

# 預先混合與非預先混合對 CSTR 動態與控制行為影響之研究

錢玉樹、唐兆璋、趙翊涵  
 國立勤益技術學院  
 材料與化學工程研究所  
 yschien@chinyi.ncit.edu.tw  
 s49214008@student.ncit.edu.tw  
 s49314001@student.ncit.edu.tw

## 摘要

本文探討連續攪拌反應槽進行自身催化反應時，預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料對多重穩態、動態分析與控制之影響做一深入分析。我們發現在上述不同進料情況、混合對於產生多重穩態之必要與充分條件也有不同程度影響，也從理論分析得知預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料系統皆不會產生振蕩，文中也推導出以模式控制之控制架構時，避免系統非穩態之控制器設計，控制器參數調整也分別受到預先混合與未預先混合之混合效應影響。上述結果可作為產業界反應器設計與控制之參考。

## 1.前言

本文以化工製程中混合效應對一般化工產業常使用之連續攪拌槽之化學反應器探討更安全的化學反應製程分析，就作者所知，目前學者對這方面研究非常少[1-7]，若能深入分析將可提供產業界反應槽安全操作使用與規範。本計畫以恒溫自身催化之連續攪拌槽之化學反應器為系統，探討預先混合與非預先混合對反應器動態分析與控制行為之影響。

## 2.研究方法與內容

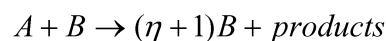
### 2.1 預先混合與非預先混合之混合模式

本文使用 Chien and Liou [7] 所發表之預先混合與非預先混合之混合模式，其詳細之模式圖形分別如圖一與圖二( $n_a q_a + n_b q_b = nq$ )，圖一裡的參數  $m$  代表真實反應區域比例，在此區域中反應才會發生， $m=1$  代表系統完全混合，系統無死區間(dead space)。參數  $n$  代表真實進入反應槽之流量比例， $n=1$  代表系統無溝渠(channeling or short circuit flow)現象。圖一裡的參數  $n_a$  與  $n_b$  代表系統進料中反應物 A 與

B 分別有溝渠(channeling or short circuit flow)現象。

### 2.2 反應系統與數學模式

針對上述系統，考慮如下之恒溫自身催化反應



$$\text{反應速率 } \gamma_A = -kC_a^p C_b^r$$

系統方程式之導衍

### 2.3 穩態分析

#### 2.3-1 預先混合

由圖一得到相關穩態質量平衡方程式

$$nqC_{a0} - nqC'_a - mVkc'_a{}^p c'_b{}^r = 0,$$

$$nqC_{b0} - nqC'_b + \eta mVkc'_a{}^p c'_b{}^r = 0$$

$$nqC_{a0} + (1-n)qC'_a = qC'_a,$$

$$nqC_{b0} + (1-n)qC'_b = qC'_b$$

經過數學整理得到穩態系統方程式

$$\frac{Y}{\theta} = (1-Y)^p (\bar{R} + Y)^r$$

其中

$$\begin{aligned} Y &= (nqc_{a0} - nqc'_a) / nqc_{a0}, \\ \bar{\theta} &= (m/n)\theta, \\ \theta &= (kV/q)\eta^r (c_{b0}/c_{a0})^{p+r-1}, \\ \bar{R} &= R, \quad R = q_b c_{b0} / \eta qc_{a0} \end{aligned}$$

### 2.3-2 非預先混合

由圖二得到穩態質量平衡方程式

$$\begin{aligned} n_a q_a C_{a0} - nqC'_a - mVkC_a^p C_b^{r'} &= 0 \\ n_b q_b C_{b0} - nqC'_b + \eta mVkC_a^p C_b^{r'} &= 0 \\ n_a q_a C_{a0} + (1-n)qC'_a &= qC'_a, \\ n_a q_a C_{b0} + (1-n)qC'_b &= qC'_b \\ \text{與 } n_a q_a + n_b q_b &= nq \end{aligned}$$

