

Examensarbete vid
Institutionen för Reglerteknik,
Lunds tekniska högskola.

TANKREAKTORN

Analys och syntes av några
olika kemiska reaktionssystem.

Lund feb. 1970

Bengt Gustafsson.

⊗ Ansvarig handledare Gustafsson

Innehållsförteckning

	sid.
<u>Abstract.</u>	3
<u>Sammanfattning (svensk översättning av föreg.).</u>	5
<u>1. Inledning.</u>	7
<u>2. Matematiska modeller.</u>	11
2.1. Allmänt om systembeskrivningen	11
2.2. Enkel reaktion; $A \rightarrow R$.	13
2.3. Konsekutiva reaktioner; $A \rightarrow B \rightarrow R$.	18
2.4. Parallella reaktioner; $A \begin{matrix} \rightarrow B \\ \rightarrow R \end{matrix}$.	22
<u>3. Studium av reaktorns värmekurvor.</u>	26
3.1. Allmänt.	26
3.2. Värmeproduktionskurvan.	26
3.3. Värmeavledningslinjen.	28
3.4. Grafen	30
3.5. Kemiska parametrarnas inverkan på värmefunktionerna samt härav följande lägesförändringar för stationärpunkterna.	32
<u>4. Beskrivning av beräkningsprogrammen, subrutinerna CREMA1 och CREMA2.</u>	37
4.1. Schematisk uppbyggnad av subrutinerna.	37
4.2. Utmatningsbara resultat.	37
4.3. Kommentarer till de valda reaktionssystemen.	40
<u>5. Inledning till analysen och syntesen. Principer och förutsättningar.</u>	41
5.1. Stabilitetsundersökning.	41
5.2. Test av observerbarhet och styrbarhet för enkla och multivariabla system. Överföringsfunktioner.	44

5.3. Rekonstruktion av tillståndsvariabler.	47
5.4. Återkoppling från alla tillstånd för att uppnå ett system med föreskrivna poler.	48
<u>6. Analys och syntes av system vid den enkla reaktionen.</u>	49
6.1. Stabilitet	49
6.2. Test av observerbarhet och styrbarhet. Överföringsfunktioner.	67
6.3. Rekonstruktion av tillståndsvariabler.	68
6.4. Återkoppling.	69
<u>7. Analys och syntes av system vid de konsekutiva reaktionerna.</u>	74
7.1. Stabilitet. Numeriska svårigheter.	74
7.2. Test av observerbarhet och styrbarhet. Överföringsfunktioner.	82
7.3. Rekonstruktion av tillståndsvariabler.	89
7.4. Återkoppling.	92
<u>8. Analys och syntes av system vid de parallella reaktionerna.</u>	96
8.1. Stabilitet	96
8.2. Test av observerbarhet och styrbarhet. Överföringsfunktioner.	104
8.3. Syntes, Icke observerbara system.	112
<u>9. Slutord.</u>	114
<u>Införda beteckningar och konstanter.</u>	117
<u>Referenser.</u>	121
<u>Appendix 1. Reaktionsystem. Grafer. Systemmatriser.</u>	122
<u>Appendix 2. Illustration av variationer i reaktorns inloppstillstånd.</u>	155
<u>Appendix 3. Programlistningar.</u>	162

Abstract.

In this work, which is to be used as a supplementary example to the educational literature in Automatic Control, at LTH, I have chosen one reactor, in the group of chemical reactors, for the examination. The chosen reactor is the continuous-flow, autothermic, nonadiabatic stirred-tank reactor. Required cooling of the reaction mixture is achieved by letting the reactor-tank be surrounded by a cooling-jacket.

Three different reaction systems will be treated:

1. Single reaction, $A \rightarrow R$.
2. Consecutive reactions, $A \rightarrow B \rightarrow R$.
3. Parallel reactions, $A \begin{matrix} \xrightarrow{R} \\ \rightarrow B \end{matrix}$.

All the actual reactions are irreversible, exothermic and of the first order.

The nonlinear differential equations, describing material balances and energy balances, are formulated. After linearizing these equations around the existing stationary states, the matrices A , B , C and D of the standard form for system representation are calculated. This is done for various combinations of input signals and output signals in each stationary state.

Considering the energy balance of the coolant, two different methods are used in this work.

I. Neglect of coolant dynamics; use of average temperature.

II. Introduction of a differential equation, describing the coolant dynamics.

This results in two main systems, model I and model II, for each reaction type. The models are studied parallelly and differences are observed.

The graphical description of heat production and heat rejection is a useful mean in reactor studies and will therefore be thoroughly discussed.

Adaption of the system models to computer analysis is made. Two subroutines are written; CREMA1 for the single reaction, and CREMA2, for the consecutive and the parallel reactions. Main results from use of these subroutines are: stationary states, heat functions and system matrices. This forms the foundation of further analysis, which is done by computer calculation at the Data Central of Lund. FORTRAN-programs are used and the computer is a CD3600.

Main points in the analysis and synthesis of the systems:

1. Discussion of stability; eigenvalues of the system matrix A .
2. Test of observability and controllability.
3. By transformation to observable canonical form (for observable systems), the transfer functions, for systems with one input and one output signal, is determined.
4. Reconstruction of state-variables; suitable here in regard to the known difficulty in measuring concentrations.
5. Synthesis of controllable systems by a state-variable feed-back control in order to get a system having the wanted qualities.

Sammandrag.

I detta arbete, som är avsett att användas som ett kompletterande exempel till undervisningslitteraturen i Reglerteknik vid LTH, har jag valt att undersöka en reaktor från gruppen av kemiska reaktorer. Den valda reaktorn benämnes: Autotermiska, nonadiabatiska tankreaktorn med kontinuerligt flöde och fullständig omblandning av reaktormediets. Med en kylmantel, som helt omger reaktortanken, uppnås erforderlig kylning.

Tre olika reaktionssystem behandlas:

1. Enkel reaktion, $A \rightarrow R$.
2. Konsekutiva reaktioner, $A \rightarrow B \rightarrow R$.
3. Parallella reaktioner, $A \begin{matrix} \nearrow R \\ \searrow B \end{matrix}$.

Alla förekommande reaktioner förutsättes vara irreversibla, exotermiska och av första ordningen.

De icke-lineära differentialekvationerna, som beskriver massbalanser och energibalanser, uppställs. Ekvationerna lineariseras kring existerande stationärpunkter, varefter systemmatriserna A , B , C och D i standardformen för systemrepresentation beräknas. Detta göres för olika kombinationer av styrsignaler och mätsignaler i varje stationärpunkt.

Då det gäller att beskriva kylmediets energibalans, används två skilda metoder genomgående:

1. Kylmediets dynamik försummas; aritmetrisk medelvärde på kylmedietemperaturen begagnas.

II. En differentialekvation, som beskriver kylmediets dynamik, införes.

Detta resulterar i två huvudsystem, modell I och modell II, för varje reaktionstyp. Modellerna studeras jämsides och skillnader dem emellan noteras.

Grafisk representation av värmeproduktion och värmeavledning är ett värdefullt hjälpmedel vid studium av en kemisk reaktor, varför det kommer att behandlas ingående.

Systemmodellerna anpassas till beräkning med dator. Härtill skrives två subrutiner: CREMA1 behandlar enkla reaktionen, CREMA2 behandlar de konsekutiva och de parallella reaktionerna. Huvudresultat av dessa subrutiners användning är stationärpunkter, värmekurvor och systemmatriser. Detta utgör grunden för vidare analys, som med hjälp av FORTRAN-program utföres vid kunds datacentral. Datorn är en CD3600.

Punkter i av systemen.

1. Stabilitetsundersökning; egenvärden till matrisen A.
2. Test av observerbarhet och styrbarhet.
3. Genom transformation till observerbara kanoniska former (för obs. bara system) bestämmas överföringsfunktioner för system med en insignal och en utsignal
4. Rekonstruktion av tillståndsvariabler; praktisk metod här med hänsyn till svårigheten att mäta koncentrationer.
5. Syntes av styrbara system genom återkoppling från alla tillstånd för att åstadkomma ett system med önskade egenskaper.



1. Inledning

Den kemiska reaktorn, som behandlas, är en kontinuerligt arbetande, autoterm, nonadiabatisk tankreaktor. Erforderlig kylning av reaktormediet uppnås genom att avleda värme till ett kylmedium, som strömmar i en enkel mantel. Manteln tänkes omge reaktorn helt. Se fig 1.1. I figuren anges även de för reaktormedium, kylmedium och omgivning karakteristiska parametrarna. Beteckningar, se sid. 117.

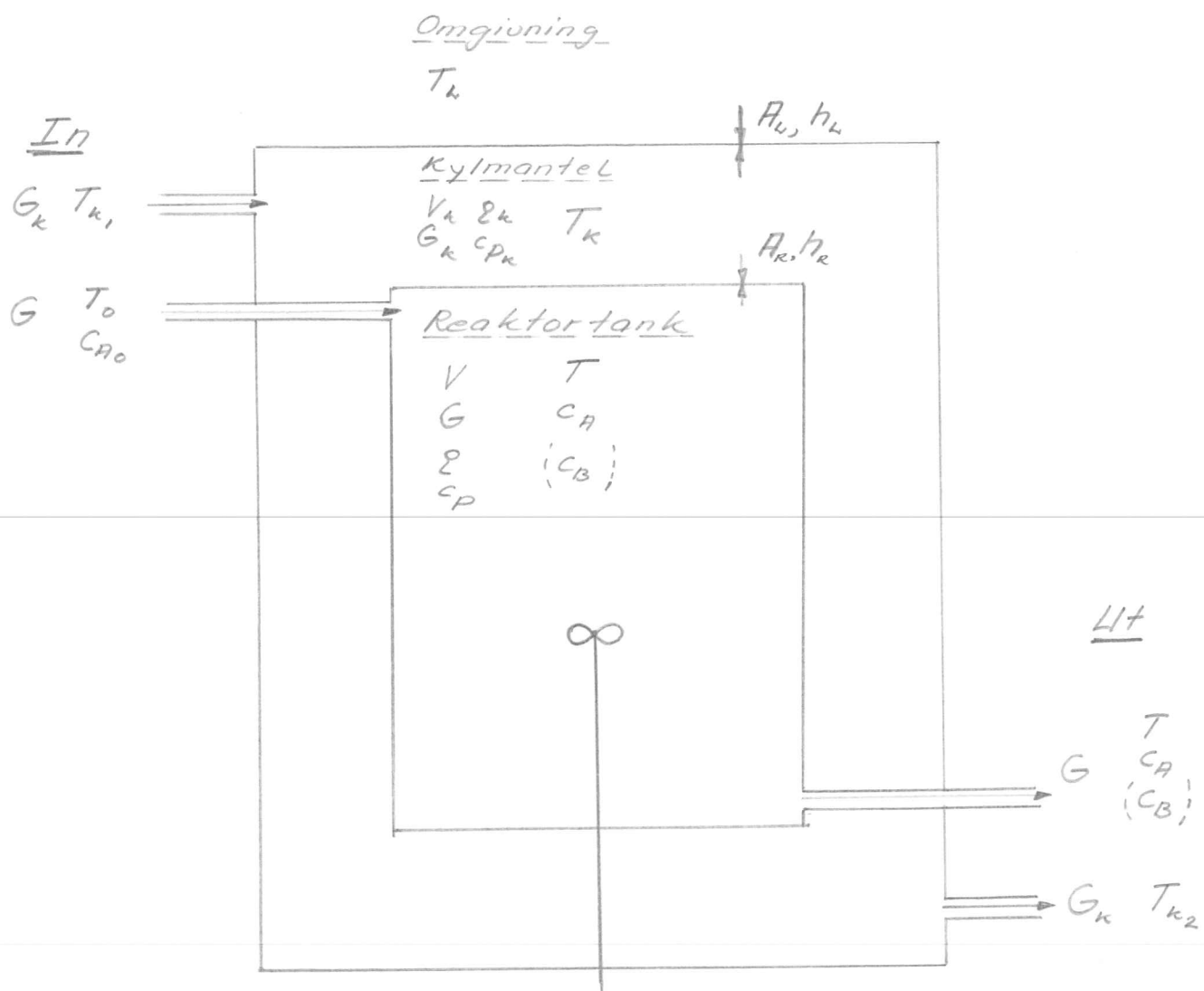


Fig 1.1. Reaktor med mantel.

Reaktionsblandningens temperatur i utloppet förutsättes vara densamma som i tanken. Detsamma antages för koncentrationerna. Vidare förutsättes samma volymflöde i inlopp, tank och utlopp, samt att täthetsändringarna är försumbara.

Angående kylsystemet kan påpekas, att mantel ger en mindre värmeöverföringsyta än den, som erhålles vid användning av en rörslinga in i reaktormediet. Jag har valt manteln på grund av, att man får en mindre komplicerad differentialekvation vid beskrivning av kylmediedynamiken, partiella derivator vid rörströmning undvikas.

Detta arbete ouser att belysa egenskaper hos tre olika reaktionssystem:

1. Enkel reaktion med en reagent som omsätts till produkter, $A \rightarrow R$.
2. Konsekutiva reaktioner, $A \rightarrow B \rightarrow R$.
3. Parallella reaktioner, $A \xrightarrow{R} B$.

I systemen 2 och 3 står B för den reaktionsprodukt, som man önskar utvinna ur respektive reaktion. Samtliga förekommande reaktioner är första ordningens reaktioner, irreversibla och exoterma. Reaktionshastighetskonstanter beskrivs med Arrhenius' ekvation: $k = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$.

Studium av ett reaktionssystem baseras på de olineära differentialekvationerna, som beskriver massbalanser för de i reaktionen ingående ämnena samt energi balans för reaktionsblandningen. Amundson och Bilou [1], Engwall [3] beskriver den enkla reaktionen. För de två andra systemen hänvisas till Westerterp [7]

I den refererade litteraturen betraktas kylmedietemperaturen på två olika sätt. Vid det ena sätts

kyltemperaturen lika med det ingående kylmediets temperatur, alltså konstant kyltemperatur. Detta baseras på antagandet om oändligt flöde. Variabel kylmediets temperatur införes vid det andra betraktelsesättet, genom att sätta kylmediets temperaturen i manteln, lika med medelvärdet av inströmnings- och utströmningstemperaturen, där den senare är beroende på temperaturen i reaktortanken.

En variant på systembeskrivning införes här genom en differentialekvation för kylmediets dynamik. Den på så sätt erhållna modellen studeras framledes parallellt med den gängse, (här åsyftas den andra av ovannämnda metoder med ett aritmetiskt medelvärde). Modellerna skiljes åt beteckningsmässigt genom **I**, för modell utan kyldynamik, och **II**, för modell med kyldynamik.

De stationära punkterna bestäms för varje reaktionssystem. I en stationär punkt är samtliga derivator lika med noll, emedan summan av inströmmande och producerad energi (massa) fullständigt balanseras av den utströmmande energin (massan).

Följaktligen kan stationärpunkterna till ett system beräknas, genom att samtliga derivator i differentialekvationerna sätts lika med noll, varefter man kombinerar ekvationer till en enda varur stationärvärdena för en variabel beräknas. Denna beräkning blir besvärlig och tidsödande att utföra "för hand", varför datamaskin toges till hjälp. Sedan stationärpunkterna erhållits kan differentialekvationerna lineariseras kring dessa. Systemet överföres på standardformen, Åström [8], dvs. genom införande av systemvariabler, karakteristiska för det erhållna lineära, dynamiska systemet, kan matriserna A ,

B, C och D bestämmas. Med tillgång till datamaskin kan ett lätthanterligt program skapas, som utför stationärpunktsbestämning, linearisering och matrisuppställning.

Avsikten är att, sedan två (I och II enligt ovan) matematiska modeller för varje reaktionssystem framräknats, utföra analys och syntes för systemen. Största delen av analysen och syntesen utföres vid CD 8090 i Lund. Härvid används en del av programmen i Programbiblioteket [9]. Stabiliteten i stationärpunkterna undersöks. De olika systemen testas med avseende på observerbarhet och styrbarhet, varvid en uppdelning i enkla respektive flervariabla system göres. De enkla systemen undersöks sedan. Möjligheter till en god rekonstruktion av systemets tillståndsvariabler analyseras. Rekonstruktionen göres enligt ekvationen för Kalmanfilter, se sid. 233, Åström [8]. För alla styr- och observerbara system analyseras en återkoppling från alla tillstånd för att uppnå ett slutet system, vars poler förutbestäms till olika lägen på negativa reella axeln. Koefficienterna i återkopplingen får ej bli för stora med tanke på den förstärkningen, som är möjlig vid de aktuella systemen.

Analys och syntes göres för system i den stationärpunkt, som är gynnsammast med hänsyn till producerad mängd av den önskade reaktionsprodukten. Dock undantag för stabilitetsundersökningen, som utföres i samtliga stationärpunkter till systemen.

2. Matematiska modeller.

2.1. Allmänt om systembeskrivningen.

Matematiska modeller för de olika systemen uppställs med utgångspunkt från de grundläggande differentialekvationerna. Olineära termer kommer in genom reaktionshastigheterna, varvid det ingår exponentialfaktorer. Amundson och Bilou [1] beskriver fullständigt den enkla reaktionen. Westerterp [2] ger underlag för formulering av differentialekvationerna beskrivande de konsekutiva och parallella reaktionerna.

Såväl materialbalanser som energi balanser grundar sig på jämvikts ekvationen:

$$In + Producerat = Ut + Akkumulerat.$$

Teorin för transformation från olineära diff. ekvationer till system på standardformen $\dot{S}(A, B, C, D)$, se Åström [3].

Systemvariabler införes, varvid följande heltalsparametrar kommer till användning:

NA: antal tillståndsvariabler = systemordningen

NB: antal styrsignaler

KU: parameter för kombination av styrsignaler

NC: antal mätsignaler

Tillståndsvektorn anges för varje enskilt reaktions-system nedan.

Styrsignalvektorn: $\vec{U} = \text{col}(u_1, \dots, u_{NB})$

Vektorns komponenter bestäms av NB och KU:

NB	KU	$\vec{U} = \text{col}(u_1, u_2, u_3)$
1	1	$\text{col}(T_{k1})$
2	1	$\text{col}(T_0, T_{k2})$
2	2	$\text{col}(c_{A0}, T_{k2})$
3	1	$\text{col}(T_0, c_{A0}, T_{k1})$

Mätsignalvektorn: $\vec{Y} = \text{col}(y_1, \dots, y_{NC})$

NC	$\vec{Y} = \text{col}(y_1, y_2)$
1	$\text{col}(T)$
2	$\text{col}(T, T_k)$

Mätsignalerna T och T_k har valts med tanke på deras lättåtkomlighet i jämförelse med koncentrationerna. Styrvariablerna kan väl sägas vara de gängse i "reaktorbranschen".

De införda beteckningarna på parametrar och konstanter finns samlade på sid. och följande.

I det följande representerar parameterprefixet Δ avvikelser från stationärvärde, och ett nedre index s anger värde i stationärpunkten.

ex. $\Delta C_A = C_A - C_{As}$

2.2 Enkel reaktion, $A \rightarrow R$.

Massbalans för ämnet A.

$$\begin{aligned} \text{Inströmmande material} &= G \cdot c_{A_0} && \text{mol/min} \\ \text{Producerat} &= V \cdot r_A && \text{"} \\ \text{Utströmmande} &= G \cdot c_A && \text{"} \\ \text{Ackumulerat} &= V \cdot \frac{dc_A}{dt} && \text{"} \end{aligned}$$

Uppställning av jämvikt ger:

$$\overset{\text{In}}{G \cdot c_{A_0}} + \overset{\text{Prod.}}{V \cdot r_A} = \overset{\text{Ut.}}{G \cdot c_A} + \overset{\text{Ack.}}{V \cdot \frac{dc_A}{dt}} \quad \dots\dots(2.1)$$

Energi balans för reaktor mediet:

$$\begin{aligned} \text{Inströmmande energimängd} &= G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T_0 && \text{kcal/min} \\ \text{Producerad} &= -V \cdot (-\Delta H) \cdot r_A && \text{"} \\ \text{Utströmmande} &= G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T && \text{"} \\ \text{Avledd} &= h_r A_r (T - T_k) && \text{"} \\ \text{Ackumulerad} &= V \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} && \text{"} \end{aligned}$$

Uppställning av jämvikt:

$$\overset{\text{In}}{G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T_0} - \overset{\text{Prod.}}{V \cdot (-\Delta H) \cdot r_A} = \overset{\text{Ut.}}{G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T} + \overset{\text{Ack.}}{h_r A_r (T - T_k)} + V \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} \quad \dots\dots(2.2)$$

Termen $h_r A_r (T - T_k)$ innehåller kylmedietemperaturen och de två nämnda betraktelse sätten ger

I. kylmediedynamiken försummad

Den avledda energimängden från reaktorn upptages av kylmediet. Värmeutbyte med omgivning försummas.

$$\text{Man får: } h_r A_r (T - T_k) = (G \cdot \rho \cdot c_p)_k \cdot (T_k - T_{k_2}) \quad \dots\dots(2.3)$$

$T_k = 1/2 \cdot (T_{k_1} + T_{k_2})$ vilket ger $T_{k_2} = 2T_k - T_{k_1}$ som insättes

$$\text{i (2.3) och ger om konstanten } d = \left(1 + \frac{h_r A_r}{2(G \rho c_p)_k}\right)^{-1}$$

$$\text{införes } T - T_k = d \cdot (T - T_{k_1}) \quad \dots\dots(2.4)$$

$$\text{samt } T_k = (1-d) \cdot T + d \cdot T_{k_1} \quad \dots\dots(2.5)$$

Ekvation (2.2) förändras nu om (3.4) insättes till

$$G \rho c_p T - V \cdot (-\Delta H) \cdot r_A = G \rho c_p T + h A_R (T - T_{k1}) + V \rho c_p \frac{dT}{dt} \dots (2.6)$$

II. Kylmediedynamiken beaktad.

Energibalans för kyldynamiken:

Inströmmande energimängd	=	$G_k \rho_k c_{pk} T_{k1}$	keal/min
Från reaktorn tillförd	— " —	$h_k A_R (T - T_k)$	"
Utströmmande	— " —	$G_k \rho_k c_{pk} T_{k2}$	"
Till omgivningen avledd	— " —	$h_u A_u (T_k - T_u)$	"
Akkumulerad	— " —	$V_k \rho_k c_{pk} \frac{dT_k}{dt}$	"

Om nu $T_{k2} = T_k$ antages fås jämvikten:

$$\underbrace{G_k \rho_k c_{pk} T_{k2}}_{\text{In}} + \underbrace{h_k A_R (T - T_k)}_{\text{Prod.}=0} = \underbrace{G_k \rho_k c_{pk} T_k}_{\text{Ut}} + \underbrace{h_u A_u (T_k - T_u)}_{\text{Ack.}} + V_k \rho_k c_{pk} \frac{dT_k}{dt} \dots (2.7)$$

Ekvationerna (2.1), (2.2), (2.6) och (2.7) divideras med koefficienterna för respektive derivator och man får:

$$\frac{dCA}{dt} = -\frac{CA}{\Theta} + r_A + \frac{CA_0}{\Theta} \dots (2.8)$$

$$\text{I} \quad \frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\Theta} - \frac{h_k A_R}{\rho c_p V} \cdot T - \frac{(-\Delta H) \cdot r_A}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\Theta} + \frac{h_k A_R}{\rho c_p V} \cdot T_{k1} \dots (2.9)$$

$$\text{II} \quad \frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\Theta} - \frac{h_k A_R}{\rho c_p V} \cdot T - \frac{(-\Delta H) \cdot r_A}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\Theta} + \frac{h_k A_R}{\rho c_p V} \cdot T_k \dots (2.10)$$

$$\text{III} \quad \frac{dT_k}{dt} = \frac{h_k A_R}{\rho_k c_{pk} V_k} T - \frac{T_k}{\Theta_k} - \frac{h_k A_R}{\rho_k c_{pk} V_k} \cdot T_k - \frac{h_u A_u}{\rho_k c_{pk} V_k} \cdot T_k + \frac{T_{k1}}{\Theta_k} + \frac{h_u A_u}{\rho_k c_{pk} V_k} \cdot T_u \dots (2.11)$$

Detta ger nu en bas för linearisering och formulering av de två huvudsystemen vid den enkla reaktionen. Markering i vänster marginal anger i vilken modell ekvationen används ingen markering anger en gemensam ekvation.

Reaktionshastigheten lineariseras kring punkten (c_A, T_s) .

$$r_A = -k \cdot c_A \quad \text{där } k = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$\Delta r_A = \Delta c_A \cdot \left(\frac{\partial r_A}{\partial c_A} \right)_s + \Delta T \cdot \left(\frac{\partial r_A}{\partial T} \right)_s \quad \text{derivering och insättning}$$

$$\Delta r_A = -k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_s}} \cdot \Delta c_A - k_0 \cdot \frac{E}{RT_s^2} \cdot e^{-\frac{E}{RT_s}} \cdot c_{A_s} \cdot \Delta T \quad \dots (2.12)$$

Inför följande konstanter:

$$e_s = \frac{E}{RT_s}, \quad k_s = k_0 \cdot e^{-e_s}, \quad g_s = k_s \cdot e_s \cdot \frac{c_{A_s}}{T_s};$$

$$g_2 = \frac{h_R A_R}{\rho c_p V}, \quad g_2 = \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p}, \quad g_3 = \frac{h_R A_R}{(\rho c_p V)_K}, \quad g_4 = \frac{h_U A_U}{(\rho c_p V)_K};$$

Linearisera eku. (3.8) t.o.m. (3.11) med användning av (3.12) samt konstanterna.

Lineariserade eku. (markering till vänster som förut.)

$$\frac{d\Delta c_A}{dt} = (-g_5) \cdot \Delta T + \left(-\frac{1}{\theta} - k_s\right) \cdot \Delta c_A + \left(\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta c_{A_0} \quad \dots (2.13)$$

$$\text{I. } \frac{d\Delta T}{dt} = \left(-\frac{1}{\theta} - g_2 \cdot d + g_2 \cdot g_5\right) \cdot \Delta T + (g_2 \cdot k_s) \cdot \Delta c_A + \left(\frac{1}{\theta}\right) \Delta T_0 + (g_1 \cdot d) \cdot \Delta T_K, \quad \dots (2.14)$$

$$\text{II. } \frac{d\Delta T}{dt} = \left(-\frac{1}{\theta} - g_1 + g_2 \cdot g_5\right) \cdot \Delta T + (g_2 \cdot k_s) \cdot \Delta c_A + (g_2) \cdot \Delta T_K + \left(\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta T_0 \quad \dots (2.15)$$

$$\text{II. } \frac{d\Delta T_K}{dt} = (g_3) \cdot \Delta T + \left(-\frac{1}{\theta_K} - g_3 - g_4\right) \cdot \Delta T_K + \left(\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta T_K + (g_4) \cdot \overset{=0}{\Delta T_U} \quad \dots (2.16)$$

I (2.16) är $\Delta T_U = 0$, då omgivningens temperatur betraktas som en konstant.

Tillståndsvektorn \vec{X} väljes:

$$\vec{X}_I = \text{col}(T, c_A) \sim NA=2 \quad \vec{X}_{II} = \text{col}(T, c_A, T_K) \sim NA=3$$

De två huvudsystemen blir för den enkla reaktionen av 2:a respektive 3:e ordningen. Standardformens matriser **A**, **B**, **C** och **D** fås genom kombination av de olika styrsignal- och mätsignalvektorerna. Se följande sid.

Matriser för enkel reaktion; modell I ~ NA=2

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_2 \cdot d + g_2 \cdot g_5 & g_2 \cdot k_s \\ -g_5 & -\frac{1}{\theta} - k_s \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \text{col}(T, c_A)$$

$$\begin{array}{l} \underline{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, T_{k_1}) \quad \text{col}(c_{A_0}, T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_{k_1}) \\ B: \quad \begin{bmatrix} g_1 \cdot d \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & g_2 \cdot d \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & g_2 \cdot d \\ \frac{1}{\theta} & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & g_1 \cdot d \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \underline{Y}: \quad \text{col}(T) \quad \text{col}(T, T_k) \\ C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1-d & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

Om $\vec{Y} = \text{col}(T)$ består D-matrisen endast av nollor.

Däremot om $\vec{Y} = \text{col}(T, T_k)$, fås från noll skilda D, enligt följande för olika \underline{U} :

$$\begin{array}{l} \underline{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \begin{array}{l} \text{col}(T_0, T_{k_1}) \\ \text{col}(c_{A_0}, T_{k_1}) \end{array} \quad \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_{k_1}) \\ D: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} \end{array}$$

C- och D-matriserna för denna modell ges förutom av vald utsignal även av relationen (2.5)

Matriser för enkel reaktion; modell II ~ NA=3

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_1 + g_2 \cdot g_5 & g_2 \cdot k_5 & g_2 \\ -g_5 & -\frac{1}{\theta} - k_5 & 0 \\ g_3 & 0 & -\frac{1}{\theta} - g_3 - g_4 \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \text{col}(T, C_A, T_K)$$

$$\vec{L}: \quad \text{col}(T_K) \quad \text{col}(T_0, T_{K_1}) \quad \text{col}(C_{A_0}, T_{K_1}) \quad \text{col}(T_0, C_{A_0}, T_{K_2})$$

$$B: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\theta} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\theta} \end{bmatrix}$$

$$\vec{Y}: \quad \text{col}(T) \quad \text{col}(T, T_K)$$

$$C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

I denna modell är D-matrisens element lika med noll för båda utsignalvektorerna.

2.3. Konsekutiva reaktioner, $A \rightarrow B \rightarrow R$.

För reaktionshastigheterna gäller:

$$r_A = -k_1 \cdot c_A \quad r_B = k_1 c_A - k_2 c_B$$

På samma sätt som vid den enkla reaktionen uppställs material- och energi balanser;

Materialbalans för ämne A:

$$\begin{array}{cccc} \text{In} & \text{Prod.} & \text{Ut} & \text{Ack} \\ G \cdot c_{A0} + r_A \cdot V & = & G \cdot c_A + V \cdot \frac{dc_A}{dt} & \dots (2.17) \end{array}$$

Materialbalans för ämne B:

$$\begin{array}{cccc} \text{In} & \text{Prod.} & \text{Ut} & \text{Ack} \\ 0 + r_B \cdot V & = & G \cdot c_B + V \cdot \frac{dc_B}{dt} & \dots (2.18) \end{array}$$

För energi balansen gäller att en term i (2.2) ändras, nämligen den som anger producerad energimängd. I denna reaktionstyp produceras värme enligt sambandet $V \cdot [(-\Delta H_1) \cdot k_1 \cdot c_A + (-\Delta H_2) \cdot k_2 \cdot c_B]$ om denna term insättes i (2.2) fås

$$\begin{array}{cccc} \text{In} & \text{Prod.} & \text{Ut} & \text{Ack.} \\ G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T_0 + V [(-\Delta H_1) \cdot k_1 \cdot c_A + (-\Delta H_2) \cdot k_2 \cdot c_B] & = & G \cdot \rho \cdot c_p \cdot T + h_{kR} A (T - T_k) + V \cdot \rho \cdot c_p \frac{dT}{dt} & \dots (2.19) \end{array}$$

Uppdelning på två modeller I och II enligt ovan dvs (2.6) och (2.7) införes med den ändrade energi produktionen och efter omformning av (2.17) och (2.18) fås; obs. (2.11) gäller naturligtvis oförändrad.

$$\frac{dc_A}{dt} = -\frac{c_A}{\theta} + r_A + \frac{c_{A0}}{\theta} \quad \dots (2.20)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -\frac{c_B}{\theta} + r_B \quad \dots (2.21)$$

$$\text{I. } \frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\theta} - \frac{h_{kR} A}{\rho c_p V} T + \frac{(-\Delta H_1) \cdot k_1 \cdot c_A}{\rho c_p} + \frac{(-\Delta H_2) \cdot k_2 \cdot c_B}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\theta} + \frac{h_{kR} A}{\rho c_p V} \frac{T_k}{k_2} \quad \dots (2.22)$$

$$\text{II. } \frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\theta} - \frac{h_{kR} A}{\rho c_p V} T + \frac{(-\Delta H_1) \cdot k_1 \cdot c_A}{\rho c_p} + \frac{(-\Delta H_2) \cdot k_2 \cdot c_B}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\theta} + \frac{h_{kR} A}{\rho c_p V} \frac{T_k}{k_2} \quad \dots (2.23)$$

Faktorerna $k_1 \cdot c_A$ och $k_2 \cdot c_B$ lineariseras i (c_{A5}, T_5)

$$\Delta(k_1 c_A) = k_{100} \cdot e^{-\frac{E_1}{RT_5}} \cdot \Delta c_A + k_{100} \cdot \frac{E_1}{RT_5^2} \cdot e^{-\frac{E_1}{RT_5}} \cdot c_{A5} \cdot \Delta T \quad \dots (2.24)$$

$$\Delta(k_2 c_B) = k_{200} \cdot e^{-\frac{E_2}{RT_5}} \cdot \Delta c_B + k_{200} \cdot \frac{E_2}{RT_5^2} \cdot e^{-\frac{E_2}{RT_5}} \cdot c_{B5} \cdot \Delta T \quad \dots (2.25)$$

Inför följande konstanter:

$$e_{15} = \frac{E_1}{RT_5}, \quad e_{25} = \frac{E_2}{RT_5}, \quad k_{25} = k_{100} \cdot e^{-e_{15}}, \quad k_{25} = k_{200} \cdot e^{-e_{25}}$$

$$g_{21} = \frac{(-\Delta H_1)}{\rho c_p}, \quad g_{22} = \frac{(-\Delta H_2)}{\rho c_p}, \quad g_{51} = k_{15} \cdot e_{15} \cdot \frac{1}{T_5}, \quad g_{52} = k_{25} \cdot e_{25} \cdot \frac{1}{T_5}$$

$$g_{6c} = g_{21} \cdot g_{51} \cdot c_{A5} + g_{22} \cdot g_{52} \cdot c_{B5}; \quad g_{21}, g_{33} \text{ och } g_{44} \text{ som förut}$$

linearisering av (2.20) - (2.23) göres, (2.16) behålles (2.24) och (2.25) insättes och man får det lineariserade systemet; markering I och II för försummad respektive beaktad kyldynamik.

$$\frac{d(\Delta c_A)}{dt} = (-g_{51} \cdot c_{A5}) \cdot \Delta T + (-\frac{1}{\theta} - k_{15}) \cdot \Delta c_A + (\frac{1}{\theta}) \cdot \Delta c_{A0} \quad \dots (2.26)$$

$$\frac{d(\Delta c_B)}{dt} = (g_{51} \cdot c_{A5} - g_{52} \cdot c_{B5}) \cdot \Delta T + (k_{15}) \cdot \Delta c_A + (-\frac{1}{\theta} - k_{25}) \cdot \Delta c_B \quad \dots (2.27)$$

$$\text{I. } \frac{d(\Delta T)}{dt} = (-\frac{1}{\theta} - g_{11} \cdot d + g_{6c}) \cdot \Delta T + (g_{21} \cdot k_{15}) \cdot \Delta c_A + (g_{22} \cdot k_{25}) \cdot \Delta c_B + (\frac{1}{\theta}) \cdot \Delta T_0 + (g_{11} \cdot d) \cdot \Delta T_k, \quad \dots (2.28)$$

$$\text{II. } \frac{d(\Delta T)}{dt} = (-\frac{1}{\theta} - g_{11} + g_{6c}) \cdot \Delta T + (g_{21} \cdot k_{15}) \cdot \Delta c_A + (g_{22} \cdot k_{25}) \cdot \Delta c_B + (g_{11}) \cdot \Delta T_k + (\frac{1}{\theta}) \cdot \Delta T_0 \quad \dots (2.29)$$

$$\text{II. } \frac{d(\Delta T_k)}{dt} = (g_{33}) \cdot \Delta T + (-\frac{1}{\theta_k} - g_{33} - g_{44}) \cdot \Delta T_k + (\frac{1}{\theta_k}) \cdot \Delta T_{k1}, \quad \dots (2.16)$$

Tillståndsvektorn \vec{X} väljes:

$$\vec{X}_I = \text{col}(T, c_A, c_B) \sim NA=3 \quad \vec{X}_{II} = \text{col}(T, c_A, c_B, T_k) \sim NA=4$$

Systemmatriser för de två modellerna följer

Matriser för konsekutiva reaktioner, modell $I \sim NA=3$

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_i \cdot d + g_6 c & g_{21} \cdot k_{1s} & g_{22} \cdot k_{2s} \\ -g_{51} \cdot c_{A_s} & -\frac{1}{\theta} - k_{1s} & 0 \\ g_{51} \cdot c_{A_s} - g_{52} \cdot c_{B_s} & k_{1s} & -\frac{1}{\theta} - k_{2s} \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \text{col}(T, c_A, c_B)$$

$$\underline{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, T_{k_1}) \quad \text{col}(c_A, T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_{k_1})$$

$$B: \quad \begin{bmatrix} g_i \cdot d \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & g_i \cdot d \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & g_i \cdot d \\ \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & g_i \cdot d \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\underline{Y}: \quad \text{col}(T) \quad \text{col}(T, T_{k_1})$$

$$C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1-d & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Om $\vec{Y} = \text{col}(T)$ består D-matrisen enbart av nollor.

För $\vec{Y} = \text{col}(T, T_{k_1})$ fås för de olika \underline{U} .

$$\underline{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \begin{matrix} \text{col}(T_0, T_{k_1}) \\ \text{col}(c_{A_0}, T_{k_1}) \end{matrix} \quad \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_{k_1})$$

$$D: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix}$$

C-och D-matrisen fås ur relationen (2.5) samt ur vald utsignal.

Matriser för konsekutiva reaktioner, modell II ~ NA = 4

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_1 + g_6 c & g_{21} \cdot k_{1s} & g_{22} \cdot k_{2s} & g_2 \\ -g_{51} \cdot c_{A_0} & -\frac{1}{\theta} - k_{1s} & 0 & 0 \\ g_{51} \cdot c_{A_0} - g_{52} \cdot c_{B_0} & k_{1s} & -\frac{1}{\theta} - k_{2s} & 0 \\ g_3 & 0 & 0 & -\frac{1}{\theta_n} - g_3 - g_4 \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \begin{pmatrix} T \\ c_A \\ c_B \\ T_n \end{pmatrix}$$

$$\vec{U}: \quad \text{col}(T_{k1}) \quad \text{col}(T_0, T_{k1}) \quad \text{col}(c_{A0}, T_{k1}) \quad \text{col}(T_0, c_{A0}, T_{k1})$$

$$B: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\theta_n} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta_n} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta_n} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\theta_n} \end{bmatrix}$$

$$\vec{Y}: \quad \text{col}(T) \quad \text{col}(T, T_n)$$

$$C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

D-matrisens element blir samtliga lika med noll vid denna modell för båda mätsignalvektorerna.

2.4 Parallella reaktioner, $A \xrightarrow{R} B$.

Jämfört med 2.3 kan nämnas att massbalanserna för ämnena A och B, (2.17) resp. (2.18), ej förändras till formen. De blir dock annorlunda vid linearisering p.g.a. att reaktionshastigheterna ändras. Energi-balansen för reaktionsblandning förändras, då värme-produktionen har annat utseende här.

För reaktionshastigheterna gäller:

$$r_A = -(k_1 + k_2) \cdot C_A, \quad r_B = +k_1 C_A; \quad k_1 = k_{100} \cdot e^{-\frac{E_1}{RT}} \quad k_2 = k_{200} \cdot e^{-\frac{E_2}{RT}}$$

Energi-balans för reaktionsblandningen:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{In} & & \text{Prod.} & & \text{H+} & & \text{Rek.} \\ G \cdot \rho c_p \cdot T_0 + [(-\Delta H_1) \cdot k_1 + (-\Delta H_2) \cdot k_2] \cdot C_A \cdot V & = & G \rho c_p T + h_c A_c (T - T_u) + V \cdot \rho c_p \frac{dT}{dt} \dots (2.30) \end{array}$$

För kylmediet gäller samma resonemang som förut.

De två modellerna m.a.p. kyldynamik fås; (2.30) omformas och markerings i vänster marginal som tidigare. se (2.11)

$$\frac{dC_A}{dt} = -\frac{C_A}{\theta} + r_A + \frac{C_{A0}}{\theta} \dots (2.20')$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{C_B}{\theta} + r_B \dots (2.21')$$

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\theta} - \frac{h_c A_c}{\rho c_p V} T + \frac{(-\Delta H_1) \cdot k_1 C_A \cdot T}{\rho c_p} + \frac{(\Delta H_2) \cdot k_2 C_A}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\theta} + \frac{h_c A_c}{\rho c_p V} T_u \dots (2.31)$$

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\theta} - \frac{h_c A_c}{\rho c_p V} T + \frac{(-\Delta H_1) \cdot k_1 C_A}{\rho c_p} + \frac{(\Delta H_2) \cdot k_2 C_A}{\rho c_p} + \frac{T_0}{\theta} + \frac{h_c A_c}{\rho c_p V} T_u \dots (2.32)$$

Faktorerna $k_1 C_A$ och $k_2 C_A$ lineariseras:

$$\Delta(k_1 C_A) = k_{100} \cdot e^{-\frac{E_1}{RT_0}} \cdot \Delta C_A + k_{100} \cdot e^{-\frac{E_1}{RT_0}} \cdot \frac{E_1}{RT_0^2} \cdot C_{A0} \cdot \Delta T \quad (\text{som ovan}) \dots (2.24)$$

$$\Delta(k_2 C_A) = k_{200} \cdot e^{-\frac{E_2}{RT_0}} \cdot \Delta C_A + k_{200} \cdot e^{-\frac{E_2}{RT_0}} \cdot \frac{E_2}{RT_0^2} \cdot C_{A0} \cdot \Delta T \dots (2.33)$$

Konstanterna $e_{15}, e_{25}, k_{15}, k_{25}, g_2, g_{21}, g_{22}, g_3, g_4, g_{51}$ och g_{52} som i 2.3. (se även sid. ?)

inför $g_{6P} = c_{A5} (g_{21} \cdot g_{51} + g_{22} \cdot g_{52})$.

Med hjälp av (2.24) och (2.33) kan nu det lineariserade systemet fås.

$$\frac{d(\Delta c_A)}{dt} = (-g_{51} \cdot c_{A5} - g_{52} \cdot c_{A5}) \Delta T + \left(-\frac{1}{\theta} - k_{15} - k_{25}\right) \Delta c_A + \left(\frac{1}{\theta}\right) \Delta c_{A0} \dots (2.34)$$

$$\frac{d(\Delta c_B)}{dt} = (g_{51} \cdot c_{A5}) \cdot \Delta T + (k_{15}) \cdot \Delta c_A + \left(-\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta c_B \dots (2.35)$$

$$\text{I. } \frac{d(\Delta T)}{dt} = \left(-\frac{1}{\theta} - g_2 \cdot d + g_{6P}\right) \cdot \Delta T + (g_{21} \cdot k_{15} + g_{22} \cdot k_{25}) \Delta c_A + (0) \cdot \Delta c_B + \left(\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta T_0 + (g_2 \cdot d) \cdot \Delta T_k \dots (2.36)$$

$$\text{II. } \frac{d(\Delta T)}{dt} = \left(-\frac{1}{\theta} - g_1 + g_{6P}\right) \cdot \Delta T + (g_{21} \cdot k_{15} + g_{22} \cdot k_{25}) \cdot \Delta c_A + (0) \cdot \Delta c_B + (g_2) \cdot \Delta T_k + \left(\frac{1}{\theta}\right) \cdot \Delta T_0 \dots (2.37)$$

$$\text{III. } \frac{d(\Delta T_k)}{dt} = (g_3) \cdot \Delta T + \left(-\frac{1}{\theta_k} - g_3 - g_4\right) \cdot \Delta T_k \dots (2.16)$$

Tillståndsvektorn \vec{x} väljes: (samma som i 2.3)

$$\vec{x}_{\text{I}} = \text{col}(T, c_A, c_B) \sim NA=3 \quad \vec{x}_{\text{II}} = \text{col}(T, c_A, c_B, T_k)$$

Två huvudsystem av 3:e respektive 4:e ordningen erhålles liksom i 2.3. \vec{Y} och \vec{U} är desamma som i 2.3, vilket medför identiska B-, C- och D-matriser.

De redovisas dock på nytt. Systemmatriserna följer på nästa sida. Element i A-matrisen som är oförändrat från 2.3 utmärks med asterisk, *.

Matriser för parallella reaktioner, modell I ~ NA = 3

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_1 \cdot d + g_{6P} & g_{21} \cdot k_{1S} + g_{22} \cdot k_{2S} & 0 \\ -c_{A3} (g_{51} + g_{52}) & -\frac{1}{\theta} - k_{1S} - k_{2S} & 0^* \\ g_{52} \cdot c_{A3} & k_{1S}^* & -\frac{1}{\theta} \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \text{col}(T, c_A, c_B)$$

$$\vec{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, T_{k_1}) \quad \text{col}(c_{A0}, T_{k_1}) \quad \text{col}(T_0, c_{A0}, T_{k_1})$$

$$B: \quad \begin{bmatrix} g_1 \cdot d \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & g_1 \cdot d \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & g_1 \cdot d \\ \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & g_1 \cdot d \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{Y}: \quad \text{col}(T) \quad \text{col}(T, T_{k_1})$$

$$C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1-d & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Om $\vec{Y} = \text{col}(T)$ blir samtliga D-matrisens element nollor.

För $\vec{Y} = \text{col}(T, T_{k_1})$ erhålls för olika \vec{U} ; $d_{2 \times 3} \neq 0$

$$\vec{U}: \quad \text{col}(T_{k_1}) \quad \begin{matrix} \text{col}(T_0, T_{k_1}) \\ \text{col}(c_{A0}, T_{k_1}) \end{matrix} \quad \text{col}(T_0, c_{A0}, T_{k_1})$$

$$D: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix}$$

Vald utsignal samt relationen (2.5) ger C- och D-matriserna.

Matriserna för parallella reaktioner, modell II. $\rightarrow NA=4$

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} - g_1 + g_{6P} & g_{21} \cdot k_{13} + g_{22} \cdot k_{25} & 0 & g_1 \\ -c_{A5}(g_{51} + g_{52}) & -\frac{1}{\theta} - k_{13} - k_{25} & 0 & 0 \\ g_{51} \cdot c_{A5} & k_{13} & -\frac{1}{\theta} & 0 \\ g_3 & 0 & 0 & -\frac{1}{\theta} - g_3 - g_4 \end{bmatrix} \quad \vec{X} = \begin{pmatrix} T \\ c_A \\ c_B \\ T_k \end{pmatrix}$$

$$\vec{U}: \quad \begin{array}{cccc} \text{col}(T_k) & \text{col}(T_0, T_{k1}) & \text{col}(c_{A0}, T_{k1}) & \text{col}(T_0, c_{A0}, T_{k2}) \end{array}$$

$$B: \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\theta_k} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta_k} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta_k} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta_k} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\theta_k} \end{bmatrix}$$

$$\vec{Y}: \quad \begin{array}{cc} \text{col}(T) & \text{col}(T, T_k) \end{array}$$

$$C: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Som tidigare vid modell med kyldynamik blir D-matrisens samtliga element lika med noll då mätsignalerna är tillståndsvariabler vid både $NC=1$ och $NC=2$.

3. Studium av reaktorns värmekurvor.

3.1. Allmänt

Vid studium av en kemisk reaktors egenskaper är det praktiskt att upprita de för reaktorn karakteristiska värmekurvorna. Den ena benämnes värme-produktionskurvan, $Q_p(T)$, den andra är värmeavledningslinjen $Q_A(T)$. Kurvan för värmeproduktion får principiellt olika utseende för de tre betraktade reaktionssystemen, medan värmeavledningslinjen, som är summan av två linjer, har genomgående samma form.

Genom att studera grafen för dessa funktioner av temperaturen, kan man dra slutsatser om stationärpunkternas statistiska stabilitet, deras förskjutning vid parameterförändringar m.m.

Dimensionen på värmefunktionerna är här vald till kcal per mol inströmmande reagent.

3.2 Värmeproduktionskurvan, $Q_p(T)$

2.1 Enkla reaktionen

Den producerade värmen blir: $(-\Delta H) \cdot k \cdot c_A \cdot V \frac{1}{G \cdot c_{A0}} \dots (3.1)$

Om i (2.8) $\frac{dc_A}{dt}$ sätts lika med noll fås

$c_{As} = c_{A0} + r_{As} \cdot \Theta$ eller $c_{As} = \frac{c_{A0}}{1 + k_s \Theta}$ som insättes i (3.1)

och man får $Q_p(T) = (-\Delta H) \cdot \frac{1}{1 + k_s \frac{1}{\Theta}} \dots (3.2)$

Grafen blir en enkel sk. S-kurva, fig 4.1.

b.) Konsekutiva reaktionen.

