entgegenkommende und sachkundige Mithilfe.

E. Müller-Erlwein
Hilf 1991

1	Einleitung	1
1.1	Reaktionstechnische Themenbereiche	1
1.2	Numerische Verfahren	3
1.3	Programmiersprache, Aufbau der Programme	5
1.4	Aufbau der ausgearbeiteten Beispiele	11
2	Reaktionstechnische Grundlagen	13
2.1	Erhaltungssätze und Bilanzgleichungen	13
2.2	Homogene Reaktormodelle	16
2.2.1	Zweidimensionale Modelle für das Strömungsrohr	16
2.2.2	Eindimensionale Modelle für das Strömungsrohr	17
2.2.3	Ideal durchmischter Rührkessel	21
2.2.4	Rührkesselkaskade	25
2.3	Heterogene Reaktormodelle	26
2.3.1	Allgemeines	26
2.3.2	Bilanzgleichungen der kontinuierlichen Phase	28
2.3.3	Bilanzgleichungen der dispersen Phase mit örtlichen Gradienten	30
2.3.4	Bilanzgleichungen der dispersen Phase ohne örtliche Gradienten	34
2.4	Quasi-homogene Reaktormodelle	37
2.5	Reaktionsmodelle und Geschwindigkeitsansätze	39
3	Numerische Verfahren	43
3.1	Inversion und Rang einer Matrix	43
3.1.1	Gauß-Jordan-Verfahren	43
3.1.2	Gauß-Elimination	46
3.1.3	Beispiele zum Abschnitt 3.1	47