經過一些整理得到穩態系統方程式

$$\frac{Y}{\bar{\theta}} = (1-Y)^p (\bar{R} + Y)^r$$

其中

$$\begin{aligned} Y &= (n_a q_c c_{a0} - nq c'_a) / nq c_{a0}, \\ \bar{\theta} &= (m/n)(n_a/n)^{p+r-1} \theta, \\ \theta &= (kV/q)\eta^r (q_a c_{b0} / q c_{a0})^{p+r-1} \\ \bar{R} &= (n_b/n_a)R, \quad R = q_b c_{b0} / \eta q c_{a0} \end{aligned}$$

使用文獻常用之切線分析法[8-10]，可得到如下

產生多重穩態之必要與充分條件

結果(一)：

- (1) 產生多重穩態之必要條件

$$\begin{aligned} r > \bar{R}p, \quad p+r-1-\bar{R} > 0, \\ -\bar{R}(p-1)+r-1 > 0 \\ [1+\bar{R}(p-1)-r]^2 - 4(p+r-1)\bar{R} > 0 \end{aligned}$$

- (2) 產生多重穩態之充分條件

$$\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2 = Y_{\pm} / \{(1-Y_{\pm})^p (\bar{R} + Y_{\pm})^r\}$$

其中

$$\begin{aligned} Y_{\pm} &= \frac{-[1+\bar{R}(p-1)-r]}{2(p+r-1)} \\ &\pm \frac{\{[1+\bar{R}(p-1)-r]^2 - 4(p+r-1)\bar{R}\}^{0.5}}{2(p+r-1)} \end{aligned}$$

結論(一)：

雖然預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料之數學式相同，但因 $\bar{R}$ 與 $\bar{\theta}$ 定義不同，即使多重穩態之必要與充分條件數學式相同，多重穩態之區域範圍也就不同。

### 2.4 動態分析

#### 2.4-1 預先混合

$$\frac{dC'_a}{d\tau} = (1/(m/n))(1-C'_a) - \eta^{-r} C_a^p C_b^{r'} \theta$$

$$\frac{dC'_b}{d\tau} = (1/(m/n))(R\eta - C'_a) + \eta^{1-r} C_a^p C_b^{r'} \theta$$

其中

$$\begin{aligned} C'_b &= c'_b / c_{a0}, \quad C'_a = c'_a / c_{a0}, \\ \bar{\tau} &= t / \tau = t / (V/q) \\ R &= c_{b0} / c_{a0}, \\ \theta &= (kV/q)\eta^r (c_{b0}/c_{a0})^{p+r-1} \end{aligned}$$

將動態系統方程式在穩態點( $c'_{as}$ ,  $c'_{bs}$ )線性化得到

$$\frac{d\underline{X}}{d\tau} = \underline{A}\underline{X} \quad \underline{X}(0) = \begin{bmatrix} C'_{a0} \\ C'_{b0} \end{bmatrix}$$

其中

$$\underline{X} = \begin{bmatrix} C'_a \\ C'_b \end{bmatrix}, \quad \underline{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},$$

$$C'_a = (c'_a - c'_{as}) / c_{as}, \quad C'_b = (c'_b - c'_{bs}) / c_{bs}$$

與

$$C'_a = (c'_{a0} - c'_{as}) / c_{as}, \quad C'_b = (c'_{b0} - c'_{bs}) / c_{bs}$$

$$a_{11} = -1/[(m/n)] - p\eta^{-r} C_{as}^{p-1} C_{bs}^{r'} \theta,$$

$$a_{12} = -r\eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$a_{21} = p\eta^{1-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta = \{1/[(m/n)] - a_{11}\} \eta$$

$$a_{22} = -1/[(m/n)] + r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$= -1/[(m/n)] - a_{12} \eta$$

區域穩定是由 Jacobian matrix 之特徵值決定。而特徵值  $\lambda_1, \lambda_2$  可以由特徵方程式求得。

$$\lambda^2 - (tr \underline{A}) \lambda + \det \underline{A} = 0$$

$$\det \underline{A} = a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12} =$$

$$1/[(m/n)]^2 + p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

$$- r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

$$tr \underline{A} = a_{11} + a_{22} =$$

$$-2/[(m/n)] - p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$+ r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$= -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