Sätt $\frac{dc_A}{dt} = 0$ i (2.20) och $\frac{dc_B}{dt} = 0$ i (2.21) och efter omvandling fås $c_{As} = \frac{c_{A0}}{1+k_1\theta}$ och $c_{Bs} = \frac{k_1\theta}{(1+k_2\theta)} \cdot c_{As}$;

Värmeproduktionen är $(-\Delta H_1) \cdot k_1 \cdot c_A + (-\Delta H_2) \cdot k_2 \cdot c_B$ $\cdot V \cdot \frac{1}{G \cdot c_{A0}}$

Insättning av c_{As} och c_{Bs} ger $Q_p(T)$.

$$Q_p(T) = \frac{1}{1 + \frac{1}{k_1\theta}} \left((-\Delta H_1) + (-\Delta H_2) \frac{1}{1 + \frac{1}{k_2\theta}} \right) \dots (3.3)$$

c.) Parallella reaktioner

Med $\frac{dc_A}{dt} = 0$ och $\frac{dc_B}{dt} = 0$ i (2.) resp. (2.) fås

$$c_{As} = \frac{c_{A0}}{1 + (k_1 + k_2)\theta} \quad \text{och} \quad c_{Bs} = k_2 \cdot \theta \cdot c_{As} ;$$

Värmeproduktionen; $Q_p(T) = ((-\Delta H_1)k_1 + (-\Delta H_2)k_2) \cdot c_A \cdot V \cdot \frac{1}{G \cdot c_{A0}}$

$$\text{Med } c_{As} = c_{Bs} \quad \text{fås} \quad Q_p(T) = \frac{(-\Delta H_1)}{1 + \frac{k_2}{k_1} + \frac{1}{k_1\theta}} + \frac{(-\Delta H_2)}{1 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{1}{k_2\theta}} \dots (3.4)$$

Kurvformen för (3.3) och (3.4) beror av förhållandet mellan hastighetskonstanterna k_1 och k_2 ; dvs. av de däri ingående aktivitetsenergierna E_1 och E_2 samt frekvensfaktorerna $k_{1\infty}$ och $k_{2\infty}$. Om kombinationen är sådan, att den ena (oftast k_1) hastighetskonstantens svängning "dämpas ut", när den andra "tar vid", så erhålles en s.k. dubbel S-kurva.

Se fig. 3.1.

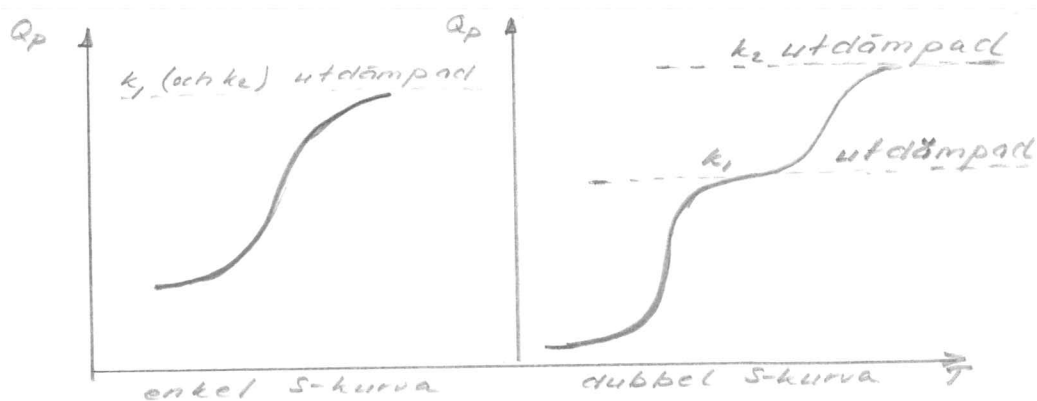


Fig 3.1

Principformer
för $Q_p(T)$

3.3. Värmeledningslinjen, $Q_A(T)$

Denna kan uppdelas i två linjer:

- Adiabatlinjen Q_A^a , som motsvarar värmeledning enbart genom skillnaden i värmeinnehåll mellan utgående och ingående reaktionsblandning.
- Kyllinjen $Q_A^k(T)$, som representerar värmeutbyte med kylmedium och eventuellt även med omgivande luften. Q_A^k får två olika utseenden beroende på om kyldynamiken är beaktad eller ej, jämför modell I. & II. i kap. 2.

Värmeledningslinjerna kan skrivas på formen:

$$Q = \operatorname{tg} \varphi \cdot (T - T_z) ; \operatorname{tg} \varphi = \text{lutningen och } T_z = \text{nollstället}$$

a) Adiabatlinjen, $Q_A^a(T)$

Skillnaden i energi mellan utströmmande och inströmmande blandning är $G g c_p (T - T_0)$.

Räknat per mol ingående A fås alltså:

$$Q_A^a(T) = \frac{g c_p}{c_{A_0}} (T - T_0) \quad \dots \dots (3.5)$$

riktningskoeff.: $\operatorname{tg} \alpha = \frac{g c_p}{c_{A_0}}$ nollställe: $T_z^a = T_0$

b) Kyllinjen $Q_A^k(T)$

Här särskiljes två fall I. och II.

Två faktorer införes u_1 och u_2

u_1 : faktor i riktningkoefficienten ($\operatorname{tg} \beta = \frac{h_k A_k}{c_{A_0} G} u_1$)

u_2 : faktor i nollstället ($T_{kz} = u_2 \cdot T_k$)

Värmeutbyte med kylmediet: $h_k A_k (T - T_k)$

med u_1 och u_2 kan även omgivningen hänföras hit.

I. Kyldynamiken försummad

$$U_L = \frac{1}{\left(1 + \frac{h_R A_R}{2(G\varrho c_p)_k}\right)} \quad \text{identisk med faktorn } d \text{ ovan, se (2.3).}$$

$$U_2 = 1 \quad \text{då värmeutbyte med omgivningen försummas.}$$

II. Kyldynamiken beaktad.

Om $\frac{dT_k}{dt}$ sätts lika med noll i (2.11); $N = h_R A_R + h_L A_L + (G\varrho c_p)_k$

$$\text{fås } T_k = \frac{(G\varrho c_p)_k}{N} T_{k1} + \frac{h_R A_R}{N} T + \frac{h_L A_L}{N} \cdot T_L \quad \dots (3.6)$$

Genom omformning och anpassning till uttrycket $h_R A_R (T - T_k)$ fås:

$$U_L = 1 - \frac{h_R A_R}{h_R A_R + h_L A_L + (G\varrho c_p)_k}$$

$$U_2 = \frac{\frac{(G\varrho c_p)_k}{h_L A_L} + \frac{T_{k1}}{T_L}}{\frac{(G\varrho c_p)_k}{h_L A_L} + 1}$$

Om nu kylinjen skrives på allmänna formen fås

$$Q_A^k = \frac{h_R A_R}{c_{R0} \cdot G} \cdot U_L \cdot (T - U_2 \cdot T_{k1}) \quad \dots (3.7)$$

riktningskoeff.: $\text{tg } \beta = \frac{h_R A_R \cdot U_L}{c_{R0} \cdot G}$ nollställe: $T_2^k = U_2 \cdot T_{k1}$

c) Addition: $Q_A^a(T) + Q_A^k(T)$

Om man summerar (3.5) och (3.7) fås funktionen, som beskriver den totala värmeledningningen.

$$Q_A(T) = \frac{\varrho c_p + \frac{h_R A_R U_L}{G}}{c_{R0}} \left(T - \frac{1}{1 + \frac{h_R A_R U_L}{G\varrho c_p}} \cdot T_0 - \frac{U_2}{1 + \frac{G\varrho c_p}{h_R A_R U_L}} \cdot T_{k1} \right) \dots (3.8)$$

riktningskoeff.: $\text{tg } \gamma = \text{tg } \alpha + \text{tg } \beta = \frac{\varrho c_p + \frac{h_R A_R U_L}{G}}{c_{R0}}$

nollställe: $T_2 = \frac{1}{\text{tg } \gamma} (\text{tg } \alpha \cdot T_0 + \text{tg } \beta \cdot U_2 \cdot T_{k1}) = \frac{1}{1 + \frac{h_R A_R U_L}{G\varrho c_p}} T_0 + \frac{U_2}{1 + \frac{G\varrho c_p}{h_R A_R U_L}} T_{k1}$

3.4 Grafen

Funktionerna enligt (3.6), (3.7) och (3.8) uppritas principiellt tillsammans med en värmeproduktionskurva av exempelvis enkel S-form. Se fig. 3.2

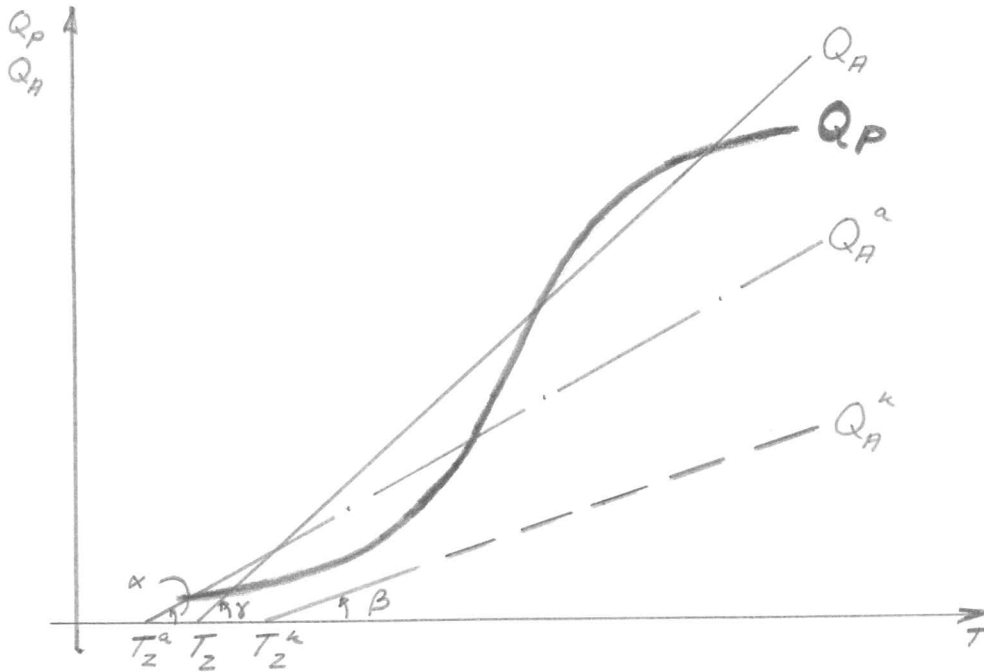


Fig. 3.2
Grafisk återgivning
av värmeproduktion
och värmeavledning.

Sammanfattning av beteckningarna:

	u_L	lutning	u_2	nollställe
Q_A^2	—	$\text{tg } \alpha = \frac{p \cdot c_p}{c \cdot A_0}$	—	$T_z^a = T_0$
$Q_A^k \text{ (I)}$	$\frac{1}{1 + \frac{h_i A_i}{2(G \cdot c_p)_k}}$	$\text{tg } \beta_I = \frac{h_i A_i \cdot u_{Lz}}{G \cdot c_{A0}}$	1	$T_z^k = T_{k1}$
$Q_A^k \text{ (II)}$	$1 - \frac{h_i A_i}{h_i A_i + h_e A_e + (G \cdot c_p)_k}$	$\text{tg } \beta_{II} = \frac{h_i A_i \cdot u_{Lz}}{G \cdot c_{A0}}$	$\frac{(G \cdot c_p)_k + \frac{T_k}{T_{k1}}}{\frac{h_i A_i}{h_i A_i} + 1}$	$T_z^k = u_2 \cdot T_{k1}$
Q_A	—	$\text{tg } \gamma = \text{tg } \alpha + \text{tg } \beta$	—	$T_z = \frac{1}{\text{tg } \gamma} (\text{tg } \alpha \cdot T_0 + \text{tg } \beta \cdot u_2 \cdot T_{k1})$

Om man betraktar fig 3.2, ser man att om det skall kunna existera mer än en skärningspunkt mellan $Q_p(T)$ och $Q_A(T)$, så måste Q_A 's lutning vara mindre än den maximala lutningen för Q_p . Alltså ett nödvändigt men "långt ifrån" tillräckligt villkor för mer än en stationärpunkt blir:

$$\text{tg } \gamma < \max \left(\frac{dQ_p}{dT} \right) \dots \dots (3.9)$$

Jämför kylinjens lutning i modell I med motsvarande i modell II. Ur sammanfattningen ovan fås:

$$H_{uI} = \frac{(Gc_p)_k}{(Gc_p)_k + \frac{1}{2} \cdot h_R \cdot A_R}; \quad H_{uII} = \frac{h_u A_u + (Gc_p)_k}{h_u A_u + (Gc_p)_k + h_R A_R};$$

Produkten $h_u A_u$ är alltid liten relativt övriga termer.

Faktorn H_{uI} kommer att vara större, närmare 1, än H_{uII} . Detta gäller genomgående i behandlade system framöver. Totala värmeledningsslinjen vid modell II har alltså mindre lutning än den vid modell I, då adiabatlinjens lutning är densamma vid båda modellerna.

Värmeledningsslinjens nollställe, T_2 , för modell II ligger vid lägre temperatur än motsvarande för modell I, om följande villkor är uppfyllt:

$$T_0 < T_{kI} \frac{t_{gRII} \cdot \frac{t_{gRII}}{t_{gRI}} - t_{g\beta II} \cdot H_{2II}}{t_{gK} \left[1 + \frac{t_{gRII}}{t_{gRI}} \right]} \dots \dots \dots (3.10)$$

Skillnaden mellan nämnda nollställen och lutningar bestämmer avstånden mellan en stationärpunkt i modell I och motsvarande stationärpunkt till system av modell II.

3.5. Kemiska parametrarnas inverkan på värmefunktionerna samt härav följande lägesförändringar för stationära punkterna.

a) "Fixerade" parametrarnas inverkan.

Med benämningen fixerad parameter förstås en parameter, som är hänförd till endera:

1. Reaktionsblandningens egenskaper: $(-AH)$, E_i , $k_{i\infty}$, ρ och c_p
2. Kylmediets egenskaper: ρ_k och c_{p_k}
3. Systemets geometri: V , V_k , A_R , A_U
4. Övriga: h_R , h_U och T_U .

Vid en "mer" exotermisk reaktion, större $(-AH)$, ökar självfallet värmeproduktionen, likaså bidrager ökande frekvensfaktor, $k_{i\infty}$, och minskande aktiveringsenergi, E_i , till en högre värmeproduktion. Då tankvolymen, V , ökas, utan att flödet, G , ändras, så höjs medeluppehållstiden, θ , och därmed värmeproduktionen.

Lutningen på värmeledningens adiabatlinje är direkt proportionell mot tätheten, ρ , och spec. värmekapacitet, c_p . För kylinjen gäller, att dess lutning är direkt proportionell mot värmeöverföringsytan, A_R , och koefficienten, $h_R \cdot \rho_k \cdot c_{p_k} \cdot A_U$ och h_U ingår förutom h_R , A_R och G_k i konstanterna u_1 och u_2 , nämnda i kap. 3.3. Skillnaden mellan systemet med försummad kyldynamik, modell I, och det med beaktad, modell II, blir liten om produkten $(G \cdot \rho \cdot c_p)_k$ är stor i förhållande till produkten $h_R \cdot A_R$; u_{2II} närmar sig värdet 1. Ökning av differensen sker om $h_U \cdot A_U$ ökar (och $(G \cdot \rho \cdot c_p)_k$ minskar). Storleksordningen på $\rho_k \cdot c_{p_k}$ varierar. Då vatten används som kylmedium, är den kring 1. Vid reaktioner med hög reaktionstemperatur används exempelvis ett kylmedium som Dowtherm-A (endifenyleter) och $\rho_k \cdot c_{p_k}$ blir ≈ 0.2 dvs. 5 ggr mindre än vid vatten.

Resonemanget ovan, kanske synes oegentligt utifrån kemisk synvinkel. Det avser dock bara, att mycket kortfattat beskriva, hur de berörda parametrarna påverkar den grafiska bilden av värmefunktionerna, över gränserna för olika reaktionssystem.

b) "Rörliga" parametrarnas inverkan.

"Rörliga" parametrar:

1. Flödena: G, G_k
2. Systemets inloppstillstånd: $T_0, C_{A0}, T_k,$

Om man betraktar fig 3.2 och sammanfattningen därunder kan man lätt konstatera:

Ökande G_k medför en mindre skillnad mellan system med kyldynamik och system utan kyldynamik.

Det gäller omvänt proportionalitet mellan G och lutningen för värmeledningens kylkurva.

En ändring av T_0 eller T_k , ger en parallell förskjutning av värmeledningens kylkurva mot högre resp. lägre temperaturer beroende på om T_0 eller T_k , ökas resp. minskas. Se även fig. 3.3 nedan.

Vidare gäller för värmeledningens kylkurva, att den är omvänt proportionell mot ingångskoncentrationen C_{A0} . Se fig. 3.4. nedan.

Värmeproduktionskurvan "sänks" om hålltiden, θ , minskas dvs. om G ökas. (Se Appendix 2, sid 160, Diagram 13)

c.) Styrning av stationär punkternas lägen genom ändring av inloppstillståndet (T_0, c_{A0}, T_{k1})

Figurer ritas för system med 3 stationärpunkter som "utgångsläge."

δ : betecknar avvikelser från ursprungligt värde.

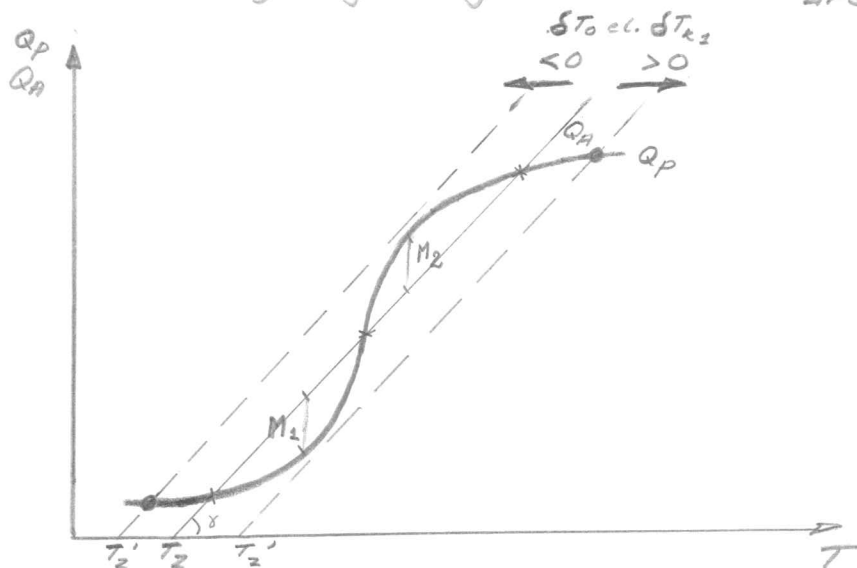


Fig. 3.3

Parallell förskjutning för Q_A genom ändring av T_0 eller T_{k1}

Om värmeavledningslinjen parallellt förskjutes genom ändring av T_0 eller T_{k1} , eller båda i kombination kan en stationärpunkt fås. Se fig 3.3

M_i : max eller min för $(Q_p(T) - Q_A(T))$ mellan stationärpunkt nr. i och stationärpunkt nr. $i+1$. (Denna faktor kan erhållas ur subrutinerna; se kap. 4)

ex. En stationärpunkt vid hög temperatur önskas;

Geometrisk betraktelse ger: $-M_2 = \delta T_2 \cdot \tan \gamma = \delta T_0 \cdot \tan \alpha = \delta T_{k1} \cdot \tan \beta$

* höj T_0 :

$$\delta T_0 \geq -M_1 \cdot \cot \alpha = -\frac{c_{A0}}{\rho c_p} \cdot M_1 \quad (M_1 < 0)$$

** höj T_{k1} :

$$\delta T_{k1} > -M_1 \cdot \cot \beta = -\frac{G \cdot c_{A0}}{h_R A_R U_2 \cdot U_2} \cdot M_1$$

Om i stället fem stationärpunkter finns byt M_2 mot $\max(|M_1|, |M_3|)$.

En stationärpunkt vid låg temperatur fås på motsvarande sätt med M_2 (el. M_2 och M_3). Se Appendix 2!

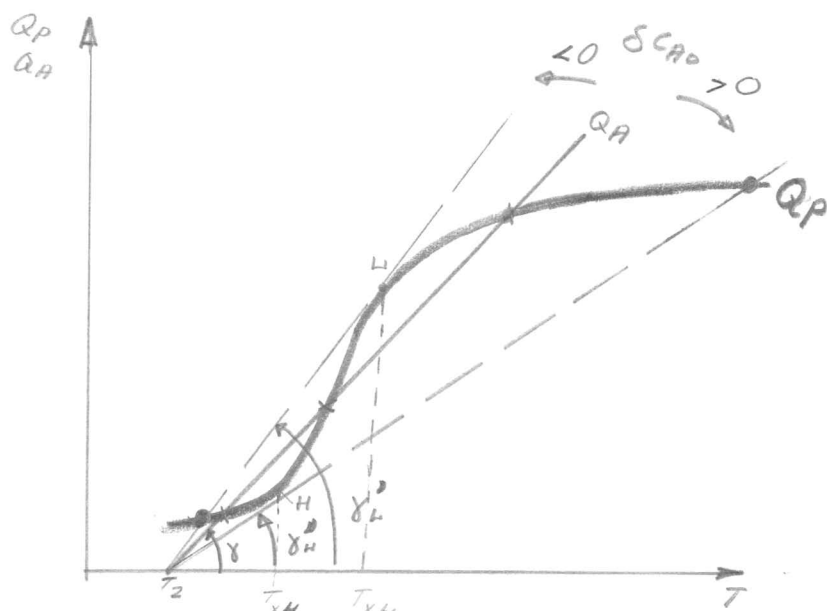


Fig. 3.4
Vridning av Q_A genom
ändrad c_{A0} .

Man kan genom ändring av c_{A0} och därmed värmeavledningslinjens lutning åstadkomma en stationär punkt, den högre oftast enbart teoretiskt då den förläggs vid en alltför hög temperatur, se fig 3.4.

Temperaturen i tangeringspunkten = T_{xL} resp. T_{xH} .

$$\text{Här gäller: } Q_p(T_x) = \text{tg } \gamma' \cdot (T_x - T_2) = \left\{ \frac{dQ_p}{dT} \right\}_{T=T_x} = \text{tg } \gamma'$$

Ur detta kan T_x lösas och sedan c_{A0}' , som ingår $\text{tg } \gamma'$.

Besvärliga räkningar, varför en direkt grafisk lösning är att föredraga. $c_{A0}' = c_{A0} \frac{\text{tg } \gamma}{\text{tg } \gamma'}$.

Se Appendix 2.

Om en förändring av stationärpunkternas antal och läge önskas, är det lämpligt, ofta även nödvändigt, att ändra T_0 , T_u och c_{A0} i kombination. Man vill exempelvis undvika alltför höga temperaturer, nå en speciell punkt vid "mitten" av $Q_p(T)$ eller måste man ta hänsyn till begränsningar vid temperering av reaktant och kylmedium till inloppstemperatur. Även begränsad tillgång på det reagerande ämnet A kan motivera ett sådant förfarande. Ett grafiskt förfarande är smidigt; se fig. 3.5 nästa sida.

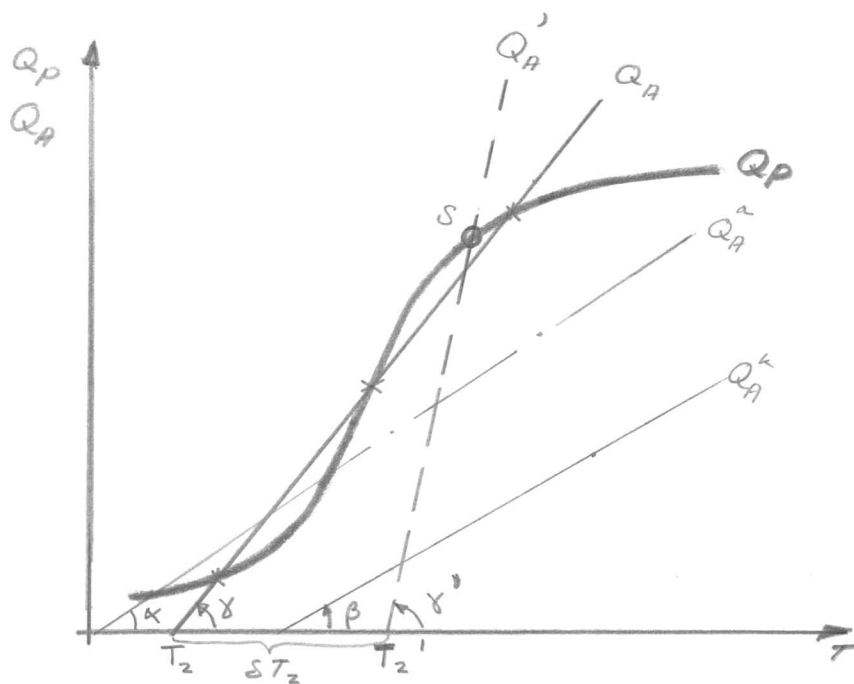


Fig. 3.5
Förflyttning av $Q_A(T)$
genom ändrat inloppstillsstånd (T_0, c_{A0}, T_{k1}) .

Ex. en stationärpunkt S önskas; $(\delta T_0)_{\max} = m$.

Steg:

* T_{k1} ökas så att T_2' uppnås

** c_{A0} minskas så att γ ändras till γ' ; $\gamma' > \gamma$

$$* \delta T_2 = \frac{1}{\tan \gamma} (m \cdot \tan \alpha + \delta T_{k1} \cdot u_2 \cdot \tan \beta) \quad \text{enligt ovan sid. 34.}$$

\Leftrightarrow

$$\delta T_{k1} = \frac{1}{u_2 \cdot \tan \beta} (\delta T_2 \cdot \tan \gamma - m \cdot \tan \alpha)$$

$$** c_{A0}' = c_{A0} \cdot \frac{\tan \gamma}{\tan \gamma'}$$

$$\delta c_{A0} = \left(1 - \frac{\tan \gamma}{\tan \gamma'}\right) \cdot c_{A0}$$

Numeriska exempel på parametervariation,
 se Appendix 2, sid. 155.

4. Beskrivning av beräkningsprogrammen CREMA 1 och CREMA 2.

Subrutinerna med kommentarer, angående genomförda beräkningar och förfarandet vid anrop från huvudprogram, återfinnes listade i Appendix 3, sid. 162.

4.1 Schematisk uppbyggnad av subrutinerna.

Programmeringsspråket är FORTRAN IV

CREMA 1 genomför beräkningar för den enkla reaktionen.

CREMA 2 behandlar de konsekutiva och de parallella reaktionerna med samma beräkningsgång som i CREMA 1

Ett kortfattat schema över subrutinernas uppläggning finns på nästa sida, fig. 4.1

4.2 Utmatningsbara resultat

- I. Antalet teckenväxlingar för $\frac{d(SQ(T))}{dT}$; se fig 4.1 & fig 4.2
- II. Approximativa extremvärden till $SQ(T)$.
- III. Antalet stationärpunkter.
- IV. Stationära värden.

CREMA 1	CREMA 2
T_s	T_s
C_{AS}	C_{AS}
T_{ks}	C_{DS}
	T_{ks}
	SP-mom.
- V. Lutning och nollställe för var och en av de tre värmeavledningslinjerna.
- VI. Tabellerade värden för värmeproduktionsfunktionen, temperaturintervall $\pm 0^\circ\text{C} - +1000^\circ\text{C}$, steget är 5°C .
- VII. Vald arbetspunkt med angivande av statistiska stabilitetsförhållandet.
- VIII. Matriserna A, B, C och D för system lineariserat kring arbetspunkten.

1 Fältdeklarationer och Commondeklarationer
(Matriserna A, B, C och D m.m.) (kemiska parametrarna)

2 Satsfunktionsdeklarationer.
Bl. a. $SQ(T) = Q_p(T) - Q_A(T)$; som motsvaras av $SF(T)$ i CREMA1 och av $F1(T)$ el. $F2(T)$ i CREMA2, beroende på reaktionstyp. Även derivatan av $SQ(T)$ deklarerar. Dessa nämnda funktioner används i 4) och 5) nedan. I övrigt kan nämnas; reaktionskonstanterna, värmefunktionerna. ($SQ(T)$; se fig 4.2)

3 Kemiska data för en vald reaktor.
I CREMA2 finns naturligtvis två datauppställningar. Dessa fixerade data kan förbigås, genom ett förfarande som beskrivs i kommentaren till resp. subrutin. Se Appendix.

4 Bestämning av antalet stationärpunkter.
Denna bestämning göres genom teckenstudium av $SQ(T)$ och dess derivata. Extremvärden till $SQ(T)$ fås som biresultat. Startvärden till iterationen i 5) uträknas.

5 Bestämning av stationära värden.
Iteration enligt Newton-Raphson ger nollställen till $SQ(T)$. Då absolutbeloppet av skillnaden mellan två konsekutiva temperaturvärden är mindre än 10^{-6} avbrytes iterationen.

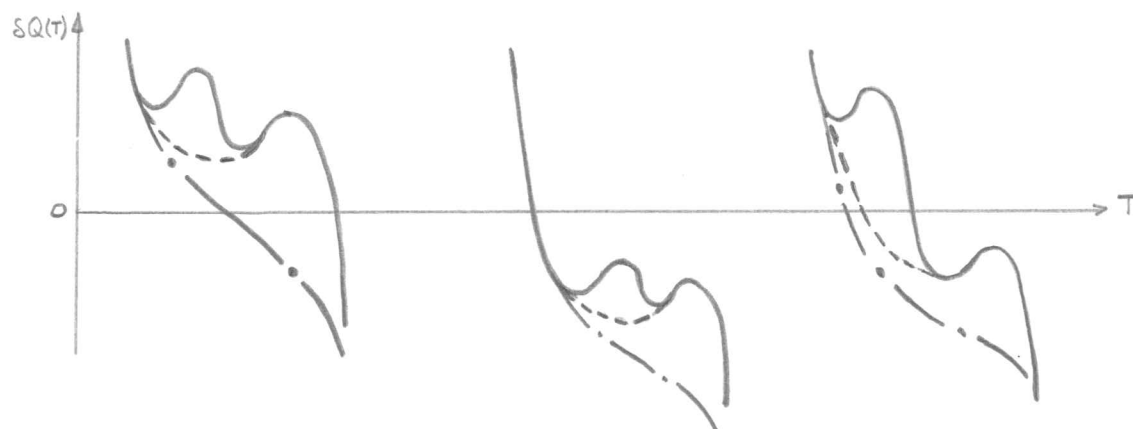
6 "Värmekurvor".
Nollställen och riktningskoefficienter för de olika värmeavledningslinjerna Q_A^k , Q_A^a och Q_A bestäms. Värmeproduktionskurvan beskrivs av en mängd värdepär $(T, Q(T))$. Intervall för T är 5° .

7 Arbetspunkt väljes.
Detta göres antingen "utifrån" eller också bestämmer subrutinen arbetspunkt genom maximering av konc. för önskad produkt.

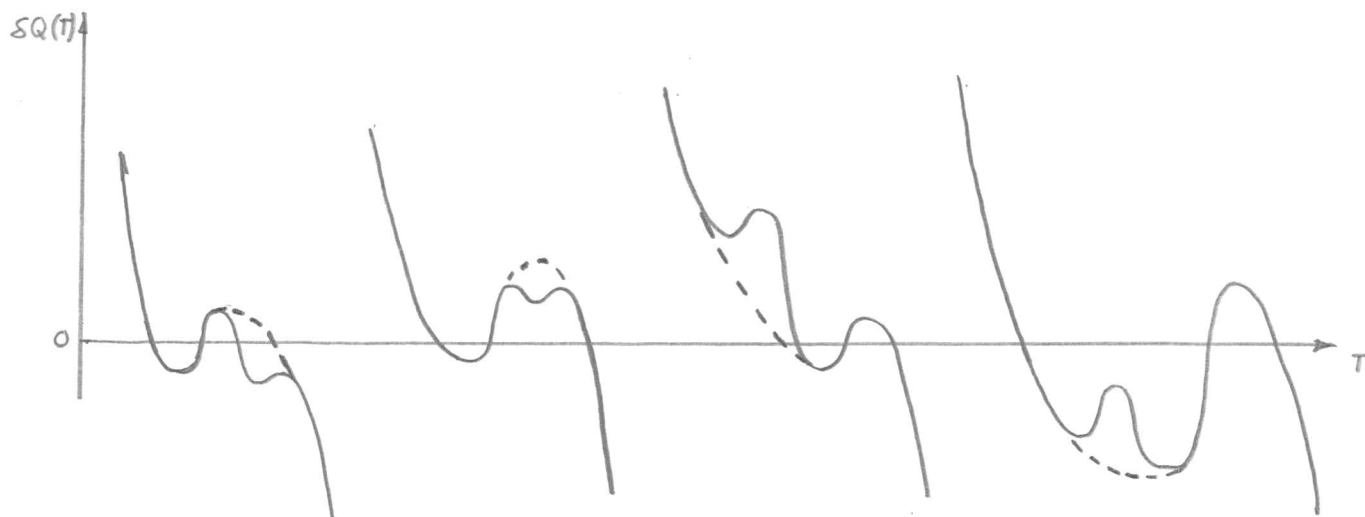
8 Systemmatriserna.
linearisering kring den valda arbetspunkten.

Fig. 4.1. Schematisk uppställning av beräkningsgången i subrutinerna.

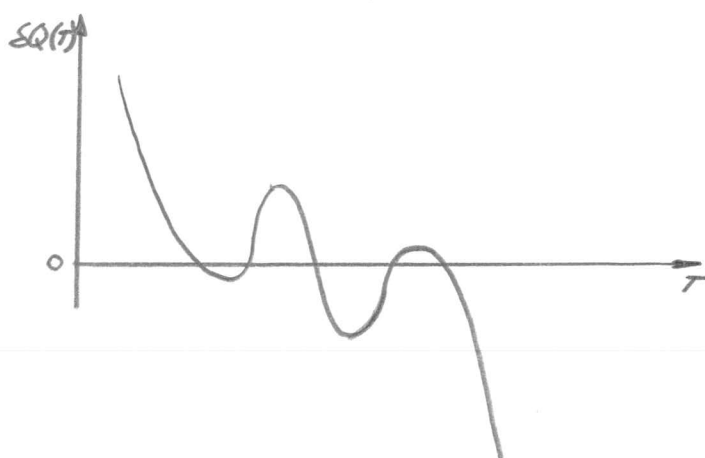
A. En stationärpunkt.



B. Tre stationärpunkter.



C. Fem stationärpunkter.



- - - : noll teckenväxlingar för $\frac{d(SQ)}{dT}$
 - · - : två " "
 - · · - : fyra "

Fig. 4.2

"Möjliga" olika utseenden på SQ(T); 4 teckenväxlingar existerar ej vid den enkla reaktionen.

Fig. ger underlag för iterationsmetod.

4.3. Kommentar till de valda reaktionssystemen.

Vid val av kemiska data till de olika reaktionssystemen har jag ej beaktat några optimeringsaspekter.

De valda parametervärdena ger bara ett exempel på reaktionssystem för resp. reaktionstyp. En annan grund för subrutinernas beräkningar är, som nämnts, lätt att åstadkomma.

Siffervärden i CREMA1, för den enkla reaktionen, har erhållits genom en modifiering av värdena, som tillhör reaktionssystemet i Engwall [2], hydrolys av en anhydrid. Enbart värmeavledningslinjen har ändrats.

Som exempel på konsekutiva reaktioner, i CREMA2, har jag valt en parameteruppställning, som har sitt ursprung i Westerterp [7]. Reaktionerna beskriver, något förenklat, framställningen av ftalsyreanhydrid ur naftalin och de äger rum i gasfas genom en fluidiserad bädd. En modifiering av värden tillhörande kylsystemet måste göras, med tanke på att den av Westerterp nämnda kvoten: $\text{kylyta genom reaktor volym} \left(\frac{A_R}{V} \right)$, blir ju normalt avsevärt mindre vid mantel kylning än vid kylning medelst rörslinga.

Data för parallella reaktionerna har "konstruerats". Systemet är dock fullständigt representativt. Utgångspunkten vid framräkning av värden till systemet var att få tre stationärpunkter samt ett i möjligaste mån realistiskt system.

5. Inledning till analysen och syntesen Principer och förutsättningar

Systemen, som behandlas i den följande analysen och syntesen, erhålles genom linearisering av de olika reaktionssystemen kring respektive arbetspunkt. Den av stationärpunkterna, som har högst koncentration av önskad reaktionsprodukt, benämnes arbetspunkt. (Om den formella parametern MAP sätts lika med noll vid anrop av subrutinerna, fås ett system lineariserat kring denna punkt.) En utökning av antalet undersökta stationärpunkter för ett specifikt system göres dock vid stabilitetsstudierna.

Värden på de kemiska parametrarna (dessa data, som finns i subrutinerna), stationär värden, värmekurvor och systemmatriser återfinnes i Appendix 1. En del av dessa resultat kommer för klarhetens skull att även presenteras direkt i analysavsnittet.

5.1. Stabilitetsundersökning.

När man studerar en kemisk reaktors stabilitet, analyseras vanligen beteendet hos reaktorn när den i en viss stationärpunkt utsätts för störningar i reaktionstemperaturen. Två begrepp kommer här in, nämligen 1. Statisk stabilitet och 2. Dynamisk stabilitet. En utförlig analys av stabiliteten för en enkel reaktion utan kylodynamik presenteras i [1] Amundson och Bilous samt [2] Amundson och Aris. Nedan följer en kort beskrivning av stabilitetsbegreppen.

I fig. 5.1. är en värme-
produktionskurva för en
enkel reaktion uppritad.
Genom att kombinera denna
med tre (principiellt) olika
värmeavledningslinjer får
man en schematisk bild av
de olika sätt på vilka en
reaktor kan arbeta. (Se ovan
kap. 3 angående variation av
värmeavledningslinjen). Om
konsekutiva eller parallella
reaktioner äger rum i reaktorn

bli variationerna fler. Men för att förklara sta-
bilitetsbegreppen är det tillräckligt med den enkla
reaktionen. Se [4] Harriott.

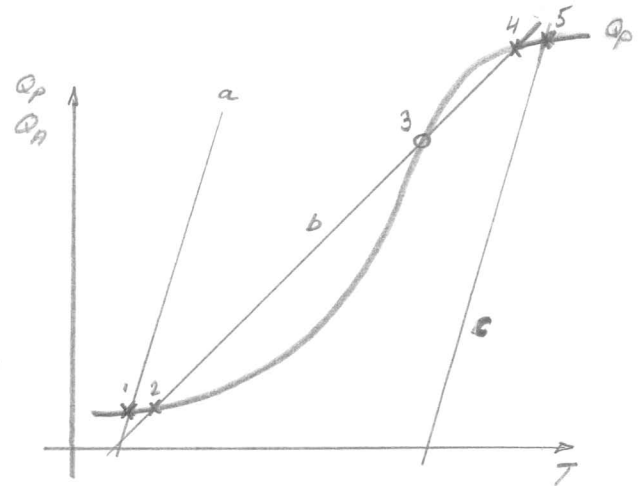


Fig 5.1

Möjliga olika "arbetsfall"
vid enkel reaktion

För att en stationärpunkt skall vara statistiskt
stabil krävs, att värmeavledningslinjens lutning är
större än värmeproduktionskurvans (Q_p), då åter-
föres reaktorn till ursprungliga stationärpunkten
efter en temperatur störning. Punkterna 1, 2, 4 och
5 i fig 5.1 uppfyller detta villkor; $\frac{dQ_R}{dT} > \frac{dQ_p}{dT}$.
Statisk instabilitet råder i punkt 3, ty en ökning
av temperaturen ger ett större tillskott i värmeproduk-
tion än i värmeavledning och reaktorns tempera-
tur stiger tills punkt 4 nås. På motsvarande sätt
uppnås stationärpunkt 2 vid en minskning av
temperaturen. Vid detta avseende är reaktions-
dynamiken ej betraktad. Q_p i fig 5.1 är ju en
kurva, som beskriver värmeproduktionen för
varje temperatur vid stationär värde på kon-
centrationen; se ovan kap. 3.

Om en reaktor, arbetande i en stationärpunkt, utsättes för exempelvis en snabb positiv störning m. a. p. temperaturen, så ökar värmeproduktionen mer än, vad Q_p anger. Koncentrationen faller ej momentant till stationärvärdet vid den högre temperaturen. Maximala värdet för ökningen i värmeproduktion fås om koncentrationen är konstant. Detta maximivärde kan betecknas $\frac{\partial Q_p^c}{\partial T}$, d.v.s. partiella derivatan av en värmefunktion $Q_p^c(c_{no}, T)$. Man kan dock praktiskt sett ej räkna med maximivärdet, då det alltid blir en liten sänkning i koncentrationen. För att dynamisk stabilitet skall råda fordras alltså att värmeavledningen ökar mer än ett belopp som ligger mellan $\frac{dQ_p}{dT}$ och $\frac{\partial Q_p^c}{\partial T}$.

Det kan kring en statiskt stabil men ej dynamiskt stabil stationärpunkt uppkomma en s. k. limit cycle för det olineära systemet. Här svänger temperatur och koncentration med konstant amplitud. Se [2] Pmunden och Paris, med exempel på limit cycles. I denna referens ges även matematiskt formulerade krav för den dynamiska stabiliteten vid enkel reaktion. För mer komplexa reaktionsystem och då kyldynamiken beaktas blir motsvarande villkor mycket komplicerade och ohanterliga. Jag har därför valt att direkt studera egenvärdena till systemmatrisen A . Ett positivt egenvärde indikerar instabilitet för systemet. Två enkla program har använts vid analys av stabiliteten, dessa finns listade i Appendix 3 EIVAR behandlar enkla reaktionen och PARV 22 de konsekutiva och de parallella reaktionerna.

5.2. Test av observerbarhet och styrbarhet för msv system och enkla system. Överförings- funktioner för enkla system.

Analysen av reaktionssystemen enligt rubriken göres med hjälp av två program, för körning på CD 3600. ANAWCR genomför analys av system härrörande från enkla reaktionen. ANAWCR2 används vid analys av de konsekutiva och de parallella reaktionerna. I programmen anropas subrutiner, som återfinns i [9] Programbibliotek vid inst. f. reglerteknik, KTH. Se kommentar till resp. subrutin som nämnes nedan. Åström [8] behandlar utförligt begreppen styrbarhet och observerbarhet samt innebörden av överföringsfunktionen. Definitionerna för observerbarhet och styrbarhet återges kort.

* observerbarhet:

Ett tillstånd x^0 är observerbart om det existerar ett ändligt, positivt t_2 (tid) sådant att tillståndet x^0 kan bestämmas ur styrsignalens och mätsignalens värden i tidsintervallet $(-t_2, 0)$. Om samtliga tillstånd är observerbara säges systemet vara observerbart.

** styrbarhet

Ett tillstånd x^0 är styrbart om det existerar ett ändligt, positivt t_2 och en styrsignal u i tidsintervallet $(0, t_2)$, som överför tillståndet x^0 till origo. Om samtliga tillstånd är styrbara säges systemet vara styrbart.

Beräkningsproceduren i ANALCR och ANALCR2 är densamma. Den genomlöps två gånger vid varje reaktionssystem; en gång för modell I och en gång för modell II.

Beräkningspunkter:

1. Multivariabla systemen, med $NC=2$, testas med övriga på observerbarheten. Då G -matrisen är densamma i alla systemen, behöver endast ett av systemen testas. Testen göres med subrutinen OBSTEST, se [9]. Utskrift av T -matris, IRANK och vektorn NECOHT sker. Radvektorerna i T -matrisen uppspannar det ortogonala komplementrummet till det icke-observerbara underrummet. Rang av denna matris, formella parametern IRANK, anger alltså komplementrummets dimension. Element j i vektorn NECOHT är **1**, om mätsignalkomponenten y_j kommer att öka antalet observerbara tillstånd, som uppnåtts med mätsignalerna y_2 t.o.m y_{j-1} , annars är $NECOHT(i) = 0$.

2. Styrbarheten testas för alla systemen. Detta göres med OBSTEST. Angående olika styrsignalvektorer, se kap. 2.

3. Tre olika enkla system bildas genom att låta T_0 , C_{A0} och T_k vara styrsignal till var sitt system i nämnd ordning. I alla dessa enkla system är mätsignalen: $y=T$. Aktuella systemmatriser erhålls lätt från systemet med $NC=2$, $NB=3$ och $KH=1$. Observerbarhet för de enkla systemen testas med hjälp av OBSTEST. En test för alla system som ovan; under punkt 1.

4. Observerbara system transformeras till den observerbara kanoniska formen med hjälp av subrutinen TOBSKAN. Transformationsmatrisen utskrivs. Koefficienterna i karakteristiska eku. $A(i)$, $i=1 \dots NA$ erhålles även. De till respektive delsystem hörande koefficienterna $B(i)$ fås genom att multiplicera transformationsmatrisen med respektive B-matris (en kolonn). Utskrift göres av $B(i)$, $i=1 \dots NA$ med angivande av aktuell styrsignal. Överföringsfunktionen G kan nu erhållas.

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{B(1) \cdot s^{NA-1} + B(2) \cdot s^{NA-2} + \dots + B(NA)}{s^{NA} + A(1) \cdot s^{NA-1} + \dots + A(NA)} \quad \text{då } D=0,$$

se vidare [B] Åström.

Detta programavsnitt överhoppas för icke observerbara system. Överföringsfunktionen för sådana system beräknas enligt $G(s) = D + C[sI - A]^{-1}B$.

5. Slutligen testas, med hjälp av OBSTEST, styrbarheten för de enkla delsystemen.

Programmen ANAKCR och ANAKCR2 återges listade i Appendix 3.

5.3 Rekonstruktion av tillståndsvariabler.

Vid syntes av system uppkommer kravet på rekonstruktion av tillståndsvariabler, som ej är direkt mätbara. Se [8] Åström sid. 226-236. Rekonstruktionen utföres här med en metod, som ej kräver derivering av styr- och mätsignaler. Om systemet, det aktuella, är observerbart kan samtliga tillstånd rekonstrueras. Utgångspunkt är ekvationen: $\frac{dx}{dt} = A \cdot \hat{x} + B \cdot u + K \cdot (y - C \cdot \hat{x})$, där \hat{x} är den rekonstruerade tillståndsvektorn. Om vektorn K är optimalt vald kallas nämnda ekvation för Kalmanfilter. Problemet är här alltså att välja vektorn K . Rekonstruktionsfelet $x - \hat{x}$ kan fås att konvergera olika snabbt mot noll beroende på egenvärdena till $[A - KC]$. Väljes K så att rekonstruktionsfelet snabbt avtar mot noll kan beräkningen enligt ekvationen ovan bli känslig för fel vid mätning av utsignalen. Vidare måste man vid dessa reaktionssystem ta hänsyn till den förstärkning, som är möjlig. Systemen, som behandlas vid rekonstruktionen har alla utsignalen $y = T$, dvs. $N=1$. Två program, som båda anropar en subrutin från [9], RECONK, har skrivits: RECAN1, för enkel reaktion och RECAN2 för konsekutiva reaktionerna. Som senare skall framgå är systemen vid parallella reaktionerna inte observerbara, varför rekonstruktion av tillhörande tillståndsvariabler ej går att göra. RECAN1 och RECAN2 återfinnes listade i Appendix 3.

5.4. Återkoppling från alla tillstånd för att uppnå ett system med föreskrivna poler.

