

Bestimmung kinetischer Parameter	395
gemeines	395
lineare multiple Regression	399
nichtlineare Regression	402
Beispiele zum Kapitel 5	403

Inhaltsverzeichnis	419
--------------------	-----

Ansatzweise	425
-------------	-----

Inhaltsverzeichnis	431
--------------------	-----

435

1 Einleitung

1.1 Reaktionstechnische Themenbereiche

Zielsetzung dieses Buches ist, eine möglichst große Auswahl reaktionstechnischer Problemstellungen mit Hilfe einer möglichst geringen Anzahl an numerischen Verfahren in einer für Kleinrechner geeigneten Form zu bearbeiten.

Was die reaktionstechnischen Themenbereiche anbelangt, so wird nichts ausgeführt, was nicht auch in mehr oder weniger abgewandelter Form in einschlägigen Lehrbüchern¹⁻¹⁰ oder Übersichtsdarstellungen des Gebiets¹¹⁻¹⁴ zu finden wäre. Es handelt sich im wesentlichen um wichtige Reaktormodelle für homogene bzw. quasi-homogene Reaktionssysteme sowie – als typische Beispiele für heterogene Systeme – um Modelle für katalytische Festbettreaktoren. In Ergänzung zu den üblicherweise in Lehrbüchern ausführlich dargestellten Modellen werden hier jedoch auch weniger übliche Modelle betrachtet. Insbesondere sind dies solche für eine instationäre und nichtisotherme Betriebsweise, welche nur numerisch zu lösen sind.

Für homogene Reaktionssysteme werden die grundlegenden Modelle für das Strömungsrohr, den Rührkessel und die Rührkesselkaskade behandelt. Aus diesen Grundmodellen gewinnt man durch kombinatorische Anwendung der Modellbedingungen ideal/mit Dispersion, stationär/instationär, absatzweise/kontinuierlich, eindimensional/zweidimensional, isotherm/nichtisotherm eine Vielzahl wichtiger Modelle, soweit diese Unterscheidungen für den betreffenden Reaktortyp sinnvoll sind. Als weiterer Grund für die ausführliche Darstellung homogener Reaktormodelle ist anzuführen, daß sich Modelle für Mehrphasenreaktoren aus diesen homogenen Modellen aufbauen lassen. Erforderlich ist allerdings, die Stofftransport- und Wärmetransportterme, welche die Wechselwirkung der einzelnen Phasen miteinander beschreiben, geeignet einzusetzen. Dies wird – allein aus Platzgründen – nur für katalytische Festbettreaktoren ausgeführt. Die angegebenen numerischen Verfahren sind nichtsdestoweniger auch für eine Vielzahl weiterer, technisch bedeutsamer