

diskrete Approximation von Funktionen und Ableitungen	56
Funktionen einer Variablen	56
Funktionen mehrerer Variablen	58
Approximation von gewöhnlichen Ableitungen	58
Approximation von partiellen Ableitungen	60
Beispiel zum Abschnitt 3.2	62
Nullstellenbestimmung	63
Allgemeines	63
Newton-Verfahren für Funktionen einer Variablen	66
Modifiziertes Gauß-Newton-Verfahren	68
Suchverfahren	73
Beispiele zum Abschnitt 3.3	75
numerische Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen	91
Allgemeines	91
Euler-Verfahren	93
Shooting-Verfahren	98
Beispiele zum Abschnitt 3.4	100
numerische Integration partieller Differentialgleichungen	108
Allgemeines	108
Parabolische Differentialgleichungen	108
Hyperbolische Differentialgleichungen	116
Beispiele zum Abschnitt 3.5	122
Simulation	143
Berechnung von Simultangleichgewichten	143
Grundlagen	143
Beispiele zum Abschnitt 4.1	146
Ideal durchmischter Rührkessel für homogene Reaktionssysteme	160
Absatzweise betriebener Rührkessel	160
Beispiele zum Abschnitt 4.2.1	164
Kontinuierlich betriebener stationärer Rührkessel	175
Beispiele zum Abschnitt 4.2.3	182
Kontinuierlich betriebener instationärer Rührkessel	195
Beispiele zum Abschnitt 4.2.5	197

4.3	Kaskade idealer Rührkessel für homogene Reaktionssysteme	204
4.3.1	Stationäre Rührkesselkaskade	204
4.3.2	Beispiele zum Abschnitt 4.3.1	206
4.3.3	Instationäre Rührkesselkaskade	212
4.3.4	Beispiele zum Abschnitt 4.3.3	213
4.4	Strömungsrohr für homogene Reaktionssysteme	218
4.4.1	Stationäres ideales Strömungsrohr	218
4.4.2	Beispiele zum Abschnitt 4.4.1	223
4.4.3	Instationäres ideales Strömungsrohr	240
4.4.4	Beispiele zum Abschnitt 4.4.3	242
4.4.5	Stationäres Strömungsrohr mit Axialdispersion	252
4.4.6	Beispiele zum Abschnitt 4.4.5	256
4.4.7	Instationäres Strömungsrohr mit Axialdispersion	267
4.4.8	Beispiele zum Abschnitt 4.4.7	270
4.4.9	Stationäres Strömungsrohr mit Radialdispersion	283
4.4.10	Beispiele zum Abschnitt 4.4.9	286
4.5	Heterogene Modelle	299
4.5.1	Stationäres Katalysatorpellet	299
4.5.2	Beispiele zum Abschnitt 4.5.1	304
4.5.3	Instationäres Katalysatorpellet	317
4.5.4	Beispiele zum Abschnitt 4.5.3	320
4.5.5	Stationäres Filmdiffusionsmodell	333
4.5.6	Beispiele zum Abschnitt 4.5.5	335
4.5.7	Instationäres Filmdiffusionsmodell	343
4.5.8	Beispiele zum Abschnitt 4.5.7	346
4.5.9	Stationäres Porendiffusionsmodell	358
4.5.10	Beispiele zum Abschnitt 4.5.9	363
4.5.11	Instationäres Porendiffusionsmodell	378
4.5.12	Beispiele zum Abschnitt 4.5.11	383