Utförligt resonemang om syntesmetoden, angiven i rubriken, finns i [8] Åström, sid 226-236. De system, som behandlas, erhålles ur det multivariabla systemet genom uppdelning i tre enkla system p.s.s. som vid analysen enligt 5.2. Varje styr signal studeras för sig. Styrbarhet förutsättes för systemet, som skall återkopplas. Målet med denna återkoppling är att åstadkomma system, vid respektive styrsignal, som är realiserbara, stabila och har tillfredställande snabbhet. Koefficienterna i återkopplingen, $\bar{u} = \bar{u}_r - L \cdot x$, får ej vara för stora. Värden kring 100 är de absolut största, som kan godtas. Stora koefficienter (element i L -vektorn) fås om det återkopplade systemet blir för snabbt. Styrsignalerna blir då stora redan vid små reglerfel och den lineära approximationens giltighet försämras, se vidare [8] Åström. Syntesmetoden används ej vid system gjorda av de parallella reaktionerna p.g.a. orsaker, som anges i kap. 7.3. Smärre ändringar i programmen RECONT och RECONT 2 behövs för att få två nya program, som beräknar L -vektorn (återkopplingens koefficienter). RECHRE behandlar enkla reaktionen och RECHRE2 de konsekutiva reaktionerna. Subrutinen RECONK är alltså användbar såväl här som vid rekonstruktion av tillståndsvariabler. Se kommentar till denna subrutin i [9] samt sid. 233, [8] Åström. Appendix 3 innehåller listningar av RECHRE och RECHRE2.

6. Analys och syntes av system vid den enkla reaktionen.

6.1 Stabilitet

A-matrisens egenvärden i de olika stationärpunkterna för resp. modell I och II, för kyl-dynamiken, anges i tabell 6.1 nedan. Värdena på de kemiska parametrarna är de, som valts som exempel och återfinnes i subrutinen CREMA2.

Tabell 6.1. Egenvärden.

A-matriser och stationärvärden, se Appendix 1.1.

System i stationärpunkterna 1 och 3 är stabila, dvs. statiskt och dynamiskt stabila, då realdelarna av egenvärdena samtliga är mindre än noll.

Den statiska stabiliteten kan ju utläsas ur grafen över värmekurvorna, och då stationärpunkt 2 inte är statiskt stabil måste här alltså finnas ett egenvärde, med realdelen större än noll, till systemmatrisen A. Se \otimes i tabell 6.1

Vid en jämförelse av mod. I och mod. II observeras att i den senare mod. finns ett egenvärde, som

Stationärpunkt nr.	modell I ; NA=2	
	Re λ	Im λ
1	-5.1424-002	+ i · 0.0000+000
	-7.2288-002	+ i · 0.0000+000
2	1.8122-001 \otimes	0.0000+000
	-4.5927-002	0.0000+000
3	-9.2506-002	0.0000+000
	-9.8319+000	0.0000+000
	modell II ; NA=3	
	Re λ	Im λ
1	-6.7383-002	0.0000+000
	-5.0825-002	0.0000+000
	-3.6929-001+	0.0000+000
2	1.8984-001 \otimes	0.0000+000
	-4.6969-002	0.0000+000
	-3.5694-001+	0.0000+000
3	-7.9035-002	0.0000+000
	-3.7149-001+	0.0000+000
	-1.4366+001	0.0000+000

ϵ_j är jämförbart med något egenvärde i modell I. Detta egenvärde benämnes allmänt i det följande λ_{II} , och i tabell 6.1 är det märkt med ett kors †. λ_{II} härrör sig från den utvidgning av systembeskrivningen, som införes med en differentialekvation för kylmediets dynamik.

Samtliga egenvärden i tabell 6.1 är reella, vilket bl.a. medför att system av båda modellerna i resp. arbetspunkt (st3) ϵ_j blir oscillativa. Viktsfunktionen innehåller bara termer av typ: $C_1 \cdot e^{-C_2 \cdot t}$, där C_1 och C_2 är konstanter. System av modell II blir något långsammare.

Egenvärdenas förändring vid värmeledningens linjens förflyttning studeras i två moment:

1. Parallell förflyttning av $Q_A(T)$ genom ändring av T_0 .
2. Vridning av $Q_A(T)$ genom ändring av ϵ_{A0} .

Vid förändring enligt 1 eller 2 kommer st1 och st3 att förskjutas mot högre temperatur och omsättning medan st2 går åt motsatt håll.

Betrakta nu tabell 6.2 på sid. 53 f.o.m. 55 där resultat av moment 1 presenteras. Egenvärdena i st1 vid de båda modellerna förändras markant då T_0 ändras, undantag är egenvärdet, som svarar ovannämnda λ_{II} . Detta förskjuts ett stycke mot origo från -0.370 till -0.366 och är hela tiden reellt. De övriga egenvärdena i modell II förändras som de i modell I. Vid ökning av T_0 närmar sig de båda egenvärdena varandra för att övergå till ett komplex konjugerat polpar. Denna övergång sker vid ett stationär värde på temperaturen, som är $\approx 311^\circ\text{K}$ för systemet av modell I.

och något lägre $\sim 307^\circ\text{K}$ för systemet av modell II. Komplexa polernas dämpning minskar med ökande T_0 . Slutligen, innan denna stationärpunkt "försvinner", fås två skilda, reella och negativa egenvärden. System i St 2 är hela tiden statiskt och dynamiskt stabila.

I den instabila stationärpunkten, St 2, rör sig λ_{II} från origo, på reella axeln. Det positiva egenvärdet förskjuts på reella axeln från $\sim 0,28$ till $\sim 0,04$, medan det negativa först ökas till beloppet men alldeles före denna stationärpunkts försvinnande rör sig detta ett litet steg tillbaka mot origo. Sista meningen gäller system av båda modellerna.

De två "jämförbara" egenvärdena till system av modell I och II rör sig från varandra vid 3:e stationärpunktens förflyttning mot högre temperatur. Egenvärdena är reella. Avståndet mellan dem är, för givet T_0 , mindre vid system av 2:a ordningen. λ_{II} rör sig mot origo. Alla egenvärden ligger på negativa, reella axeln och system av modell I och II, förblir stabila, då St 3 förskjuts med hjälp av T_0 .

Vid variation i reaktorns inloppskoncentration, c_{A_0} , undergår egenvärdena i de olika stationärpunkterna förändringar, som återges i tabell 6.3 sid 56 t.o.m. 58. Tabellen innehåller ett representativt urval av resultatet från en undersökning där c_{A_0} varierades mellan 3 och 10 mol/l. Egenvärdenas förskjutningar överensstämmer till riktningsarna med förändringarna vid variation av

T_0 . Detta gäller även det komplex konjugerade polparet i St 1. System av båda modellerna förblir stabila i St 1 och St 3, då c_{A_0} varieras. Observera att det till beloppet största egenvärdet i St 3 mycket snabbt förflyttas från origo. St 3 blir orimlig som arbetspunkt till reaktorn vid inloppskoncentrationer över ca 7.5-8 mol/L om ej övriga parametrar ändras.

Vid jämförelse av egenvärde till ett system av mod. I med motsvarande egenvärde till system av mod II i tabellerna 6.2 och 6.3, bör följande beaktas. Om T_0 ändras 2 °K, parallellt förflyttas totalvärmeledninglinjen ~1.1 °K vid mod I och ~1.2 °K vid mod II. St 3 i mod. II kommer härigenom att fjärra sig från St 3 i mod I, då T_0 ökar från 283.15 °K. För St 1 blir förhållandet omvänt, dvs stationärpunkterna närmar sig varandra. Till riktningarna blir förskjutningarna desamma då c_{A_0} ökas.

Om totalvärmeledninglinjen för system av mod II bringas att överensstämma med linjen för mod I, genom ändringar enligt kap. 3.5.4, blir inloppstillståndet för detta modifierade 3:e ordningssystem: $T_0 = 296.0 \text{ °K}$, $c_{A_0} = 4.644 \text{ mol/L}$; $T_{k_I} = 320.0 \text{ °K}$.

Egenvärdena till detta systems A-matris återges i tabell 6.4, för alla stationärpunkter. Jämför med de ursprungliga systemen av modell I och II. Egenvärdet λ_{II} är som förut. I St 1 och St 2 avvikelser, för övriga egenvärden, från ursprungliga systemet av modell I större hos modifierade systemet av modell II. I St 3 blir dock avvikelserna minst för det modifierade systemet; betrakta det till beloppet största egenvärdet i denna stationärpunkt.

Tabell 6.4		Egenvärden till modif. system
Stationärpunkt nr	Egenvärden till A-matrisen	
1	$\lambda_1 = -5.1760 \cdot 10^{-2}$ $\lambda_2 = -6.2617 \cdot 10^{-2}$ $\lambda_{II} = -3.6895 \cdot 10^{-1}$	
2	$\lambda_1 = +1.6053 \cdot 10^{-1}$ $\lambda_2 = -4.6727 \cdot 10^{-2}$ $\lambda_{II} = -3.5762 \cdot 10^{-2}$	
3	$\lambda_1 = -7.9499 \cdot 10^{-2}$ $\lambda_2 = -9.8594$ $\lambda_{II} = -3.7201 \cdot 10^{-1}$	

Tabell 6.2 Egenvärdenas variation, då T_0 ökas.

① $T_0=283,15$	② $T_0=285,15$
<p><i>Re λ med I; NA=2</i> <i>Im λ</i></p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,0314=002 0,0000+000</p> <p>-8,3711=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,4875=002 0,0000+000</p> <p>2,7858=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,5989=002 0,0000+000</p> <p>-4,6141+000 0,0000+000</p>	<p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,0404=002 0,0000+000</p> <p>-8,2363=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,5136=002 0,0000+000</p> <p>2,6082=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,5004=002 0,0000+000</p> <p>-5,4158+000 0,0000+000</p>
<p><i>med I; NA=3</i></p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,4443=002 0,0000+000</p> <p>-5,0184=002 0,0000+000</p> <p>-3,6987=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,6160=002 0,0000+000</p> <p>-3,5471=001 0,0000+000</p> <p>2,7935=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-8,0540=002 0,0000+000</p> <p>-3,7321=001 0,0000+000</p> <p>-6,6772+000 0,0000+000</p>	<p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,3618=002 0,0000+000</p> <p>-5,0239=002 0,0000+000</p> <p>-3,6980=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,6357=002 0,0000+000</p> <p>-3,5511=001 0,0000+000</p> <p>2,6286=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-8,0120=002 0,0000+000</p> <p>-3,7272=001 0,0000+000</p> <p>-7,8381+000 0,0000+000</p>
<p>③ $T_0=287,15$</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,0528=002 0,0000+000</p> <p>-8,0685=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>2,4232=001 0,0000+000</p> <p>-4,5368=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,4199=002 0,0000+000</p> <p>-6,3213+000 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,2583=002 0,0000+000</p> <p>-5,0314=002 0,0000+000</p> <p>-3,6971=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,6533=002 0,0000+000</p> <p>-3,5552=001 0,0000+000</p> <p>2,4574=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,9773=002 0,0000+000</p> <p>-3,7232=001 0,0000+000</p> <p>-9,1595+000 0,0000+000</p>	<p>④ $T_0=289,15$</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,0704=002 0,0000+000</p> <p>-7,8579=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>2,2304=001 0,0000+000</p> <p>-4,5575=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,3535=002 0,0000+000</p> <p>-7,3434+000 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,1276=002 0,0000+000</p> <p>-5,0419=002 0,0000+000</p> <p>-3,6960=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,6692=002 0,0000+000</p> <p>2,2798=001 0,0000+000</p> <p>-3,5596=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,9485=002 0,0000+000</p> <p>-3,7199=001 0,0000+000</p> <p>-1,0663+001 0,0000+000</p>

St 1

St 2

St 3

St 7


St 2

St 3

Tabell 6.2 forts

<p>⑤ T0=291,15 NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -5,0970=002 0,0000+000 -7,5895=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 2,0290=001 0,0000+000 -4,5760=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -9,2981=002 0,0000+000 -8,4968+000 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -6,9608=002 0,0000+000 -5,0574=002 0,0000+000 -3,6946=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -4,6836=002 0,0000+000 2,0954=001 0,0000+000 -3,5642=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -7,9243=002 0,0000+000 -3,7172=001 0,0000+000 -1,2372+001 0,0000+000</p>	<p>⑥ T0=293,15 NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -5,1409=002 0,0000+000 -7,2389=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,8176=001 0,0000+000 -4,5923=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -9,2517=002 0,0000+000 -9,7974+000 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -6,7445=002 0,0000+000 -5,0817=002 0,0000+000 -3,6929=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,9033=001 0,0000+000 -4,6966=002 0,0000+000 -3,5693=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -7,9040=002 0,0000+000 -3,7149=001 0,0000+000 -1,4314+001 0,0000+000</p>
<p>⑦ T0=295,15 NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -5,2276=002 0,0000+000 -6,7565=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,5941=001 0,0000+000 -4,6066=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -9,2125=002 0,0000+000 -1,1263+001 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -6,4548=002 0,0000+000 -5,1248=002 0,0000+000 -3,6907=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,7025=001 0,0000+000 -4,7083=002 0,0000+000 -3,5748=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -7,8868=002 0,0000+000 -3,7131=001 0,0000+000 -1,6519+001 0,0000+000</p>	<p>⑧ T0=297,15 NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -5,5923=002 0,0000+000 -5,8678=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,3546=001 0,0000+000 -4,6187=002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -9,1792=002 0,0000+000 -1,2914+001 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -6,0312=002 0,0000+000 -5,2265=002 0,0000+000 -3,6880=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX 1,4910=001 0,0000+000 -4,7188=002 0,0000+000 -3,5810=001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A=MATRIX -7,8722=002 0,0000+000 -3,7115=001 0,0000+000 -1,9020+001 0,0000+000</p>

Tobell 6. & forts.

<p>⑨ T0=299,15</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,3674e002 -7,3551e003</p> <p>-5,3674e002 7,3551e003</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1,0919e001 0,0000+000</p> <p>-4,6278e002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,1508e002 0,0000+000</p> <p>-1,4773e001 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,4131e002 -3,6586e003</p> <p>-5,4131e002 3,6586e003</p> <p>-3,6843e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1,2655e001 0,0000+000</p> <p>-4,7281e002 0,0000+000</p> <p>-3,5881e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,8597e002 0,0000+000</p> <p>-3,7101e001 0,0000+000</p> <p>-2,1855e001 0,0000+000</p>	<p>⑩ T0=301,15</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,8218e002 -9,4685e003</p> <p>-4,8218e002 9,4685e003</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>7,8944e002 0,0000+000</p> <p>-4,6320e002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,1265e002 0,0000+000</p> <p>-1,6864e001 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5,1115e002 -6,2753e003</p> <p>-5,1115e002 6,2753e003</p> <p>-3,6794e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1,0199e001 0,0000+000</p> <p>-4,7358e002 0,0000+000</p> <p>-3,5965e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,8491e002 0,0000+000</p> <p>-3,7090e001 0,0000+000</p> <p>-2,5067e001 0,0000+000</p>
<p>⑪ T0=303,15</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-3,5359e002 0,0000+000</p> <p>-4,0168e002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>3,8275e002 0,0000+000</p> <p>-4,6193e002 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,1057e002 0,0000+000</p> <p>-1,9215e001 0,0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,6540e002 -6,6767e003</p> <p>-4,6540e002 6,6767e003</p> <p>-3,6723e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>7,4006e002 0,0000+000</p> <p>-4,7411e002 0,0000+000</p> <p>-3,6071e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,8400e002 0,0000+000</p> <p>-3,7080e001 0,0000+000</p> <p>-2,8703e001 0,0000+000</p>	<p>⑫ T0=305,15</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9,0877e002 0,0000+000</p> <p>-2,1857e001 0,0000+000</p> <p>CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS</p> <p>CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS</p> <p><i>För NA=2 finns här alltså endast en stat. pkt vid hög temp.</i></p>  <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4,5546e002 0,0000+000</p> <p>-3,0160e002 0,0000+000</p> <p>-3,6600e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>3,7459e002 0,0000+000</p> <p>-4,7391e002 0,0000+000</p> <p>-3,6229e001 0,0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7,8321e002 0,0000+000</p> <p>-3,7072e001 0,0000+000</p> <p>-3,2816e001 0,0000+000</p>

Tabell 6.3. Egenvärdenas variation då c_{A0} ökas.

CA0=3.25

NA=2

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-5.1008-002 0.0000+000
-7.9234-002 0.0000+000

CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS
CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS

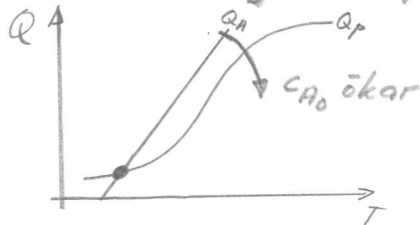
NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-7.1398-002 0.0000+000
-5.0636-002 0.0000+000
-3.6962-001 0.0000+000

CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS
CALCULATION OF WORKING-POINT FAILS

I detta fall, $c_{A0} = 3.25$, finns
endast en låg stat. pkt.



CA0=4.00

NA=2

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-5.1150-002 0.0000+000
-7.6413-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

2.0704-001 0.0000+000
-4.2652-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1156-001 0.0000+000
-1.1728+000 0.0000+000

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-6.9738-002 0.0000+000
-5.0705-002 0.0000+000
-3.6948-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-4.4522-002 0.0000+000
2.0848-001 0.0000+000
-3.5557-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-8.6529-002 0.0000+000
-3.8196-001 0.0000+000
-1.7505+000 0.0000+000

CA0=4.25

NA=2

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-5.1207-002 0.0000+000
-7.5425-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

2.0126-001 0.0000+000
-4.3955-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.0115-001 0.0000+000
-2.2553+000 0.0000+000

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-6.9165-002 0.0000+000
-5.0731-002 0.0000+000
-3.6943-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-4.5486-002 0.0000+000
2.0477-001 0.0000+000
-3.5602-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-8.2705-002 0.0000+000
-3.7549-001 0.0000+000
-3.2569+000 0.0000+000

CA0=4.50

NA=2

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-5.1271-002 0.0000+000
-7.4409-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

1.9470-001 0.0000+000
-4.4823-002 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-9.6511-002 0.0000+000
-3.8751+000 0.0000+000

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-6.8582-002 0.0000+000
-5.0760-002 0.0000+000
-3.6938-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-4.6135-002 0.0000+000
2.0007-001 0.0000+000
-3.5638-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-8.0782-002 0.0000+000
-3.7351-001 0.0000+000
-5.5661+000 0.0000+000

Tabell 6.3 forts.

<p>CA0=4.75</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.1343-002 0.0000+000</p> <p>-7.3365-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.8794-001 0.0000+000</p> <p>-4.5449-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9.4000-002 0.0000+000</p> <p>-6.2832+000 0.0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.7988-002 0.0000+000</p> <p>-5.0791-002 0.0000+000</p> <p>-3.6934-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4.6608-002 0.0000+000</p> <p>1.9500-001 0.0000+000</p> <p>-3.5668-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7.9693-002 0.0000+000</p> <p>-3.7223-001 0.0000+000</p> <p>-9.0774+000 0.0000+000</p>	<p>CA0=5.25</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.1516-002 0.0000+000</p> <p>-7.1176-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.7462-001 0.0000+000</p> <p>-4.6305-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9.1558-002 0.0000+000</p> <p>-1.5017+001 0.0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.6765-002 0.0000+000</p> <p>-5.0862-002 0.0000+000</p> <p>-3.6924-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.8470-001 0.0000+000</p> <p>-4.7255-002 0.0000+000</p> <p>-3.5717-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7.8621-002 0.0000+000</p> <p>-3.7104-001 0.0000+000</p> <p>-2.2257+001 0.0000+000</p>
<p>CA0=5.50</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.1622-002 0.0000+000</p> <p>-7.0024-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.6819-001 0.0000+000</p> <p>-4.6612-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9.0958-002 0.0000+000</p> <p>-2.2531+001 0.0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.6134-002 0.0000+000</p> <p>-5.0903-002 0.0000+000</p> <p>-3.6919-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.7965-001 0.0000+000</p> <p>-4.7489-002 0.0000+000</p> <p>-3.5739-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7.8353-002 0.0000+000</p> <p>-3.7075-001 0.0000+000</p> <p>-3.3931+001 0.0000+000</p>	<p>CA0=5.75</p> <p>NA=2</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.1747-002 0.0000+000</p> <p>-6.8827-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.6192-001 0.0000+000</p> <p>-4.6867-002 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-9.0552-002 0.0000+000</p> <p>-3.3341+001 0.0000+000</p> <p>NA=3</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.5488-002 0.0000+000</p> <p>-5.0948-002 0.0000+000</p> <p>-3.6914-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>1.7471-001 0.0000+000</p> <p>-4.7683-002 0.0000+000</p> <p>-3.5758-001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-7.8177-002 0.0000+000</p> <p>-3.7056-001 0.0000+000</p> <p>-5.1059+001 0.0000+000</p>

Tabell 6.3 forts.

CA0=6.00	CA0=7.00
NA=2	NA=2
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-5.1894-002 0.0000+000	-5.2991-002 0.0000+000
-6.7578-002 0.0000+000	-6.1749-002 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
1.5582-001 0.0000+000	1.3292-001 0.0000+000
-4.7083-002 0.0000+000	-4.7693-002 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-9.0277-002 0.0000+000	-8.9800-002 0.0000+000
-4.8779+001 0.0000+000	-2.0494+002 0.0000+000
NA=3	NA=3
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-6.4828-002 0.0000+000	-6.1999-002 0.0000+000
-5.0998-002 0.0000+000	-5.1277-002 0.0000+000
-3.6909-001 0.0000+000	-3.6888-001 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
1.6989-001 0.0000+000	1.5184-001 0.0000+000
-4.7847-002 0.0000+000	-4.8314-002 0.0000+000
-3.5777-001 0.0000+000	-3.5841-001 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-7.8060-002 0.0000+000	-7.7863-002 0.0000+000
-3.7044-001 0.0000+000	-3.7023-001 0.0000+000
-7.5995+001 0.0000+000	-3.4152+002 0.0000+000
CA0=8.00	CA0=9.00
NA=2	NA=2
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-5.4677-002 -3.9362-003	-5.1524-002 -6.1515-003
-5.4677-002 3.9362-003	-5.1524-002 6.1515-003
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
1.1177-001 0.0000+000	9.1583-002 0.0000+000
-4.8070-002 0.0000+000	-4.8323-002 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-8.9681-002 0.0000+000	-8.9649-002 0.0000+000
-7.7282+002 0.0000+000	-2.6662+003 0.0000+000
NA=3	NA=3
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-5.8697-002 0.0000+000	-5.3767-002 -1.5360-003
-5.1828-002 0.0000+000	-5.3767-002 1.5360-003
-3.6866-001 0.0000+000	-3.6842-001 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
1.3548-001 0.0000+000	1.2042-001 0.0000+000
-4.8607-002 0.0000+000	-4.8807-002 0.0000+000
-3.5898-001 0.0000+000	-3.5950-001 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
-7.7817-002 0.0000+000	-7.7805-002 0.0000+000
-3.7019-001 0.0000+000	-3.7017-001 0.0000+000
-1.3682+003 0.0000+000	-4.9745+003 0.0000+000

Den enkla reaktionen beskrives ju av ett andra ordningens system, då kyldynamiken försummas. Detta medför att man bl.a. enkelt och överskådligt kan studera sambandet mellan de två nödvändiga villkoren för lokal stabilitet. Studera problemställningen: Vad kan sägas om den dynamiska stabiliteten i en stationärpunkt, då den uppfyller villkoret för statisk stabilitet.

Karaktäristiska ekvationen för systemet är:

$$\lambda^2 - (a_{11} + a_{22}) \cdot \lambda + a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} \cdot a_{21} = 0; a_{jk} \text{ är element i } A\text{-matrisen enligt ovan kap. 2.2 mod. I.}$$

Två villkor skall vara uppfyllda för att denna karaktäristiska ekvations rötter båda skall få negativa realdelar:

$$1) a_{11} + a_{22} < 0 \quad 2) a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} \cdot a_{21} > 0$$

1) svarar mot den dynamiska stabiliteten och
2) mot den statiska stabiliteten. Se [3] Engwall.

Antag nu, att vi har statisk stabilitet, d.v.s villkor 2) är uppfyllt. Detta villkor skrives, efter insättning av matriselement enligt 2.2:

$$\frac{1}{\theta} + k_s + g_1 \cdot d (1 + k_s \theta) - g_2 \cdot g_5 > 0 \quad (5)$$

Villkor 1) övergår p.s.s. i:

$$\frac{2}{\theta} + k_s + g_2 \cdot d - g_2 \cdot g_5 > 0 \quad (6)$$

Då (5) gäller kommer (6) också att gälla under förutsättning att följande olikhet är uppfylld:

$$\frac{1}{\Theta} \geq g_2 \cdot d \cdot k_s \cdot \Theta \quad ; \quad \text{eller med alla kemiska}$$

parametrar insatta:

$$\frac{h_R \cdot A_R}{g_{cp} V} \cdot \frac{1}{\frac{h_R A_R}{2(g_{cp} G)_R} + 1} \cdot k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_s}} \cdot \Theta^2 \leq 1 \quad \dots (SD)$$

Härav ses att en statisk stabil stationärpunkt är dynamiskt stabil, om ej stationärpunkten överskrider en viss temperatur. För den här aktuella enkla reaktionen med kemiska parametervärden enligt App 1.1, blir temperaturen 319 °K.

6.2 Test av observerbarhet och styrbarhet. Överföringsfunktioner.

De olika system, som undersöks, kan erhållas ur nedanstående system för enkla reaktionen.

A-MATRIX

6.16334-001	2.62269+002
-2.82387-002	-1.05408+001

B-MATRIX

5.00000-002	0.00000+000	3.96341-002
0.00000+000	5.00000-002	0.00000+000

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000
2.37805-001	0.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	7.62195-001

mod I. NA=2
NB=3, KU=1,
NC=2.

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} T \\ c_A \end{pmatrix}$$

$$\bar{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ c_{A_0} \\ T_{K_1} \end{pmatrix}$$

$$\bar{y} = \begin{pmatrix} T \\ T_K \end{pmatrix}$$

A-MATRIX

5.93102-001	3.75332+002	5.20000-002
-2.78041-002	-1.50633+001	0.00000+000
1.24800-001	0.00000+000	-3.45968-001

B-MATRIX

5.00000-002	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	5.00000-002	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	2.00000-001

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

mod II. NA=3
NB=3, KU=1,
NC=2.

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} T \\ c_A \\ T_K \end{pmatrix}$$

$$\bar{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ c_{A_0} \\ T_{K_1} \end{pmatrix}$$

$$\bar{y} = \begin{pmatrix} T \\ T_K \end{pmatrix}$$

6.2.1 modell I

Test av observerbarheten för multivariabla systemen ger vidstående T-matris.

Rangen är lika med NA , alltså är båda tillstånden

$x_1 = T$ och $x_2 = c_A$ observerbara.

$NECOLIT(2) = 0$, utsignalen $y_2 = T_K$ bidrar ej till observerbarheten, som nås med $y_1 = T$.

T-MATRIX		
1.00000+000		0.00000+000
1.05408+001		2.62269+002
RANK T=2		
NECOLIT	1	0

Styrbarheten för de möjliga mus systemen testas.

*)

$NB=KU=1$ ger $\bar{u} = (T_{K1})$;

Rang $T=2$, båda tillstånden är alltså styrbara.

RANK T=2

**)

$NB=2, KU=1$ ger $\bar{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_{K1} \end{pmatrix}$

Rang $T=2$; systemet är styrbart.

T-MATRIX		
5.00000-002		0.00000+000
5.27038-001		-1.41194-003
RANK T=2		

***) $NB=KU=2$ ger $\bar{u} = \begin{pmatrix} c_{A0} \\ T_{K1} \end{pmatrix}$

Systemet är styrbart, då Rang $T=2$.

T-MATRIX		
0.00000+000		5.00000-002
1.31134+001		-3.08167-002
RANK T=2		

****) $NB=3, KU=1$ ger $\bar{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ c_{A0} \\ T_{K1} \end{pmatrix}$

Rang $T=2$ och systemet är alltså styrbart.

T-MATRIX		
5.00000-002		0.00000+000
5.27038-001		-1.41194-003
RANK T=2		

Styrbarheten, för systemen ovan, nås genomgående med 1:a elementet i styrsignalvektorn; $NECOLIT(i) = 0$ då $i > 1$.

De enkla systemen testas m.a.p. observerbarhet. Samma T-matris som ovan vid mus systemen erhålles här.

Denna matris har rangen lika med

2, varför systemen kan transformeras till observerbara kanoniska formen med vidstående transformationsmatris.

T-matriserna vid observerbarhetstester samt överföringsfunktionerna för de olika enkla systemen följer nedan:

CONTROL SIGNAL U1 (T_o)

T-MATRIX

5.00000-002 0.00000

5.27038-001 -1.41194

RANK T=2 ; styrbart system

$$G_o(s) = \frac{0.0500(s+10.541)}{(s+9.832)(s+0.0925)}$$

$$= \frac{(1+0.0949 \cdot s)}{(1+10.81 \cdot s)(1+0.1017 \cdot s)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (C_{R_o})

T-MATRIX

0.00000+000 5.00000-002

1.31134+001 -3.08167-002

RANK T=2 ; styrbart system

$$G_o(s) = \frac{13.113}{(s+9.832)(s+0.0925)} = 14.42 \cdot \frac{1}{(1+10.81 \cdot s)(1+0.1017 \cdot s)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_k)

T-MATRIX

3.96341-002 0.00000+000

4.17774-001 -1.11922-003

RANK T=2 ; styrbart system

$$G_o(s) = \frac{0.0396(s+10.541)}{(s+9.832)(s+0.0925)} = 0.459 \cdot \frac{(1+0.0949 \cdot s)}{(1+10.81 \cdot s)(1+0.1017 \cdot s)}$$

6.2.2. modell II

På samma sätt som för modell I presenteras resultaten.

T-matris vid test

av observerbarhet

för mus systemen.

System är obser-

verbara. Kompen-

ten $y_2 = T_k$ bidrar

ej till observerbarheten uppnådd med $y_1 = T$.

T-MATRIX

1.00000+000 0.00000+000 0.00000+000

1.54093+001 3.75332+002 5.20000-002

5.21142+000 1.29853+002 7.83291-001

RANK T=3 (=NR)

NECOUT 1 0

Nedan följer T-matriserna vid styrbarhets testerna.

*) $NB=KL=1$

$\bar{U} = (T_{k,})$

T-MATRIX

0.00000+000 0.00000+000 2.00000-001

1.04000-002 0.00000+000 2.89404+000

1.56658-001 -2.89163-004 3.00340-001

RANK T=3

***)

$NB=2, KL=1$

$\bar{U} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_{k,} \end{pmatrix}$

T-MATRIX

5.00000-002 0.00000+000 0.00000+000

7.70463-001 -1.39020-003 6.24000-003

2.60571-001 -4.80966-004 9.39950-002

RANK T=3

****)

$NB=KL=2$

$\bar{U} = \begin{pmatrix} C_{A_0} \\ T_{k,} \end{pmatrix}$

T-MATRIX

0.00000+000 5.00000-002 0.00000+000

1.87666+001 -1.23567-002 0.00000+000

6.49265+000 -1.05842-002 2.34207+000

RANK T=3

*****)

$NB=3, KL=1$

$\bar{U} = \begin{pmatrix} T_0 \\ C_{A_0} \\ T_{k,} \end{pmatrix}$

T-MATRIX

5.00000-002 0.00000+000 0.00000+000

7.70463-001 -1.39020-003 6.24000-003

2.60571-001 -4.80966-004 9.39950-002

RANK T=3

Rang $T=3=NA$ genomgående. Alla mus system är alltså styrbara. Vektorn $NECOLT$ blir identisk med den vid modell I. De enkla systemen är observerbara, T -matrisen är densamma som vid observerbarhetstesten för mus systemen. Nedan följer transformationsmatrisen till obs.kan.form, styrbarhetstester och överföringsfunktioner för de tre enkla systemen.

T-MATRIX TO OBS.CAN. FORM

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.54093+001	3.75332+002	5.20000-002
5.21142+000	1.29853+002	7.83291-001

CONTROL SIGNAL U1 (T_0)

T-MATRIX

5.00000-002	0.00000+000	0.00000+000
7.70463-001	-1.39020-003	6.24000-003
2.60571-001	-4.80966-004	9.39950-002

RANK $T=3$; styrbart system

$$G_0(s) = \frac{0.0500(s+15.063)(s+0.3460)}{(s+14.366)(s+0.3715)(s+0.0790)} = 0.618 \frac{(1+2.890 \cdot s)(1+0.0664 \cdot s)}{(1+12.65 \cdot s)(1+2.692 \cdot s)(1+0.0696 \cdot s)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (C_{R0})

T-MATRIX

0.00000+000	5.00000-002	0.00000+000
1.87666+001	-1.23567-002	0.00000+000
6.49265+000	-1.05842-002	2.34207+000

RANK $T=3$; styrbart system

$$G_0(s) = \frac{18.767(s+0.3460)}{(s+14.366)(s+0.3715)(s+0.0790)} = 15.39 \frac{(1+2.890 \cdot s)}{(1+12.65 \cdot s)(1+2.692 \cdot s)(1+0.0696 \cdot s)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_{k_1})

T-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	2.00000-001
1.04000-002	0.00000+000	2.89404+000
1.56658-001	-2.89163-004	3.00340-001

RANK T=3 ; styrbart system

$$G_o(s) = \frac{0.0104(s+15.063)}{(s+14.366)(s+0.3715)(s+0.0790)} = 0.371 \frac{(1+0.0664)}{(1+12.65s)(1+2.692s)(1+0.0696s)}$$

För att jämföra de enkla systemen vid modell I resp. modell II, uppritas Bode-diagram. Se diagram i Appendix 1.1. Studera först systemen med $\bar{u} = \text{col}(T_0)$. Såväl beloppkurvan som argumentkurvan ligger lägre vid modell I än vid modell II. Krets förstärkningen vid system av mod II är $\sim 6.5\%$ större än vid system av mod I. Argumentkurvans högfrekvensasymptot är: $\arg(G_o(i\omega)) = -90^\circ$ vid båda modellerna. Då styrsignalen är $\bar{u} = \text{col}(c_{A_0})$ ligger denna asymptot vid -180° . Förstärkningen är 25 ggr större än vid systemen med T_0 som styrsignal. Skillnaden i förstärkning mellan modellerna är ungefär densamma som vid de föregående systemen eller $\sim 6.8\%$ (mod II störst). Vid denna styrsignal, c_{A_0} , erhålls skärning mellan beloppkurvan och linjen $|G_o|=1$. Fasmarginalen är 4° större vid mod II än vid mod I. Skillnaderna mellan modellerna vid styrsignalerna T_0 och c_{A_0} är, som synes, små. Skärfrekvenserna i mod II, som saknar motsvarighet i mod I, vid 0.346 resp. 0.377 rad/s påverkar ej Bode diagrammet i nämnvärd grad. Vid system med T_{k_1} som styrsignal har modellerna större skillaktigheter. Argumentkurvans högfrekvensasymptot vid modell II är: $\arg(G_o(i\omega)) = -180^\circ$, medan

den vid modell I är $\arg b_0(j\omega) = -90^\circ$, dvs här ligger den lägre vid mod II. Även beloppkurvan ligger lägre vid mod II än vid mod I. Kretsförstärkningen är 90% mindre i mod II.

Skillnaderna mellan modellerna belyses även av resultatet från simulering av systemen med ingångskoncentrationen, c_{A0} , som styrsignal. Simuleringen är genomförd på dator efter att systemen transformerats till tidsdiskret form. Se diagram 8 i Appendix 1.1.

Om man betraktar systemen vid de olika styrsignalerna, ser man, att det mest realistiska systemet, vid båda modellerna, fås då c_{A0} är styrsignal. Detta verifieras även av syntesen i det följande.

6.3. Rekonstruktion av tillståndsvariabler.

Resultat av beräkningar enligt programmet RECANt studeras. För de båda systemen av ordning 2 resp. 3 betraktas ett antal olika egenvärden till matrisen $(A-KC)$. En del av beräkningsresultatet återges.

6.3.1 modell I.

Se vidstående uppställning! Det absolut största egenvärdet till det ursprungliga systemet ändras ej. Komponenterna i K -matrisen studeras då det andra egenvärdet förflyttas från

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 0.10 ; - 9.84

K^T -VECTOR 1 (1.5574-002, -3.4193-004)

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 1.00 ; - 9.84

K^T -VECTOR 2 (9.1557-001, -2.7466-003)

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 2.00 ; - 9.84

K^T -VECTOR 3 (1.9156+000, -5.4186-003)

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 5.00 ; - 9.84

K^T -VECTOR 4 (4.9156+000, -1.3434-002)

origo. Man har att beakta resonemanget i 5.3. K -vektorn nr. 4 medför ett för snabbt system. Ett rimligare system erhålles med K -vektor nr. 2 eller 3.

6.3.2. modell II

Se vidstående schema!

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 0.10 ; - 0.37 ; -14.37

K^T -VECTOR 1 (2.3838-002, -2.0975-004, 1.6480-002)

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 0.50 ; - 0.50 ; -14.37

K^T -VECTOR 2 (5.5384-001, -1.1850-003, 5.5957-001)

EIGENVALUES OF $(A-KC)$: - 0.75 ; - 0.75 ; -14.37

K^T -VECTOR 3 (1.0538+000, -2.0911-003, 3.1162+000)

De två egenvärdena, som ligger närmast origo förskjutes utåt på negativa reella axeln. K -vektor nr 3 ger önskvärt resultat.

6.3.3. Modell I och II jämföres.

Rekonstruktionsfelets konvergenshastighet blir något större vid modell I än vid modell I än vid modell II. Vid båda modellerna är den andra komponenten negativ och mycket liten till beloppet jämfört med övriga komponenter.

Störningskänsligheten beaktas vid K -vektorns bestämning. Den absoluta optimeringen försäkras här, såväl som vid övriga behandlade reaktionssystem, p.g.a. den ringa kännedomen om störningarnas egenskaper.

6.4. Återkoppling.

6.4.1. modell I

I tabell 6.5 återges resultat från beräkningar enligt RECHRE. Betrakta koefficienterna i återkopplingen (element i K -vektorn), då man ökar slutna systemets snabbhet genom att förskjuta den absolut minsta polen från origo. Om synpunkterna i kap. 5.4 beaktas kan de återkopplade systemens poler anges.

För system med $u_{ref} = T_0$ väljes polerna överensstämmande med ursprungliga systemets egenvärden. Möjligen kan man tänka sig att förskjuta den till beloppet minsta polen utåt till värdet -0.15 .

Då c_{n_0} är ref. signal kan ett avsevärt snabbare system fås efter återkopplingen, utan att styrsignalerna blir för stora. Den "rörliga" polen kan förläggas till intervallet $(-2, -1)$. Placering närmare -1 är att föredraga.

Vid system med $u_{ref} = T_{k_1}$ blir andra komponenten i K -vektorn mycket stor. Återkopplade systemet ges polerna -0.10 och -9.84 .

6.4.2. modell II

Egenvärdena -0.579 och -0.371 till ursprungliga systemet flyttas från origo, utåt på negativa reella axeln. Urval av beräkningsresultatet med RECANNT återfinns i tabell 6.6. sid 73. Referenssignalen T_0 medger ett återkopplat system med polerna: $-0.10, -0.40, -14.37$. Om polerna flyttas till: $-0.20, -0.37, -14.37$, ett snabbare system, blir k -vektorns element nr. 2 för stort. Märk att detta element ej förändras nämnvärt, relativt sett, om polerna flyttas från det senare läget till: $-1.00, -1.00, -14.30$. Första och tredje elementen växer dock avsevärt. Då $u_{ref} = c_{A_0}$ kan emellertid återkopplade systemets poler ges sistnämnda värden, utan att k -vektorns element blir för stora. Det så erhållna systemet är för snabbt. Ett ännu snabbare system fås med polerna i "närheten" av: $-0.30, -0.37, -14.37$.

Vid system där T_k är referenssignal, kan polerna placeras i: $-0.10, -0.40, -14.37$ eller i: $-0.37, -0.75, -14.37$. Observera här k -vektorns andra element, som vid de möjliga systemen antar mycket stora negativa värden.

6.4.3. modell I och II jämföres.

Vid båda modellerna och vid samtliga referenssignaler är k -vektorns andra element avsevärt större till beloppet än övriga element. Återkopplingslänken från tillståndet $x_2 = c_A$ kräver alltså genomgående störst förstärkning. Vid båda modellerna uppnås snabbare återkopplade system med referenssignalen c_{A_0} än med T_0 och T_k . Detta är fullt naturligt då inloppskoncentrationen är den kemiska parameter, som påverkar reaktionens förlopp med störst effekt. Med $u_{ref} = T_0$ kan man uppnå snabbare system vid modell II än vid modell I.

Ursprungliga, öppna systemen är vid båda modellerna minimum-fas system, enär nollställena i högra halvplanet saknas. Om så ej vore fallet inträder ytterligare restriktioner vid ökningen av systemens snabbhet, se vidare [8] Åström. De valda k -vektorer har utmärkts med \otimes i tabellerna 6.5 och 6.6.

Tabell 6.5. L -vektorn vid återkoppling (mod I)

POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.10 ; - 9.84 -		
U-REF = U1 ⊗	L-VECTOR	(3.1148-001, 6.3514+001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(6.4121-003, 3.1148-001)
U-REF = U3 ⊗	L-VECTOR	(3.9295-001, 8.0125+001)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.12 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(7.1148-001, 7.3440+001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(2.2360-002, 7.1148-001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(8.9757-001, 9.2648+001)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.15 ; - 9.84 -		
U-REF = U1 ⊗	L-VECTOR	(1.3115+000, 8.8330+001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(4.6281-002, 1.3115+000)
U-REF = U3	L-VECTOR	(1.6545+000, 1.1143+002)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.20 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(2.3115+000, 1.1315+002)
U-REF = U2	L-VECTOR	(8.6150-002, 2.3115+000)
U-REF = U3	L-VECTOR	(2.9160+000, 1.4274+002)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.50 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(8.3115+000, 2.6204+002)
U-REF = U2	L-VECTOR	(3.2536-001, 8.3115+000)
U-REF = U3	L-VECTOR	(1.0485+001, 3.3057+002)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 1.00 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(1.8311+001, 5.1019+002)
U-REF = U2 ⊗	L-VECTOR	(7.2405-001, 1.8311+001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(2.3101+001, 6.4363+002)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 2.00 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(3.8311+001, 1.0065+003)
U-REF = U2 ⊗	L-VECTOR	(1.5214+000, 3.8311+001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(4.8331+001, 1.2697+003)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 5.00 ; - 9.84 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(9.8311+001, 2.4954+003)
U-REF = U2	L-VECTOR	(3.9135+000, 9.8311+001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(1.2402+002, 3.1481+003)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: -10.00 ; -10.00 -		
U-REF = U1	L-VECTOR	(2.0151+002, 5.0383+003)
U-REF = U2	L-VECTOR	(8.0300+000, 2.0151+002)
U-REF = U3	L-VECTOR	(2.5421+002, 6.3560+003)

$$\begin{aligned} u_1 &= T_0 \\ u_2 &= C_{R_0} \\ u_3 &= T_{k_1} \end{aligned}$$

Tabell 6.6. L-vektorn vid återkoppling (mod II).

POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.10 ; - 0.40 ; -14.37 -			
U-REF = U1 ⊗	L-VECTOR	(1.0768+000,	7.1839+001, -9.8950-001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(3.9265-002,	1.0768+000, -3.8651-002)
U-REF = U3 ⊗	L-VECTOR	(-5.3353+000,	-3.1401+003, 2.6919-001)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.20 ; - 0.37 ; -14.37 -			
U-REF = U1(⊗)	L-VECTOR	(2.4768+000,	1.0642+002, 5.0432-001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(9.5599-002,	2.4768+000, 2.0118-002)
U-REF = U3	L-VECTOR	(-2.7405+000,	-3.0604+003, 6.1919-001)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.20 ; - 1.00 ; -14.37 -			
U-REF = U1	L-VECTOR	(1.5077+001,	4.2371+002, -1.3539+001)
U-REF = U2	L-VECTOR	(5.9301-001,	1.5077+001, -5.2878-001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(3.3055+000,	-2.7747+003, 3.7692+000)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.30 ; - 0.37 ; -14.37 -			
U-REF = U1	L-VECTOR	(4.4768+000,	1.5621+002, 8.7130-001)
U-REF = U2 ⊗	L-VECTOR	(1.7546-001,	4.4768+000, 3.4785-002)
U-REF = U3	L-VECTOR	(-1.4618-001,	-2.9743+003, 1.1192+000)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 0.75 ; - 0.37 ; -14.37 -			
U-REF = U1	L-VECTOR	(1.3477+001,	3.8025+002, 2.5227+000)
U-REF = U2	L-VECTOR	(5.3483-001,	1.3477+001, 1.0079-001)
U-REF = U3 ⊗	L-VECTOR	(1.1528+001,	-2.5868+003, 3.3692+000)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 1.00 ; - 1.00 ; -14.30 -			
U-REF = U1 ⊗	L-VECTOR	(2.9677+001,	1.2829+002, 6.6036+001)
U-REF = U2 ⊗	L-VECTOR	(1.2504+000,	2.9677+001, 2.5935+000)
U-REF = U3	L-VECTOR	(1.5646+002,	4.4474+004, 7.4192+000)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: - 1.00 ; - 5.00 ; -14.30 -			
U-REF = U1	L-VECTOR	(1.0968+002,	2.2269+003, 4.6354+002)
U-REF = U2	L-VECTOR	(4.5642+000,	1.0968+002, 1.8191+001)
U-REF = U3	L-VECTOR	(4.7561+002,	4.0342+004, 2.7419+001)
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM: -10.00 ; -10.00 ; -10.00 -			
U-REF = U1	L-VECTOR	(3.0368+002,	1.1622+003, 9.7985+003)
U-REF = U2	L-VECTOR	(1.5839+001,	3.0368+002, 3.8425+002)
U-REF = U3	L-VECTOR	(7.0948+003,	4.6574+005, 7.5919+001)

7. Analys och syntes av system vid de konsekutiva reaktionerna.

7.1. Stabilitet

Valda värden på de kemiska parametrarna samt systemmatriser återges i Appendix 1.2. Betrakta A-matriserna vid de båda modellerna, i samtliga stationärpunkter. Då stationärvärdet på temperaturen ökar kommer element utanför huvuddiagonalen att dominera över diagonalelementen. Matriselementen varierar kraftigt till beloppet, detta blir mest markant i de övre stationärpunkterna.

Man kan av det nämnda sluta sig till att egenvärdesberäkning med numeriska metoder kommer att bli besvärlig. Resultat av beräkningar återges i tabell 7.1, se nästa sida. Korrekta egenvärden fås vid modell I i St 1, St 2, St 3 och St 4 samt vid modell II i St 1, St 2, St 3. Undersökningarna i det följande omfattar stationärpunkterna 1-3. Vad beträffar de två övriga, St 4 och St 5, kan det fastslås, att båda är orimliga som arbetspunkter för reaktorn. Temperaturen är alldeles för hög. St 4 är statistiskt instabil, medan St 5 är statistiskt stabil.

Studera nu St 1 - St 3 vid de båda modellerna. Egenvärdet i modell II, som saknar motsvarighet i modell I, d_{II} , ligger kring ≈ -1.48 i alla tre stationärpunkterna. Jämför med element a_{44} i A-matriserna till modell II, detta är konstant lika med -1.47877 i samtliga stationärpunkter.

St 1 är dynamiskt stabil med enbart negativa egenvärden. Om de "jämförbara" egenvärdena (alla utom d_{II}) studeras, ses att i båda modellerna finns två

Tabell 7.1 Egenvärden (obs! blir ej alla korrekta)

modell I; NA=3	modell II; NA=4	Stationär- pkt. nr
EIGENVALUES OF A-MATRIX Re λ Im λ -6.0000+001 0.0000+000 -6.0172+001 0.0000+000 -6.0000+001 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX Re λ Im λ -1.4772+000 0.0000+000 -6.0000+001 0.0000+000 -6.0212+001 0.0000+000 -6.0000+001 0.0000+000	1 <u>anm.</u> helt korrekt
EIGENVALUES OF A-MATRIX -5.9993+001 0.0000+000 -6.0565+001 0.0000+000 5.8054+002 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.4793+000 0.0000+000 -5.9992+001 0.0000+000 -6.0558+001 0.0000+000 5.8033+002 0.0000+000	2 <u>anm.</u> helt korrekt
EIGENVALUES OF A-MATRIX -4.3237+001 0.0000+000 -5.9981+001 0.0000+000 -4.0808+004 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.4764+000 0.0000+000 -4.3229+001 0.0000+000 -5.9976+001 0.0000+000 -4.1195+004 0.0000+000	3 <u>anm.</u> helt korrekt
EIGENVALUES OF A-MATRIX 4.1049+001 0.0000+000 -5.9901+001 0.0000+000 -6.4415+007 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.5236+000 0.0000+000 -1.8644+000 -1.3027-001 -1.8644+000 1.3027-001 -2.3315+000 1.6457-001	4 <u>anm.</u> modell I korrekt, modell II felaktig
EIGENVALUES OF A-MATRIX -6.0910+001 0.0000+000 -9.4580+001 -8.8979-002 -9.4580+001 -8.8979-002	EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.2017+000 0.0000+000 -1.6790+000 2.8595-001 -1.6790+000 -2.8595-001 -2.1000+000 -3.5647-001	5 <u>anm.</u> Felaktigt resultat vid båda modellerna

egenvärden med värdet -60.00 . Detta beror på, att elementen a_{22} och a_{33} vid denna temperatur blir lika med $-\frac{1}{6}$ dvs. lika med -60.00 . Reaktionskonstanternas värden är mycket små. Se A -matriserna i kap. 2.3 sid 20 och 21 samt graferna i Appendix 1.2.

