

Mit der Taylor-Reihenentwicklung kann eine komplizierte Funktion in einer Umgebung approximiert werden.

Auch eine unbekannte Funktion kann in einer „kleinen“ Umgebung approximiert werden, wenn Zusatzwissen vorhanden ist: Der Wert der Funktion an einem Punkt und die Steigung in diesem Punkt.

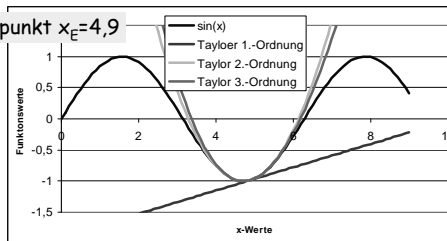
Entwicklungspunkt  $x_E$  Taylor-Reihenentwicklung

$$f(x) \approx \underbrace{f(x_E)}_{0\text{-Ordnung}} + \underbrace{f'(x_E)(x-x_E)}_{1\text{-Ordnung}} + \underbrace{\frac{f''(x_E)}{2}(x-x_E)^2}_{2\text{-Ordnung}}$$

Mit der Taylorreihenentwicklung kann eine komplizierte Funktion in einer Umgebung approximiert werden.

Auch eine unbekannte Funktion kann in einer „kleinen“ Umgebung approximiert werden, wenn Zusatzwissen vorhanden ist: Der Wert der Funktion an einem Punkt und die Steigung in diesem Punkt.

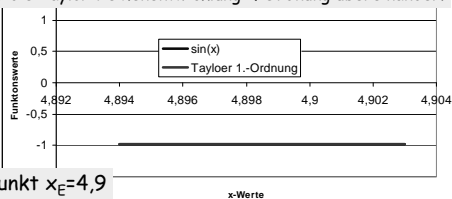
Entwicklungspunkt  $x_E=4,9$



Mit der Taylorreihenentwicklung kann eine komplizierte Funktion in einer Umgebung approximiert werden.

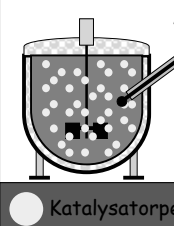
Auch eine unbekannte Funktion kann in einer „kleinen“ Umgebung approximiert werden, wenn Zusatzwissen vorhanden ist: Der Wert der Funktion an einem Punkt und die Steigung in diesem Punkt.

Da nur ein kleiner Bereich um  $x_E$  betrachtet wird, liegen die Funktion und die Taylor-Reihenentwicklung 1. Ordnung übereinander!

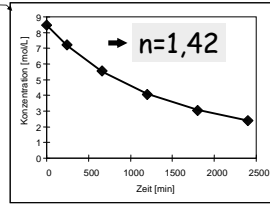


Entwicklungspunkt  $x_E=4,9$

In einem ideal durchmischten Reaktor wird eine katalysierte Reaktion durchgeführt. Die effektive Reaktionsgeschwindigkeit soll bestimmt werden.



einfacher Ansatz:  
 $\frac{dc}{dt} = -kc^n$



Trennung der Variablen und Integration

$$c(t) = \left( nkt - kt + c_0 e^{-n \ln(c_0)} \right)^{\frac{1}{1-n}}$$

In einem ideal durchmischten Reaktor wird eine katalysierte Reaktion durchgeführt. Die effektive Reaktionsgeschwindigkeit soll bestimmt werden.

einfacher Ansatz:  $\frac{dc}{dt} = -kc^{n_{eff}}$

genauer: allgemeine Stoffbilanz (keine Konvektion)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\cancel{\text{div}(\vec{v}c)} + \text{div}(D \text{grad}(c)) - k_R c^n$$

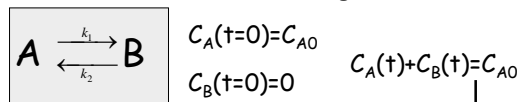
Kugelsymmetrie

Katalysatorpellet  $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) - k_R c^n$  Muss eigentlich gelöst werden

$\frac{dc}{dt} = -k_{eff} c^{n_{eff}}$  Kann manchmal als „Näherungslösung“ verwendet werden

### Aufgabe und Lösung

Eine reversible Reaktion 1. Ordnung wird betrachtet.



Wie groß ist der Umsatz im Gleichgewicht?