St 2 är en instabil stationärpunkt, ty här fås ett egenvärde med positiv realdel. Skillnaden mellan "jämförbara" egenvärden till modell I och modell II är här som i St 1 och St 3 mycket liten, relativt sett.

Den stationärpunkt, som utgör normal arbetspunkt, St 3, är statiskt och dynamiskt stabil. Här erhålles ett egenvärde med mycket stort belopp ($\sim 4 \cdot 10^4$).

Egenvärdena (bortse fränd II) är genomgående större till beloppet i modell I än i modell II. Två undantag finns; ¹⁾ i St 1 det egenvärde, som är skilt från $-\frac{1}{6} = -60.00$ ²⁾ i St 3 det egenvärde, som ligger kring $\sim 4 \cdot 10^4$.

Det valda reaktionsystemet medför A -matriser vars egenvärden blir mycket stora till beloppet. En koordinattransformation för att få element av storleksordningen ~ 1.00 i A -matrisen (efter transformation) vore alltså önskvärd. Att "hitta" en sådan är dock mycket besvärligt. Jag har gjort ett försök genom att normalisera A -matriserna i respektive stationärpunkter. Detta medförde ingen nämnvärd förbättring. Matematiska modellen, som utnyttjas inuti CREMAR2 behålles. Anledningen härtill är, att det framöver torde bli lättare, att finna exempel på konsekutiva reaktioner, som underlag till beräkningar med CREMAR2. Vid tidpunkten för detta examensarbete utförande fanns få lämpliga reaktionsystem att utgå ifrån. Det valda systemet är speciellt med reaktionsförloppet genomfört på en

fluidiserad bädd, vilket medför extrema temperaturer och volymflöden.

För att återgå till egenvärdesundersökningen, studera nu förändringarna, då totalvärmeöverföringslinjen förskjuts med hjälp av ändring i inloppstemperaturen, T_0 . Se tabell 7.2 sid 79, som innehåller ett representativt urval av resultatet från en undersökning, där T_0 varierats mellan 378.15°K och 478.15°K . St 4 och St 5 behandlas ej p.g.a. ovan nämnda orsaker.

Betrakta St 1. Då T_0 ökas, förblir egenvärdena oförändrade vid både modell I och II. Skillnaden mellan modellerna består, förutom λ_{II} , i en relativt liten differens för ett egenvärde: mod I ~ 60.172 jämfört med mod II ~ 60.212 . Egenvärdena ligger stilla, eftersom diagonalelementen i A-matrisen dominerar kraftigt och reaktionskonstanterna är mycket små. Vid aktuella värden på stationärtemperaturen är producerade värmemängden mycket liten, nästan noll. Se graferna i Appendix 1.2.

I den instabila stationärpunkten, St 2, undergår det positiva egenvärdet en förändring enligt följande; gäller båda modellerna. Först sker en ökning av beloppet, då T_0 ökar ($388.15^\circ\text{K} \rightarrow 408.15^\circ\text{K}$), sedan minskar det från ~ 593 till ~ 520 . λ_{II} ändras obetydligt, från -1.4795 till -1.4792 . De båda övriga egenvärdena, vid respektive modell I och II, förändras också mycket litet. Skillnaderna mellan modellerna, med undantag av λ_{II} , är som i St 1 och även i St 3 mycket små. Detta beror på att de element, som "tillkommer" i A-matrisen vid utökning av systembeskrivning enligt modell II, leder till egenvärdet λ_{II} , som har nästan konstant värde kring -1.48 . En faktor $(1+1.48)$ kan alltså approximativt

brytas ut ur karakteristiska ekvationen. Storleksordningen på detta egenvärde är ju avsevärt mindre än för övriga egenvärden. Karakteristiska ekvationen har alltså utseendet $(\lambda + 1.48) \cdot f(\lambda)$, där $f(\lambda)$ har mycket små avvikelser från karakteristiska ekvationen till A -matrisen i modell I.

De "jämförbara" egenvärdena i den normala arbetspunkten, dvs. den stabila stationärpunkten St3, varierar som följer; det till absolutbeloppet största egenvärdet ändras kraftigt från $\sim -7.9 \cdot 10^3$ till $\sim -2.4 \cdot 10^5$, medan de båda övriga förskjuts ett stycke mot origo. λ_{II} rör sig också mot mindre negativa värden.

Då egenvärdena till ett system i arbetspunkten beräknas, under det att koncentrationen c_{A_0} ökas, får man resultatet, som återges i tabell 7.3 sid. 81. Arbetspunkten är den stationärpunkt i vilken koncentrationen av önskade reaktionsprodukten, c_B , är störst.

I ① där $c_{A_0} = 0.170$ är St1 arbetspunkt. Vid övriga koncentrationer i tabellen svarar arbetspunkten mot St3. Då c_{A_0} ökar från 0.180 mol/l till 0.220 mol/l ändras stationärvärdet på temperaturen från $\sim 780^\circ\text{K}$ till $\sim 1060^\circ\text{K}$. Uridas totalvärmeavledningslinjen ytterligare mot mindre lutning, genom ökning av c_{A_0} , fås som arbetspunkt, (med formella parametern $MAP=0$ vid anrop av CREMA2) stationärpunkten St5. Denna är helt orimlig. Egenvärdenas förändring framgår klart i tabell 7.3 och behöver ej kommenteras. Notera att arbetspunkten förblir stabil hela tiden, eftersom egenvärdena har negativa realdelar enbart.

Tabell 7.2. Egenvärdenas variation då T_0 ökas

①	TO=388.15	TO=408.15	TO=418.15
<p>NA=3</p> <p><i>Im λ</i></p>	<p>NA=3</p>	<p>NA=3</p>	<p>NA=3</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>Re λ</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0172+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0172+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0172+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>δz1</p> <p>-5.9992+001</p> <p>-6.1086+001</p> <p>5.8221+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.9993+001</p> <p>-6.0711+001</p> <p>5.9298+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.9993+001</p> <p>-6.0606+001</p> <p>5.8595+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>δz2</p> <p>-4.9869+001</p> <p>-5.9984+001</p> <p>-7.8705+003</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4.6673+001</p> <p>-5.9982+001</p> <p>-2.0591+004</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4.4496+001</p> <p>-5.9981+001</p> <p>-3.2492+004</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>
<p>NA=4</p>	<p>NA=4</p>	<p>NA=4</p>	<p>NA=4</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>δz3</p> <p>-1.4772+000</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0212+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4772+000</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0212+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4772+000</p> <p>-6.0000+001</p> <p>-6.0212+001</p> <p>-6.0000+001</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>δz4</p> <p>-1.4795+000</p> <p>-5.9990+001</p> <p>-6.1070+001</p> <p>5.8243+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4793+000</p> <p>-5.9991+001</p> <p>-6.0702+001</p> <p>5.9287+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4793+000</p> <p>-5.9991+001</p> <p>-6.0599+001</p> <p>5.8577+002</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>
<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>δz5</p> <p>-1.4766+000</p> <p>-4.9895+001</p> <p>-5.9980+001</p> <p>-7.9467+003</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4766+000</p> <p>-4.6680+001</p> <p>-5.9978+001</p> <p>-2.0779+004</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4765+000</p> <p>-4.4493+001</p> <p>-5.9977+001</p> <p>-3.2794+004</p>	<p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p> <p>0.0000+000</p>

Tabell 7.2 forts.

TO=428.15	TO=438.15	TO=458.15
NA=3	NA=3	NA=3
<i>Re A</i>	<i>Im A</i>	
EIGENVALUES OF A-MATRIX -6.0000+001 -6.0172+001 <i>St 1</i> -6.0000+001	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX -5.9993+001 -6.0528+001 <i>St 2</i> 5.7411+002	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 5.5874+002	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 5.2036+002
EIGENVALUES OF A-MATRIX -4.1847+001 -5.9980+001 <i>St 3</i> -5.1344+004	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 -8.2203+004	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 -2.9148+001 -5.9977+001 -2.3522+005
NA=4	NA=4	NA=4
EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.4772+000 -6.0000+001 <i>St 1</i> -6.0212+001 -6.0000+001	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000
EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.4793+000 -5.9992+001 <i>St 2</i> -6.0521+001 5.7387+002	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 5.5846+002	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 5.2003+002
EIGENVALUES OF A-MATRIX -1.4763+000 -4.1832+001 <i>St 3</i> -5.9976+001 -5.1844+004	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 -8.3064+004	EIGENVALUES OF A-MATRIX 0.0000+000 0.0000+000 0.0000+000 -1.4751+000 -2.9050+001 -5.9971+001 -2.3849+005

Tabell 7.3. Variation av egenvärden i arbetspunk-
ten då ϵ_{00} ökar.

<p>① $CAO=0.170$</p> <p><i>Reλ</i> <i>Imλ</i></p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-6.0000+001 0.0000+000</p> <p>-6.0172+001 <i>NA=3</i> 0.0000+000</p> <p>-6.0000+001 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4772+000 0.0000+000</p> <p>-6.0000+001 <i>NA=4</i> 0.0000+000</p> <p>-6.0212+001 0.0000+000</p> <p>-6.0000+001 0.0000+000</p>	<p>④ $CAO=0.200$</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-4.6132+001 0.0000+000</p> <p>-5.9981+001 0.0000+000</p> <p>-2.5393+004 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4766+000 0.0000+000</p> <p>-4.6136+001 0.0000+000</p> <p>-5.9977+001 0.0000+000</p> <p>-2.5623+004 0.0000+000</p>
<p>② $CAO=0.180$</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.9982+001 0.0000+000</p> <p>-5.2630+001 0.0000+000</p> <p>-3.2986+003 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4765+000 0.0000+000</p> <p>-5.9978+001 0.0000+000</p> <p>-5.2677+001 0.0000+000</p> <p>-3.3361+003 0.0000+000</p>	<p>⑤ $CAO=0.210$</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-3.9534+001 0.0000+000</p> <p>-5.9980+001 0.0000+000</p> <p>-6.6882+004 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4762+000 0.0000+000</p> <p>-3.9507+001 0.0000+000</p> <p>-5.9976+001 0.0000+000</p> <p>-6.7568+004 0.0000+000</p>
<p>③ $CAO=0.190$</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-5.0251+001 0.0000+000</p> <p>-5.9982+001 0.0000+000</p> <p>-9.8140+003 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4767+000 0.0000+000</p> <p>-5.0275+001 0.0000+000</p> <p>-5.9977+001 0.0000+000</p> <p>-9.9035+003 0.0000+000</p>	<p>⑥ $CAO=0.220$</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-2.7656+001 0.0000+000</p> <p>-5.9979+001 0.0000+000</p> <p>-2.1349+005 0.0000+000</p> <p>EIGENVALUES OF A-MATRIX</p> <p>-1.4750+000 0.0000+000</p> <p>-2.7541+001 0.0000+000</p> <p>-5.9974+001 0.0000+000</p> <p>-2.1663+005 0.0000+000</p>

7.2. Test av observerbarhet och styrbarhet Överföringsfunktioner.

7.2.1. Modell I

Systemmatriserna till de system, som behandlas i detta avsnitt fås ur nedanstående.

A-MATRIX		
7.17939+002	8.33486+007	6.37813+003
-3.78347-001	-4.15676+004	0.00000+000
3.73094-001	4.15076+004	-6.18231+001
B-MATRIX		
6.00000+001	0.00000+000	1.72416-001
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
C-MATRIX		
1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.82257-001	0.00000+000	0.00000+000
D-MATRIX		
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	8.17743-001

$$NA=2;$$

$$NB=3; \quad KU=1;$$

$$NC=2;$$

$$\bar{x} = \text{col}(T, C_A, C_B)$$

$$\bar{u} = \text{col}(T_0, C_{A0}, T_{K1})$$

$$\bar{y} = \text{col}(T, T_K)$$

De multivariabla systemen testas m.a.p. observerbarhet. Den erhållna T-matrizen ses intill. $\text{Rang } T = 3 = NA$.

System är alltså styrbara. Inget bidrag från $y_2 = T_K$ till observerbarheten, som nås med $y_1 = T$.

T-MATRIX		
1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
4.16294+004	8.33486+007	6.37813+003
2.56984+006	5.41761+009	2.65124+008
RANK T=3		
NECOUT	1	0

T-matriserna, som erhålls då styrbarheten för mus systemen testas, återfinns på nästa sida.

Samtliga mus system är styrbara, då rang $T = 3$ i alla T -matriser till höger. I varje system med mer än en styrsignal är element $NECOLIT(i) = 0$, då i är större än 1. Styrbarheten för systemen nås alltså med första komponenten i styrsignalvektorn. P.g.a detta är andra och fjärde T -matriserna identiska.

T-MATRIX	$H = COL(T_{k_1})$	
1.72416-001	0.00000+000	0.00000+000
7.17757+003	-6.52330-002	6.43272-002
4.43081+005	-4.03291+000	-3.37369+001
T-MATRIX	$H = COL(T_0, T_{k_1})$	
6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
2.49777+006	-2.27008+001	2.23856+001
1.54190+008	-1.40344+003	-1.17403+004
T-MATRIX	$H = COL(C_{A_0}, T_{k_1})$	
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000
5.00092+009	-3.93670+004	2.49046+006
3.25057+011	-2.80589+006	7.78132+007
T-MATRIX	$H = COL(T_0, C_{A_0}, T_{k_1})$	
6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
2.49777+006	-2.27008+001	2.23856+001
1.54190+008	-1.40344+003	-1.17403+004

De enkla system, som är observerbara, transformeras till obs. kan. form. T -matrisen vid observerbarhetstesten är densamma som vid mus system, se föregående sida. Transformationsmatrisen, resultat av styrbarhetstester för de enkla systemen samt överföringsfunktionerna följer nedan.

T-MATRIX TO OBS. CAN. FORM		
1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
4.16294+004	8.33486+007	6.37813+003
2.56984+006	5.41761+009	2.65124+008

(Denna matris innehåller radvektorerna, som uppspannar ortogonala komplementrymden till den icke observerbara rymden. Se kommentar i OBSTEST, som använder samma matris vid observerbarhetstest.)

CONTROL SIGNAL U1 (T_o)

T-MATRIX

6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
2.49777+006	-2.27008+001	2.23856+001
1.54190+008	-1.40344+003	-1.17403+004

RANK T=3

$$G_o(s) = \frac{6.0000 \cdot 10^2 (s + 4.1568 \cdot 10^4) (s + 6.1823 \cdot 10^2)}{(s + 4.0808 \cdot 10^4) (s + 5.9981 \cdot 10^2) (s + 4.3237 \cdot 10^2)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (C_{Ao})

T-MATRIX

0.00000+000	0.00000+001	0.00000+000
5.00092+009	-3.93670+004	2.49046+006
3.25057+011	-2.80589+006	7.78132+007

RANK T=3

$$G_o(s) = \frac{5.0009 \cdot 10^9 (s + 6.5000 \cdot 10^2)}{(s + 4.0808 \cdot 10^4) (s + 5.9981 \cdot 10^2) (s + 4.3237 \cdot 10^2)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_{k1})

T-MATRIX

1.72416-001	0.00000+000	0.00000+000
7.17757+003	-6.52330-002	6.43272-002
4.43081+005	-4.03291+000	-3.37369+001

RANK T=3

$$G_o(s) = \frac{1.7242 \cdot 10^{-1} (s + 4.1568 \cdot 10^4) (s + 6.1823 \cdot 10^2)}{(s + 4.0808 \cdot 10^4) (s + 5.9981 \cdot 10^2) (s + 4.3237 \cdot 10^2)}$$

Rang T = 3 vid samtliga enkla system, som alltså är styrbara.

7.2.2. modell II

Som i modell I följer här systemet med $NA=4$, $NB=3$, $KH=1$ och $NC=2$. Övriga system kan erhållas ur detta.

A-MATRIX

7.17441+002	8.41249+007	6.40603+003	2.10843-001
-3.78085-001	-4.19542+004	0.00000+000	0.00000+000
3.72813-001	4.18942+004	-6.18311+001	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

B-MATRIX

6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

$$\bar{x} = \text{col}(T, C_A, C_B, T_K); \bar{u} = \text{col}(T_0, C_{A_0}, T_{K_2}); \bar{y} = \text{col}(T, T_K)$$

Både multivariabla och enkla system blir observerbara. Se nedanstående T-matris. NECOIT-vektorn för mus system är identisk med motsvarande vid modell I.

T-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
4.20175+004	8.41249+007	6.40603+003	2.10843-001
2.65621+006	5.59432+009	2.68770+008	8.85881+003
3.83635+006	8.09050+009	3.97435+008	5.46944+005

RANK T=4 = NA

NECOIT 1 0

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_{k_1})$		
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000
2.10843-001	0.00000+000	0.00000+000	4.12986+004
8.85881+003	-7.97168-002	7.86052-002	4.25407+006
5.46944+005	-4.92898+000	-4.18526+001	1.06802+008

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_{0_j}, T_{k_1})$		
6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.52105+006	-2.26851+001	2.23688+001	2.67453+001
1.59373+008	-1.43619+003	-1.18770+004	1.12373+006
2.30181+008	-2.07466+003	-1.76122+004	6.93793+007

T-MATRIX	$u = \text{col}(c_{A_{0_j}}, T_{k_1})$		
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
5.04750+009	-3.92479+004	2.51365+006	0.00000+000
3.35659+011	-2.86308+006	8.20935+007	2.24995+009
4.85396+011	-4.18294+006	1.15678+008	1.46294+011

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_{0_j}, c_{A_{0_j}}, T_{k_1})$		
6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.52105+006	-2.26851+001	2.23688+001	2.67453+001
1.59373+008	-1.43619+003	-1.18770+004	1.12373+006
2.30181+008	-2.07466+003	-1.76122+004	6.93793+007

T-matriserna ovan är resultat av observerbarhetstester för de multivariabla systemen. $\text{Rang} T = 4$ i samtliga. Systemen är styrbara. $\text{NECOHT}(i) = 0$ då $i > 1$ precis som i modell I. Transformation av enkla systemen till obs. kan. form sker med följande matris:

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
4.20175+004	8.41249+007	6.40603+003	2.10843-001
2.65621+006	5.59432+009	2.68770+008	8.85881+003
3.83635+006	8.09050+009	3.97435+008	5.46944+005

Resultat av styrbarhetstester och överföringsfunktioner för enkla systemen återges på nästa sida.

CONTROL SIGNAL U1 (T_0)

T-MATRIX

6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.52105+006	-2.26851+001	2.23688+001	2.67453+001
1.59373+008	-1.43619+003	-1.18770+004	1.12373+006
2.30181+008	-2.07466+003	-1.76122+004	6.93793+007

RANK T=4

$$G_0(s) = \frac{6.0000 \cdot 10^2 (s + 4.1954 \cdot 10^4) (s + 6.1831 \cdot 10^2) (s + 1.4791)}{(s + 4.1195 \cdot 10^4) (s + 5.9976 \cdot 10^2) (s + 4.3329 \cdot 10^2) (s + 1.4764)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (C_{R0})

T-MATRIX

0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
5.04750+009	-3.92479+004	2.51365+006	0.00000+000
3.35659+011	-2.86308+006	8.20935+007	2.24995+009
4.85396+011	-4.18294+006	1.15678+008	1.46294+011

RANK T=4

$$G_0(s) = \frac{5.0475 \cdot 10^9 (s + 6.5021) \cdot (s + 1.4791)}{(s + 4.1195 \cdot 10^4) (s + 5.9976 \cdot 10^2) (s + 4.3329 \cdot 10^2) (s + 1.4764)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_{k1})

T-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000
2.10843-001	0.00000+000	0.00000+000	4.12986+004
8.85881+003	-7.97168-002	7.86052-002	4.25407+006
5.46944+005	-4.92898+000	-4.18526+001	1.06802+008

RANK T=4

$$G_0(s) = \frac{2.1084 \cdot 10^{-1} (s + 4.1954 \cdot 10^4) (s + 6.1831 \cdot 10^2)}{(s + 4.1195 \cdot 10^4) (s + 5.9976 \cdot 10^2) (s + 4.3329 \cdot 10^2) (s + 1.4764)}$$

Som vid modell I blir alla enkla system styrbara.

7.2.3. modell I och modell II jämföres

Studera, för varje insignal, överföringsfunktionen vid modell I och motsvarande vid modell II.

Vid insignalerna T_0 , inloppstemperaturen för reaktionsblandningen, och e_{A_0} , inloppskoncentrationen, kommer modellernas frekvensfunktioner och stegsvar att uppvisa mycket små avvikelser sinsemellan. Detta beror på att polen och nollstället, som härrör från utvidningen av systembeskrivningen i modell II, ligger mycket nära varandra. Polen (d_{II}) ligger i -1.4764 och nollstället i -1.4791 .

Då kylvattnets inloppstemperatur, T_{k_2} , är styrsignal, uppvisar modellerna tydliga skillnader. Nollstället $s = -1.4791$ i överföringsfunktionerna vid de båda styrsignalerna ovan saknas här. System av modell I blir följaktligen snabbare än system av modell II. Vidare har argumentfunktionen vid modell I gränsvärdet: $\arg G_0(i\omega) = -\frac{\pi}{2}$ då $\omega \rightarrow \infty$, medan motsvarande gränsvärde vid modell II är lika med $-\pi$.

7.3. Rekonstruktion av tillståndsvariabler

A -matriserna i systemmodellerna, som beskriver de konsekutiva reaktionerna, har egenvärden med stora belopp, se avsnitt 7.1. Rekonstruktionsfelet vid den valda rekonstruktionsformeln kan uppskattas till: $\text{konstant} * e^{-a \cdot t}$, där $(-a)$ är större än största realdelen av egenvärdena till matrisen $(A - K \cdot C)$. Det ovanstående leder till, att man ej behöver göra någon förflyttning av A -matrisens egenvärden utåt från origo, för att rekonstruktionsfelets konvergenstakt skall bli tillräcklig. Om man ger matrisen $(A - K \cdot C)$ samma egenvärden som matrisen A , blir rekonstruktionsfelet vid modell I lika med $\text{konst} * e^{-43 \cdot t}$ och vid modell II $\text{konst} * e^{-65 \cdot t}$.

Störningskänsligheten kan medföra problem, särskilt vid modell I, där rekonstruktionsfelet mycket snabbt konvergerar mot noll. Se [8] Åström.

För modell I undersöks K -vektorns utseende, då ett egenvärde till $(A - K \cdot C)$ förskjuts mot origo, varvid känsligheten för fel vid mätningen av utsignalen. Urval av resultatet återges i tabell 7.4 sid. 91. Som tabellen visar kan rekonstruktionsfelets konvergenstakt minska betydligt, utan att elementen i K -vektorn blir orimliga. Märk även att element k_2 ej nämnvärt förändras. En kompromiss med hänsyn till den för handen varande kännedomen om systemet och störningar, som kan inverka, leder till, att den med $\textcircled{2}$ märkta rekonstruktionen väljes.

Då det gäller system av modell II kan man eventuellt, till skillnad mot modell I, tänka sig att öka rekonstruktionsfelets konvergenshastighet något. Egenvärdet λ_{II} , se avsnitt 7.2, förflyttas från origo. Tabell 7.5 sid 91 återger några K -vektorer för olika egenvärden till $(A - K \cdot \epsilon)$. Elementen k_1 , k_2 och k_3 antar realistiska värden även då λ_{II} flyttats till -10.00 . Den återstående komponenten, k_4 , växer däremot snabbt mot för stora värden. Om λ_{II} flyttas från -1.47 till -2.00 så ökar k_4 sitt värde ~ 10 ggr, från 10.9 till 109.7 .

Lösningen på rekonstruktionsproblemet blir den rekonstruktion, som har egenvärdena till $(A - K \cdot \epsilon)$ lika med egenvärdena till A -matrisen. Se \otimes i tabell 7.5

Tabell 7.4 K-vektorn vid modellrekonstruktion

EIGENVALUES OF (A-KC)	- 4.324+001 ;	- 5.998+001 ;	- 4.081+004
K-VECTOR (1.7363+000,	-8.6425-004,	8.6629-004)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 2.000+001	- 5.998+001	- 4.081+004
K-VECTOR (-	2.1504+001,	-6.5299-004,	7.2483-003)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 1.000+001	- 5.998+001	- 4.081+004
K-VECTOR (-	3.1504+001,	-5.6208-004,	9.9944-003)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 1.000+000	- 5.998+001	- 4.081+004
K-VECTOR (-	4.0504+001,	-4.8026-004,	1.2466-002)

mod I
NA=3

Tabell 7.5 K-vektorn vid modellrekonstruktion

EIGENVALUES OF (A-KC)	- 1.476+000 ;	- 4.323+001 ;	- 5.998+001 ;	- 4.120+004
K-VECTOR (4.5941+000,	-2.2868-003,	1.9142-003,	1.0893+001)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 2.000+000 ;	- 4.323+001 ;	- 5.998+001 ;	- 4.120+004
K-VECTOR (5.1181+000,	-2.2915-003,	1.8731-003,	1.0966+002)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 5.000+000 ;	- 4.323+001 ;	- 5.998+001 ;	- 4.120+004
K-VECTOR (8.1181+000,	-2.3184-003,	1.6376-003,	6.7515+002)
EIGENVALUES OF (A-KC)	- 1.000+001 ;	- 4.323+001 ;	- 5.998+001 ;	- 4.120+004
K-VECTOR (1.3118+001,	-2.3632-003,	1.2452-003,	1.6176+003)

mod II
NA=4

7.4. Återkoppling.

Polernas lägen vid de här aktuella system av både modell I och modell II medför, att huvudsyftet med syntesen blir att åstadkomma slutna system, som är realiserbara i möjligaste utsträckning. Snabbheten hos de ursprungliga öppna systemen är, som tidigare framgått, mer än tillräcklig. Se kap 7.1 och 7.2.

Studera system av modell I, som vid återkoppling ges poler, så att snabbheten minskas. Tabell 7.6 sid 94 visar L-vektorer vid de olika styrsignalerna. Den första uppsättning, märkt med @, beskriver återkoppling, där slutna systemets poler är desamma som ursprungliga systemets. Tabellen visar klart, att kylvattnets inloppstemperatur, T_{k_2} , är olämplig som styrsignal. Då reaktionsblandningens inloppstemperatur, T_0 , är styrsignal fås L-vektorer med ett andra element, länken från tillståndet $x_2 = c_A$, som minskar något då en pol förflyttas mot origo. Beloppet för L_2 är stort $\sim 10^3$. Övriga element i L-vektorn ökar sitt belopp, särskilt den som svarar mot länken från tillståndet $x_3 = c_B$. Återkopplingslänkarna från tillstånden $x_1 = T$ och $x_3 = c_B$ kräver mycket liten förstärkning då referenssignalen är c_{A_0} , inloppskoncentrationen, förutsatt att endast en pol förskjuts.

En del av de återkopplingar, som undersökts vid system av modell II, återges i tab 7.7 sid. 95. Som vid modell I är T_{k_2} olämplig som referenssignal. Märk att återkopplingslänken från tillståndet $x_3 = c_B$ kräver mycket större förstärkning vid styrsignalerna T_0 och c_{A_0} än fallet är i modell I.

Summering av resultaten från användning av syntesmetoden, $\bar{u} = \bar{u}_{ref} - L \cdot \bar{x}$, på system, som beskriver de konsekutiva reaktionerna, medför för både modell I och II följande:

- * Koncentrationens inverkan på reaktionsförloppet framgår mycket markant. C_{A_0} är följaktligen den lämpligaste styrsignalen.
- xx Polernas placering i det återkopplade systemet väljes så att de överensstämmer med placeringen vid det ursprungliga öppna systemet. T_0 , inloppstemperaturen, är vid denna återkoppling möjlig som styrsignal.
- xxx Som förut nämnts är kylmediets inloppstemperatur, T_{k1} , ej möjlig som styrsignal.

Tabell 7.6 L-vektorn vid återkoppling (mod I)

POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 4.324+001 ; - 5.998+001 ; - 4.081+004			
U-REF = U1 = T_0	L-VECTOR	(2.8938-002, 3.1729+003, -4.0231-002)	⊗
U-REF = U2 = C_{R_0}	L-VECTOR	(2.7937-007, 2.8938-002, -2.8977-006)	⊗
U-REF = U3 = T_{k_1}	L-VECTOR	(1.0070+001, 1.1042+006, -1.3918+001)	⊗
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 3.000+001 ; - 5.998+001 ; - 4.081+004			
U-REF = U1	L-VECTOR	(-1.9173-001, 2.6553+003, -7.5807+001)	
U-REF = U2	L-VECTOR	(-9.3612-005, -1.9173-001, -3.2231-002)	
U-REF = U3	L-VECTOR	(-6.6721+001, 9.2402+005, -2.6381+004)	
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 2.000+001 ; - 5.998+001 ; - 4.081+004			
U-REF = U1	L-VECTOR	(-3.5840-001, 2.2643+003, -1.3303+002)	
U-REF = U2	L-VECTOR	(-1.6453-004, -3.5840-001, -5.6572-002)	
U-REF = U3	L-VECTOR	(-1.2472+002, 7.8796+005, -4.6295+004)	
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 1.000+001 ; - 5.998+001 ; - 4.081+004			
U-REF = U1	L-VECTOR	(-5.2506-001, 1.8733+003, -1.9026+002)	
U-REF = U2	L-VECTOR	(-2.3544-004, -5.2506-001, -8.0913-002)	
U-REF = U3	L-VECTOR	(-1.8272+002, 6.5191+005, -6.6209+004)	
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 1.000+001 ; - 1.000+001 ; - 1.000+001			
U-REF = U1	L-VECTOR	(-6.8136+002, -7.4784+007, 1.1691+002)	
U-REF = U2	L-VECTOR	(-6.2077-003, -6.8136+002, 2.7707-003)	
U-REF = U3	L-VECTOR	(-2.3711+005, -2.6024+010, 4.0681+004)	
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM - 5.000+000 ; - 5.998+001 ; - 4.081+004			
U-REF = U1	L-VECTOR	(-6.0840-001, 1.6778+003, -2.1887+002)	
U-REF = U2	L-VECTOR	(-2.7090-004, -6.0840-001, -9.3084-002)	
U-REF = U3	L-VECTOR	(-2.1172+002, 5.8388+005, -7.6166+004)	

Tabell 7.7. L-vektorn vid återkoppling (mod II).

POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM	- 1.476+000	;	- 4.323+001	;	- 5.998+001	;	- 4.120+004
U-REF = U1 = T ₀	L-VECTOR (7.6569-002,	8.4873+003,	7.5247+000,	8.5874-002)	⊗	
U-REF = U2 = C ₀₀	L-VECTOR (1.6662-007,	7.6569-002,	1.1270-003,	4.0645-005)	⊗	
U-REF = U3 = T _{k-1}	L-VECTOR (-8.9670+005,	-9.9404+010,	1.1163+004,	4.5941+000)	⊗	
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM	- 1.476+000	;	- 1.000+001	;	- 5.998+001	;	- 4.120+004
U-REF = U1	L-VECTOR (-4.7726-001,	7.1921+003,	-1.8283+002,	8.9290-002)		
U-REF = U2	L-VECTOR (-2.3541-004,	-4.7726-001,	-7.9936-002,	4.1921-005)		
U-REF = U3	L-VECTOR (-8.9084+005,	-9.9469+010,	2.2711+006,	-2.8636+001)		
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM	- 1.476+000	;	- 1.000+001	;	- 1.000+001	;	- 4.120+004
U-REF = U1	L-VECTOR (-1.3103+000,	-2.4892+003,	-8.2000+003,	9.0174-002)		
U-REF = U2	L-VECTOR (1.2371-005,	-1.3103+000,	-1.4099+000,	3.9968-005)		
U-REF = U3	L-VECTOR (-8.7019+005,	-9.9410+010,	1.3844+008,	-7.8616+001)		
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM	- 1.476+000	;	- 1.000+001	;	- 1.000+001	;	- 1.000+001
U-REF = U1	L-VECTOR (-6.8781+002,	-7.6248+007,	9.5222+001,	-2.5686-001)		
U-REF = U2	L-VECTOR (-6.2012-003,	-6.8781+002,	-3.7919-003,	-2.4664-004)		
U-REF = U3	L-VECTOR (8.0630+009,	8.9382+014,	-1.2547+009,	-4.1269+004)		
POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM	- 1.476+000	;	- 5.000+000	;	- 5.000+000	;	- 4.120+004
U-REF = U1	L-VECTOR (-1.4769+000,	-4.5036+003,	-9.8815+003,	9.0308-002)		
U-REF = U2	L-VECTOR (6.7975-005,	-1.4769+000,	-1.6881+000,	3.9449-005)		
U-REF = U3	L-VECTOR (-8.6594+005,	-9.9396+010,	1.6702+008,	-8.8616+001)		

8 Analys och syntes av system vid de parallella reaktionerna.

8.1. Stabilitet

A-matrisernas egenvärden i existerande stationärpunkter till det valda reaktionssystemet, se Appendix 1.3, med parallella reaktioner återges i tabell 8.1, sid 97. Om tabell 8.1 studeras kan man konstatera, att i samtliga stationärpunkter vid båda modellerna finns ett gemensamt egenvärde lika med -0.1000 . Denna egenhet förklaras av det följande. I eku. (2.34) ovan ses att här saknas term innehållande c_B , eftersom reaktionshastigheten r_A (även r_B) endast beror på c_A , av koncentrationerna. A-matriserna vid både modell I och II får p.g.a. detta och övriga nollors placering sekulärekvationer, ur vilka en faktor $(\lambda - a_{33})$ kan utbrytas. Jämför A-matriserna vid de konsekutiva reaktionerna där element a_{13} är skilt från noll. Egenvärdet är lika med $-\frac{1}{\theta}$ (oberoende av temperatur och koncentration); dvs. negativa inverterade värdet av medeluppehållstiden i tanken. Man kan alltså kontrollera en pol till systemet då tankens geometri och volymflöde fastläggs. Polen betecknas λ_0 .

Vidare ger tabell 8.1 att systemen vid båda modellerna har två stabila stationärpunkter, St1 och St3, samt en instabil, St2. Egenvärdet, som tillkommer vid den utvidgade systembeskrivning i modell II, ligger kring -1.046 . Jämför med element a_{44} i A-matrisen, som är lika med -1.04533 konstant. Det egenvärdet betecknas λ_{II} .

Förändring av egenvärdena i existerande statio.

Tabell 8.1. Egenvärden.

St1

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000
-8.9590-002		0.0000+000
-7.0436-002		0.0000+000

St2

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
8.6910-002		0.0000+000
-9.1575-002		0.0000+000
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000

St3

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
-1.2275-001		0.0000+000
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000
-6.5152-001		0.0000+000

System med $NA=3$;
(modell I)

St1

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000
-8.9647-002		0.0000+000
-7.1538-002		0.0000+000
-1.0461+000	λ_{II}	0.0000+000

St2

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
8.8717-002		0.0000+000
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000
-9.1715-002		0.0000+000
-1.0459+000	λ_{II}	0.0000+000

System med $NA=4$;
(modell II)

St3

EIGENVALUES OF A-MATRIX		
Re λ	λ_0	Im λ
-1.2177-001		0.0000+000
-1.0000-001	λ_0	0.0000+000
-6.5611-001		0.0000+000
-1.0450+000	λ_{II}	0.0000+000

närpunkter studeras, då värmeledningslinjen parallellförflyttas. Se tabell 8.2. sid 100-101.

Stationärpunkten vid låg omsättning förskjuts från $\sim 296^\circ\text{K}$ till $\sim 313^\circ\text{K}$, då T_0 ökas från $285,15^\circ\text{K}$ till $295,15^\circ\text{K}$. Detta gäller system av båda modellerna. Egenvärdet $\lambda_0 = -0,1000$ ligger, som ovan nämnts, stilla. I modell I finns ett annat egenvärde, λ_{II} , som ej ändras då St I går mot högre temperatur. λ_{II} är konstant lika med $-1,0461$. Betrakta övriga egenvärden, två vid varje modell. De övergår vid respektive modell från ett komplexkonjugerat polpar till två skilda, reella och negativa egenvärden. Polparets dämpning minskar först för att sedan öka igen. Värmeledningslinjen förflyttas $\frac{4}{1000}^\circ\text{K}$ mer vid modell II än vid modell I, då T_0 ändras 2°K . Jämför med motsvarande vid enkla reaktionen.

Positiva egenvärdet i St 2 förskjuts från origo då värmeledningslinjen flyttas mot högre temperatur. Men alldeles innan St 2 "försviner" sker en ändring mot origo.

Betrakta egenvärden till system i "normala" arbetspunkten, St 3. λ_{II} , i modell II, och λ_0 , i båda modellerna, kan ju förbigås då variationen studeras. Övriga två egenvärden vid respektive modell övergår från ett komplexkonjugerat polpar med snabbt ökande dämpning till två reella, negativa poler, som sedan fjärrar sig från varandra.

Tabell 8.3 visar resultatet av en utredning av värmeledningslinjen för system av båda modellerna. Egenvärdena anges för system i den stationärpunkt som har högst koncentration av önskad reaktionsprodukt. Då c_{A_0} är lika med 3,2 - 3,6 mol/l finns endast en

stationärpunkt vid låg omsättning, St 1. Stationärvärdet på temperaturen ökar endast ca 1°K . λ_{II} rör sig ej, utan förblir vid -1.0461 . Samma värde för λ_{II} här som ovan i St 2 då T_0 ökades. Detta beror på att de temperaturberoende elementen är och förblir små i relation till övriga i A-matrisen, då St 1 förskjuts. De "jämförbara" egenvärdena i modell I och II är, förutom λ_0 , i form av ett komplexkonjugerat polpar med ökande dämpning vid stigande c_{A_0} . Vid $c_{A_0} = 3.7 \text{ mol/L}$ fås för båda modellerna en arbetspunkt vid hög omsättning och temperatur ($\sim 358^\circ\text{K}$). Egenvärdenas förändring då c_{A_0} ökar blir i princip densamma som vid ökning av T_0 . Då c_{A_0} ökats till 4.7 mol/L har stationärpunkten nått en temperatur över 390°K , varför högre koncentrationer inte är realistiska om man bibehåller värdet på övriga kemiska parametrar.

Observera att såväl vid parallellförflyttningen som vid vridningen av värmeavledningslinjen är systemet i St 1 och St 3, av både modell I och II, hela tiden stabila.

Tabell 8.2. Egenvärdenas variation
då T_0 ökas.

	①	②
	T0=285.15	T0=287.15
	NA=3	NA=3
Re λ	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 1	0.0000+000	0.0000+000
	1.1190-002	1.1543-002
	-1.1190-002	-1.1543-002
	NA=4	NA=4
Im λ	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 2	0.0000+000	0.0000+000
	1.0990-002	1.1351-002
	-1.0990-002	-1.1351-002
	0.0000+000	0.0000+000
	-1.0461+000	-1.0461+000
	NA=3	NA=3
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 1	0.0000+000	0.0000+000
	1.0948-002	1.0948-002
	-1.0948-002	-1.0948-002
	NA=4	NA=4
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 2	0.0000+000	0.0000+000
	1.0793-002	1.0793-002
	-1.0793-002	-1.0793-002
	0.0000+000	0.0000+000
	-1.0459+000	-1.0459+000
	NA=3	NA=3
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 1	0.0000+000	0.0000+000
	1.0948-002	1.0948-002
	-1.0948-002	-1.0948-002
	NA=4	NA=4
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 2	0.0000+000	0.0000+000
	1.0793-002	1.0793-002
	-1.0793-002	-1.0793-002
	0.0000+000	0.0000+000
	-1.0459+000	-1.0459+000
	NA=3	NA=3
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 1	0.0000+000	0.0000+000
	1.0948-002	1.0948-002
	-1.0948-002	-1.0948-002
	NA=4	NA=4
	EIGENVALUES OF A-MATRIX	EIGENVALUES OF A-MATRIX
St 2	0.0000+000	0.0000+000
	1.0793-002	1.0793-002
	-1.0793-002	-1.0793-002
	0.0000+000	0.0000+000
	-1.0459+000	-1.0459+000

Endast en stat. pkt.
vid låg omsättning
och temperatur finns
vid $T_0 = 285.15$.

Angående St 1 se även
fig 8.1, där variationen
för egenvärdena med den
minsta realdelen grafiskt
anges, för bästa medel-
terna.

Tabell 8.2 forts.

TO=297.15

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1701-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-1.1076+000 0.0000+000

NA=4

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1629-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-1.0537+000 0.0000+000

-1.1061+000 0.0000+000

TO=313.15

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1252-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-4.0118+000 0.0000+000

NA=4

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1203-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-1.0463+000 0.0000+000

-4.0396+000 0.0000+000

T0=297.15 medför att endast en stat.pkt. vid hög omsättning existerar.

TO=295.15

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.0000-001 0.0000+000

-9.2066-002 0.0000+000

-4.5793-002 0.0000+000

NA=4

EIGENVALUES OF A-MATRIX

5.3548-002 0.0000+000

-9.2429-002 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1912-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-8.7077-001 0.0000+000

NA=4

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.0000-001 0.0000+000

-9.2157-002 0.0000+000

-4.8013-002 0.0000+000

-1.0461+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

5.6678-002 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-9.2551-002 0.0000+000

-1.0460+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.1831-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-8.7812-001 0.0000+000

-1.0434+000 0.0000+000

TO=291.15

NA=3

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.0000-001 0.0000+000

-8.6753-002 7.9270-003

-8.6753-002 -7.9270-003

EIGENVALUES OF A-MATRIX

1.0728-001 0.0000+000

-9.0348-002 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.3057-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-4.4376-001 0.0000+000

NA=4

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.0000-001 0.0000+000

-8.7114-002 7.9279-003

-8.7114-002 -7.9279-003

-1.0461+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

1.0841-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-9.0512-002 0.0000+000

-1.0459+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX

-1.2923-001 0.0000+000

-1.0000-001 0.0000+000

-4.4705-001 0.0000+000

-1.0454+000 0.0000+000

St1

St2

St2

St3

St1

St2

St3

Tabell 8.3. Egenvärden i arbetspunkten, då c_0 ökas.

CA0=3.200

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
ReA	ImA
-1.0000-001	0.0000+000
NA=3 -9.2013-002	1.3788-002
-9.2013-002	-1.3788-002

CA0=3.600

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.6723-002	9.9962-003
-8.6723-002	-9.9962-003

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
NA=4 -9.2199-002	1.3555-002
-9.2199-002	-1.3555-002
-1.0461+000	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.7057-002	9.8981-003
-8.7057-002	-9.8981-003
-1.0461+000	0.0000+000

CA0=3.300

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
NA=3 -9.0786-002	1.3190-002
-9.0786-002	-1.3190-002

CA0=3.700

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.1461-001	-8.2108-002
-1.1461-001	8.2108-002
-1.0000-001	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
NA=4 -9.1003-002	1.2975-002
-9.1003-002	-1.2975-002
-1.0461+000	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.1391-001	-8.0828-002
-1.1391-001	8.0828-002
-1.0000-001	0.0000+000
-1.0457+000	0.0000+000

CA0=3.400

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.9500-002	1.2409-002
-8.9500-002	-1.2409-002

CA0=3.800

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-2.0988-001	0.0000+000
-1.8054-001	0.0000+000
-1.0000-001	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.9753-002	1.2218-002
-8.9753-002	-1.2218-002
-1.0461+000	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-2.1827-001	0.0000+000
-1.7237-001	0.0000+000
-1.0000-001	0.0000+000
-1.0456+000	0.0000+000

CA0=3.500

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.8148-002	1.1381-002
-8.8148-002	-1.1381-002

CA0=3.900

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.3158-001	0.0000+000
-1.0000-001	0.0000+000
-4.3794-001	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.0000-001	0.0000+000
-8.8440-002	1.1227-002
-8.8440-002	-1.1227-002
-1.0461+000	0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX	
-1.3024-001	0.0000+000
-1.0000-001	0.0000+000
-4.4103-001	0.0000+000
-1.0454+000	0.0000+000

Tabell 8.3 forts.

CA0=4.000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.2275-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -6.5152-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.2177-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -6.5611-001 0.0000+000
 -1.0450+000 0.0000+000

CA0=4.100

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1835-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -8.9160-001 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1754-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -8.9972-001 0.0000+000
 -1.0429+000 0.0000+000

CA0=4.200

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1561-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.1660+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1490-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0500+000 0.0000+000
 -1.1690+000 0.0000+000

CA0=4.300

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1371-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.4811+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1306-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0472+000 0.0000+000
 -1.4891+000 0.0000+000

CA0=4.400

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1230-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.8430+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1170-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0467+000 0.0000+000
 -1.8543+000 0.0000+000

CA0=4.500

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1120-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -2.2587+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1063-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0465+000 0.0000+000
 -2.2736+000 0.0000+000

CA0=4.600

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.1032-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -2.7357+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.0978-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0464+000 0.0000+000
 -2.7547+000 0.0000+000

CA0=4.700

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.0961-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -3.2823+000 0.0000+000

EIGENVALUES OF A-MATRIX
 -1.0908-001 0.0000+000
 -1.0000-001 0.0000+000
 -1.0464+000 0.0000+000
 -3.3062+000 0.0000+000

8.2 Test av observerbarhet och styrbarhet. Överföringsfunktioner.

8.2.1. modell I.

Samtliga system, som behandlas i detta avsnitt, erhålles ur nedanstående system.

A-MATRIX		
4.47352-001	2.75716+001	0.00000+000
-2.27214-002	-1.22162+000	0.00000+000
1.29867-002	7.17976-001	-1.00000-001
B-MATRIX		
1.00000-001	0.00000+000	2.74123-002
0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
C-MATRIX		
1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.31579-002	0.00000+000	0.00000+000
D-MATRIX		
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	9.86842-001

NA=2;
NB=3; KH=1;
NC=2;

$\bar{x} = \text{col}(T, c_A, c_B)$

$\bar{u} = \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_k)$

$\bar{y} = \text{col}(T, T_k)$

Observerbarhetstest för mus systemen ger vidstående T-matrisen. Rang T = 2 < NA. Systemet är alltså inte observerbart.

Studera NECONT:
 $y_2 = T_k$ bidrar ej till observerbarheten nådd med $y = T$.

T-MATRIX		
1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.32162+000	2.75716+001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

RANK T=2
NECONT 1 0

Då styrbarheten testas för de multivariabla systemen får man T-matriserna, som ses på nästa sid.

För samtliga T-matriser gäller att Rang T är lika med 3 (=NA).

Alltså är alla systemen styrbara.

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_{k_1})$	
2.74123-002	0.000000+000	0.000000+000
3.62285-002	-6.22844-004	3.55995-004
3.34873-003	-6.22844-005	-1.22984-005

Då observerbarheten för de enkla systemen, $\bar{y} = T$, testas, fås samma resultat som vid test av mvs

systemen. Transformering till observerbara kanoniska formen kan ej utföras.

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_0, T_{k_1})$	
1.000000-001	0.000000+000	0.000000+000
1.32162-001	-2.27214-003	1.29867-003
1.22162-002	-2.27214-004	-4.48646-005

T-MATRIX	$u = \text{col}(C_{A_0}, T_{k_1})$	
0.000000+000	1.000000-001	0.000000+000
2.75716+000	-3.47352-002	7.17976-002
2.75716-001	-4.47352-003	3.68754-003

T-MATRIX	$u = \text{col}(T_0, C_{A_0}, T_{k_2})$	
1.000000-001	0.000000+000	0.000000+000
1.32162-001	-2.27214-003	1.29867-003
1.22162-002	-2.27214-004	-4.48646-005

Överföringsfunktionerna beräknas enligt $G_0(s) = C \cdot [sI - A]^{-1} B$, där B antar olika utseende beroende på vilken styrsignal, som systemet har. Man finner vid denna beräkning att nämnare och täljare har en faktor, $(s + 0.1000)$, gemensam. Denna faktor kommer alltså att kunna bortförkortas. Den icke observerbara moden svarar alltså mot ett egenvärde -0.1000 . Observera att moden är stabil. Till de enkla systemen finns alltså genomgående både styrbara och observerbara delsystem, som entydigt bestämmer respektive överföringsfunktion.

Betrakta T-matriserna på omstående sida, som är resultat av styrbarhetstester för enkla systemen. Alla system är styrbara. Överföringsfunktionen står under T-matrisen.

CONTROL SIGNAL U1 (T_0)

T-MATRIX

1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000
1.32162-001	-2.27214-003	1.29867-003
1.22162-002	-2.27214-004	-4.48646-005

RANK T=3

$$G_0(s) = \frac{0.1000 \cdot (s+1.22162)}{(s+0.65152) \cdot (s+0.12275)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (c_{q_0})

T-MATRIX

0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000
2.75716+000	-3.47352-002	7.17976-002
2.75716-001	-4.47352-003	3.68754-003

RANK T=3

$$G_0(s) = \frac{2.7572}{(s+0.65152) \cdot (s+0.12275)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_{K_2})

T-MATRIX

2.74123-002	0.00000+000	0.00000+000
3.62285-002	-6.22844-004	3.55995-004
3.34873-003	-6.22844-005	-1.22984-005

RANK T=3

$$G_0(s) = \frac{0.0274123 \cdot (s+1.22162)}{(s+0.65152) \cdot (s+0.12275)}$$

Systemen ovan har samtliga en icke observerbar mod. För att närmare studera detta, transformeras systemen till den diagonaliserade formen. Transformation kan göras då A -matrisen har skilda egenvärden.

Sätt $z = T \cdot x$ och $S(A, B, C, D)$ övergår till systemet

$$\begin{cases} \dot{z} = TAT^{-1}z + T \cdot B \cdot u \\ y = C \cdot T \cdot z + D \cdot u \end{cases}, \text{ där } TAT^{-1} \text{ är en diagonalmatris med } A\text{'s egenvärden i huvuddiagonalen, se [8] Åström.}$$

Med aktuella A -matrisen fås nedanstående:

$$\dot{\bar{z}} = \begin{bmatrix} -0.65152 & 0 & 0 \\ 0 & -0.12275 & 0 \\ 0 & 0 & -0.1000 \end{bmatrix} \cdot \bar{z} + \begin{bmatrix} 0.04297 & 2.0739 & 0 \\ -0.04297 & -1.0782 & 0 \\ -0.1393 & -2.7836 & 1 \end{bmatrix} \cdot B \cdot \bar{u}$$

(T)

$$\bar{y} = C \cdot \begin{bmatrix} -25.0909 & -48.3626 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -0.71100 & -3.9520 & 1 \end{bmatrix} \cdot \bar{z} + D \cdot \bar{u}$$

(T⁻¹)

Om de två aktuella C -matriserna insätts, ser man att $C \cdot T^{-1}$ vid både multivariabla och enkla systemen får nollor som koefficienter för komponenten z_3 i \bar{z} .

z_3 är alltså icke observerbar. Ursprungliga koordinatsystemet uppspanner vektorn $\sum_{i=1}^3 t_{3i} \cdot x_i$ ett rum med de icke observerbara tillstånden (t_{3i} är element i T -matrisens 3:e rad).

Vektorn är alltså: $-0.1393x_1 - 2.7836x_2 + x_3$.

Den existerande icke observerbara moden medför att rekonstruktion av tillståndsvariabler ej kan utföras.

8.2.2. modell II

Ur systemet nedan fås lätt övriga studerade system.

$$NA=4; NB=3; KH=1; NC=2;$$

$$\bar{x} = \text{col}(T, c_A, c_B); \quad \bar{u} = \text{col}(T_0, c_{A_0}, T_{K_2}); \quad \bar{y} = \text{col}(T, T_K);$$

A-MATRIX

4.47054-001	2.76463+001	0.00000+000	2.77778-002
-2.27222-002	-1.22457+000	0.00000+000	0.00000+000
1.29828-002	7.19664-001	-1.00000-001	0.00000+000
2.66667-002	0.00000+000	0.00000+000	-1.04533+000

B-MATRIX

1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000	

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	

Mvs systemen har p.s.s. som vid modell I en icke observerbar mod svarande mot egenvärdet $-0.1000 (= -\frac{1}{10})$. Dektorn NECOLIT är också densamma som i föregående fall. T-matrisen återges nedan.

T-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.36990+000	2.76463+001	0.00000+000	2.77778-002
1.50707+000	3.16642+001	0.00000+000	3.67936-002
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

RANK T=3

NECOUT 1 0

Alla multivariabla system är styrbara, då Rang T är lika med 4 för samtliga T -matriser nedan. Vektorn $NECOLIT$ är identisk med den i modell I.

T-MATRIX	$W = \text{COL}(T_{k_1})$		
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000
2.77778-002	0.00000+000	0.00000+000	8.77516-001
3.67936-002	-6.21173-004	3.60634-004	1.58488-001
	0.31173-005	-1.26109-005	8.07368-003

T-MATRIX	$W = \text{COL}(T_0, T_{k_1})$		
1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.36990-001	-2.27222-003	1.29828-003	2.66667-003
1.50707-001	-2.60245-003	1.31174-003	3.53219-003
1.28008-002	-2.37523-004	-4.74572-005	3.26552-004

T-MATRIX	$W = \text{COL}(C_{R_0}, T_{k_1})$		
0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000
2.76463+000	6.98279-002	7.19664-002	0.00000+000
3.16642+000	-4.08233-002	7.89488-002	7.37235-002
2.88996-001	-4.68061-003	3.83518-003	7.37235-003

T-MATRIX	$W = \text{COL}(T_0, C_{R_0}, T_{k_1})$		
1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.36990-001	-2.27222-003	1.29828-003	2.66667-003
1.50707-001	-2.60245-003	1.31174-003	3.53219-003
1.28008-002	-2.37523-004	-4.74572-005	3.26552-004

Transformation av enkla systemen till obs. kan formen går ej att utföra p.g.a den icke observerbara modens existens. En faktor $(s+0.1000)$ förkortas bort vid beräkningen av överföringsfunktionerna p.s.s. som vid modell I. De observerbara och styrbara delsystemen bestämmer överföringsfunktionen vid respektive styrsignal. Enkla systemen är styrbara samtliga. Se nästa sida!

CONTROL SIGNAL U1 (T_b)

T-MATRIX

1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
2.36990-001	-2.27222-003	1.29828-003	2.66667-003
1.50707-001	-2.60245-003	1.31174-003	3.53219-003
1.28008-002	-2.37523-004	-4.74572-005	3.26552-004

RANK T=4

$$G_o(s) = \frac{0.1000 (s+1.22457)(s+1.04533)}{(s+1.04500)(s+0.65611)(s+0.12177)}$$

CONTROL SIGNAL U2 (C_{R0})

T-MATRIX

0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000
2.76463+000	6.98279-002	7.19664-002	0.00000+000
3.16642+000	-4.08233-002	7.89488-002	7.37235-002
2.88996-001	-4.68061-003	3.83518-003	7.37235-003

RANK T=4

$$G_o(s) = \frac{2.7646 \cdot (s+1.04533)}{(s+1.04500)(s+0.65611)(s+0.12177)}$$

CONTROL SIGNAL U3 (T_{k1})

T-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000
2.77778-002	0.00000+000	0.00000+000	8.77516-001
3.67936-002	-6.31173-004	3.60634-004	1.58488-001
3.40158-003	-6.31173-005	-1.26109-005	8.07368-003

RANK T=4

$$G_o(s) = \frac{0.027778 \cdot (s+1.22457)}{(s+1.04500)(s+0.65611)(s+0.12177)}$$

Icke observerbara tillstånd beräknas enligt metoden vid modell I. Då systemet transformeras till diagonal formen har utsignalen följande form:

$$y = C \cdot T^{-1} \cdot z + D \cdot u = \begin{bmatrix} -7.90 & -25.02 & -48.53 & 0 \\ -570.76 & -1.70 & -1.40 & 0 \end{bmatrix} \cdot z + D \cdot u,$$

C-matrisen vid mätsignalvektorn $\text{col}(T, T_k)$ är insatt. z_4 i \bar{z} är inte observerbar, då koefficienterna för z_4 i (T^{-1}) är noll. Vektorn $(-0.15, -2.93, 1.00, -0.0043)$, i ursprungliga koordinatsystemet, spänner upp det endimensionella underrummet med icke observerbara tillstånd. Den icke observerbara moden får som konsekvens, att tillståndsvariablerna ej kan rekonstrueras genom mätning i utsignalen.

8.2.3. modell I och modell II jämföres.

Skillnaden mellan modellerna märks praktiskt endast vid styrsignalen T_k , inloppstemperaturen på kylmediet. Här fås ett snabbare system vid modell I dessutom ligger gränsvärdet för argumentfunktionen $\arg G_o(i\omega)$ vid modell I på $-\frac{\pi}{2}$ radianer dvs $\frac{\pi}{2}$ radianer över motsvarande gränsvärde vid modell II. Vidare ses, om man betraktar överföringsfunktionerna på sid. 106 och 110, att för insignalerna T_0 och c_{p0} är avvikelserna mellan de båda systemmodellerna mindre än de är vid den enkla reaktionen och de konsekutiva reaktionerna. Dipolen, som tillkommer, då systembeskrivningen utökas genom hänsyn till kyldynamiken, ligger i systemet med parallella reaktioner vid: polen $s = -1.04500$ och nollstället $s = -1.04533$.

8.3. Syntes. Icke observerbara system.

Då man skall göra syntes av systemen vid de parallella reaktionerna, stöter man på problem, som ej finns vid de två övriga behandlade reaktionerna. För både modell I och II gäller, enligt kap 8.2, att de enkla systemen är styrbara men har en icke observerbar mod, som svarar mot egenvärdet -0.1000 och alltså är stabil. Vid system, som ej är observerbara, kan alltså inte samtliga tillståndsvariabler rekonstrueras genom "mätning" av insignalen och utsignalen. Direkt mätning av alla tillståndsvariablers värden är ej heller möjlig, ty koncentrationsmätningar är förenade med stora svårigheter.

Syntesen kan alltså utföras enligt följande. Tillstånden i det observerbara delsystemet, som entydigt bestämmer överföringsfunktionerna vid de båda modellerna (se sid. 106 och 110), rekonstrueras. Återkoppling från dessa tillstånd göres. Det slutna systemet har en pol i -0.1000 , vars värde ej förändras genom återkopplingen. Då icke observerbara moden är stabil, uppträder ej några okontrollerbart växande signaler.

Om polernas placering studeras, se kap 8.1, ser man att det är polen närmast origo, vid båda modellerna, som ej kan förflyttas.

Styrlagarna, som definierar återkopplingar, fås på enkel form, om de observerbara och styrbara delsystemen transformeras till den styrbara kanoniska formen, vilken lätt erhålles ur överföringsfunktionerna på sid 106 och 110 för respektive modell I och II. Se nästa sida.
 z_i är koordinater i det transformerade systemet.

*modell I; polerna -0.65152 och -0.12275 skall flyttas till $-p_1$ respektive $-p_2$. Styrlagen blir då:

$$u = u_{ref} + (0.77427 - (p_1 + p_2)) \cdot z_1 + (0.07997 - p_1 \cdot p_2) \cdot z_2$$

*modell II; polerna -1.04500 , -0.65611 och -0.12177 ges nya värden $-p_1$, $-p_2$ och $-p_3$ respektive.

Styrlagen blir:

$$u = u_{ref} + (1.82288 - (p_1 + p_2 + p_3)) \cdot z_1 + (0.89278 - (p_1 \cdot p_2 + p_1 \cdot p_3 + p_2 \cdot p_3)) \cdot z_2 + (0.08348 - p_1 \cdot p_2 \cdot p_3) \cdot z_3$$

Transformering av styrlagen kan sedan göras till ursprungliga koordinatsystemet med hjälp av transformationsmatrisen till styrbara kanoniska formen. Se vidare [8] Åström.

Någon exemplifiering görs ej vid detta reaktionssystem. För numeriska exempel på olika återkopplingslänkar, hänvisas till de övriga två reaktionssystemen där syntesmetoden är fullständigt genomförbar.

9. Slutord

Vid studium av de tre reaktionstyperna kommer man fram till beskrivande reglersystem, som får mycket olika egenskaper. De konsekutiva reaktionerna är av mycket speciell natur. Reaktionsförloppet som försiggår på en fluidiserad bädd medför höga temperaturer och stora volymflöden. Reaktionerna är starkt exotermiska. Summan av reaktionsentalpierna är 1200 kcal/mol jämfört med 20 kcal/mol vid den enkla reaktionen och 25 kcal/mol vid de parallella reaktionerna. Valda dimensioner på de kemiska parametrarna leder till stora variationer för absolutbeloppen på elementen i systemmattisen A , diagonalelementen är dominerade. Egenvärdesberäkningen blir besvärlig och stabilitetsundersökningen för systemet kan ej genomföras fullständigt. Numeriska svårigheterna inverkar även vid syntesen. Av skäl som berörts i kap. 7, göres inga ändringar av koordinatsystemet, vilka skulle ge en del av subrutinen CREMA 2 annorlunda utseende. Systemet fyller funktionen som studieexempel.

Den utvidgning av systembeskrivning, som införts i detta arbete, genom hänsyn till kylmediets dynamik medför en extra pol jämfört med system där kylmediodynamiken försummas. Om systemen av modell I och modell II jämföres erhålls generellt följande: Då kylmediets inloppstemperatur är styrsignal uppvisar modellerna tydliga skillnader i fråga om snabbhet och fasförskjutning. Avvikelserna mellan modellerna blir däremot obetydliga då man styr med reaktionsblandningens

inloppstemperatur eller inloppskoncentration. Detta beror på att vid modell II tillkommer här förutom polen (svarande mot egenvärdet med beteckningen λ_{II}) ett extra nollställe, som ligger mycket nära polen på negativa, reella axeln. Avståndet mellan nollstället och polen är 0.02 vid den enkla reaktionen, 0.003 vid de konsekutiva reaktionerna och 0.0003 vid de parallella. Då även övriga poler och nollställen vid dessa två styrsignaler avviker obetydligt mellan systemmodellerna, blir här i praktiken det extra tillståndet i modell II omöjligt att observera och styra. Vid enkla reaktionen, där avståndet pol-nollställe är störst, har system av modell I och modell II simulerats, se diagram 8 sid i App 1., inloppskoncentrationen är styrsignal.

Syntesmetodens, återkoppling från ett systems alla tillstånd, användbarhet vid de olika reaktionssystemen är, som framgått, varierande. Vid den enkla reaktionen, där systemen är observerbara och styrbara, erhålles vid återkopplingen slutna system med tillfredställande egenskaper. Numeriska svårigheter inverkar menligt på syntesen vid de konsekutiva reaktionerna. Då systemen skapade ur de parallella reaktionerna ej är observerbara, kan alla tillståndsvariablerna icke rekonstrueras, varför återkoppling av det observerbara delsystemet göres.

Ett antal av biblioteksprogrammen i [9] Programbibliotek vid inst. f. reglerteknik, LTH, Lund, har använts vid beräkningsarbetet, se program i App 3. I vari biblioteksprogrammen anropas. Angående deras användbarhet kan sägas; problemen vid analys och syntes av reglersystemen i detta arbete täcks väl, flertalet är enkla att använda och

riktaktigheten av utmatningsbara resultat är tillräcklig. Några subjektiva synpunkter: Kommentaren till subrutinen OBSTEST är oklar vad beträffar formella parametern NECOLIT, särskilt vid test av styrbarhet. Det bör även i kommentaren tydligt anges, att man ej kan sätta ett siffervärde på parametern DELTA i argumentet vid anrop.

Beräkningarna i subrutinen TOBSKAN kunde lämpligen omfatta även koefficienterna i överföringsfunktionens täljare.

I örigt förekom inga problem vid tillämpningen av subrutinerna. Mülleriterationen, som utföres i FIGUNS vid egenvärdesberäkning, fallerar endast vid de konsekutiva reaktionerna. Orsaken härtill är utredd ovan.

Införda beteckningar och konstanter.

1. Parametrar för reaktor system.

Reaktor medium.

T_0	mediets inloppstemperatur	$^{\circ}\text{K}$
T	mediets temperatur i tanken	$^{\circ}\text{K}$
C_{A0}	koncentration av ämnet A i inloppet	mol/L
C_A	koncentration av ämnet A i tanken	mol/L
C_B	koncentration av ämnet B i tanken	mol/L
V	reakortankens volym	L
G	volymflödet genom tanken	L/min
θ	medeluppehållstid i tanken	min
ρ	reaktionsblandningens täthet	kg/L
C_p	reaktionsblandningens spec. värme	$\text{kcal/kg,}^{\circ}\text{K}$
r_i	reaktionshastighet	mol/L, min
k_i	hastighetskonstant	min^{-1}
k_{100}	frekvensfaktor	min^{-1}
E_i	aktiveringsenergi	cal/mol
R	allmänna gaskonstanten	$\text{cal/mol,}^{\circ}\text{K}$
ΔH	reaktionsentalpin	kcal/mol

vägg: Reaktortank - kylmantel

h_R	total värmeöverföringskoefficient	$\text{kcal/m}^2,^{\circ}\text{K, min}$
A_R	total värmeöverförings yta	m^2

Kylmedium.

T_{k1}	kylmediets inloppstemperatur	$^{\circ}\text{K}$
T_k	kylmediets manteltemperatur	$^{\circ}\text{K}$
T_{k2}	kylmediets utloppstemperatur	$^{\circ}\text{K}$
V_k	kylmantelns volym	L
G_k	volymflöde genom manteln	L/min
θ_k	medeluppehållstid i manteln	min

ρ_k kylmediets täthet kg/L
 c_{pk} kylmediets spec. värme kcal/kg, °K

vägg: Kylmantel - Ömgiuning

h_u total värmeöverföringskoefficient kcal/m², °K, min
 A_u total värmeöverföringsyta m²

Ömgiuning

T_u luftens temperatur °K

2. Systemvariabler m.m.

\vec{x} tillståndsvektorn col (x_1, x_2, \dots, x_{NA})
 \vec{u} styrsignalvektorn col (u_1, u_2, \dots, u_{NB})
 \vec{y} mätsignalvektorn col (y_1, y_2, \dots, y_{NC})

NA systemordning = antalet tillståndsvariabler
 NB antal styrsignaler
 KU kombinationsparameter för \vec{u} .
 NC antal mätsignaler

Standardformen, se vidare [B] Åström :

$$\begin{cases} \dot{\vec{x}} = A \cdot \vec{x} + B \cdot \vec{u} \\ \vec{y} = C \cdot \vec{x} + D \cdot \vec{u} \end{cases}$$

G_0 överföringsfunktion för öppet system
 K vektor i kalmanfilter
 L vektor i återkopplingen $\vec{u} = \vec{u}_{ref} - L \cdot \vec{x}$.
 ω_b bryt frekvens
 ω_c skärfrekvens
 φ_m fas marginal
 λ egenvärde
 T transformationsmatris
 \vec{z} tillståndsvektor i transformerat system
 $\vec{z} = T \cdot \vec{x}$.

3. Konstanter

			<u>Dimension</u>
$g_2 = \frac{h_R \cdot A_R}{\rho c_p V}$	$g_3 = \frac{h_R \cdot A_R}{(\rho c_p V)_K}$	$g_4 = \frac{h_U \cdot A_U}{(\rho c_p V)_K}$	min^{-1}
$g_{21} = \frac{(-\Delta H_1)}{\rho c_p}$	$g_{21} = \frac{(-\Delta H_1)}{\rho c_p}$	$g_{22} = \frac{(-\Delta H_2)}{\rho \cdot c_p}$	$\frac{\text{L} \cdot ^\circ\text{K}}{\text{mol}}$
$d = \left(1 + \frac{h_R \cdot A_R}{(\rho c_p G) \cdot R^2}\right)^{-1}$			dim:lös
$e_s = \frac{E}{RT_s}$	$e_{1s} = \frac{E_1}{RT_s}$	$e_{2s} = \frac{E_2}{RT_s}$	dim:lös
$k_s = k_{00} \cdot e^{-e_s}$	$k_{1s} = k_{100} \cdot e^{-e_{1s}}$	$k_{2s} = k_{200} \cdot e^{-e_{2s}}$	min^{-1}
$g_5 = k_s \cdot e_s \cdot \frac{C_{As}}{T_s}$			$\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot ^\circ\text{K} \cdot \text{min}}$
$g_{51} = k_{1s} \cdot e_{1s} \cdot \frac{1}{T_s}$	$g_{52} = k_{2s} \cdot e_{2s} \cdot \frac{1}{T_s}$		$(^\circ\text{K} \cdot \text{min})^{-1}$
$g_{6C} = g_{21} \cdot g_{51} \cdot C_{As} + g_{22} \cdot g_{52} \cdot C_{Bs}$			min^{-1}
$g_{6P} = (g_{21} \cdot g_{51} + g_{22} \cdot g_{52}) \cdot C_{As}$			min^{-1}

4. Övriga beteckningar.

$Q_p(T)$ = värmeproduktionsfunktionen

$Q_A(T)$ = värmeavledningsfunktionen, total

$Q_A^a(T)$ = _____, adiabaten

$Q_A^k(T)$ = _____, kylinjen

U_L = koefficient för värmeavledningslinjens lutning

U_2 = _____ " _____ " _____ nollställe

$\alpha = Q_A^a(T)$'s lutningsvinkel, $\beta = Q_A^k(T)$'s lutningsvinkel

$\gamma = Q_A(T)$'s _____ " _____ .

- st stationärpunkt (ex. $st I$)
 Δ anger avvikelse från stationärvärde (ex. AC_R)
 δ anger avvikelse från värde, som för de olika reaktionssystemen valts på en parameter och tilldelas denna i subrutinens inledning (ex. δT_0)

5. Index.

- I** anger att storheten tillhör modell I, där kyl-
 dynamiken försummas (ex. Q_{RI})
II. anger att storheten tillhör modell II, där
 kylmediedynamiken beaktas. (ex. Q_{RII})
A avledd (ex. Q_{RI}^k)
P producerad (ex. Q_P)
S anger parametervärdet i stationärt tillstånd
 (ex. T_S)
0 anger parametervärdet vid reaktorinloppet.
2 anger värmeavledningens nollställe

Referenser

1. Amundson, N.R. and Bilous, O.
Amer. Inst. Chem. Engrs. 1, 513, 1955.
2. Amundson, N.R. and Aris, R.
Chem. Eng. Sci. 7, 121, 1958.
3. Engwall, H.
Examensarbete vid inst. f. kem. teknologi, KTH, Sthlm, 1967.
4. Harriott, P.
Process Control, 1964
5. van Heerden, C.
Ind. Eng. Chem. 45, 1242, 1953.
6. Lundin, S.T.
Tekn. Reaktionskinetik, del 2, KTH, Sthlm, 1964.
7. Westerterp, K.R.
Chem. Eng. Sci. 17, 423, 1962.
8. Åström, K.J.
Reglerteori, 1968.
9. Programbibliotek vid inst. f. reglerteknik, LTH,
Lund, jan 1969.

Appendix 1.

	<u>sid.</u>
<u>App.1.1. Enkel reaktion</u>	123
<u>App.1.2. Konsekutiva reaktioner</u>	137
<u>App.1.3. Parallella reaktioner</u>	146

Värden på de kemiska parametrarna

Underlag till graf över Q_A och Q_P

Graf över Q_A och Q_P

Stationärvärden

Systemmatriser; genomgående anges

A-matrisen i samtliga stationärpunkter,

B-, C-, D-matriserna för fallet $NB=3$,

$KH=1$ och $NC=2$. Härur erhålles lätt

övriga möjliga system vid varje reak-

tionstyp och kyldynamikmodell. Vid den

enkla reaktion med $NA=2$ anges dessutom

B-, C- och D-matriserna för samtliga kom-

binationer av NB och KH då $NC=2$.

Kommentar; angående differenser mellan

de två modellerna för kyldynamiken.

(I App. 1.1. återges Bode-diagram och

resultat av systemsimulering för enkla

system vid den enkla reaktionen; $A \rightarrow R$)

App. 1.1. Enkel reaktionKemiska parametrarnas värden:

$T_0 = 293.2$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_{k1} = 320.0$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_{k2} = 291.15$	$^{\circ}\text{K}$	
$C_{A0} = 5.0$	mol/L	
$\rho = 0.8$	kg/L	
$\rho_k = 1.0$	kg/L	
$c_p = 1.0$	$\text{kcal/kg, } ^{\circ}\text{K}$	
$c_{pk} = 1.0$	$\text{kcal/kg, } ^{\circ}\text{K}$	
$V = 3000$	L	$\left(\begin{array}{l} \theta = 20 \text{ min} \\ \theta_k = 5 \text{ min} \end{array} \right)$
$V_k = 1000$	L	
$G = 150$	L/min	
$G_k = 200$	L/min	
$(-\Delta H) = 20$	kcal/mol	
$E = 31.600$	cal/mol	
$R = 1.9858$	$\text{cal/mol, } ^{\circ}\text{K}$	
$k_{\infty} = 3.0 \cdot 10^{19}$	min^{-1}	
$h_R = 10.0$	$\text{kcal/m}^2\text{, } ^{\circ}\text{K, min}$	
$h_L = 1.4$	$\text{kcal/m}^2\text{, } ^{\circ}\text{K, min}$	
$A_R = 12.48$	m^2	
$A_L = 15.12$	m^2	

QR-AD

QF

SLOPE ($\frac{\text{sec}}{\text{ml}, \text{°K}}$) 1.600-001

1.00

ZERO (°K) 293.200

31

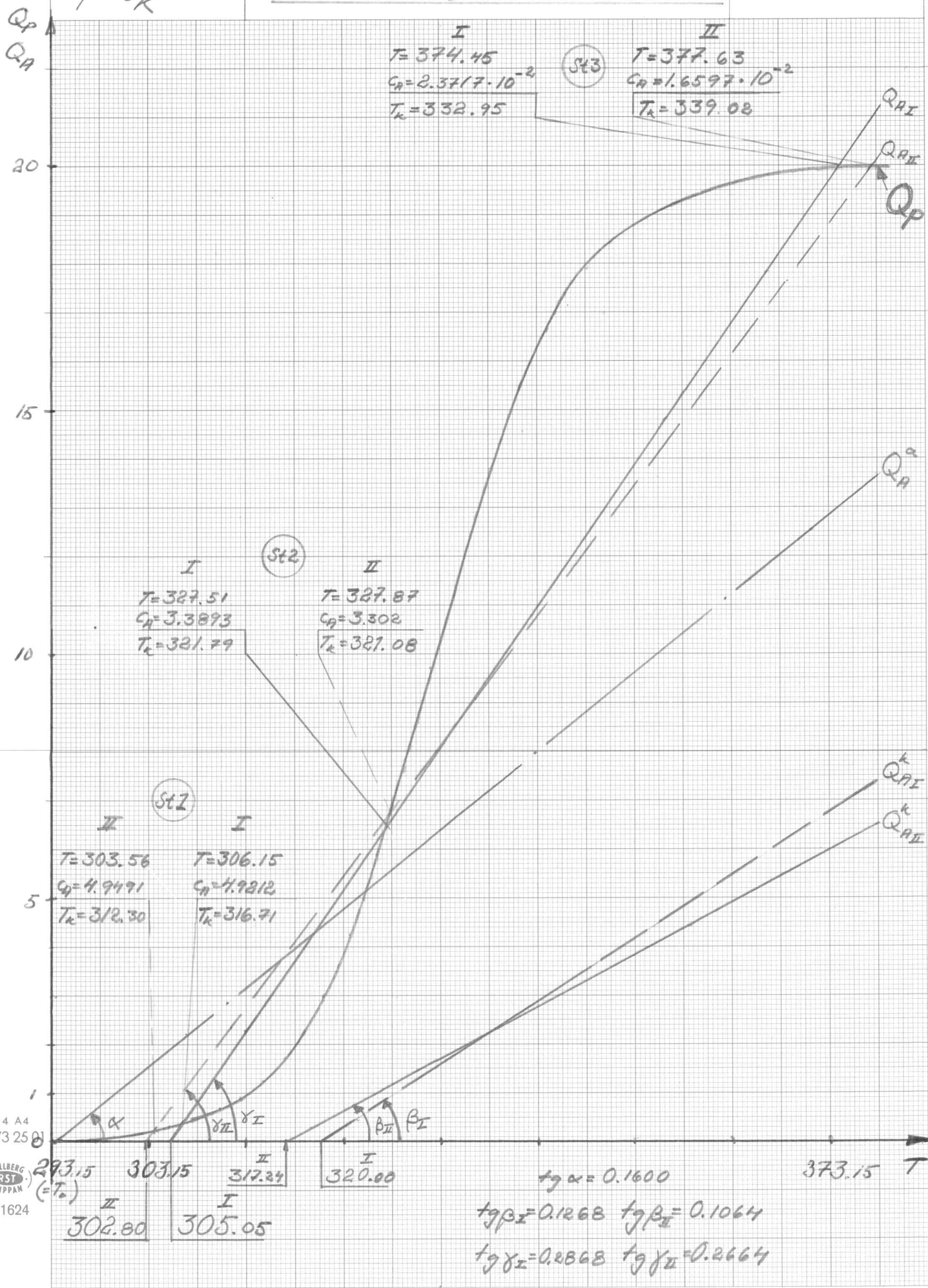
TEMP (°K)	QPROD	TEMP	QF	SLOPE	ZERO
273.15	6.003-004	528.15	2.100+000.S	21.8801	100
278.15	1.711-003	533.15	2.100+000.S	21.8801	100
283.15	4.697-003	538.15	2.100+000.S	21.8801	100
288.15	1.245-002	543.15	2.100+000.S	21.8801	100
293.15	3.190-002	548.15	2.100+000.S	21.8801	100
298.15	7.909-002	553.15	2.100+000.S	21.8801	100
303.15	1.897-001	558.15	2.100+000.S	21.8801	100
308.15	4.389-001	563.15	2.100+000.S	21.8801	100
313.15	9.738-001	568.15	2.100+000.S	21.8801	100
318.15	2.043+000	573.15	2.100+000.S	21.8801	100
323.15	3.957+000	578.15	2.100+000.S	21.8801	100
328.15	6.862+000	583.15	2.100+000.S	21.8801	100
333.15	1.039+001	588.15	2.100+000.S	21.8801	100
338.15	1.373+001	593.15	2.100+000.S	21.8801	100
343.15	1.626+001	598.15	2.100+000.S	21.8801	100
348.15	1.789+001	603.15	2.100+000.S	21.8801	100
353.15	1.884+001	608.15	2.100+000.S	21.8801	100
358.15	1.936+001	613.15	2.100+000.S	21.8801	100
363.15	1.965+001	618.15	2.100+000.S	21.8801	100
368.15	1.980+001	623.15	2.100+000.S	21.8801	100
373.15	1.989+001	628.15	2.100+000.S	21.8801	100
378.15	1.994+001	633.15	2.100+000.S	21.8801	100
383.15	1.996+001	638.15	2.100+000.S	21.8801	100
388.15	1.998+001	643.15	2.100+000.S	21.8801	100
393.15	1.999+001	648.15	2.100+000.S	21.8801	100
398.15	1.999+001	653.15	2.100+000.S	21.8801	100
403.15	2.000+001	658.15	2.100+000.S	21.8801	100
408.15	2.000+001	663.15	2.100+000.S	21.8801	100
413.15	2.000+001	668.15	2.100+000.S	21.8801	100
418.15	2.000+001	673.15	2.100+000.S	21.8801	100
423.15	2.000+001	678.15	2.100+000.S	21.8801	100
428.15	2.000+001	683.15	2.100+000.S	21.8801	100
433.15	2.000+001	688.15	2.100+000.S	21.8801	100
438.15	2.000+001	693.15	2.100+000.S	21.8801	100
443.15	2.000+001	698.15	2.100+000.S	21.8801	100
448.15	2.000+001	703.15	2.100+000.S	21.8801	100
453.15	2.000+001	708.15	2.100+000.S	21.8801	100
458.15	2.000+001	713.15	2.100+000.S	21.8801	100
463.15	2.000+001	718.15	2.100+000.S	21.8801	100
468.15	2.000+001	723.15	2.100+000.S	21.8801	100
473.15	2.000+001	728.15	2.100+000.S	21.8801	100
478.15	2.000+001	733.15	2.100+000.S	21.8801	100
483.15	2.000+001	738.15	2.100+000.S	21.8801	100
488.15	2.000+001	743.15	2.100+000.S	21.8801	100
493.15	2.000+001	748.15	2.100+000.S	21.8801	100
498.15	2.000+001	753.15	2.100+000.S	21.8801	100
503.15	2.000+001	758.15	2.100+000.S	21.8801	100
508.15	2.000+001	763.15	2.100+000.S	21.8801	100
513.15	2.000+001	768.15	2.100+000.S	21.8801	100
518.15	2.000+001	773.15	2.100+000.S	21.8801	100
523.15	2.000+001	778.15	2.100+000.S	21.8801	100

Dimensioner:

Q_p } kcal
 Q_R } / molingt
 T °K

Värmekurvor för enkla reaktionen; modell I och II

Diagram 1



.. BASIC STATE ..

CAO = 5.000 TO = 293.200 TKI = 320.000 TAETA = 2.00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2

APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0

NO.1

T= 318.1

SF(T)= -1.71+000

APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0

NO.2

T= 346.6

SF(T)= 5.55+000

NUMBER OF STEADY-STATES = 3

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 306.1492

REACTANT CONCENTRATION = 4.9212+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 316.7062

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTANT TEMPERATURE = 327.5124

REACTANT CONCENTRATION = 3.3893+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 321.7865

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTANT TEMPERATURE = 374.4475

REACTANT CONCENTRATION = 2.3717-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 332.9479

Enkla reaktioner

modell I.

.. BASIC STATE ..

CAO = 5.000 TO = 293.200 TKI = 320.000 TAETA = 2.00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2

APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0

NO.1

T= 317.5

SF(T)= -2.05+000

APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0

NO.2

T= 347.5

SF(T)= 5.81+000

NUMBER OF STEADY-STATES = 3

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 303.5641

REACTANT CONCENTRATION = 4.9491+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 312.3059

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTANT TEMPERATURE = 327.8744

REACTANT CONCENTRATION = 3.3302+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 321.0753

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTANT TEMPERATURE = 377.6326

REACTANT CONCENTRATION = 1.6597-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 339.0245

Enkla reaktioner

modell II.

Enkel reaktion; A → R, modell I.

A-MATRIX

-7.29109-002	2.00154-002
-6.68929-004	-5.08006-002

St 1 (=Stationärpunkt 1, dvs. den med lägst temperatur.)

A-MATRIX

2.09054-001	5.94034-001
-1.19475-002	-7.37614-002

St 2

A-MATRIX

St 3	6.16334-001	2.62269+002
	-2.82387-002	-1.05408+001

B-MATRIX

3.96341-002	
0.00000+000	

$\vec{u} = T_{k_1}$

B-MATRIX

0.00000+000	3.96341-002
5.00000-002	0.00000+000

$\vec{u} = \begin{pmatrix} C_{A0} \\ T_{k_1} \end{pmatrix}$

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000
2.37805-001	0.00000+000

B-MATRIX

5.00000-002	3.96341-002
0.00000+000	0.00000+000

$\vec{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_{k_1} \end{pmatrix}$

D-MATRIX

0.00000+000	
7.62195-001	

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000
2.37805-001	0.00000+000

Gemensamt: $\vec{y} = \begin{pmatrix} T \\ T_k \end{pmatrix}$

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	7.62195-001

B-MATRIX

5.00000-002	0.00000+000
0.00000+000	5.00000-002

$\vec{u} = \begin{pmatrix} T_0 \\ C_{A0} \\ T_{k_1} \end{pmatrix}$

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000
2.37805-001	0.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000
7.62195-001	

Enkel reaktion; $A \rightarrow R$, modell II.

A-MATRIX

-9.10124-002	1.28566-002	5.20000-002
-4.39504-004	-5.05143-002	0.00000+000
1.24800-001	0.00000+000	-3.45968-001

St 1

A-MATRIX

2.06970-001	6.26774-001	5.20000-002
-1.23588-002	-7.50710-002	0.00000+000
1.24800-001	0.00000+000	-3.45968-001

St 2

A-MATRIX

5.93102-001	3.75332+002	5.20000-002
-2.78041-002	-1.50633+001	0.00000+000
1.24800-001	0.00000+000	-3.45968-001

St 3

B-MATRIX

5.00000-002	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	5.00000-002	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	2.00000-001

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} T_0 \\ C_{R0} \\ T_k \end{pmatrix}$$

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} T \\ T_k \end{pmatrix}$$

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

Kommentar: A → R

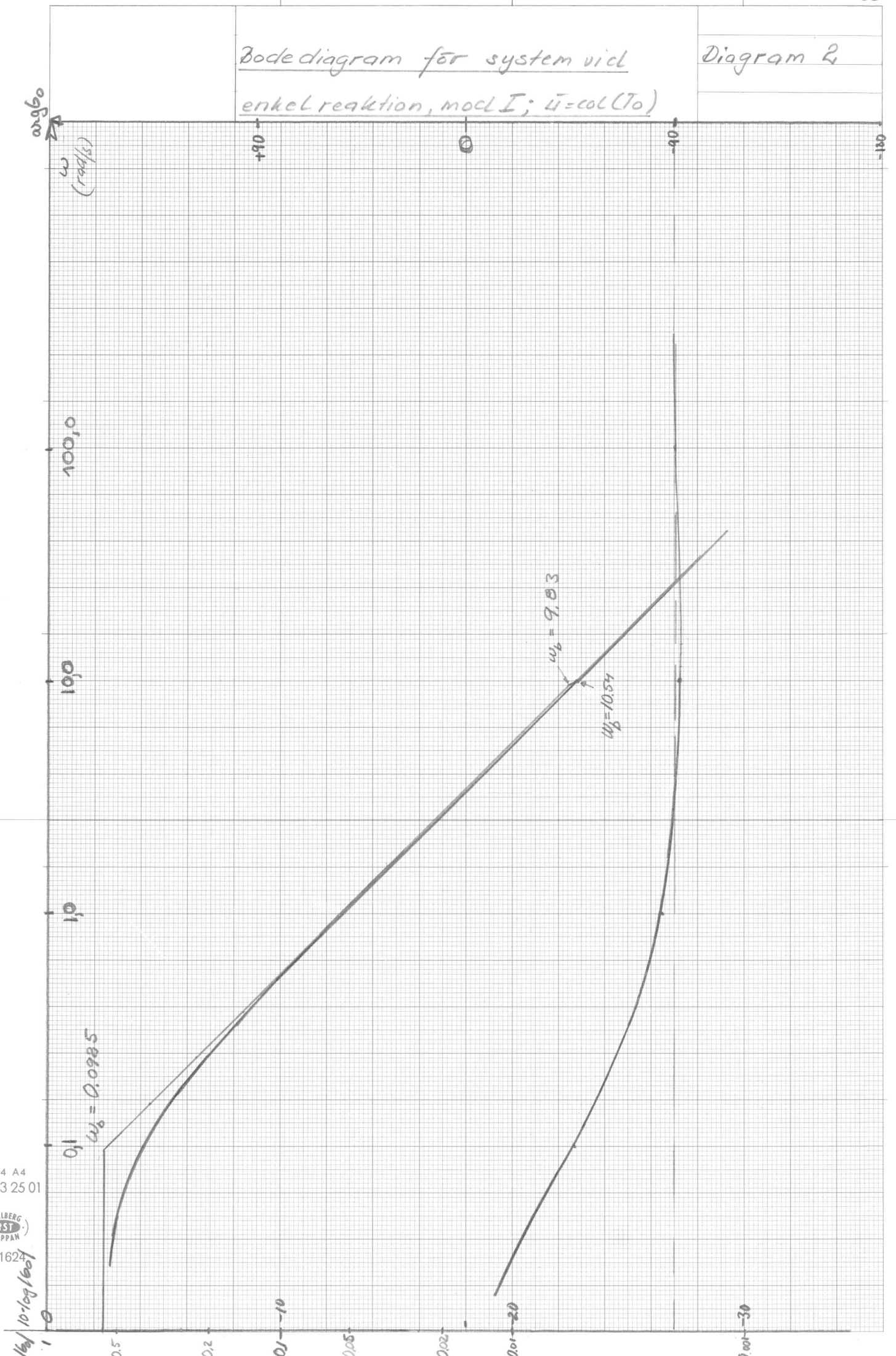
Den enkla reaktionen medför största skillnaderna mellan modell I och modell II, av de undersökta reaktionerna. Differensen mellan totalvärmeavledningslinjernas lutning, $\text{tg}\gamma_I - \text{tg}\gamma_{II}$, som är identisk med differensen mellan kylinjernas lutning, $\text{tg}\beta_I - \text{tg}\beta_{II}$, blir 0.0204. $\text{tg}\gamma_{II}$ är 7.1 % mindre än $\text{tg}\gamma_I$. Valet av värden på de kemiska parametrarna leder till att de statistiskt instabila stationärpunkterna, vid resp. modell, kommer att ligga mycket nära varandra. Arbetspunkten, st 3, ligger för modell II vid 4.18 °K högre temperatur än vid modell I. Omsättningen är 99.52 % vid modell I jämfört med 99.67 % vid modell II.

Se även diagram 2-8, som kommenterats på sid. 66 och 67.

Villkoret (3.10) på sid. 31 är uppfyllt vid denna reaktion (med valda parametervärden), alltså skall totalvärmeavledningslinjens nollställe ligga vid lägre temperatur vid modell II än vid modell I. Så är fallet, se diagram 1, och skillnaden mellan nollställena är 2.25 °K.