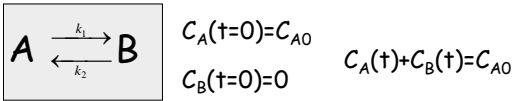
DGL:  $\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A + k_2 c_B$      $c_B = c_{A0} - c_A$

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A + k_2 (c_{A0} - c_A) = -(k_1 + k_2) c_A + k_2 c_{A0}$$

Gleichgewicht:  $\frac{dc_A}{dt} = 0 = -(k_1 + k_2) c_A + k_2 c_{A0}$

### Aufgabe und Lösung

Eine reversible Reaktion 1. Ordnung wird betrachtet.



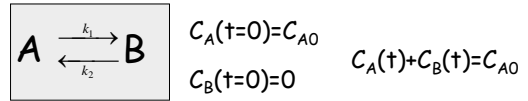
Wie groß ist der Umsatz im Gleichgewicht?

Gleichgewicht:  $\frac{dc_A}{dt} = 0 = -(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}$   
 $(k_1+k_2)c_A = k_2c_{A0} \quad c_A = \frac{k_2}{k_1+k_2}c_{A0}$

Umsatz:  $U = \frac{c_{A0} - c_A}{c_{A0}} = \frac{c_{A0} - \frac{k_2}{k_1+k_2}c_{A0}}{c_{A0}} = 1 - \frac{k_2}{k_1+k_2} = \frac{k_1}{k_1+k_2} = U$

### Aufgabe und Lösung

Eine reversible Reaktion 1. Ordnung wird betrachtet.



Wie verläuft die Konzentration  $c_A(t)$ ?

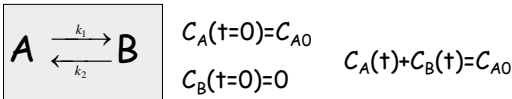
$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1c_A + k_2c_B \quad \frac{dc_A}{dt} = -(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}$$

Trennung der Variablen

$$\frac{dc_A}{-(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}} = dt \quad \int \frac{dc_A}{-(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}} = \int dt$$

### Aufgabe und Lösung

Eine reversible Reaktion 1. Ordnung wird betrachtet.



Wie verläuft die Konzentration  $c_A(t)$ ?

$$\int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{-(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}} = \int_0^{t'} dt = t'$$

Substitution  $x = -(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}$

$$\frac{dx}{dc_A} = -(k_1+k_2) \quad dc_A = \frac{dx}{-(k_1+k_2)} \quad \int_a^b \frac{dx}{-(k_1+k_2)x} = t'$$

### Aufgabe und Lösung

$$\int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{-(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}} = \int_0^{t'} dt = t' \quad \text{Substitution} \quad x = -(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}$$

$$\int_a^b \frac{dx}{-(k_1+k_2)x} = t' = \frac{1}{-(k_1+k_2)} \int_a^b \frac{dx}{x} = \frac{1}{-(k_1+k_2)} \ln(x) \Big|_a^b$$

$$= \frac{1}{-(k_1+k_2)} \ln \left( \frac{-(k_1+k_2)c_A(t') + k_2c_{A0}}{-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0}} \right) = t'$$

### Aufgabe und Lösung

$$\int_{c_{A0}}^{c_A(t')} \frac{dc_A}{-(k_1+k_2)c_A + k_2c_{A0}} = \int_0^{t'} dt = t'$$

$$= \frac{1}{-(k_1+k_2)} \ln \left( \frac{-(k_1+k_2)c_A(t') + k_2c_{A0}}{-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0}} \right) = t'$$

$$\frac{-(k_1+k_2)c_A(t') + k_2c_{A0}}{-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0}} = e^{-(k_1+k_2)t'}$$

$$-(k_1+k_2)c_A(t') + k_2c_{A0} = (-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0})e^{-(k_1+k_2)t'}$$

$$-(k_1+k_2)c_A(t') = -k_2c_{A0} + (-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0})e^{-(k_1+k_2)t'}$$

### Aufgabe und Lösung

$$-(k_1+k_2)c_A(t') = -k_2c_{A0} + (-(k_1+k_2)c_{A0} + k_2c_{A0})e^{-(k_1+k_2)t'}$$

$$c_A(t) = \frac{k_2c_{A0}}{(k_1+k_2)} + \left( c_{A0} - \frac{k_2c_{A0}}{(k_1+k_2)} \right) e^{-(k_1+k_2)t}$$

Konzentrationsverlauf bei einer Gleichgewichtsreaktion