Bode diagram för system vid
enkel reaktion, mod I; $\bar{u} = \text{col}(T_0)$

Diagram 2



514 A4
SIS 73 25 01



Nr 1624

$10 \cdot \log |b_0|$

100,0

10,0

1,0

0,1

$\omega_b = 0.0985$

$\omega_b = 9.83$

$\omega_p = 10.54$

+90

0

-90

-180

0,1 -10

0,05

0,02

0,01 -20

0,001 -30

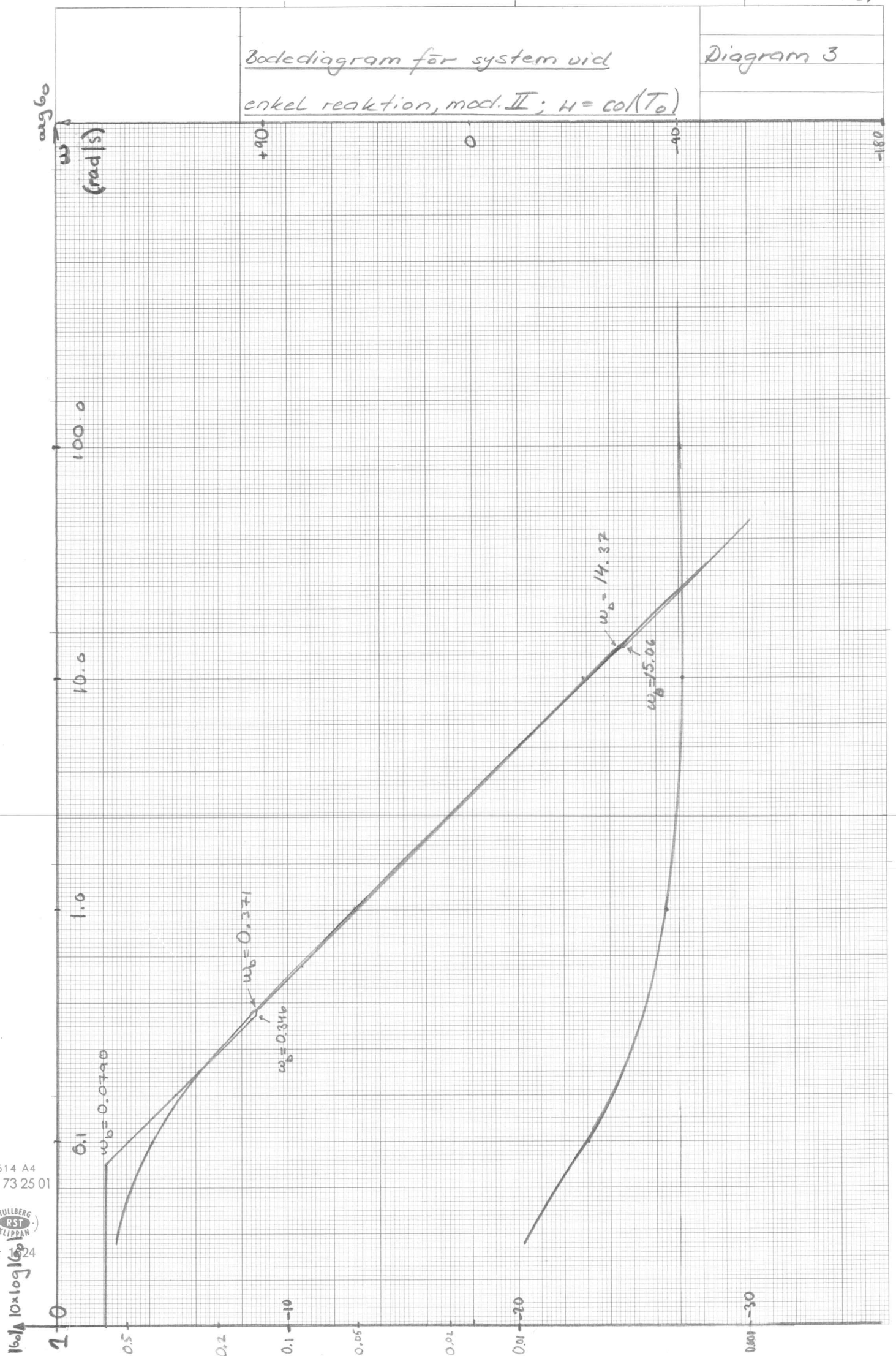
arg b_0

ω
(rad/s)

Bodediagram för system vid

Diagram 3

enkel reaktion, mod. II; $H = col(T_0)$



514 A4
SIS 73 25 01

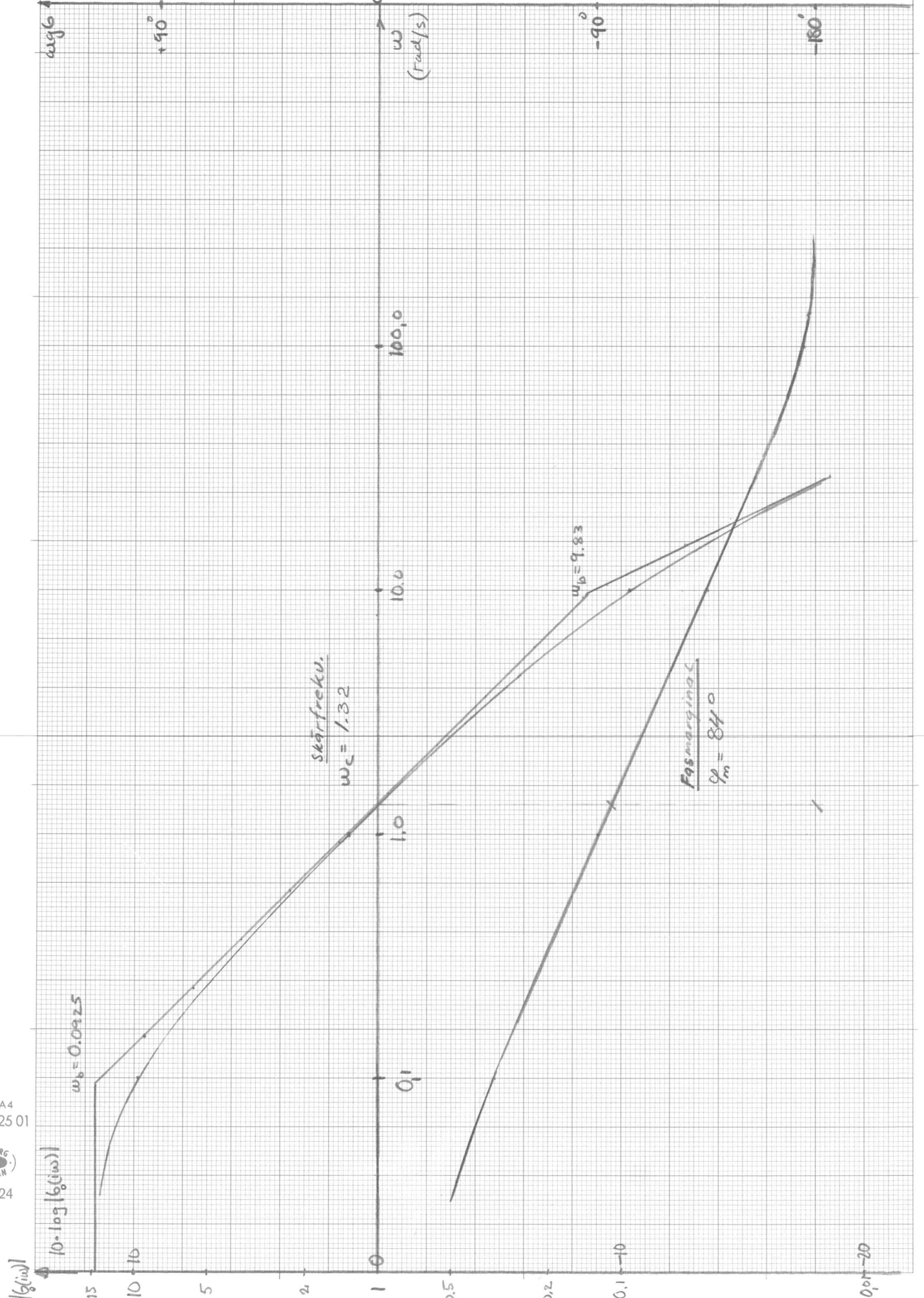


Nr 124

100 10x log 10

Bodediagram för system vid enkel reaktion, mod. I; $H = COL (K_{RO})$

Diagram 4



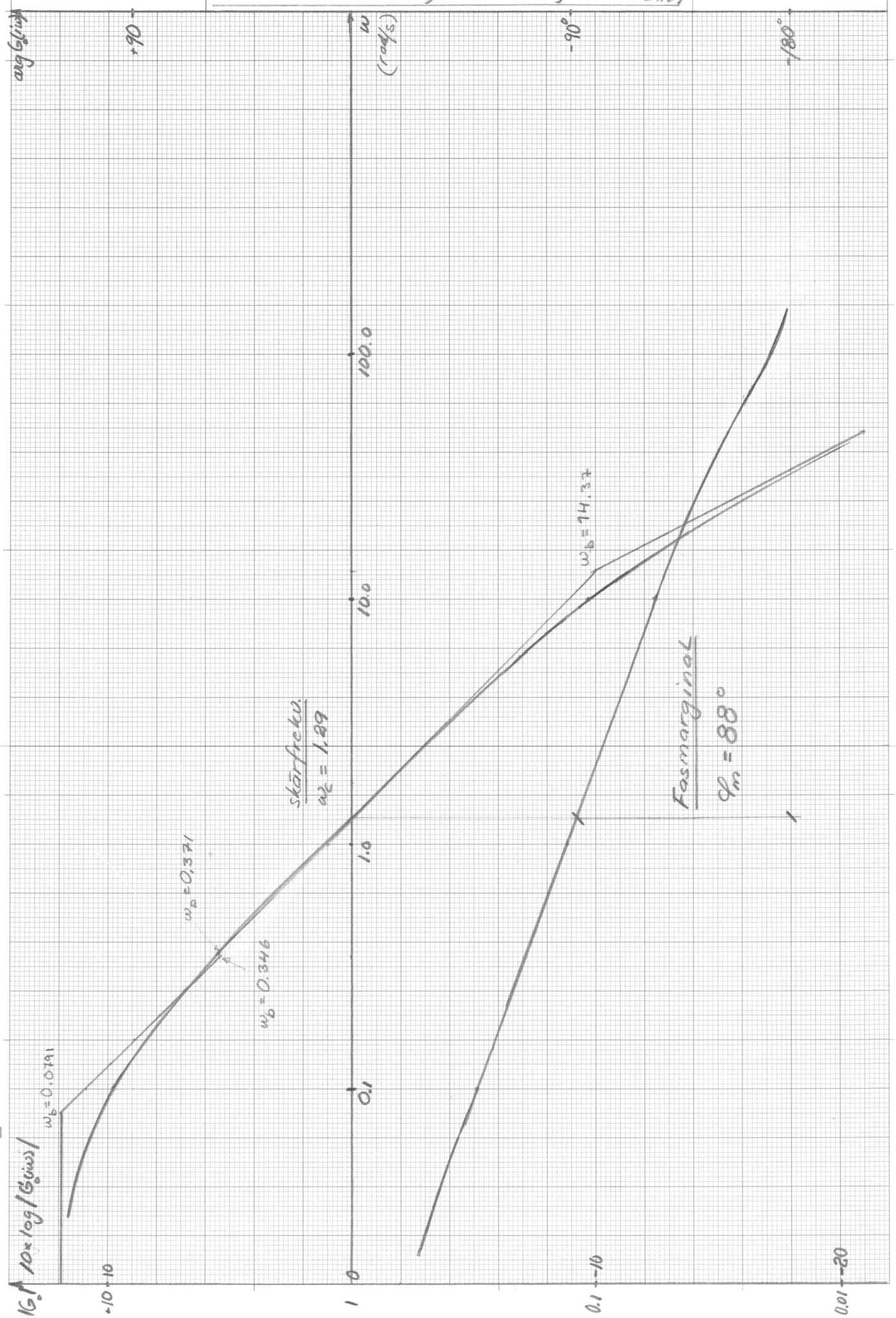
514 A4
SIS 73 25 01



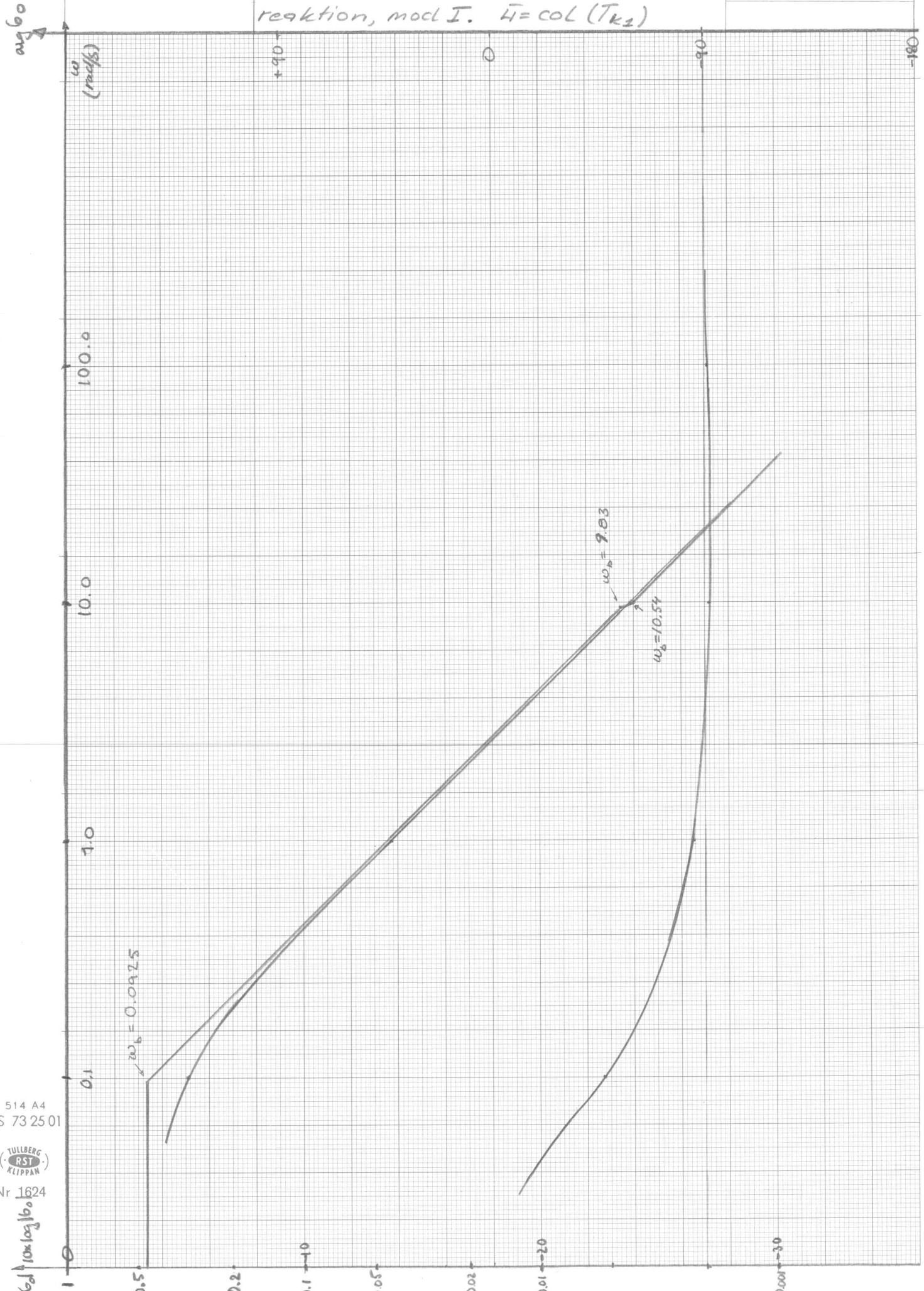
Nr 1624

Bode diagram för system vid enkla reaktionen; modell II; $\bar{u} = \text{col}(G_{10})$

Diagram 5



Bodediagram för system vid enkel
reaktion, mod I. $\bar{H} = \text{col}(T_{k2})$ Diagram 6



514 A4
SIS 73 25 01

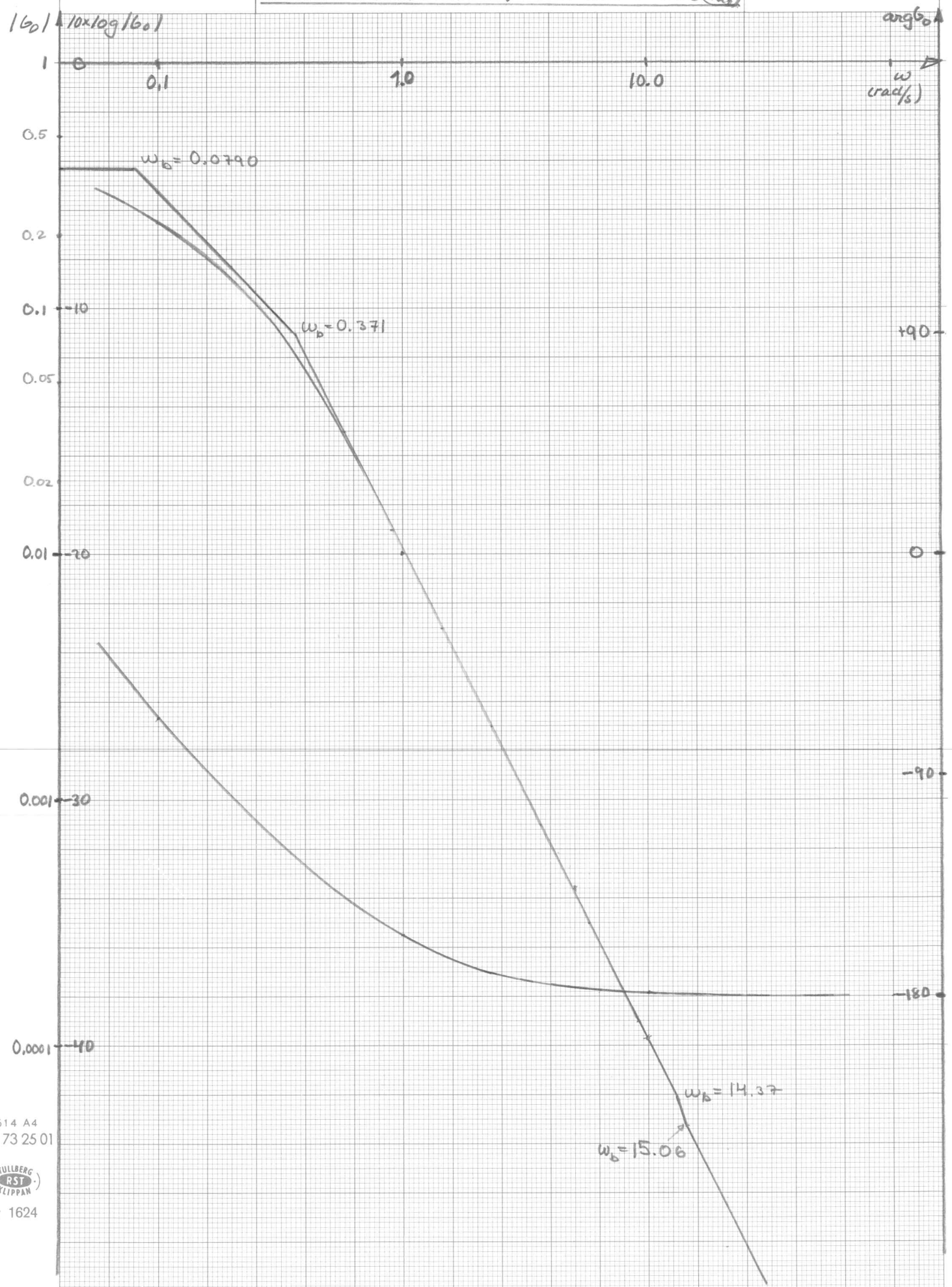


Nr 1624

60 10x109 160

Bodediagram för system vid den enkla reaktionen; mod II. $\vec{r} = \text{col}(T_{kl})$

Diagram 7



514 A4
SIS 73 25 01

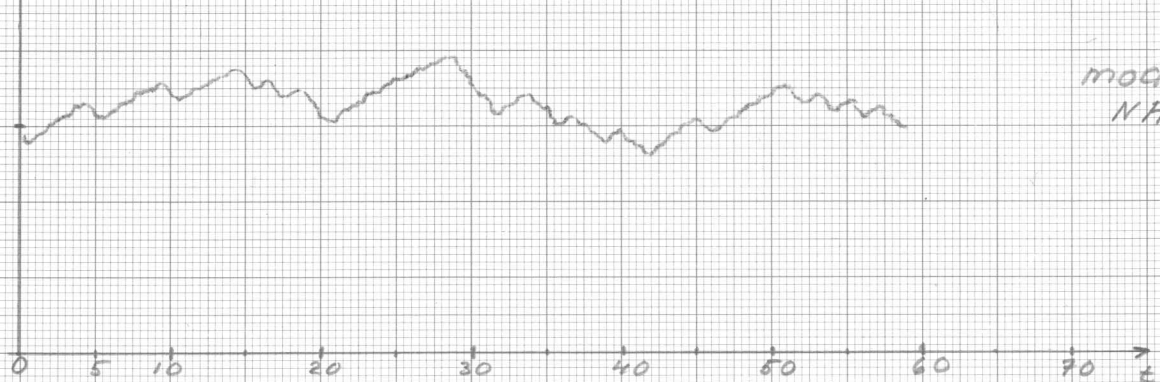


Nr 1624

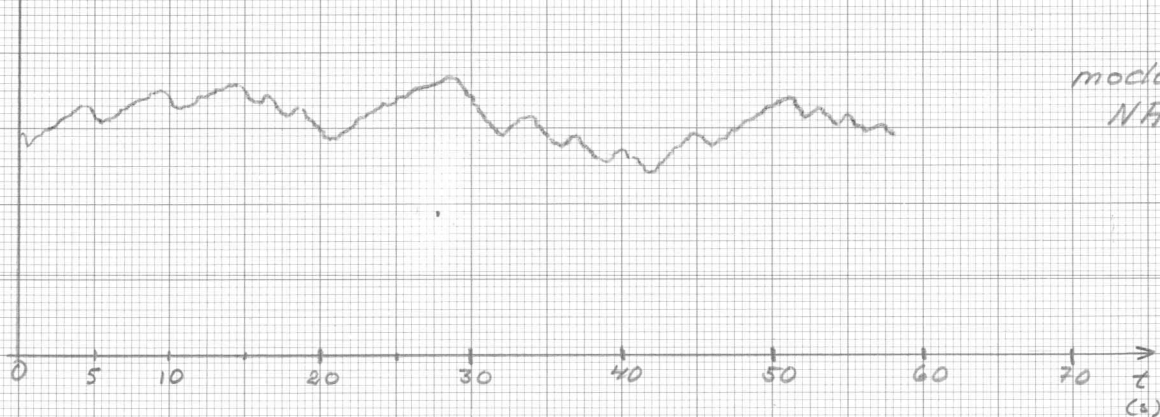
Simulering av system vid enkla reaktionen. mod I och mod II.
enkla system; $u = \text{col}(e_{A0})$.

Diagram 8

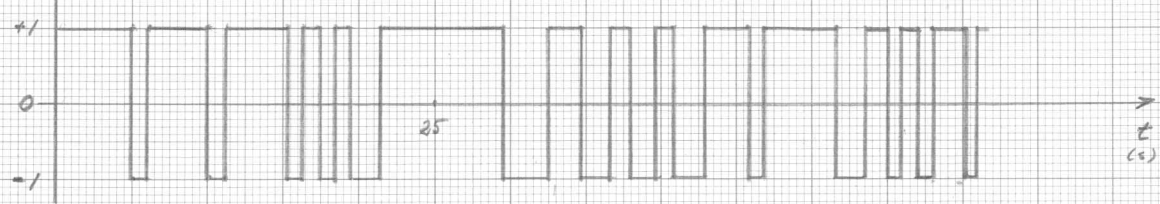
utsignal



utsignal



in-signal



App. 1.2 Konsekutiva reaktioner

Kemiska parametrarnas värden:

$T_0 = 423.15$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_{k2} = 350.0$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_u = 291.15$	$^{\circ}\text{K}$	
$C_{H_0} = 0.205$	mol/L	
$\rho = 0.9$	kg/L	
$\rho_k = 1.0$	kg/L	
$c_p = 0.249$	$\text{kcal/kg, } ^{\circ}\text{K}$	
$c_{pk} = 0.53$	$\text{kcal/kg, } ^{\circ}\text{K}$	
$V = 20.000$	L	$\left(\begin{array}{l} \theta = 0.0167 \text{ min} \\ \theta_k = 1.0 \text{ min} \end{array} \right)$
$V_k = 4.000$	L	
$G = 1.20 \cdot 10^6$	L/min	
$G_k = 4.000$	L/min	
$(-\Delta H_1) = 450$	kcal/mol	
$(-\Delta H_2) = 784$	kcal/mol	
$E_1 = 44.600$	cal/mol	
$E_2 = 21.000$	cal/mol	
$R = 1.9858$	$\text{cal/mol, } ^{\circ}\text{K}$	
$k_{100} = 1.10 \cdot 10^{16}$	min^{-1}	
$k_{200} = 4.36 \cdot 10^5$	min^{-1}	
$h_k = 21.0$	$\text{kcal/m}^2, ^{\circ}\text{K, min}$	
$h_u = 1.4$	$\text{kcal/m}^2, ^{\circ}\text{K, min}$	
$A_R = 45.0$	m^2	
$A_u = 50.0$	m^2	

QR-AD

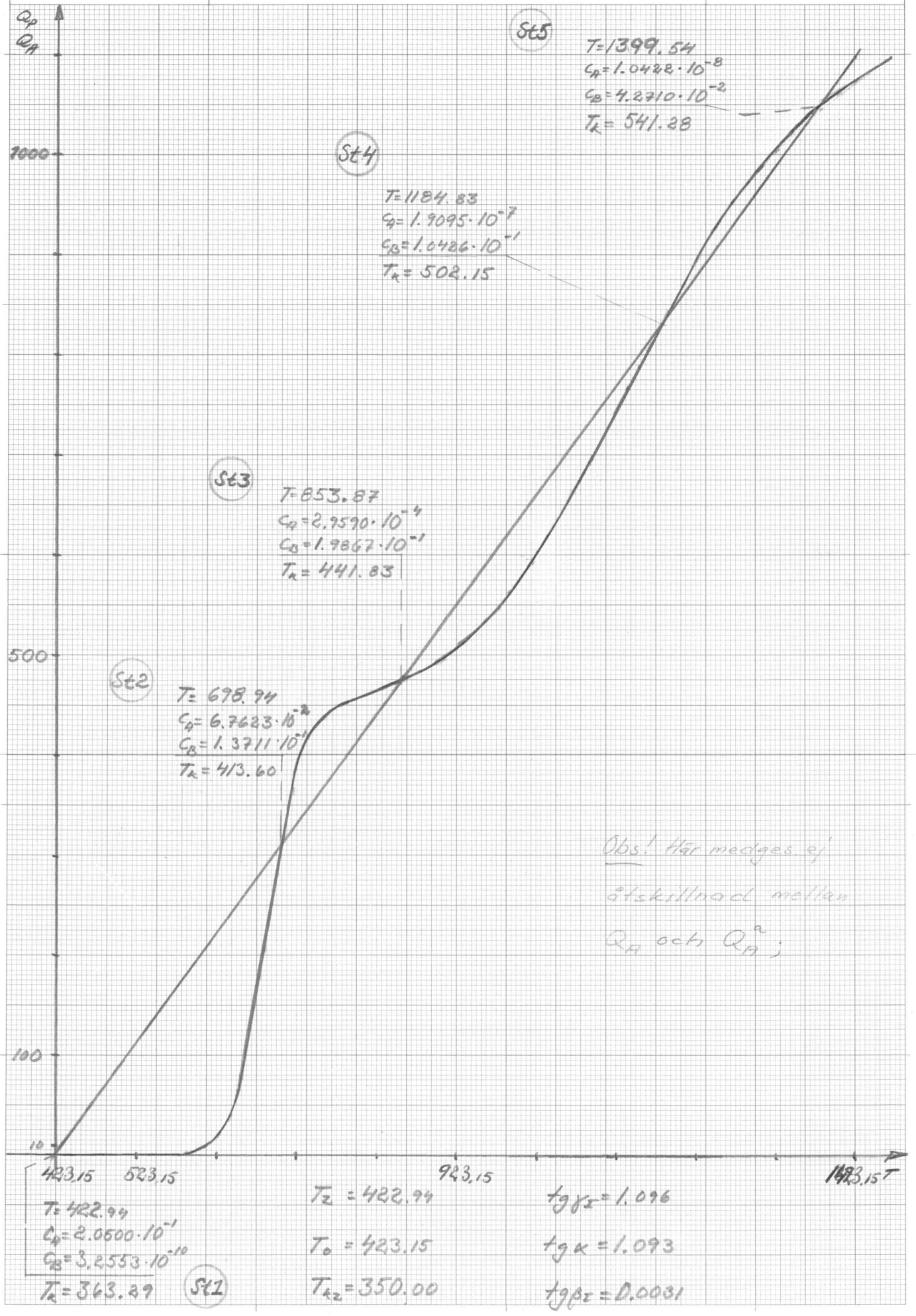
SLOPE ($\frac{\text{kcal}}{\text{mol} \cdot ^\circ\text{K}}$) 1.093+000

ZERO ($^\circ\text{K}$) 423.150

TEMP ($^\circ\text{K}$)	QPROD ($\frac{\text{kcal}}{\text{mol} \cdot \text{ing. A}}$)
273.15	1.611-019
278.15	7.063-019
283.15	2.939-018
288.15	1.164-017
293.15	4.399-017
298.15	1.590-016
303.15	5.507-016
308.15	1.832-015
313.15	5.866-015
318.15	1.811-014
323.15	5.398-014
328.15	1.557-013
333.15	4.348-013
338.15	1.178-012
343.15	3.101-012
348.15	7.938-012
353.15	1.979-011
358.15	4.808-011
363.15	1.140-010
368.15	2.641-010
373.15	5.981-010
378.15	1.326-009
383.15	2.877-009
388.15	6.123-009
393.15	1.278-008
398.15	2.619-008
403.15	5.272-008
408.15	1.043-007
413.15	2.030-007
418.15	3.889-007
423.15	7.336-007
428.15	1.364-006
433.15	2.498-006
438.15	4.515-006
443.15	8.050-006
448.15	1.417-005
453.15	2.463-005
458.15	4.231-005
463.15	7.183-005
468.15	1.206-004
473.15	2.002-004
478.15	3.288-004
483.15	5.346-004
488.15	8.607-004
493.15	1.372-003
498.15	2.168-003
503.15	3.393-003
508.15	5.264-003
513.15	8.097-003
518.15	1.235-002
523.15	1.869-002

Dimensioner: Värmekurvor för konsekutiva
 Q_p } kcal/mol ing A
 Q_R } reaktioner; modell I
 T °K

Diagram 9



.. BASIC STATE ..

CAO = 0.205 TO = 423.150 TKI = 350.000 TAETA = 1.67-002

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF FP = 4

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.1 T= 625.3 F(T)= -2.02+002

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.2 T= 746.5 F(T)= 7.21+001

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.3 T=1000.1 F(T)= -5.99+001

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.4 T=1292.6 F(T)= 2.21+001

NUMBER OF STEADY-STATES = 5

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTION TEMPERATURE = 422.94040

REAGENT CONCENTRATION = 2.05000-001

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 3.25533-010

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 363.29386

INSTANT SELECTIVITY = 1.000000

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTION TEMPERATURE = 698.94142

REAGENT CONCENTRATION = 6.76227-002

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.37110-001

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 413.59685

INSTANT SELECTIVITY = 0.998052

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTION TEMPERATURE = 853.87325

REAGENT CONCENTRATION = 2.95904-004

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.98667-001

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 441.83418

INSTANT SELECTIVITY = 0.970510

DATA IN STEADY-STATE NR.4

REACTION TEMPERATURE = 1184.83297

REAGENT CONCENTRATION = 1.90947-007

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.04259-001

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 502.15374

INSTANT SELECTIVITY = 0.508581

DATA IN STEADY-STATE NR.5

REACTION TEMPERATURE = 1399.54181

REAGENT CONCENTRATION = 1.04220-008

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 4.27101-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 541.28583

INSTANT SELECTIVITY = 0.208342

Konsekutiva reaktioner;
modell I.

Konsekutiva reaktioner: $A \rightarrow B \rightarrow R$, modell I.

A-MATRIX

-6.01724+001	1.91321-004	2.11049-002	St 1
-2.45238-009	-6.00000+001	0.00000+000	
2.45238-009	9.52781-008	-6.00000+001	
A-MATRIX			
7.01991+002	2.44762+005	4.09660+002	St 2
-3.78952-001	-1.81892+002	0.00000+000	
3.78604-001	1.21892+002	-6.01171+001	
A-MATRIX			
7.17939+002	8.33486+007	6.37813+003	St 3
-3.78347-001	-4.15676+004	0.00000+000	
3.73094-001	4.15076+004	-6.18231+001	
A-MATRIX			
4.94271+002	1.29349+011	2.02823+005	St 4
-1.96784-001	-6.44157+007	0.00000+000	
1.51251-001	6.44157+007	-1.17975+002	
A-MATRIX			
4.06954+002	2.36987+012	7.97603+005	St 5
-1.41037-001	-1.18020+009	0.00000+000	
8.84648-002	1.18020+009	-2.87988+002	

B-MATRIX

6.00000+001	0.00000+000	1.72416-001
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.82257-001	0.00000+000	0.00000+000

D-MATRIX

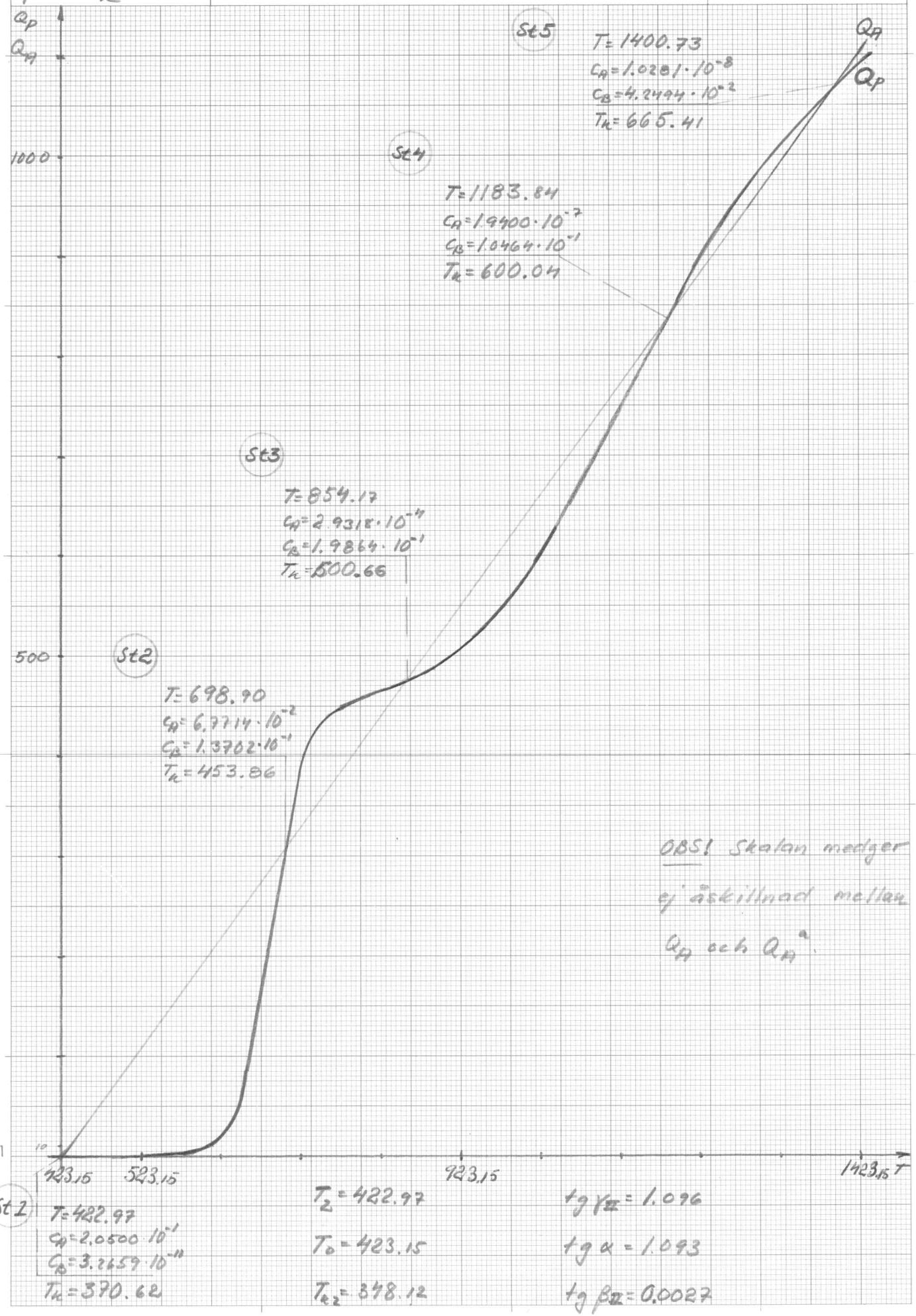
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	8.17743-001

Dimensioner:

Q_p
 Q_A } kcal/mol ing R
 T °K

Värmekurvor för konsekutiva reaktionerna; modell II.

Diagram 10



CA0 = 0.205 T0 = 423.150 TKI = 350.000 TAETA = 1.67-002

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF FP = 4

APPROX. ROOT OF FP(T)=0	NO.1	T= 625.3	F(T)= -2.02+002
APPROX. ROOT OF FP(T)=0	NO.2	T= 746.5	F(T)= 7.23+001
APPROX. ROOT OF FP(T)=0	NO.3	T=1000.1	F(T)= -5.96+001
APPROX. ROOT OF FP(T)=0	NO.4	T=1292.7	F(T)= 2.26+001

NUMBER OF STEADY-STATES = 5

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTION TEMPERATURE = 422.96627
 REAGENT CONCENTRATION = 2.05000-001
 CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 3.26592-010
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 370.68058
 INSTANT SELECTIVITY = 1.000000

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTION TEMPERATURE = 698.89743
 REAGENT CONCENTRATION = 6.77144-002
 CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.37018-001
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 453.85600
 INSTANT SELECTIVITY = 0.998054

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTION TEMPERATURE = 854.17433
 REAGENT CONCENTRATION = 2.93177-004
 CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.98644-001
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 500.66196
 INSTANT SELECTIVITY = 0.970385

konsekutiva reaktioner;
modell II.

DATA IN STEADY-STATE NR.4

REACTION TEMPERATURE = 1183.84391
 REAGENT CONCENTRATION = 1.93995-007
 CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.04641-001
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 600.03604
 INSTANT SELECTIVITY = 0.510444

DATA IN STEADY-STATE NR.5

REACTION TEMPERATURE = 1400.73160
 REAGENT CONCENTRATION = 1.02809-008
 CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 4.24935-002
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 665.41367
 INSTANT SELECTIVITY = 0.207285

Konsekutiva reaktioner; A → B → R modell II

A-MATRIX

-6.02108+001	1.91944-004	2.11372-002	2.10843-001
-2.46006-009	-6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000
2.46006-009	9.55880-008	-6.00000+001	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

St 1

A-MATRIX

7.01538+002	2.44268+005	4.09270+002	2.10843-001
-3.78747-001	-1.81645+002	0.00000+000	0.00000+000
3.78400-001	1.21645+002	-6.01170+001	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

St 2

A-MATRIX

7.17441+002	8.41249+007	6.40603+003	2.10843-001
-3.78085-001	-4.19542+004	0.00000+000	0.00000+000
3.72813-001	4.18942+004	-6.18311+001	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

St 3

A-MATRIX

4.94554+002	1.27316+011	2.01317+005	2.10843-001
-1.97113-001	-6.34036+007	0.00000+000	0.00000+000
1.51677-001	6.34035+007	-1.17545+002	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

St 4

A-MATRIX

4.06368+002	2.40240+012	8.02738+005	2.10843-001
-1.40797-001	-1.19639+009	0.00000+000	0.00000+000
8.82446-002	1.19639+009	-2.89456+002	0.00000+000
4.45755-001	0.00000+000	0.00000+000	-1.47877+000

St 5

B-MATRIX

6.00000+001	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	6.00000+001	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000	

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	

Kommentar: $A \rightarrow B \rightarrow R$

Se diagram 9 och 10.

Skillnaden mellan totalvärmeledningens lutning i modell I och motsvarande i modell II är mindre än $\sim 0.03\%$. Differensen mellan stationär värdena, på reaktionstemperatur och koncentrationer, i varje stationärpunkt blir också obetydliga. När det gäller kyltemperaturen är förhållandet annorlunda. Modellen som tar hänsyn till kyl-dynamiken, mod. II, ger högre stationär värden. Skillnaden $T_{k,II} - T_{k,I}$ ökar, då temperaturen stiger. Se schemat nedan.

Differens	St 1	St 2	St 3	St 4	St 5
$T_{s,II} - T_{s,I} (^{\circ}K)$	0.04	-0.04	0.30	-0.98	1.19
$T_{k,II} - T_{k,I} (^{\circ}K)$	7.33	40.26	58.83	97.91	124.13

App. 1.3. Parallella reaktioner.

Kemiska parametrarnas värden:

$T_0 = 293.15$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_{k_1} = 320.0$	$^{\circ}\text{K}$	
$T_{k_2} = 291.15$	$^{\circ}\text{K}$	
$C_{A0} = 4.0$	mol/l	
$\rho = 0.8$	kg/l	
$\rho_k = 1.0$	kg/l	
$c_p = 0.6$	$\text{kcal/kg, }^{\circ}\text{K}$	
$c_{pk} = 1.0$	$\text{kcal/kg, }^{\circ}\text{K}$	
$V = 1.500$	l	$\left(\begin{array}{l} \theta = 10.0 \text{ min} \\ \theta_k = 1.0 \text{ min} \end{array} \right)$
$V_k = 750$	l	
$G = 150$	l/min	
$G_k = 750$	l/min	
$(-\Delta H_1) = 10.0$	kcal/mol	
$(-\Delta H_2) = 15.0$	kcal/mol	
$E_1 = 15.000$	cal/mol	
$E_2 = 20.000$	cal/mol	
$R = 1.9858$	$\text{cal/mol, }^{\circ}\text{K}$	
$k_{100} = 5.34 \cdot 10^8$	min^{-1}	
$k_{200} = 2.72 \cdot 10^{11}$	min^{-1}	
$h_R = 2.5$	$\text{kcal/m}^2, ^{\circ}\text{K, min}$	
$h_U = 1.4$	$\text{kcal/m}^2, ^{\circ}\text{K, min}$	
$A_R = 8.0$	m^2	
$A_U = 10.0$	m^2	

QR-AD

QR-CC

SLOPE ($\frac{\text{kcal}}{\text{mol } ^\circ\text{K}}$) 1.200-001

3.248-0

ZERO ($^\circ\text{K}$) 293.150

319.47

TEMP ($^\circ\text{K}$)	QPR(D) ($\frac{\text{kcal}}{\text{mol } \ln A}$)	TEMP	QPR	QPR(D)	QPR
273.15	5.585-002	528.15	1.406	1.0+15.0	01.2701
278.15	9.265-002	533.15	1.410	1.0+15.0	01.2701
283.15	1.509-001	538.15	1.413	1.0+15.0	01.2701
288.15	2.414-001	543.15	1.416	1.0+15.0	01.2701
293.15	3.791-001	548.15	1.419	1.0+15.0	01.2701
298.15	5.833-001	553.15	1.422	1.0+15.0	01.2701
303.15	8.781-001	558.15	1.424	1.0+15.0	01.2701
308.15	1.290+000	563.15	1.427	1.0+15.0	01.2701
313.15	1.842+000	568.15	1.429	1.0+15.0	01.2701
318.15	2.548+000	573.15	1.431	1.0+15.0	01.2701
323.15	3.404+000	578.15	1.434	1.0+15.0	01.2701
328.15	4.377+000	583.15	1.436	1.0+15.0	01.2701
333.15	5.417+000	588.15	1.438	1.0+15.0	01.2701
338.15	6.459+000	593.15	1.440	1.0+15.0	01.2701
343.15	7.444+000	598.15	1.442	1.0+15.0	01.2701
348.15	8.329+000	603.15	1.443	1.0+15.0	01.2701
353.15	9.094+000	608.15	1.445	1.0+15.0	01.2701
358.15	9.738+000	613.15	1.447	1.0+15.0	01.2701
363.15	1.027+001	618.15	1.448	1.0+15.0	01.2701
368.15	1.071+001	623.15	1.450	1.0+15.0	01.2701
373.15	1.107+001	628.15	1.451	1.0+15.0	01.2701
378.15	1.137+001	633.15	1.453	1.0+15.0	01.2701
383.15	1.162+001	638.15	1.454	1.0+15.0	01.2701
388.15	1.183+001	643.15	1.455	1.0+15.0	01.2701
393.15	1.202+001	648.15	1.456	1.0+15.0	01.2701
398.15	1.218+001	653.15	1.458	1.0+15.0	01.2701
403.15	1.233+001	658.15	1.459	1.0+15.0	01.2701
408.15	1.246+001	663.15	1.460	1.0+15.0	01.2701
413.15	1.258+001	668.15	1.461	1.0+15.0	01.2701
418.15	1.269+001	673.15	1.462	1.0+15.0	01.2701
423.15	1.279+001	678.15	1.463	1.0+15.0	01.2701
428.15	1.289+001	683.15	1.464	1.0+15.0	01.2701
433.15	1.298+001	688.15	1.465	1.0+15.0	01.2701
438.15	1.307+001	693.15	1.465	1.0+15.0	01.2701
443.15	1.315+001	698.15	1.466	1.0+15.0	01.2701
448.15	1.323+001	703.15	1.467	1.0+15.0	01.2701
453.15	1.330+001	708.15	1.468	1.0+15.0	01.2701
458.15	1.337+001	713.15	1.469	1.0+15.0	01.2701
463.15	1.344+001	718.15	1.469	1.0+15.0	01.2701
468.15	1.350+001	723.15	1.470	1.0+15.0	01.2701
473.15	1.356+001	728.15	1.471	1.0+15.0	01.2701
478.15	1.362+001	733.15	1.471	1.0+15.0	01.2701
483.15	1.367+001	738.15	1.472	1.0+15.0	01.2701
488.15	1.372+001	743.15	1.473	1.0+15.0	01.2701
493.15	1.377+001	748.15	1.473	1.0+15.0	01.2701
498.15	1.382+001	753.15	1.474	1.0+15.0	01.2701
503.15	1.387+001	758.15	1.474	1.0+15.0	01.2701
508.15	1.391+001	763.15	1.475	1.0+15.0	01.2701
513.15	1.395+001	768.15	1.475	1.0+15.0	01.2701
518.15	1.399+001	773.15	1.476	1.0+15.0	01.2701
523.15	1.403+001	778.15	1.476	1.0+15.0	01.2701

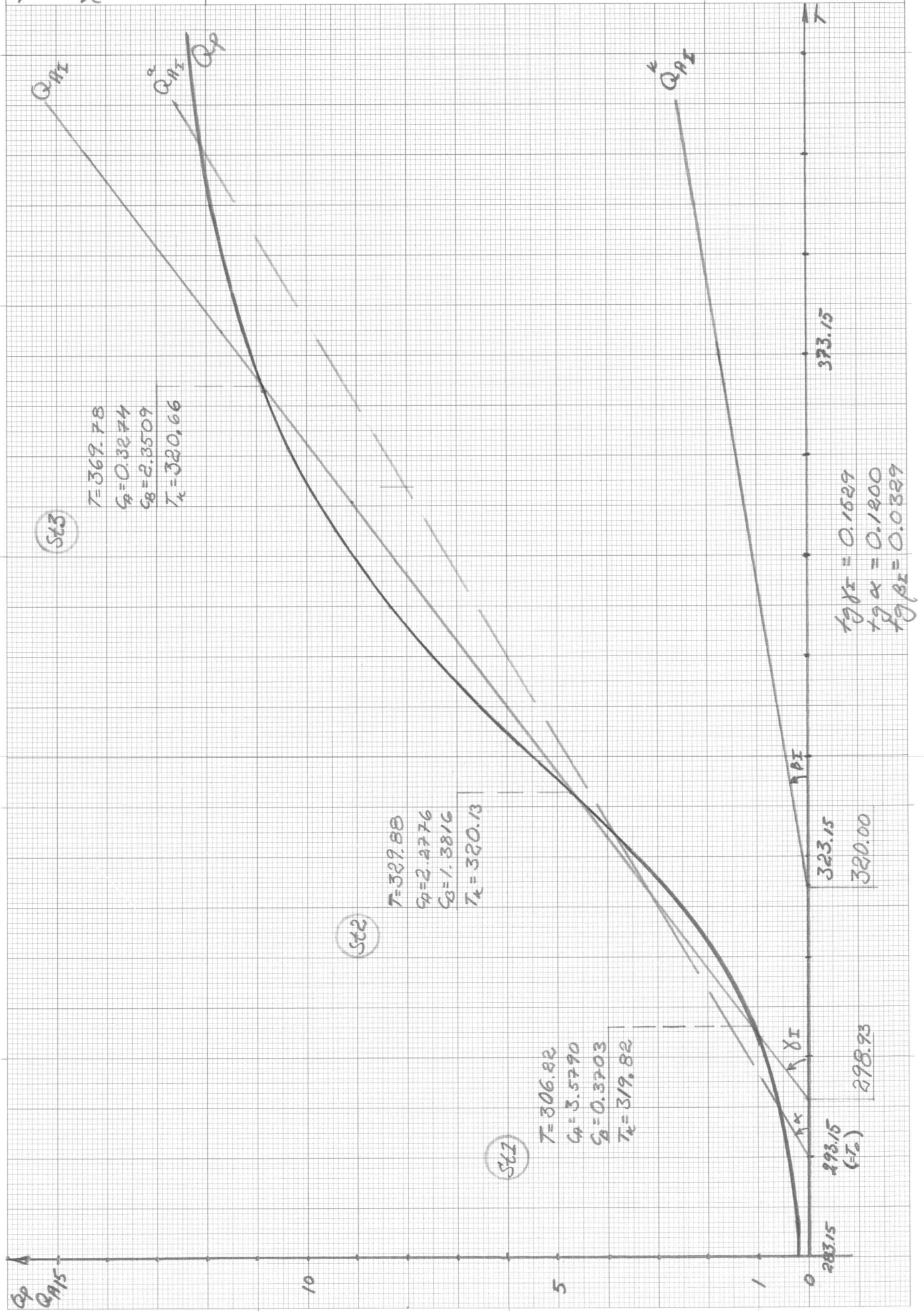
Dimensioner:

Q_p } kcal/moling A
 Q_p }
 T °K

Värmekurvor för parallella

reaktionen; modell I.

Diagram 11



.. BASIC STATE ..

CA0 = 4.000 T0 = 293.150 TKI = 320.000 TAETA = 1.00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF FP = 2

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.1 T= 317.6 F(T)= -3.92-001

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.2 T= 350.7 F(T)= 8.19-001

NUMBER OF STEADY-STATES = 3

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTION TEMPERATURE = 306.22429

REAGENT CONCENTRATION = 3.57902+000

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 3.70313-001

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 319.81874

INSTANT SELECTIVITY = 0.879655

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTION TEMPERATURE = 329.87588

REAGENT CONCENTRATION = 2.27762+000

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.38157+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 320.12995

INSTANT SELECTIVITY = 0.802127

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTION TEMPERATURE = 369.78252

REAGENT CONCENTRATION = 3.27435-001

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 2.35091+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 320.65503

INSTANT SELECTIVITY = 0.640127

Parallella reaktioner;
modell I

Parallella reaktioner; A $\begin{matrix} \nearrow R \\ \searrow B \end{matrix}$ modell I.

A-MATRIX

-4.82635-002	2.59793-001	0.00000+000
-3.52708-003	-1.11762-001	0.00000+000
2.98295-003	1.03468-002	-1.00000-001

St 1

A-MATRIX

1.70957-001	1.73133+000	0.00000+000
-1.27445-002	-1.75622-001	0.00000+000
9.59018-003	6.06584-002	-1.00000-001

St 2

A-MATRIX

4.47352-001	2.75716+001	0.00000+000
-2.27214-002	-1.22162+000	0.00000+000
1.29867-002	7.17976-001	-1.00000-001

St 3

B-MATRIX

1.00000-001	0.00000+000	2.74123-002
0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
1.31579-002	0.00000+000	0.00000+000

D-MATRIX

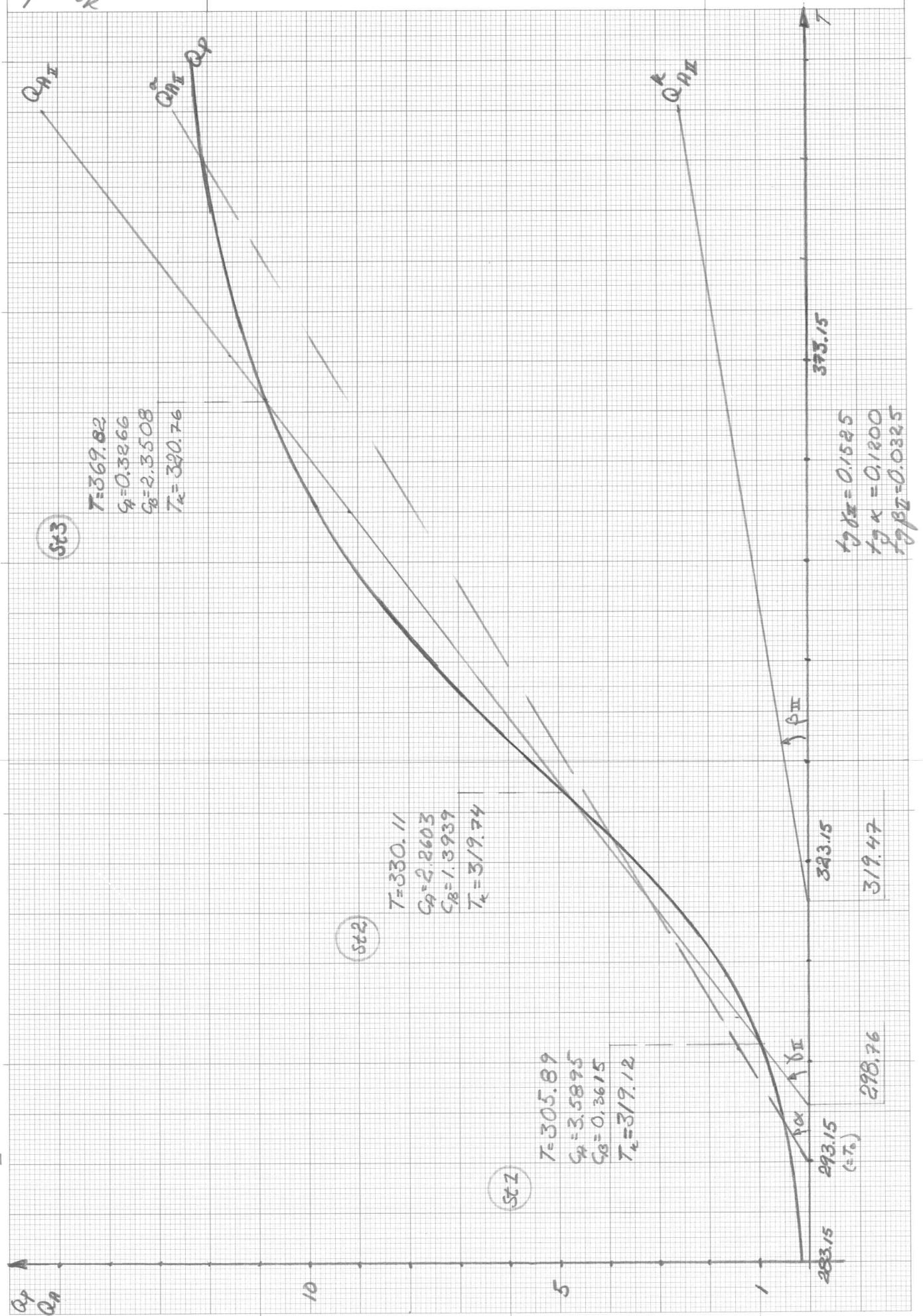
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	9.86842-001

Dimensioner:

Q_p } kcal/moling A
 Q_R }
 T °K

Värmekurvor för parallella reaktionen; modell II.

Diagram 12



.. BASIC STATE ..

CA0 = 4.000 T0 = 293.150 TK1 = 320.000 TAETA = 1.00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF FP = 2

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.1 T= 317.5 F(T)= -4.10-001

APPROX. ROOT OF FP(T)=0 NO.2 T= 350.8 F(T)= 8.14-001

NUMBER OF STEADY-STATES = 3

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTION TEMPERATURE = 305.88947

REAGENT CONCENTRATION = 3.58948+000

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 3.61502-001

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 319.12486

INSTANT SELECTIVITY = 0.880605

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTION TEMPERATURE = 330.11417

REAGENT CONCENTRATION = 2.26032+000

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 1.39392+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 319.74284

INSTANT SELECTIVITY = 0.801251

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTION TEMPERATURE = 369.82504

REAGENT CONCENTRATION = 3.26645-001

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 2.35075+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 320.75587

INSTANT SELECTIVITY = 0.639946

Parallella reaktioner;
modell II,

Parallella reaktioner; $A \begin{matrix} \rightarrow R \\ \rightarrow B \end{matrix}$ modell II.

A-MATRIX

-5.04922-002	2.52487-001	0.00000+000	2.77778-002
-3.44592-003	-1.11437-001	0.00000+000	0.00000+000
2.91835-003	1.00711-002	-1.00000-001	0.00000+000
2.66667-002	0.00000+000	0.00000+000	-1.04533+000

St 1

A-MATRIX

1.73374-001	1.76281+000	0.00000+000	2.77778-002
-1.28575-002	-1.76966-001	0.00000+000	0.00000+000
9.66198-003	6.16694-002	-1.00000-001	0.00000+000
2.66667-002	0.00000+000	0.00000+000	-1.04533+000

St 2

A-MATRIX

4.47054-001	2.76463+001	0.00000+000	2.77778-002
-2.27222-002	-1.22457+000	0.00000+000	0.00000+000
1.29828-002	7.19664-001	-1.00000-001	0.00000+000
2.66667-002	0.00000+000	0.00000+000	-1.04533+000

St 3

B-MATRIX

1.00000-001	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	1.00000-001	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

C-MATRIX

1.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000	1.00000+000

D-MATRIX

0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000
0.00000+000	0.00000+000	0.00000+000

Kommentar: $A \xrightarrow{B}$
 \xrightarrow{R}

Se diagram 11 och 12.

Totalvärmeledningslinjens lutning är $\sim 0,3\%$ mindre vid modell II än vid modell I. Skillnaden mellan modellerna, då det gäller stationärvärden, i alla stationärpunkterna, är också liten. Studera exempelvis reaktionstemperatur och kylmedietemperatur:

Differens	St 1	St 2	St 3
$T_{sII} - T_{sI} \text{ (°K)}$	-0.33	0.23	0.04
$T_{kII} - T_{kI} \text{ (°K)}$	-0.70	-0.39	0.10

Appendix 2.

Illustration av variation i reaktorns inloppstillstånd.

Se kap. 3.5.

Här följer verifiering av teser framförda i kap. 3.5. rörande värmekurvornas förändring och stationärpunkternas förflyttning.

1. En stationär punkt vid hög temperatur och omsättning önskas vid den enkla reaktionen. Detta uppnås genom parallell förflyttning av totalvärme av ledningslinjen, Q_A , mot högre temperatur.

a) Q_A förflyttas med hjälp av ökning i T_0 :

Med dator erhålles resultatet. ($NA=3$)

```

.. BASIC STATE ..
CAO = 5,000      TO = 306,400      TKI = 320,000      TAETA = 2,00+001
NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,1      T= 317,5      SF(T)= 5,86+
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,2      T= 347,5      SF(T)= 7,93+
NUMBER OF STEADY-STATES = 1
  
```

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 385,7071
 REACTANT CONCENTRATION = 6,8826-003
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 341,9372

Ändringen av T_0 från det valda värdet (som finns i subrutinen och i inl. till App. 1.1.) betecknas δT_0 ; här $\delta T_0 = +13,2^\circ K$

b) Q_A förflyttas med hjälp av T_{k2} :

Med dator erhålles resultatet. ($NA=3$)

```

CAO = 5,000      TO = 293,200      TKI = 341,500      TAETA = 2,00+001
NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,1      T= 317,5      SF(T)= 1,48+
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,2      T= 347,5      SF(T)= 7,88+
NUMBER OF STEADY-STATES = 1
  
```

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 385,5407
 REACTANT CONCENTRATION = 7,0061-003
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 354,3060

$\delta T_{k2} = +21,5^\circ K$

2. En stationärpunkt vid låg temperatur och omsättning önskas vid den enkla reaktionen. Totalvärmeavledningslinjen parallellförskjutes mot lägre temperatur

a) Q_A förflyttas med hjälp av minskning i T_0 .

```

.. BASIC STATE ..      (NA=3)
CAO = 5,000      TO = 256,800      TKI = 320,000      TAETA = 2,00+001
NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,1      T= 317,5      SF(T)= -7,88+000
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,2      T= 347,5      SF(T)= -1,07+002
NUMBER OF STEADY-STATES = 1

```

DATA IN STEADY-STATE NR,1

REACTANT TEMPERATURE = 280,9472
 REACTANT CONCENTRATION = 4,9992+000
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 304,1474

Obs! Ej realistiskt T_0 !

$$\delta T_0 = -36,4 \text{ } ^\circ\text{K}$$

Se b)!

b) Q_A förflyttas med hjälp av minskning i T_0 och T_k

```

.. BASIC STATE ..      (NA=3)
CAO = 5,000      TO = 278,200      TKI = 284,300      TAETA = 2,00+001
NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,1      T= 317,5      SF(T)= -7,89+000
APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0      NO,2      T= 347,5      SF(T)= -2,08+002
NUMBER OF STEADY-STATES = 1

```

DATA IN STEADY-STATE NR,1

REACTANT TEMPERATURE = 280,9091
 REACTANT CONCENTRATION = 4,9992+000
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 283,4959

$$\delta T_0 = -15,0 \text{ } ^\circ\text{K} ; \delta T_k = -35,7 \text{ } ^\circ\text{K}$$

3. Då man söker få en stationärpunkt vid hög omsättning, vid den enkla reaktionen (gäller även konsekutiva och parallella reaktionerna), genom att öka koncentrationen, C_{A0} , så att totalvärmeavledningslinjen vrids, hamnar denna stationärpunkt alldeles för högt.

.. BASIC STATE ..

(NA=3)

CAO = 34,000 T0 = 293,200 TKI = 320,000 TAETA = 2,00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
 APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0 NO,1 T= 304,3 SF(T)= 1,72+001
 APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0 NO,2 T= 363,7 SF(T)= 1,73+001
 NUMBER OF STEADY-STATES = 1

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 813,3581
 REACTANT CONCENTRATION = 1,7787-011
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 496,2024

$$\delta C_{A0} = 29.0 \text{ mol/L}$$

$$\frac{C_{A0}^{\text{nytt}}}{C_{A0}} = 6.8$$

4. Vill man ha ett system med en stationärpunkt, där temperatur och omsättning skall vara lämpliga i någon mening, krävs ofta ändring av såväl T_0 och T_{k2} som C_{A0} . Exemplet visar enkla reaktionen.

.. BASIC STATE ..

CAO = 3.200 T0 = 298.200 TKI = 342.500 TAETA = 2.00+001

NUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = 2
 APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0 NO,1 T= 321.6 SF(T)= 6.41-002
 APPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0 NO,2 T= 343.1 SF(T)= 4.10+000
 NUMBER OF STEADY-STATES = 1

DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 360.8743
 REACTANT CONCENTRATION = 7.3684-002
 COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 345.9863

$$\delta T_0 = +5.0 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$\delta T_{k2} = +22.5 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$\delta C_{A0} = -1.8 \text{ mol/L} \left(\frac{C_{A0}^{\text{nytt}}}{C_{A0}} = 0.64 \right)$$

5. Studera inverkan av förändringar i medeluppehållstiden, Θ .

a) Inverkan på kurvan för producerad värmemängd, Q_p , vid de konsekutiva reaktionerna då Θ ökar 10, 50 och 100 ggr återges i diagram 13 sid. 160.

b) Stationärvärdenas förändring, vid enkla reaktionen, då Θ ökas resp. minskas 5 min kan studeras på nästa sida, överst.

$\Theta = 25 \text{ min}$ $(NA=3)$ DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 305,2661

REACTANT CONCENTRATION = 4,9154+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 312,9199

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTANT TEMPERATURE = 325,9446

REACTANT CONCENTRATION = 3,4008+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 320,3792

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTANT TEMPERATURE = 372,0359

REACTANT CONCENTRATION = 2,4985-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 337,0056

 $\Theta = 15 \text{ min}$ DATA IN STEADY-STATE NR.1

REACTANT TEMPERATURE = 301,6577

REACTANT CONCENTRATION = 4,9725+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 311,6183

DATA IN STEADY-STATE NR.2

REACTANT TEMPERATURE = 330,2754

REACTANT CONCENTRATION = 3,2570+000

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 321,9414

DATA IN STEADY-STATE NR.3

REACTANT TEMPERATURE = 384,4322

REACTANT CONCENTRATION = 1,0515-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 341,4773

6. Här visas möjligheten till optimering av konsekutiva reaktionerna. En stabil arbetspunkt där c_B är "stor" kan fås om inloppstillståndet och medeluppehållstiden ändras. "Grundtillstånd" se Appl. 2

$$\begin{cases} c_{A0} = 0,205 \text{ mol/L} \\ T_0 = 423,15 \text{ }^\circ\text{K} \\ T_{k1} = 350,0 \text{ }^\circ\text{K} \\ \Theta = 0,0167 \text{ min} \end{cases}$$

ändras till

$$\begin{cases} c_{A0} = 0,0525 \text{ mol/L} \\ T_0 = 637,3 \text{ }^\circ\text{K} \\ T_{k1} = 350,0 \text{ }^\circ\text{K} \\ \Theta = 1,67 \text{ min} \end{cases}$$

Beräkning med dator ger:

REACTION TEMPERATURE = 664,27327

REAGENT CONCENTRATION = 1,34703-003

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 4,69894-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 407,27835

INSTANT SELECTIVITY = 0,918606

REACTION TEMPERATURE = 680,79107

REAGENT CONCENTRATION = 6,01716-004

CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT = 4,59122-002

COOLING-MEDIA TEMPERATURE = 448,39811

INSTANT SELECTIVITY = 0,884658

 $NA=3$ $NA=4$

Se grafen över "nya" systemet i diagram 14, sid.

$Q_p \sim \text{kcal/moling A}$
 $T \sim ^\circ\text{K}$

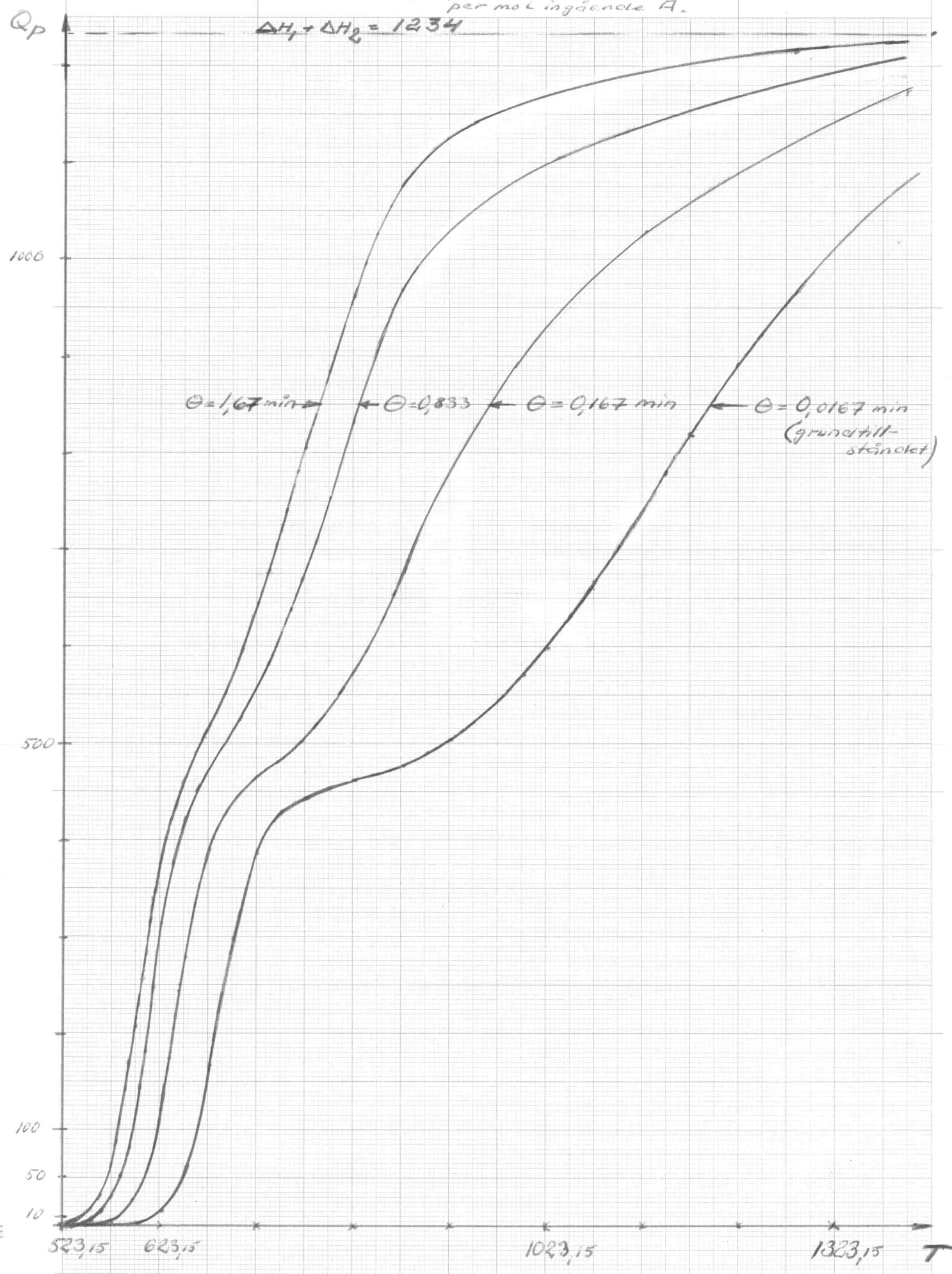
Variation av Θ

Diagram 13

Konsekutiva reaktioner

$Q_p(T) = \text{producerad värme per mol ingående A.}$

$\Delta H_1 + \Delta H_2 = 1234$



SIS 73 25 01 - 514 A4 - 1 x 1 mm

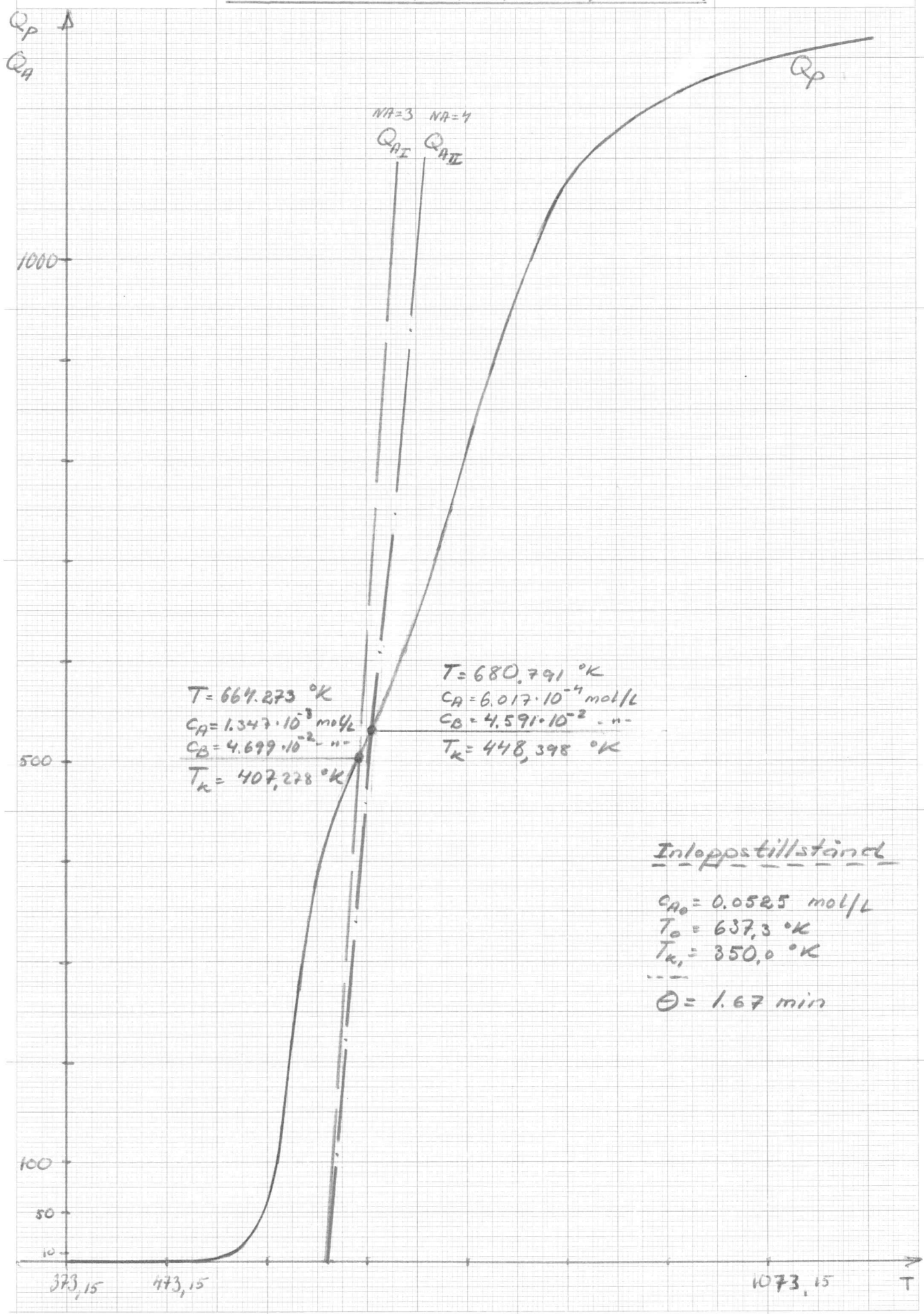
ESSELTE 4441

$Q_p \rightarrow \text{keel/möding A}$
 $Q_A \rightarrow$
 $T \sim \text{OK}$

Verifiering av optimerings-
 möjlighet

Diagram 14

Konsekutiva reaktioner; $A \rightarrow B \rightarrow R$



$T = 664.273 \text{ } ^\circ\text{K}$
 $C_A = 1.347 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$
 $C_B = 4.699 \cdot 10^{-2} \text{ mol/L}$
 $T_K = 407.278 \text{ } ^\circ\text{K}$

$T = 680.791 \text{ } ^\circ\text{K}$
 $C_A = 6.017 \cdot 10^{-4} \text{ mol/L}$
 $C_B = 4.591 \cdot 10^{-2} \text{ mol/L}$
 $T_K = 448.398 \text{ } ^\circ\text{K}$

Inloppstillstånd

$C_{A0} = 0.0525 \text{ mol/L}$
 $T_0 = 637.3 \text{ } ^\circ\text{K}$
 $T_{ki} = 350.0 \text{ } ^\circ\text{K}$
 $\theta = 1.67 \text{ min}$

Appendix 3.

		<u>sid.</u>
App 3.1	SUBROUTINE CREMA1	163
" 3.2	" CREMA2	170
" 3.3	PROGRAM TESBC1	181
" 3.4	" TES2C2	181
" 3.5	" EIVAR	182
" 3.6	" PARV22	183
" 3.7	" ANALCR	184
" 3.8	" ANALCR2	186
" 3.9	" RECANT	188
" 3.10	" RECANT2	189
" 3.11	" RECHRE	190
" 3.12	" RECHRE2	191

Programlistningar.

3.1

SUBROUTINE CREMA1(IDATA,NOWP,LEAVE,MAP,NA,NB,KU,NC,A,B,C,D,IW)

REFERENCE, BILOUS O.AND AMUNDSON A. I.CH.E.JOURNAL 1,513,1955.
 ENGWALL H. EXAMINATION TREATISE BY INST.F.CHEM.TECHN.
 KTH,STOCKHOLM,1967.

AUTHOR, BENGT GUSTAFSSON 15/8 1969.

CONSIDERED REACTION* ONE REAGENT REACTS TO ONE PRODUCT, THE
 REACTION IS IRREVERSIBLE,EXOTHERMIC AND OF FIRST ORDER.

CONSIDERED REACTOR* CONTINUOUS-FLOW STIRRED-TANK REACTOR
 WITH A COOLING-JACKET.

RESULTS FROM PERFORMED CALCULATIONS*

1. REACTANT TEMPERATURE,REACTANT CONCENTRATION AND TEMPERATURE
 OF THE COOLING-MEDIA IN THE EXISTING STEADY-STATES.
- 2.A WORKING-POINT IS CHOOSEN OUT OF THE EXISTING STEADY-STATES,
 ACCORDINGLY TO THE INPUT VALUE OF THE FORMAL PARAMETER MAP,SEE BELOW.
3. RESULTS CONCERNING THE HEAT FUNCTIONS.

- I. SLOPE AND ZERO OF THE THREE HEAT REJECTION LINES.IN THE OUTPUT
 PRINTINGS QR-AD REPRESENTS THE ADIABATIC LINE,QR-COOL REPRESENTS
 THE COOLANT LINE AND QR-TOT THE TOTAL HEAT REJECTION LINE.
 DIMENSION OF ZERO IS KELVIN-DEGREES AND OF SLOPE KCAL PER
 MOL INLET REAGENT AND KELVIN-DEGREE.
- II.A NUMBER OF POINTS ON THE HEAT PRODUCTION CURVE.THE TEMPERATURE
 INTERVAL IS 5 KELVIN-DEGREES.HEAT PRODUCTION IS REPRESENTED BY
 QPROD IN THE OUTPUT PRINTINGS,DIMENSION OF QPROD IS KCAL PER
 MOL INLET REAGENT.

NOTE,IN THE SUBROUTINE AND IN THE OUTPUT PRINTINGS.
 SF(T) REPRESENTS THE FUNCTION FORMED BY THE DIFFERENCE,,
 QPROD(T) MINUS QR-TOT(T), SFPRIM(T) IS THE DERIVATIVE.

4. THE SYSTEM-MATRICES FOR THE REACTOR,BY LINEARIZING AROUND THE W.P.

A-MATRIX OF ORDER NA*NA, B-MATRIX OF ORDER NA*NB
 C-MATRIX OF ORDER NC*NA, D-MATRIX OF ORDER NC*NB.
 MAX(NA)=3, MAX(NB)=3, MAX(NC)=2.

NOTE,IN DIMENSION STATEMENTS BELOW,ALL MATRICES ARE DIMENSIONED 3*3.
 THIS SOMETIMES SIMPLIFIES THE USE OF THE SUBROUTINE.

IDATA-VECTOR OF ORDER 20,SEE BELOW.

SPECIFICATION OF PARAMETERS***

STATE-VARIABLES*

T=REACTANT TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
CA=REACTANT CONCENTRATION	MOL/DM**3
TK=COOLING-MEDIA TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES

CHEMICAL DATA*

1. TO=FEED-FLOW TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
-----------------------------	----------------

- C 2. TKI=INLET COOLING-MEDIA TEMPERATURE KELVIN-DEGREES
- C 3. TA=AIR TEMPERATURE KELVIN-DEGREES
- C 4. CAO=FEED-FLOW CONCENTRATION MOL/DM**3
- C 5. RAA=REACTANT DENSITY KG/DM**3
- C 6. RAAC=COOLING-MEDIA DENSITY KG/DM**3
- C 7. CP=REACTANT HEAT-CAPACITY KCAL/KG,K
- C 8. CPC=COOLING-MEDIA HEAT-CAPACITY KCAL/KG,K
- C 9. V=REACTOR VOLUME DM**3
- C 10.VC=JACKET VOLUME DM**3
- C 11.G=RATE OF FEED FLOW DM**3/MIN
- C 12.GC=RATE OF INLET COOLING-MEDIA DM**3/MIN
- C 13.DHM=-(HEAT OF REACTION) KCAL/MOL
- C 14.EACT=ACTIVATION ENERGY CAL/MOL
- C 15.R=GAS CONSTANT CAL/MOL,K
- C 16.RC=ARRHENIUS CONSTANT MIN**-1
- C 17.HR=HEAT TRANSFER COEFF.,TOTAL REACTOR--JACKET KCAL/M**2,K,MIN
- C 18.HA=HEAT TRANSFER COEFF.,TOTAL JACKET--AIR KCAL/M**2,K,MIN
- C 19.AR=COOLING AREA,INNER (TOWARDS REACTOR) M**2
- C 20.AA=COOLING AREA,OUTER (TOWARDS AIR) M**2

---- NOTE,SINGLE K STANDS FOR KELVIN-DEGREES.

VALUES ARE ASSIGNED TO THE CHEMICAL PARAMETERS IN STATEMENTS INSIDE THE SUBROUTINE.NOTE,THIS STATEMENTS CAN BE PASSED OVER,SEE IDATA BELOW.

VALUES OF THE FORMAL PARAMETERS*****

IDATA.THIS VECTOR DECIDES THE BASIC VALUES OF THE CHEMICAL PARAMETERS. THE FIGURE OF AN ELEMENT IN THIS VECTOR CORRESPONDS TO THE FIGURE OF A CHEMICAL PARAMETER IN THE SPECIFICATION ABOVE.IF THE FOUNDATION OF THE SUBROUTINE CALCULATIONS SHOULD BE THE VALUES ASSIGNED TO THE PARAMETERS IN THE SUBROUTINE,THEN SET ALL ELEMENTS OF IDATA EQUAL TO ZERO.IF NEW VALUES OF ONE OR MORE PARAMETERS ARE WANTED, OBSERVE THE FIGURES OF THE ACTUAL PARAMETERS IN THE SPECIFICATION AND SET THE CORRESPONDING ELEMENTS OF IDATA EQUAL TO ONE THEN ASSIGN NEW VALUES TO THE PARAMETERS IN THE CALLING PROGRAM. THE OTHER ELEMENTS OF IDATA SHOULD REMAIN EQUAL TO ZERO. NOTE*** WHEN USING THIS SUBROUTINE,THE COMMON-DECLARATION OF THESE PARAMETERS SHOULD ALWAYS BE EXACTLY THE SAME AS THE ONE,WHICH FOLLOWS BELOW AFTER THE DIMENSION STATEMENTS.

NOWP. IS RETURNED EQUAL TO ONE IF NO WORKING-POINT IS OBTAINED, OTHERWISE NOWP IS RETURNED ZERO.

LEAVE.THIS PARAMETER DECIDES THE EXTENT OF THE PERFORMED CALCULATIONS.

- LEAVE PERFORMED CALCULATIONS
- 0 THE TOTAL
- 1 STEADY-STATES
- 2 STEADY-STATES,WORKING-POINT AND HEAT FUNCTIONS.
- 3 STEADY-STATES,WORKING-POINT AND SYSTEM-MATRICES.

MAP. IF THE STEADY-STATES ARE KNOWN,FOR EXAMPLE AFTER USE OF THIS SUBROUTINE WITH LEAVE=1,(AND ANY VALUE OF MAP) AND A SPECIAL STEADY-STATE IS WANTED AS W.P.,PUT ACCORDINGLY MAP=1,2, OR 3. (MAP=1 RESULTS IN THE ONE WITH THE LOWEST TEMPERATURE ETC.). IF,AS NORMALLY,THE W.P. SHOULD HAVE MAXIMAL CONVERSION,PUT MAP=0.

NA. IF THE DYNAMICS OF THE COOLING-MEDIA SHOULD BE CONSIDERED, PUT NA=3,THEN THE STATE-VARIABLES ARE X1=T,X2=CA AND X3=TK. NA=2 RESULTS IN NEGLECTING OF THESE DYNAMICS AND THE STATE-VARIABLES X1=T AND X2=CA.

NB. COMBINATION OF NB AND KU DECIDES THE CONTROL-VECTOR. FOUR
 KU. POSSIBILITIES ARE AVAILABLE.....

- | | |
|---------------------------|-------------------|
| 1. U1=TKI. | PUT NB=1 AND KU=1 |
| 2. U1=T0, U2=TKI. | NB=2 AND KU=1 |
| 3. U1=CA0, U2=TKI. | NB=2 AND KU=2 |
| 4. U1=T0, U2=CA0, U3=TKI. | NB=3 AND KU=1 |

NC. DECIDES THE OBSERVAL-VECTOR.

- | | |
|-----------------|----------|
| 1. Y1=T. | PUT NC=1 |
| 2. Y1=T, Y2=TK. | NC=2 |

IW. THIS PARAMETER DECIDES THE OUTPUT PRINTINGS.

- | | |
|-----|--|
| IW. | PRINTINGS. |
| 0 | ONLY EVENTUAL FAILURE-MESSAGES. |
| 1 | A-MATRIX. |
| 2 | ALL THE SYSTEM-MATRICES. |
| 3 | SYSTEM-MATRICES AND STEADY-STATES. |
| 4 | SYSTEM-MATRICES, STEADY-STATES AND EXTREME-VALUES OF F(T). |

SUBROUTINES REQUIRED

NONE

DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)
 DIMENSION LD(3),TV(2),START(3)
 COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
 COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA
 COMMON TS(3),CAS(3)

CALCULATION OF 1. STEADY-STATES 2. WORKING-POINT

STATEMENT FUNCTIONS

REX(T)=EACT/(R*T)
 QA(T)=RL*T-AL*T0-CL*U*TKI
 Q(T)=1./(1.+EXP(REX(T))/(RC*TETA))
 SF(T)=DHM*Q(T)-QA(T)
 SFPRIM(T)=DHM*Q(T)**2.*EXP(REX(T))*REX(T)/(RC*TETA*T)-RL
 DELTA(TS)=SF(TS)/SFPRIM(TS)

IN THE FOLLOWING 20 ASSIGN-STATEMENTS, DATA FOR THE REACTOR.

1 IF(IDATA(1).EQ.0) T0=293.2
 IF(IDATA(2).EQ.0) TKI=320.
 IF(IDATA(3).EQ.0) TA=291.15
 IF(IDATA(4).EQ.0) CA0=5.
 IF(IDATA(5).EQ.0) RAA=0.8
 IF(IDATA(6).EQ.0) RAAC=1.
 IF(IDATA(7).EQ.0) CP=1.
 IF(IDATA(8).EQ.0) CPC=1.
 IF(IDATA(9).EQ.0) V=3000.
 IF(IDATA(10).EQ.0) VC=1000.
 IF(IDATA(11).EQ.0) G=150.
 IF(IDATA(12).EQ.0) GC=2.E2
 IF(IDATA(13).EQ.0) DHM=20.
 IF(IDATA(14).EQ.0) EACT=31600.
 IF(IDATA(15).EQ.0) R=1.9858
 IF(IDATA(16).EQ.0) RC=3.E19
 IF(IDATA(17).EQ.0) HR=10.

```

IF(IDATA(18).EQ.0) HA=1.4
IF(IDATA(19).EQ.0) AR=12.48
IF(IDATA(20).EQ.0) AA=15.12
TETA=V/G

```

```

C
2 IF(IW.GE.3) WRITE(61,120) CAO,TO,TKI,TETA

```

```

C
C
C
C
CONSTANTS

```

```

CR=RAA*CP*G
CC=RAAC*CPC*GC
CA=CC/(HA*AA)
AL=RAA*CP/CAO
IF(NA.EQ.3) GO TO 3
COOL=1./(1.+HR*AR/(2.*CC))
U=1.
GO TO 4

```

```

3 COOL=1.-HR*AR/(HR*AR+HA*AA+CC)

```

```

U=(CA+TA/TKI)/(CA+1.)

```

```

4 CL=HR*AR*COOL/(CAO*G)

```

```

RL=AL+CL

```

```

C
NS=0

```

```

NOWP=0

```

```

S=2.

```

```

DO 5 I=1,3

```

```

5 LD(I)=0

```

```

10 L=1

```

```

T=275.

```

```

11 X=SIGN(S,SFPRIM(T))

```

```

DO 12 I=1,200

```

```

T=T+5.

```

```

Y=SIGN(S,SFPRIM(T))

```

```

YX=Y+X

```

```

IF(ABS(YX).LT.1.) GO TO 13

```

```

12 CONTINUE

```

```

GO TO (14,15) L

```

```

13 TV(L)=T-5.

```

```

L=L+1

```

```

IF(L.LT.3) GO TO 11

```

```

GO TO 16

```

```

14 START(1)=T0

```

```

NSA=0

```

```

NS=1

```

```

IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA

```

```

IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS

```

```

GO TO 23

```

```

15 NSA=1

```

```

WRITE(61,100) NSA

```

```

IF(SF(T).LT.0.) GO TO 151

```

```

WRITE(61,190)

```

```

GO TO 29

```

```

151 WRITE(61,191)

```

```

GO TO 29

```

```

16 NSA=2

```

```

IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA

```

```

16 DO 19 J=1,NSA

```

```

T=TV(J)

```

```

X=SIGN(S,SFPRIM(T))

```

```

DO 17 I=1,20

```

```

T=T+0.3

```

```

Y=SIGN(S,SFPRIM(T))

```

```

YX=Y+X

```

```

IF(ABS(YX).LT.1.) GO TO 18

```

```

17 CONTINUE

```

```

T=TV(J)+5.
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,101)
18 TV(J)=T-0.15
FV=SF(T-0.15)
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,107) J,TV(J),FV
19 CONTINUE
TA=TV(1)
TB=TV(2)
IF(SF(TA).NE.0..AND.SF(TB).NE.0.) GO TO 20
IF(SF(TA).EQ.0.) TA=TA+0.05
IF(SF(TB).EQ.0.) TB=TB+0.05
20 IF(SF(TA)*SF(TB).LT.0.) GO TO 22
NS=1
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
IF(SF(TA).GT.0.) GO TO 21
START(1)=275.
GO TO 23
21 START(1)=TB+20.
GO TO 23
22 NS=3
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=TB+20.
23 I=1
24 TI=START(I)
DO 25 J=1,30
IF(ABS(SFPRIM(TI)).LT.1.0E-20) GO TO 26
TI=TI-DELTA(TI)
IF(ABS(SFPRIM(TI)).LT.1.0E-20) GO TO 26
IF(ABS(DELTA(TI)).LT.1.0E-05) GO TO 27
25 CONTINUE
26 WRITE(61,103) I
IF(NS-2) 29,30,30
27 TS(I)=TI
CAS(I)=CA0/(1.+TETA*RC*EXP(-REX(TI)))
TKS=(1.-COOL)*TI+COOL*U*TKI
IF(IW.LT.3) GO TO 28
WRITE(61,105) I
WRITE(61,106) TS(I),CAS(I),TKS
28 I=I+1
IF(I.GT.NS) GO TO 31
GO TO 24
29 NOWP=1
WRITE(61,102)
IF(LEAVE.EQ.2) GO TO 360
GO TO 1000
30 LD(I)=1
IF(MAP.EQ.0.AND.I.EQ.NS) GO TO 29
GO TO 28
31 IF(LEAVE.EQ.1) GO TO 1000
IF(MAP.GT.0) GO TO 32
KW=NS
GO TO 33
32 IF(LD(MAP).EQ.1.OR.MAP.GT.NS) GO TO 29
KW=MAP
33 TWP=TS(KW)
CWP=CAS(KW)
IF(LEAVE.EQ.3) GO TO 40

```

C
C
C
C
C

CALCULATION OF 3. HEAT PRODUCTION AND REJECTION

360 CZ=U*TKI


```

RZ=(AL*TO+CL*CZ)/RL
WRITE(61,110) AL,CL,RL,TO,CZ,RZ
T1=268.15
WRITE(61,111)
DO 36 I=1,51
T1=T1+5.
T2=T1+255.
T3=T2+255.
T4=T3+255.
QPA=DHM*Q(T1)
QPB=DHM*Q(T2)
QPC=DHM*Q(T3)
QPD=DHM*Q(T4)
36 WRITE(61,112) T1,QPA,T2,QPB,T3,QPC,T4,QPD
IF(LEAVE.EQ.2) GO TO 1000

```

C
C
C
C
C
C
C

CALCULATION OF 4. SYSTEM-MATRICES

CONSTANTS

```

40 TETAI=G/V
TETACI=GC/VC
G1=HR*AR/(RAA*CP*V)
G2=DHM/(RAA*CP)
G3=HR*AR/(RAAC*CPC*VC)
G4=HA*AA/(RAAC*CPC*VC)
REXC=REX(TWP)
REAC=RC*EXP(-REXC)
GS=REXC*REAC*CWP/TWP
IF(KW.EQ.NS-1) GO TO 41
IF(IW.GT.0) WRITE(61,109) KW
GO TO 42
41 IF(IW.GT.0) WRITE(61,108) KW
42 CONTINUE

```

C

C

```

DO 50 I=1,3
DO 50 J=1,3
50 B(I,J)=0.
DO 51 I=1,2
DO 51 J=1,3
51 C(I,J)=0.
C(1,1)=1.
C(2,3)=1.
DO 52 I=1,2
DO 52 J=1,3
52 D(I,J)=0.
IF(NA-2) 60,60,70

```

C

C

```

60 A(1,1)=-TETAI-G1*COOL+G2*GS
A(1,2)=G2*REAC
A(2,1)=-GS
A(2,2)=-TETAI-REAC
B(1,NB)=G1*COOL
GO TO(62,61,63) NB
61 B(KU,1)=TETAI
62 GO TO(80,64) NC
63 B(1,1)=TETAI
B(2,2)=TETAI
GO TO(80,64) NC
64 C(2,1)=1.-COOL
D(2,NB)=COOL

```

GO TO 80

C

```

70 A(1,1)=-TETAI-G1+G2*GS
   A(1,2)=G2*REAC
   A(1,3)=G1
   A(2,1)=-GS
   A(2,2)=-TETAI-REAC
   A(2,3)=0.
   A(3,1)=G3
   A(3,2)=0.
   A(3,3)=-TETACI-G3-G4
   B(3,NB)=TETACI
   GOTO (80,71,72) NB
71 B(KU,1)=TETAI
   GO TO 80
72 B(1,1)=TETAI
   B(2,2)=TETAI

```

C

C

```

80 IF(IW,EQ.0) GO TO 1000
   WRITE(61,200)
   DO 81 I=1,NA
81  WRITE(61,201) (A(I,J),J=1,NA)
   IF(IW,LT.2) GO TO 1000
   WRITE(61,210)
   DO 82 I=1,NA
82  WRITE(61,201) (B(I,J),J=1,NB)
   WRITE(61,220)
   DO 83 I=1,NC
83  WRITE(61,201) (C(I,J),J=1,NA)
   WRITE(61,230)
   DO 84 I=1,NC
84  WRITE(61,201) (D(I,J),J=1,NB)

```

C

C

```

100 FORMAT(1H0,9X,40HNUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF SFPRIM = ,I1)
101 FORMAT(10X,41HMORE EXACT METHOD FOR EXTREME-VALUE FAILS,I1)
102 FORMAT(10X,34HCALCULATION OF WORKING-POINT FAILS)
103 FORMAT(10X,34HNO CONVERGENCE FOR START-VALUE NR.,I1)
104 FORMAT(10X,26HNUMBER OF STEADY-STATES = ,I1)
105 FORMAT(1H0,24HDATA IN STEADY-STATE NR.,I1)
106 FORMAT(1H0,23HREACTANT TEMPERATURE =,F10.4/1H0,13HREACTANT CONC,
  *12HENTRATION =,E12.4/1H0,28HCOOLING-MEDIA TEMPERATURE =,F10.4)
107 FORMAT(10X,27HAPPROX. ROOT OF SFPRIM(T)=0,5X,3HNO.,I1,5X,2HT=,
  *F6.1,5X,6HSF(T)=,E10.2)
108 FORMAT(1H1/////20X,40HSTATICALLY UNSTABLE WORKING-POINT.....ST,I1/
  *19X,43(1H*))
109 FORMAT(1H1/////20X,38HSTATICALLY STABLE WORKING-POINT.....ST,I1/
  *19X,41(1H*))
110 FORMAT(1H1,23X,5HQR-AD,15X,7HQR-COOL,13X,6HQR-TOT/1H0,5X,5HSLOPE,
  *3(10X,E10.3)/1H0,5X,4HZERO,3(12X,F8.3))
111 FORMAT(/////7X,4(4HTEMP,9X,5HQPROD,8X)/1H0,1X)
112 FORMAT(1H ,4(4X,F7.2,5X,E10.3))
120 FORMAT(1H1,30X,19H.. BASIC STATE ../1H0,5HCAO =,F8.3,5X,4HTO =,
  *F8.3,5X,5HTKI =,F8.3,5X,7HTAETA =,E9.2)
190 FORMAT(1H0,10X,14HQR-TOT TOO LOW)
191 FORMAT(1H0,10X,15HQR-TOT TOO HIGH)

```

C

C

```

200 FORMAT(/////11X,8HA-MATRIX)
201 FORMAT(1H0,5(5X,E13.5))
210 FORMAT(1H0,10X,8HB-MATRIX)
220 FORMAT(1H0,10X,8HC-MATRIX)
230 FORMAT(1H0,10X,8HD-MATRIX)

```

C

STATE-VARIABLES*

T=REACTION-MIXTURE TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
CA=REAGENT CONCENTRATION	MOL/DM**3
CB=CONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT	MOL/DM**3
TK=COOLING-MEDIA TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES

CHEMICAL DATA*

1. TO=FEED-FLOW TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
2. TKI=INLET COOLING-MEDIA TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
3. TA=AIR TEMPERATURE	KELVIN-DEGREES
4. CAO=FEED-FLOW CONCENTRATION	MOL/DM**3
5. RAA=REACTANT DENSITY	KG/DM**3
6. RAAC=COOLING-MEDIA DENSITY	KG/DM**3
7. CP=REACTANT HEAT-CAPACITY	KCAL/KG,K
8. CPC=COOLING-MEDIA HEAT-CAPACITY	KCAL/KG,K
9. V=REACTOR VOLUME	DM**3
10.VC=JACKET VOLUME	DM**3
11.G=RATE OF FEED FLOW	DM**3/MIN
12.GC=RATE OF INLET COOLING-MEDIA	DM**3/MIN
13.DHM1=-(HEAT OF REACTION,1)	KCAL/MOL
14.DHM2=-(HEAT OF REACTION,2)	KCAL/MOL
15.E1=ACTIVATION ENERGY,1	CAL/MOL
16.E2=ACTIVATION ENERGY,2	CAL/MOL
17.R=GAS CONSTANT	CAL/MOL,K
18.RC1=ARRHENIUS CONSTANT,1	MIN**-1
19.RC2=ARRHENIUS CONSTANT,2	MIN**-1
20.HR=HEAT TRANSFER COEFF.,TOTAL REACTOR--JACKET	KCAL/M**2,K,MIN
21.HA=HEAT TRANSFER COEFF.,TOTAL JACKET--AIR	KCAL/M**2,K,MIN
22.AR=COOLING AREA,INNER (TOWARDS REACTOR)	M**2
23.AA=COOLING AREA,OUTER (TOWARDS AIR)	M**2

--- NOTE,SINGLE K STANDS FOR KELVIN-DEGREES.

VALUES ARE ASSIGNED TO THE CHEMICAL PARAMETERS IN STATEMENTS INSIDE THE SUBROUTINE.NOTE,THIS STATEMENTS CAN BE PASSED OVER,SEE IDATA BELOW.

VALUE OF THE FORMAL PARAMETERS*****

ITYPE.IF THE CONSECUTIVE REACTIONS SHALL BE TREATED,PUT ITYPE=1.
IF THE PARALLEL REACTIONS SHALL BE TREATED,PUT ITYPE=2.

IDATA.THIS VECTOR DECIDES THE BASIC VALUES OF THE CHEMICAL PARAMETERS. THE FIGURE OF AN ELEMENT IN THIS VECTOR CORRESPONDS TO THE FIGURE OF A CHEMICAL PARAMETER IN THE SPECIFICATION ABOVE.IF THE FOUNDATION OF THE SUBROUTINE CALCULATIONS SHOULD BE THE VALUES ASSIGNED TO THE PARAMETERS IN THE SUBROUTINE,THEN SET ALL ELEMENTS OF IDATA EQUAL TO ZERO.IF NEW VALUES OF ONE OR MORE PARAMETERS ARE WANTED, OBSERVE THE FIGURES OF THE ACTUAL PARAMETERS IN THE SPECIFICATION AND SET THE CORRESPONDING ELEMENTS OF IDATA EQUAL TO ONE THEN ASSIGN NEW VALUES TO THE PARAMETERS IN THE CALLING PROGRAM. THE OTHER ELEMENTS OF IDATA SHOULD REMAIN EQUAL TO ZERO. NOTE*** WHEN USING THIS SUBROUTINE,THE COMMON-DECLARATION OF THESE PARAMETERS SHOULD ALWAYS BE EXACTLY THE SAME AS THE ONE,WHICH FOLLOWS BELOW AFTER THE DIMENSION STATEMENTS.

NOWP. IS RETURNED ZERO IF CALCULATION OF WORKING-POINT SUCCEEDS, IF IT FAILS NOWP=1.

LEAVE.THIS PARAMETER DECIDES THE EXTENT OF THE PERFORMED CALCULATIONS.
LEAVE PERFORMED CALCULATIONS
0 THE TOTAL

C 1 STEADY-STATES
C 2 STEADY-STATES,WORKING-POINT AND HEAT FUNCTIONS.
C 3 STEADY-STATES,WORKING-POINT AND SYSTEM-MATRICES.
C
C MAP. IF THE STEADY-STATES ARE KNOWN,FOR EXAMPLE AFTER USE OF THIS
C SUBROUTINE WITH LEAVE=1 AND ANY VALUE OF MAP,AND A SPECIAL ONE
C IS WANTED AS WORKING-POINT,PUT THEN ACCORDINGLY MAP=1,2,3,4 OR 5.
C (MAP=1 RESULTS IN THE ONE WITH LOWEST TEMPERATURE ETC.)
C IF THE DEMANDS UPON THE WORKING-POINT ARE MAXIMAL CONCENTRA-
C TION OF THE DESIRED PRODUCT IN COMBINATION WITH STATICAL
C STABILITY PUT MAP=0.
C
C NA. IF THE DYNAMICS OF THE COOLING-MEDIA SHOULD BE CONSIDERED,
C PUT NA=4,THEN THE STATE-VARIABLES ARE X1=T,X2=CA,X3=CB AND
C X4=TK. NA=3 RESULTS IN NEGLECTING OF THESE DYNAMICS AND THE
C STATE-VARIABLES X1=T,X2=CA,AND X3=CB.
C
C NB. COMBINATION OF NB AND KU DECIDES THE CONTROL-VECTOR. FOUR
C KU. POSSIBILITIES ARE AVAILABLE....
C 1. U1=TKI. PUT NB=1 AND KU=1
C 2. U1=T0, U2=TKI. NB=2 AND KU=1
C 3. U1=CA0, U2=TKI. NB=2 AND KU=2
C 4. U1=T0, U2=CA0, U3=TKI. NB=3 AND KU=1
C
C NC. DECIDES THE OBSERVAL-VECTOR.
C 1. Y1=T. PUT NC=1
C 2. Y1=T, Y2=TK. NC=2
C
C IW. THIS PARAMETER DECIDES THE OUTPUT PRINTINGS.
C IW. PRINTINGS.
C 0 ONLY EVENTUAL FAILURE-MESSAGES.
C 1 A-MATRIX.
C 2 ALL THE SYSTEM-MATRICES.
C 3 SYSTEM-MATRICES AND STEADY-STATES.
C 4 SYSTEM-MATRICES,STEADY-STATES AND EXTREME-VALUES OF F(T).

SUBROUTINES REQUIRED
NONE

DIMENSION A(4,4),B(4,4),C(4,4),D(4,4),IDATA(23)
DIMENSION TV(4),START(5),LD(5),FV(4)
COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
COMMON DHM1,DHM2,E1,E2,R,RC1,RC2,HR,HA,AR,AA
COMMON TS(5),CAS(5),CBS(5)

CALCULATION OF 1.STEADY-STATES 2.WORKING-POINT

STATEMENT FUNCTIONS

X(T)=E1/(R*T)
Y(T)=E2/(R*T)
RA(T)=RC1*EXP(-X(T))
RB(T)=RC2*EXP(-Y(T))
QA(T)=RL*T-AL*T0-CL*U*TKI

C
 ZA(T)=1./(1.+1./(TETA*RA(T)))
 ZB(T)=1./(1.+1./(TETA*RB(T)))
 QP1(T)=ZA(T)*(DHM1+DHM2*ZB(T))
 F1(T)=QP1(T)-QA(T)
 FP1(T)=(ZA(T)**2.*X(T)*(DHM1+DHM2*ZB(T))/RA(T)
 * +ZA(T)*ZB(T)**2.*DHM2*Y(T)/RB(T))/(TETA*T)-RL
 DEL1(T)=F1(T)/FP1(T)

C
 C
 Z(T)=1./(1.+TETA*(RA(T)+RB(T)))
 QP2(T)=TETA*(DHM1*RA(T)+DHM2*RB(T))*Z(T)
 F2(T)=QP2(T)-QA(T)
 FP2(T)=Z(T)*TETA*(DHM1*RA(T)*X(T)*(1.-Z(T)*RA(T)*TETA)+DHM2*RB(T)*
 Y(T)(1.-Z(T)*RB(T)*TETA)-Z(T)*RA(T)*RB(T)*TETA*(DHM1*Y(T)+DHM2*
 * X(T)))/T-RL
 DEL2(T)=F2(T)/FP2(T)

C
 GO TO (1,2) ITYPE

C
 C
 C
 HERE,DATA FOR CONSECUTIVE REACTION

1 IF(IDATA(1).EQ.0) T0=423.15
 IF(IDATA(2).EQ.0) TKI=350.
 IF(IDATA(3).EQ.0) TA=291.15
 IF(IDATA(4).EQ.0) CAO=0.205
 IF(IDATA(5).EQ.0) RAA=0.9
 IF(IDATA(6).EQ.0) RAAC=1.
 IF(IDATA(7).EQ.0) CP=0.249
 IF(IDATA(8).EQ.0) CPC=0.53
 IF(IDATA(9).EQ.0) V=2.E4
 IF(IDATA(10).EQ.0) VC=4.E3
 IF(IDATA(11).EQ.0) G=1.2E6
 IF(IDATA(12).EQ.0) GC=4.E3
 IF(IDATA(13).EQ.0) DHM1=450.
 IF(IDATA(14).EQ.0) DHM2=784.
 IF(IDATA(15).EQ.0) E1=4.46E4
 IF(IDATA(16).EQ.0) E2=2.1E4
 IF(IDATA(17).EQ.0) R=1.9858
 IF(IDATA(18).EQ.0) RC1=1.10E16
 IF(IDATA(19).EQ.0) RC2=4.36E5
 IF(IDATA(20).EQ.0) HR=21.
 IF(IDATA(21).EQ.0) HA=1.4
 IF(IDATA(22).EQ.0) AR=45.
 IF(IDATA(23).EQ.0) AA=50.
 GO TO 3

C
 C
 C
 HERE,DATA FOR PARALLEL REACTION

2 IF(IDATA(1).EQ.0) T0=293.15
 IF(IDATA(2).EQ.0) TKI=320.
 IF(IDATA(3).EQ.0) TA=291.15
 IF(IDATA(4).EQ.0) CAO=4.
 IF(IDATA(5).EQ.0) RAA=0.8
 IF(IDATA(6).EQ.0) RAAC=1.
 IF(IDATA(7).EQ.0) CP=0.6
 IF(IDATA(8).EQ.0) CPC=1.
 IF(IDATA(9).EQ.0) V=1.5E3
 IF(IDATA(10).EQ.0) VC=750.
 IF(IDATA(11).EQ.0) G=150.
 IF(IDATA(12).EQ.0) GC=750.
 IF(IDATA(13).EQ.0) DHM1=10.
 IF(IDATA(14).EQ.0) DHM2=15.
 IF(IDATA(15).EQ.0) E1=1.5E4
 IF(IDATA(16).EQ.0) E2=2.0E4

```

IF(IDATA(17).EQ.0) R=1.9858
IF(IDATA(18).EQ.0) RC1=5.34E8
IF(IDATA(19).EQ.0) RC2=2.72E11
IF(IDATA(20).EQ.0) HR=2.5
IF(IDATA(21).EQ.0) HA=1.4
IF(IDATA(22).EQ.0) AR=8.
IF(IDATA(23).EQ.0) AA=10.

```

C

```

3 TETA=V/G
IF(IW.GE.3) WRITE(61,120) CAO,TO,TKI,TETA

```

C

```

CR=RAA*CP*G
CC=RAAC*CPC*GC
CA=CC/(HA*AA)
AL=RAA*CP/CAO
IF(NA.EQ.4) GO TO 4
COOL=1./(1.+HR*AR/(2.*CC))
U=1.
GO TO 5
4 COOL=1.-HR*AR/(HR*AR+HA*AA+CC)
U=(CA+TA/TKI)/(CA+1.)
5 CL=HR*AR*COOL/(CAO*G)
RL=AL+CL
DO 6 I=1,5
6 LD(I)=0
NS=0
NOWP=0
S=2.

```

```

10 L=1
T=275.
GO TO(111,211) ITYPE
111 P=SIGN(S,FP1(T))
DO 112 I=1,300
T=T+2.
Q=SIGN(S,FP1(T))
PQ=P+Q
IF(ABS(PQ).LT.1.) GO TO 13
112 CONTINUE
GO TO (14,15,16,17) L
211 P=SIGN(S,FP2(T))
DO 212 I=1,300
T=T+2.
Q=SIGN(S,FP2(T))
PQ=P+Q
IF(ABS(PQ).LT.1.) GO TO 13
212 CONTINUE
GO TO (14,15,16,17) L
13 TV(L)=T-2.
L=L+1
IF(L.GT.4) GO TO 18
GO TO (111,211) ITYPE
14 NSA=0
NS=1
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=TO
GO TO (28,29) ITYPE
15 NSA=1
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA
WRITE(61,101) L
GO TO 30
16 NSA=2
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA
GO TO 19
17 NSA=3

```

```

IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA
TN=T
WRITE(61,198) TN
GO TO 19
18 NSA=4
IF(IW.EQ.4) WRITE(61,100) NSA
19 DO 24 J=1,NSA
T=TV(J)
GO TO(119,219) ITYPE
119 P=SIGN(S,FP1(T))
DO 120 I=1,22
T=T+0.1
Q=SIGN(S,FP1(T))
PQ=P+Q
IF(ABS(PQ).LT.1.) GO TO 21
120 CONTINUE
GO TO 20
219 P=SIGN(S,FP2(T))
DO 220 I=1,22
T=T+0.1
Q=SIGN(S,FP2(T))
PQ=P+Q
IF(ABS(PQ).LT.1.) GO TO 21
220 CONTINUE
20 T=TV(J)+2.05
21 TV(J)=T-0.05
GO TO (122,222) ITYPE
122 FV(J)=F1(T-0.05)
IF(FV(J).EQ.0.) FV(J)=F1(T)
GO TO 23
222 FV(J)=F2(T-0.05)
IF(FV(J).EQ.0.) FV(J)=F2(T)
23 IF(IW.EQ.4) WRITE(61,103) J,TV(J),FV(J)
24 CONTINUE
TA=TV(1)
TB=TV(2)
SA=SIGN(S,FV(1))
SB=SIGN(S,FV(2))
GO TO (15,25,26,27) NSA
25 IF(SA.NE.SB) GO TO 252
NS=1
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
IF(SB.GT.0.) GO TO 251
START(1)=275.
GO TO (28,29) ITYPE
251 START(1)=TB+20.
GO TO (28,29) ITYPE
252 NS=3
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=TB+20.
GO TO (28,29) ITYPE
26 GO TO (126,226) ITYPE
126 FN=F1(TN)
IF(FN.EQ.0.) FN=F1(TN+1.)
GO TO 261
226 FN=F2(TN)
IF(FN.EQ.0.) FN=F2(TN+1.)
261 TC=TV(3)
SC=SIGN(S,FV(3))
SN=SIGN(S,FN)
IF(SA*SB*SC*SN.GT.0.) GO TO 264
IF(SN.GT.0.) GO TO 262
NS=3

```



```
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=(TB+TC)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
262 NS=2
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
IF(SA.GT.0.) GO TO 263
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
IF(SB.LT.0.) START(2)=(TC+TN)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
263 START(1)=(TB+TC)/2.
START(2)=(TC+TN)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
264 IF(SN.GT.0.) GO TO 265
NS=1
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
IF(SA.GT.0.) START(1)=(TB+TC)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
265 IF(SA.GT.0.) GO TO 30
NS=4
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=(TB+TC)/2.
START(4)=(TC+TN)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
27 TC=TV(3)
TD=TV(4)
SC=SIGN(S,FV(3))
SD=SIGN(S,FV(4))
IF(SA*SB*SC*SD.GT.0.) GO TO 273
NS=3
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
IF(SA.NE.SD) GO TO 272
IF(SA.LT.0.) GO TO 271
START(1)=(TB+TC)/2.
START(2)=(TC+TD)/2.
START(3)=TD+20.
GO TO (28,29) ITYPE
271 START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=(TB+TC)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
272 START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=TD+20.
IF(SB.LT.0.) START(2)=(TC+TD)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
273 IF(SA.NE.SB) GO TO 275
NS=1
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
IF(SB.NE.SC) GO TO 274
START(1)=275.
IF(SA.GT.0.) START(1)=TD+20.
GO TO (28,29) ITYPE
274 START(1)=(TB+TC)/2.
GO TO (28,29) ITYPE
275 NS=5
IF(IW.GE.3) WRITE(61,104) NS
START(1)=275.
START(2)=(TA+TB)/2.
START(3)=(TB+TC)/2.
```

```

START(4)=(TC+TD)/2.
START(5)=TD+20.
GO TO (28,29) ITYPE
28 I=1
281 P=START(I)
    DO 282 K=1,35
    IF (ABS(FP1(P)).LT.1.E-20) GO TO 283
    P=P-DEL1(P)
    IF (ABS(FP1(P)).LT.1.E-20) GO TO 283
    IF (ABS(DEL1(P)).LT.1.E-6) GO TO 284
282 CONTINUE
283 WRITE(61,105) K
    GO TO (30,31,31,32,32) NS
284 TS(I)=P
    CAS(I)=CA0/(1.+TETA*RA(P))
    CBS(I)=CAS(I)*RA(P)*TETA/(1.+TETA*RB(P))
    TKS=(1.-COOL)*TS(I)+COOL*U*TKI
    SELIN=1./(1.+TETA*RB(P))
    IF (IW.LT.3) GO TO 285
    WRITE(61,106) I
    WRITE(61,107) TS(I),CAS(I),CBS(I),TKS,SELIN
285 I=I+1
    IF (I.GT.NS) GO TO 33
    GO TO 281
29 I=1
291 P=START(I)
    DO 292 K=1,35
    IF (ABS(FP2(P)).LT.1.E-20) GO TO 293
    P=P-DEL2(P)
    IF (ABS(FP2(P)).LT.1.E-20) GO TO 293
    IF (ABS(DEL2(P)).LT.1.E-6) GO TO 294
292 CONTINUE
293 WRITE(61,105) K
    GO TO (30,31,31,32,32) NS
294 TS(I)=P
    CAS(I)=CA0*Z(P)
    CBS(I)=TETA*RA(P)*CAS(I)
    TKS=(1.-COOL)*TS(I)+COOL*U*TKI
    SELIN=1./(1.+RB(P)/RA(P))
    IF (IW.LT.3) GO TO 295
    WRITE(61,106) I
    WRITE(61,107) TS(I),CAS(I),CBS(I),TKS,SELIN
295 I=I+1
    IF (I.GT.NS) GO TO 33
    GO TO 291
30 NOWP=1
    WRITE(61,102)
    IF (LEAVE.EQ.2) GO TO 40
    GO TO 1000
31 IF (I.EQ.1.OR.I.EQ.NS.AND.MAP.EQ.0) GO TO 30
    LD(I)=1
    GO TO (285,295) ITYPE
32 IF (I.EQ.3.AND.MAP.EQ.0) GO TO 30
    LD(I)=1
    GO TO (285,295) ITYPE
33 IF (LEAVE.EQ.1) GO TO 1000
    IF (MAP.GT.0) GO TO 37
    GO TO (34,34,35,36,36) NS
34 KW=1
    GO TO 38
35 IF (CBS(1).GT.CBS(3)) GO TO 34
36 KW=3
    GO TO 38
37 IF (LD(MAP).EQ.1.OR.MAP.GT.NS) GO TO 30
    KW=MAP

```

```

38 TWP=TS(KW)
   CAWP=CAS(KW)
   CBWP=CBS(KW)
   IF(LEAVE.EQ.3) GO TO 500

```

C
C
C
C
C

CALCULATION OF 3. HEAT PRODUCTION AND REJECTION

```

40 CZ=U*TKI
   RZ=(AL*TO+CL*CZ)/RL
   WRITE(61,140) AL,CL,RL,TO,CZ,RZ
   T1=268.15
   WRITE(61,141)
   DO 43 I=1,51
   T1=T1+5.
   T2=T1+255.
   T3=T2+255.
   T4=T3+255.
   GO TO (41,42) ITYPE
41 QPA=QP1(T1)
   QPB=QP1(T2)
   QPC=QP1(T3)
   QPD=QP1(T4)
   GO TO 43
42 QPA=QP2(T1)
   QPB=QP2(T2)
   QPC=QP2(T3)
   QPD=QP2(T4)
43 WRITE(61,142) T1,QPA,T2,QPB,T3,QPC,T4,QPD
   IF(LEAVE.EQ.2) GO TO 1000

```

C
C
C
C
C
C

CALCULATION OF 4. SYSTEM-MATRICES

CONSTANTS

```

500 TETAI=G/V
   TETACI=GC/VC
   G1=HR*AR/(RAA*CP*V)
   G21=DHM1/(RAA*CP)
   G22=DHM2/(RAA*CP)
   G3=HR*AR/(RAAC*CPC*VC)
   G4=HA*AA/(RAAC*CPC*VC)
   R1=RA(TWP)
   R2=RB(TWP)
   G51=R1*X(TWP)/TWP
   G52=R2*Y(TWP)/TWP
   IF(KW.EQ.2.OR.KW.EQ.4) GO TO 501
   IF(IW.GT.0) WRITE(61,109) KW
   GO TO (150,250) ITYPE
501 IF(IW.GT.0) WRITE(61,108) KW
   GO TO (150,250) ITYPE
150 E11=G21*G51*CAWP+G22*G52*CBWP
   E12=G21*R1
   E13=G22*R2
   E21=G51*CAWP
   E22=-TETAI-R1
   E31=CBWP*G52-CAWP*G51
   E33=-TETAI-R2
   GO TO 50
250 E11=CAWP*(G21*G51+G22*G52)

```

C

C

C

```

E12=G21*R1+G22*R2
E13=0.
E21=CAWP*(G51+G52)
E22=-TETAI-R1-R2
E31=-CAWP*G51
E33=-TETAI

```

C
C

```

50 DO 51 I=1,4
    DO 51 J=1,3
51 B(I,J)=0.
    DO 52 I=1,2
    DO 52 J=1,4
52 C(I,J)=0.
    C(1,1)=1.
    C(2,4)=1.
    DO 53 I=1,2
    DO 53 J=1,3
53 D(I,J)=0.

```

C

```

    IF (NA-3) 60,60,70
60 A(1,1)=-TETAI-G1*COOL+E11
    A(1,2)=E12
    A(1,3)=E13
    A(2,1)=-E21
    A(2,2)=E22
    A(2,3)=0.
    A(3,1)=-E31
    A(3,2)=R1
    A(3,3)=E33
    B(1,NB)=G1*COOL
    GO TO(62,61,63) NB
61 B(KU,1)=TETAI
62 GO TO (80,64) NC
63 B(1,1)=TETAI
    B(2,2)=TETAI
    GO TO (80,64) NC
64 C(2,1)=1.-COOL
    D(2,NB)=COOL
    GO TO 80
70 A(1,1)=-TETAI-G1+E11
    A(1,2)=E12
    A(1,3)=E13
    A(1,4)=G1
    A(2,1)=-E21
    A(2,2)=E22
    A(2,3)=0.
    A(2,4)=0.
    A(3,1)=-E31
    A(3,2)=R1
    A(3,3)=E33
    A(3,4)=0.
    A(4,1)=G3
    A(4,2)=0.
    A(4,3)=0.
    A(4,4)=-TETACI-G3-G4
    B(4,NB)=TETACI
    GO TO (80,71,72) NB
71 B(KU,1)=TETAI
    GO TO 80
72 B(1,1)=TETAI
    B(2,2)=TETAI

```

C

```

80 IF(IW.EQ.0) GO TO 1000
    WRITE(61,201)

```

```

DO 81 I=1,NA
81 WRITE(61,200) (A(I,J),J=1,NA)
   IF(IW.LT.2) GO TO 1000
   WRITE(61,202)
   DO 82 I=1,NA
82 WRITE(61,200) (B(I,J),J=1,NB)
   WRITE(61,203)
   DO 83 I=1,NC
83 WRITE(61,200) (C(I,J),J=1,NA)
   WRITE(61,204)
   DO 84 I=1,NC
84 WRITE(61,200) (D(I,J),J=1,NB)

```

C
C

```

100 FORMAT(1H0,9X,36HNUMBER OF SIGN-ALTERNATIONS OF FP = ,I1)
101 FORMAT(1H0,10X,10HSTARTVALUE,I2,30HIS NOT OBTAINED-TOO HIGH TEMP.)
102 FORMAT(10X,34HCALCULATION OF WORKING-POINT FAILS)
103 FORMAT(10X,23HAPPROX. ROOT OF FP(T)=0,5X,3HNO.,I1,5X,2HT=,F6.1,5X,
*5HF(T)=,E10.2)
104 FORMAT(10X,26HNUMBER OF STEADY-STATES = ,I1)
105 FORMAT(10X,34HNO CONVERGENCE FOR START-VALUE NR.,I1)
106 FORMAT(1H0,24HDATA IN STEADY-STATE NR.,I1)
107 FORMAT(1H0,23HREACTION TEMPERATURE =,F11.5/1H0,14HREAGENT CONCEN,
*9HTRATION =,E13.5/1H0,34HCONCENTRATION OF DESIRED PRODUCT =,E13.5/
*1H0,28HCOOLING-MEDIA TEMPERATURE =,F11.5/1H0,16HINSTANT SELECTIV,
*5HITY =,F9.6)
108 FORMAT(1H1/////20X,40HSTATICALLY UNSTABLE WORKING-POINT.....ST,I1/
*19X,43(1H*))
109 FORMAT(1H1/////20X,38HSTATICALLY STABLE WORKING-POINT.....ST,I1/
*19X,41(1H*))
120 FORMAT(1H1,30X,19H.. BASIC STATE ../1H0,5HCA0 =,F8.3,5X,4HT0 =,
*F8.3,5X,5HTKI =,F8.3,5X,7HTAETA =,E9.2)
140 FORMAT(1H1,23X,5HQR-AD,15X,7HQR-COOL,13X,6HQR-TOT/1H0,5X,5HSLOPE,
*3(10X,E10.3)/1H0,5X,4HZERO,3(12X,F8.3))
141 FORMAT(/////7X,4(4HTEMP,9X,5HQPROD,8X)/1H0,1X)
142 FORMAT(1H ,4(4X,F7.2,5X,E10.3))
198 FORMAT(1H0,37HUPPER ZEROS OF FP(T) AT TOO HIGH TEMP)
200 FORMAT(1H0,5(5X,E13.5))
201 FORMAT(/////11X,8HA-MATRIX)
202 FORMAT(1H0,10X,8HB-MATRIX)
203 FORMAT(1H0,10X,8HC-MATRIX)
204 FORMAT(1H0,10X,8HD-MATRIX)

```

C

```

1000 RETURN
      END

```

3.3PROGRAM TES2C1

```

DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)
DIMENSION EIGR(3),EIGI(3)
COMMON TO,TKI,TA,CAO,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA
DO 20 I=1,20

```

```

20 IDATA(I)=0

```

```

1 READ(60,300) NA,NR,KII,NC,LEAVE,MAP
IF(NA) 99,99,2

```

```

2 CALL CREMA1(IDATA,NOWP,LEAVE,MAP,NA,NR,KII,NC,A,B,C,D,4)
IF(NOWP) 3,3,1

```

```

3 CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,3,0,IER)
IF(IER-1) 6,4,5

```

```

4 WRITE(61,301)
GO TO 1

```

```

5 WRITE(61,302)
GO TO 1

```

```

6 WRITE(61,304)
WRITE(61,303) (EIGR(K),EIGI(K), K=1,NA)
GO TO 1

```

*TES2C1 ger stat.pkter,
värmekurvor, system-
matriser och egen-
värden för enkla
reaktionen. ("grund-
värden" på de kemiska
parametrarna)*

```

300 FORMAT(6I1)

```

```

301 FORMAT(1H0,25H TRIDIAGONALISATION FAILS)

```

```

302 FORMAT(1H0,23H MULLER ITERATION FAILS)

```

```

303 FORMAT(1H0,2(5X,E12.4))

```

```

304 FORMAT(1H0,10X,23HEIGENVALUES OF A-MATRIX)

```

```

310 FORMAT(4I2,4F10.4/(7F10.4,E10.3))

```

```

99 CALL EXIT

```

```

END

```

3.4PROGRAM TES2C2

```

DIMENSION A(4,4),R(4,4),C(4,4),D(4,4),EIGR(4),EIGI(4),IDATA(23)
COMMON TO,TKI,TA,CAO,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
COMMON DHM1,DHM2,E1,E2,R,RC1,RC2,HR,HA,AR,AA

```

```

DO 10 I=1,23

```

```

10 IDATA(I)=0

```

```

1 READ(60,300) ITYPE,LEAVE,MAP,NA,NR,KU,NC,IW
IF(ITYPE) 99,99,2

```

```

2 CALL CREMA2(ITYPE,IDATA,NOWP,LEAVE,MAP,NA,NR,KU,NC,A,R,C,D,IW)
IF(NOWP) 3,3,1

```

```

3 CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,4,0,IER)
IF(IER-1) 6,4,5

```

```

4 WRITE(61,301)
GO TO 1

```

```

5 WRITE(61,302)
GO TO 1

```

```

6 WRITE(61,304)
WRITE(61,303) (EIGR(K),EIGI(K), K=1,NA)
GO TO 1

```

*TES2C2 ger resultat
som TES2C1 men be-
handlar konsekutiva
och parallella reaktio-
nerna.*

```

300 FORMAT(8I1)

```

```

301 FORMAT(1H0,25H TRIDIAGONALISATION FAILS)

```

```

302 FORMAT(1H0,23H MULLER ITERATION FAILS)

```

```

303 FORMAT(1H0,2(5X,E12.4))

```

```

304 FORMAT(1H0,10X,23HEIGENVALUES OF A-MATRIX)

```

```

99 CALL EXIT

```

```

END

```

3.5

PROGRAM FIVAR

DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)

DIMENSION EIGR(3),EIGI(3)

COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC

COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA

COMMON TS(3),CAS(3)

DO 1 I=1,20

1 IDATA(I)=0

IDATA(4)=1

IDATA(1)=1

Y=2.

IP=16

DO 10 I=1,4

GO TO (2,3,4,5) I

2 CA0=5.

TO=281.15

GO TO 6

3 CA0=4.6443

TO=284.896

GO TO 6

4 CA0=6.

TO=281.15

GO TO 6

5 CA0=4.

TO=281.15

6 DO 10 N=1,IP

TO=TO+Y

WRITE(61,100) TO

DO 10 J=1,2

NA=J+1

WRITE(61,101) NA

DO 10 K=1,3

IW=0

CALL CREMA1(IDATA,NOWP,3,K,NA,1,1,1,A,R,C,D,IW)

IF(NOWP.EQ.1) GO TO 10

CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,3,0,IER)

IF(IER-1) 9,7,8

7 WRITE(61,301)

GO TO 10

8 WRITE(61,302)

GO TO 10

9 WRITE(61,304)

WRITE(61,303) (EIGR(L),EIGI(L),L=1,NA)

10 CONTINUE

11 IDATA(1)=0

CA0=2.5

Y=0.25

DO 15 I=1,30

CA0=CA0+Y

WRITE(61,102) CA0

DO 15 J=1,2

NA=J+1

WRITE(61,101) NA

DO 15 K=1,3

IW=0

CALL CREMA1(IDATA,NOWP,3,K,NA,1,1,1,A,R,C,D,IW)

IF(NOWP.EQ.1) GO TO 15

CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,3,0,IER)

IF(IER-1) 14,12,13

12 WRITE(61,301)

GO TO 15

13 WRITE(61,302)

GO TO 15

14 WRITE(61,304)

WRITE(61,303) (EIGR(L),EIGI(L),L=1,NA)

15 CONTINUE

100 FORMAT(///20X,3HTO=,F6.2)

101 FORMAT(1H0,20X,3HNA=,I1)

102 FORMAT(///20X,4HCA0=,F4.2)

301 FORMAT(1H0,25H TRIDIAGONALISATION FAILS)

302 FORMAT(1H0,23H MULLER ITERATION FAILS)

303 FORMAT(1H ,2(5X,E12.4))

304 FORMAT(1H0,10X,23HEIGENVALUES OF A-MATRIX)

CALL EXIT

END

L

3.6

PROGRAM PARV22

```

DIMENSION A(4,4),B(4,4),C(4,4),D(4,4),IDATA(23)
DIMENSION EIGR(4),EIGI(4)
COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
COMMON DHM1,DHM2,E1,E2,R,RC1,RC2,HR,HA,AR,AA
COMMON TS(5),CAS(5),CBS(5)
DO 9 ITYPE=1,2
DO 1 I=1,23
1 IDATA(I)=0
  IDATA(1)=1
  GO TO (11,12) ITYPE
11 TO=383.15
  Q=423.15
  Y=5.
  IP=20
  IS=5
  GO TO 10
12 TO=281.15
  Q=293.15
  Y=2.
  IP=16
  IS=3
10 DO 7 I=1,IP
  TO=TO+Y
  WRITE(61,100) TO
  IF(ABS(TO-Q).LT.0.5) GO TO 7
  DO 7 N=1,2
  NA=N+2
  WRITE(61,101) NA
  DO 7J=1,IS
  IW=0
  CALL CREMA2(ITYPE,IDATA,NOWP,3,J,NA,1,1,1,A,B,C,D,IW)
  IF(NOWP.EQ.1) GO TO 7
2 CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,4,0,IER)
  IF(IER-1) 5,3,4
3 WRITE(61,301)
  GO TO 7
4 WRITE(61,302)
  GO TO 7
5 WRITE(61,304)
  WRITE(61,303) (EIGR(K),EIGI(K), K=1,NA)
7 CONTINUE
  IDATA(1)=0
  IDATA(4)=1
  GO TO (31,32) ITYPE
31 CA0=0.15
  Y=0.01
  IP=10
  GO TO 33
32 CA0=3.1
  Y=0.1
  IP=16
33 DO 8 I=1,IP
  CA0=CA0+Y
  WRITE(61,103) CA0
  DO 8 N=1,2
  NA=N+2
  CALL CREMA2(ITYPE,IDATA,NOWP,3,0,NA,1,1,1,A,B,C,D,0)
  IF(NOWP.EQ.1) GO TO 8
  CALL EIGUNS(A,EIGR,EIGI,NA,4,0,IER)
  IF(IER-1) 15,13,14
13 WRITE(61,301)
  GO TO 8
14 WRITE(61,302)
  GO TO 8
15 WRITE(61,304)
  WRITE(61,303) (EIGR(K),EIGI(K), K=1,NA)
8 CONTINUE
9 CONTINUE
100 FORMAT(////20X,3HTO=,F6.2)
101 FORMAT(1H0,20X,3HNA=,I1)
102 FORMAT(1H0,20X,3HTO=,F6.2)
103 FORMAT(1H0,20X,4HCA0=,F5.3)
301 FORMAT(1H0,25H TRIDIAGONALISATION FAILS)
302 FORMAT(1H0,23H MULLER ITERATION FAILS)
303 FORMAT(1H ,2(5X,E12.4))
304 FORMAT(1H0,10X,23HEIGENVALUES OF A-MATRIX)
CALL EXIT
END

```


3.7

PROGRAM ANALCR

C THIS PROGRAM ANALYZES SYSTEMS GIVEN BY CREMA1,, SINGLE REACTION.
 C OBSERVABILITY AND CONTROLLABILITY OF THE MVS SYSTEMS IS TESTED.
 C SINGLE SYSTEMS WITH REACTION TEMPERATURE AS OUTPUT SIGNAL ARE FORMED.
 C THREE CONTROL SIGNALS ARE CONSIDERED, U1=TO, U2=CAO, U3=TKI.
 C THIS RESULTS IN THREE DIFFERENT SINGLE SYSTEMS.
 C OBSERVABILITY OF THESE SYSTEMS IS TESTED.OBSERVABLE SYSTEMS ARE
 C TRANSFORMED TO THE OBSERVABLE CANONICAL FORM AND THEIR TRANSFER
 C FUNCTIONS ARE DETERMINED.FINALLY THE CONTROLLABILITY IS TESTED.

C IN THE OUTPUT PRINTINGS,THE COEFFICIENTS OF THE TRANSFER FUNCTION ARE
 C REPRESENTED AS FOLLOWS,,

C A(I) = COEFFICIENTS OF THE DENOMINATOR.

C B(I) = COEFFICIENTS OF THE NUMERATOR.

C NEEDED SUBROUTINES*

C CREMA1

C OBSTEST

C TOBSKAN

C SEE COMMENTS TO THE NECESSARY SUBROUTINES BEFORE USE OF THIS PROGRAM.

C
 C DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)
 C DIMENSION AT(3,3),BT(3,3),CE(3),BTE(3),S(3,3),T(3,3)
 C DIMENSION NECOUT(3),P(3),PT(3)
 C COMMON TO,TKI,TA,CAO,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
 C COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA
 C COMMON TS(3),CAS(3)
 C DO 1 I=1,20
 1 IDATA(I)=0
 C DO 19 I=1,2
 C NA=I+1
 C DO 8 J=1,3
 C NB=J
 C NC=2
 C KU=1
 2 CALL CREMA1(IDATA,NOWP,3,3,NA,NB,KU,NC,A,B,C,D,2)
 C IF(NOWP.EQ.1) GO TO 99
 C IF(NB.GT.1) GO TO 5
 C DO 3 K=1,NA
 C DO 3 L=1,NA
 3 AT(K,L)=A(L,K)
 C DELTA=1.E-10
 C CALL OBSTEST(NA,NC,A,C,DELTA,T,IRANK,NECOUT,3,3)
 C WRITE(61,100)
 C DO 4 K=1,NA
 4 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
 C WRITE(61,102) IRANK
 C WRITE(61,103) (NECOUT(K),K=1,NC)
 5 DO 6 K=1,NB
 C DO 6 L=1,NA
 6 BT(K,L)=B(L,K)
 C DELTA=1.E-10
 C CALL OBSTEST(NA,NB,AT,BT,DELTA,T,IRANK,NECOUT,3,3)
 C WRITE(61,100)
 C DO 7 K=1,NA
 7 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
 C WRITE(61,102) IRANK
 C WRITE(61,103) (NECOUT(K),K=1,NB)
 C IF(NB.NE.2.OR.KU.EQ.2) GO TO 8
 C KU=2
 C GO TO 2
 8 CONTINUE
 C DO 9 M=1,NA

```

9 CE(M)=C(1,M)
  NC=1
  DELTA=1.E-10
  CALL OBSTEST(NA,NC,A,CE,DELTA,T,IRANK,NECOUT,3,1)
  WRITE(61,108)
  WRITE(61,100)
  DO 10 K=1,NA
10 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
  WRITE(61,102) IRANK
  WRITE(61,103) NECOUT(1)
  IF(IRANK.LT.NA) GO TO 16
  CALL TOBSKAN(NA,A,CE,T,P,S,3)
  WRITE(61,106)
  DO 11 K=1,NA
11 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
  WRITE(61,104) (P(N),N=1,NA)
  DO 15 J=1,3
  WRITE(61,107) J
  DO 14 K=1,NA
  X=0.
  DO 13 L=1,NA
13 X=X+T(K,L)*B(L,J)
14 PT(K)=X
15 WRITE(61,105) (PT(N),N=1,NA)
16 CONTINUE
  WRITE(61,109)
  DO 19 J=1,3
  DO 17 K=1,NA
17 BTE(K)=B(K,J)
  NB=1
  DELTA=1.E-10
  CALL OBSTEST(NA,NB,AT,BTE,DELTA,T,IRANK,NECOUT,3,1)
  WRITE(61,107) J
  WRITE(61,100)
  DO 18 K=1,NA
18 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
  WRITE(61,102) IRANK
19 WRITE(61,103) NECOUT(1)
100 FORMAT(1H0,10X,8HT-MATRIX)
101 FORMAT(1H0,5(5X,E13.5))
102 FORMAT(1H0,7HRANK T=,I1)
103 FORMAT(1H0,6HNECOUT,5I5)
104 FORMAT(1H0,10HCOEFF A(I),4(2X,E12.4))
105 FORMAT(1H0,10HCOEFF B(I),4(2X,E12.4))
106 FORMAT(1H0,10X,25HT-MATRIX TO OBS.CAN. FORM)
107 FORMAT(1H0,16HCONTROL SIGNAL U,I1)
108 FORMAT(1H1,10X,22HOBSTEST SINGLE SYSTEMS)
109 FORMAT(1H1,10X,22HCONTEST SINGLE SYSTEMS)
99 CALL EXIT
  END

```

3.8PROGRAM ANALCR2

```

C
C THIS PROGRAM ANALYZES SYTEMS GIVEN BY CREMA2,, CONSECUTIVE AND
C PARALLEL REACTIONS.
C OBSERVABILITY AND CONTROLLABILITY OF THE MVS SYSTEMS IS TESTED.
C SINGLE SYSTEMS WITH REACTION TEMPERATURE AS OUTPUT SIGNAL ARE FORMED.
C THREE CONTROL SIGNALS ARE CONSIDERED, U1=T0, U2=CA0, U3=TKI.
C THIS RESULTS IN THREE DIFFERENT SINGLE SYSTEMS.
C OBSERVABILITY OF THESE SYSTEMS IS TESTED.OBSERVABLE SYSTEMS ARE
C TRANSFORMED TO THE OBSERVABLE CANONICAL FORM AND THEIR TRANSFER
C FUNCTIONS ARE DETERMINED.FINALLY THE CONTROLLABILITY IS TESTED.
C
C IN THE OUTPUT PRINTINGS,THE COEFFICIENTS OF THE TRANSFER FUNCTION ARE
C REPRESENTED AS FOLLOWS,,
C A(I) = COEFFICIENTS OF THE DENOMINATOR.
C B(I) = COEFFICIENTS OF THE NUMERATOR.
C
C NEEDED SUBROUTINES*
C     CREMA2
C     OBSTEST
C     TOBSKAN
C
C SEE COMMENTS TO THE NECESSARY SUBROUTINES BEFORE USE OF THIS PROGRAM.
C
DIMENSION A(4,4),B(4,4),C(4,4),D(4,4),IDATA(23),S(4,4)
DIMENSION T(4,4),NECOUT(4),AT(4,4),BT(4,4),CE(4),BTE(4)
DIMENSION P(4),PT(4)
COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
COMMON DHM1,DHM2,E1,E2,R,RC1,RC2,HR,HA,AR,AA
COMMON TS(5),CAS(5),CBS(5)
DO 1 I=1,23
1 IDATA(I)=0
DO 19 ITYPE=1,2
DO 19 I=1,2
NA=I+2
DO 8 J=1,3
NB=J
NC=2
KU=1
2 CALL CREMA2(ITYPE,IDATA,NOWP,3,3,NA,NB,KU,NC,A,B,C,D,2)
IF(NOWP.EQ.1) GO TO 99
IF(NB.GT.1) GO TO 5
DO 3 K=1,NA
DO 3 L=1,NA
3 AT(K,L)=A(L,K)
DELTA=1.E-10
CALL OBSTEST(NA,NC,A,C,DELTA,T,IRANK,NECOUT,4,4)
WRITE(61,100)
DO 4 K=1,NA
4 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
WRITE(61,102) IRANK
WRITE(61,103) (NECOUT(K),K=1,NC)
5 DO 6 K=1,NB
DO 6 L=1,NA
6 BT(K,L)=B(L,K)
DELTA=1.E-10
CALL OBSTEST(NA,NB,AT,BT,DELTA,T,IRANK,NECOUT,4,4)
WRITE(61,100)
DO 7 K=1,NA
7 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
WRITE(61,102) IRANK
WRITE(61,103) (NECOUT(K),K=1,NB)
IF(NB.NE.2.OR.KU.EQ.2) GO TO 8
KU=2

```

```

GO TO 2
8 CONTINUE
DO 9 M=1,NA
9 CE(M)=C(1,M)
NC=1
DELTA=1.E-10
CALL OBSTEST(NA,NC,A,CE,DELTA,T,IRANK,NECOUT,4,1)
WRITE(61,108)
WRITE(61,100)
DO 10 K=1,NA
10 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
WRITE(61,102) IRANK
WRITE(61,103) NECOUT(1)
IF(IRANK.LT.NA) GO TO 16
CALL TOBSKAN(NA,A,CE,T,P,S,4)
WRITE(61,106)
DO 11 K=1,NA
11 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
WRITE(61,104) (P(N),N=1,NA)
DO 15 J=1,3
WRITE(61,107) J
DO 14 K=1,NA
X=0.
DO 13 L=1,NA
13 X=X+T(K,L)*B(L,J)
14 PT(K)=X
15 WRITE(61,105) (PT(N),N=1,NA)
16 CONTINUE
WRITE(61,109)
DO 19 J=1,3
DO 17 K=1,NA
17 BTE(K)=B(K,J)
NB=1
DELTA=1.E-10
CALL OBSTEST(NA,NB,AT,BTE,DELTA,T,IRANK,NECOUT,4,1)
WRITE(61,107) J
WRITE(61,100)
DO 18 K=1,NA
18 WRITE(61,101) (T(K,L),L=1,NA)
WRITE(61,102) IRANK
19 WRITE(61,103) NECOUT(1)
100 FORMAT(1H0,10X,8HT-MATRIX)
101 FORMAT(1H0,5(5X,E13.5))
102 FORMAT(1H0,7HRANK T=,I1)
103 FORMAT(1H0,6HNECOUT,5I5)
104 FORMAT(1H0,10HCOEFF A(I),4(2X,E12.4))
105 FORMAT(1H0,10HCOEFF B(I),4(2X,E12.4))
106 FORMAT(1H0,10X,25HT-MATRIX TO OBS.CAN. FORM)
107 FORMAT(1H0,16HCONTROL SIGNAL U,I1)
108 FORMAT(1H1,10X,22HOBSTEST SINGLE SYSTEMS)
109 FORMAT(1H1,10X,22HCONTEST SINGLE SYSTEMS)
99 CALL EXIT
END

```

3.9PROGRAM RECONT

```

C
C THIS PROGRAM COMPUTES THE K-VECTOR OF THE KALMAN FILTER FOR
C RECONSTRUCTION OF STATE-VARIABLES. THE LINEAR SYSTEM IS GIVEN BY
C CREMA1 (SINGLE REACTION).
C
C INPUT DATA*
C VALUE OF THE PARAMETER MAP, SEE COMMENTS TO SUBROUTINE CREMA1
C EIGENVALUES OF THE MATRIX (A-KC). ONLY REAL VALUES
C
C NEEDED SUBROUTINES
C     CREMA1
C     RECONK
C
C
C DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)
C DIMENSION WCH(3),XK(3)
C COMMON TO,TKI,TA,CAG,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
C COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA
C COMMON TS(3),CAS(3)
C DO 1 I=1,20
1  IDATA(I)=0
  READ(60,104) MAP
  DO 9 I=1,2
  NA=I+1
  WRITE(61,101) NA
  CALL CREMA1(IDATA,NOWP,3,MAP,NA,1,1,1,A,B,C,D,0)
  IF(NOWP.EQ.1) GO TO 99
  DO 8 K=1,20
  IF(NA-3) 3,4,5
3  READ(60,100) X,Y
  IF(X) 9,9,31
31 WRITE(61,102) X,Y
  WCH(1)=X+Y
  WCH(2)=X*Y
  GO TO 6
4  READ(60,100) X,Y,Z
  IF(X) 9,9,41
41 WRITE(61,102) X,Y,Z
  WCH(1)=X+Y+Z
  WCH(2)=X*(Y+Z)+Y*Z
  WCH(3)=X*Y*Z
  GO TO 6
5  CONTINUE
6  CONTINUE
  CALL RECONK(NA,A,C,WCH,XK,ISING,3)
  WRITE(61,103) (XK(L),L=1,NA)
  IF(K.EQ.10.AND.NA.EQ.3) WRITE(61,101) NA
8  CONTINUE
9  CONTINUE
100 FORMAT(4E10.3)
101 FORMAT(1H1,25X,12HSYSTEM ORDER,12)
102 FORMAT(/5X,21HEIGENVALUES OF (A-KC),4(4H  --E10.3,2X))
103 FORMAT(/5X,8HK-VECTOR,4(2X,E12.4,1H,))
104 FORMAT(11)
99  CALL EXIT
  END

```

*** EOF

3.10PROGRAM RECANT2

THIS PROGRAM COMPUTES THE K-VECTOR OF THE KALMAN FILTER FOR RECONSTRUCTION OF STATE-VARIABLES. THE LINEAR SYSTEM IS GIVEN BY CREMA2 (ONLY CONSECUTIVE REACTIONS)

INPUT DATA*

VALUE OF THE PARAMETER MAP, SEE COMMENTS TO SUBROUTINE CREMA2
EIGENVALUES OF THE MATRIX (A-KC). ONLY REAL VALUES

NEEDED SUBROUTINES

CREMA2

RECONK

DIMENSION A(4,4),B(4,4),C(4,4),D(4,4),IDATA(23)

DIMENSION WCH(4),XK(4)

COMMON TO,TKI,TA,CA0,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC

COMMON DHM1,DHM2,E1,E2,R,RC1,RC2,HR,HA,AR,AA

COMMON TS(5),CAS(5),CBS(5)

DO 1 I=1,23

1 IDATA(I)=0

READ(60,104) MAP

DO 9 I=1,2

NA=I+2

WRITE(61,101) NA

ITYPE=1

CALL CREMA2(ITYPE,IDATA,NOWP,3,MAP,NA,3,1,1,A,B,C,D,0)

IF(NOWP.EQ.1) GO TO 99

DO 8 K=1,20

IF(NA-3) 3,4,5

3 CONTINUE

4 READ(60,100) X,Y,Z

IF(X) 9,9,41

41 WRITE(61,102) X,Y,Z

WCH(1)=X+Y+Z

WCH(2)=X*(Y+Z)+Y*Z

WCH(3)=X*Y*Z

GO TO 6

5 READ(60,100) X,Y,Z,Q

IF(X) 9,9,51

51 WRITE(61,102) X,Y,Z,Q

WCH(1)=X+Y+Z+Q

WCH(2)=X*(Y+Z+Q)+Y*(Z+Q)+Z*Q

WCH(3)=X*(Y*(Z+Q)+Z*Q)+Y*Z*Q

WCH(4)=X*Y*Z*Q

6 CONTINUE

CALL RECONK(NA,A,C,WCH,XK,ISING,4)

WRITE(61,103) (XK(L),L=1,NA)

IF(K.EQ.10) WRITE(61,101) NA

8 CONTINUE

9 CONTINUE

100 FORMAT(4E10.3)

101 FORMAT(1H1,25X,12HSYSTEM ORDER,I2)

102 FORMAT(//5X,21HEIGENVALUES OF (A-KC),4(4H -,E10.3,2X))

103 FORMAT(/5X,8HK-VECTOR,4(2X,E12.4,1H,))

104 FORMAT(I1)

99 CALL EXIT

END

3.11PROGRAM RECHRE

```

C
C THIS PROGRAM COMPUTES THE L-VECTOR IN THE FORMULA FOR STATE-VARIABLE
C FEED-BACK CONTROL ..  $U = U-REF - L*x$ .
C THE LINEAR SYSTEM IS GIVEN BY CREMA1 (SINGLE REACTION).
C
C INPUT DATA*
C VALUE OF THE PARAMETER MAP,SEE COMMENTS TO SUBROUTINE CREMA1
C WANTED POLES FOR THE CLOSED-LOOP SYTEM. ONLY REAL POLES.
C
C NEEDED SUBROUTINES
C     CREMA1
C     RECONK
C
C DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3),D(3,3),IDATA(20)
C DIMENSION AT(3,3),BT(3),WCH(3),XK(3)
C COMMON TO,TKI,TA,CAO,RAA,RAAC,CP,CPC,V,VC,G,GC
C COMMON DHM,EACT,R,RC,HR,HA,AR,AA
C COMMON TS(3),CAS(3)
C DO 1 I=1,20
1 IDATA(I)=0
  READ(60,104) MAP
  DO 9 I=1,2
    NA=I+1
    WRITE(61,101) NA
    CALL CREMA1(IDATA,NOWP,3,MAP,NA,3,1,1,A,B,C,D,0)
    IF(NOWP.EQ.1) GO TO 99
    DO 2 J=1,NA
      DO 2 K=1,NA
2 AT(J,K)=A(K,J)
      DO 8 K=1,20
        IF(NA-3) 3,4,5
3 READ(60,100) X,Y
        IF(X) 9,9,31
31 WRITE(61,102) X,Y
        WCH(1)=X+Y
        WCH(2)=X*Y
        GO TO 6
4 READ(60,100) X,Y,Z
        IF(X) 9,9,41
41 WRITE(61,102) X,Y,Z
        WCH(1)=X+Y+Z
        WCH(2)=X*(Y+Z)+Y*Z
        WCH(3)=X*Y*Z
        GO TO 6
5 CONTINUE
6 DO 8 J=1,3
  DO 7 L=1,NA
7 BT(L)=B(L,J)
  CALL RECONK(NA,AT,BT,WCH,XK,ISING,3)
  WRITE(61,103) J,(XK(L),L=1,NA)
  IF((K.EQ.5.OR.K.EQ.10).AND.J.EQ.3) WRITE(61,101) NA
8 CONTINUE
9 CONTINUE
100 FORMAT(E10,3)
101 FORMAT(1H1,25X,12HSYSTEM ORDER,I2)
102 FORMAT(///28H POLES OF CLOSED-LOOP SYSTEM,4(4H -E10,3,2X))
103 FORMAT(/10H U-REF = U,11,5X,8HL-VECTOR,4(2X,E12,4,1H,))
104 FORMAT(I1)
99 CALL EXIT
END

```

*** EOF