$\lambda_1, \lambda_2$  值可以由下面式子求

$$\lambda_1 = \frac{(tr \underline{A}) - \sqrt{\{[tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}\}}}{2},$$

$$\lambda_2 = \frac{(tr \underline{A}) + \sqrt{\{[tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}\}}}{2}$$

由於

$$(\lambda_2 - \lambda_1)^2 = [tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}$$

$$= \{-1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}\}^2 > 0$$

即  $\lambda_1, \lambda_2$  值無虛根。

另一方面,  $tr \underline{A} = 0, \det \underline{A} > 0$  不存在, 也可以知道系統無週期解(periodical solutions)。

再進一步分析得下表

	$tr \underline{A} < 0$	$tr \underline{A} = 0$	$tr \underline{A} > 0$
$\det \underline{A} < 0$	$\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$	$\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$	$\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$
$\det \underline{A} = 0$	$\lambda_1 < 0, \lambda_2 = 0$	$\lambda_1, \lambda_2$ 不存在	$\lambda_1, \lambda_2$ 不存在
$\det \underline{A}$	$\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$	$\lambda_1, \lambda_2$	$\lambda_1, \lambda_2$

$> 0$	$\lambda_2 < 0$	不存在	不存在
-------	-----------------	-----	-----

由上表可知  $\det \underline{A} < 0$  時 不論  $tr \underline{A}$  值為何,  $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$  皆存在。只有在  $\det \underline{A} > 0$  與  $tr \underline{A} < 0$  皆滿足時, 系統才穩定 ( $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ )。所以系統穩定之策略為系統控制在  $\det \underline{A} > 0$  與  $tr \underline{A} < 0$ , 即可以讓系統穩定。

又由下式可知

$$tr \underline{A} = -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

$$\det \underline{A} > 0 \text{ 時皆滿足 } tr \underline{A} < 0$$

所以  $tr \underline{A} = 0$  時  $\det \underline{A} = -1/[(m/n)]^2$  為邊界點,

$-1/[(m/n)]^2 \leq \det \underline{A} \leq \infty$  皆滿足  $tr \underline{A} < 0$ , 但在  $-1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A}$ , 無法滿足  $tr \underline{A} < 0$

結果(二):

(1) 只要  $\det \underline{A} > 0$  時皆滿足  $tr \underline{A} < 0$ ,

$\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ , 系統穩定

(2) 在  $-1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A}$ ,

$\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$ , 系統不穩定

注意:

$$-1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A}$$

$$= 1/[(m/n)]^2 + p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

$$- r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

即當

$$r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

$$\geq 2/[(m/n)]^2 + p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

時, 系統不穩定

#### 2.4-2 非預先混合

$$\frac{dC'_a}{d\tau} = (1/(m/n)) \left( \frac{q_a}{q} \frac{n_a}{n} - C'_a \right)$$

$$- \eta^{-r} C'_a{}^p C'_b{}^{r-1} \left( \frac{q}{q_a} \right)^{p+r-1} \theta$$

$$\frac{dC'_b}{d\tau} = (1/(m/n))(R\eta \frac{q_a}{q} \frac{n_b}{n} - C'_b) \\ + \eta^{1-r} C'_a{}^p C'_b{}^r \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} \theta$$

其中

$$R = q_b c_{b0} / \eta q c_{a0},$$

$$\theta = (kV/q)\eta^r (q_a c_{b0} / q c_{a0})^{p+r-1}$$

數學型式相同，所以雖然分析情形相同，

但因  $\bar{R}$  與  $\bar{\theta}$  定義不同，結果也就不同。

將動態系統方程式在穩態點 ( $c'_{as}$ ,  $c'_{bs}$ ) 線性化得到

$$\frac{d\underline{X}}{d\tau} = \underline{A}\underline{X} \quad \underline{X}(0) = \begin{bmatrix} C'_{a0} \\ C'_{b0} \end{bmatrix}$$

$$\underline{X} = \begin{bmatrix} C'_a \\ C'_b \end{bmatrix} \quad \underline{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},$$

其中

$$C'_a = (c'_a - c'_{as}) / c_{as}, C'_b = (c'_b - c'_{bs}) / c_{bs}$$

與

$$C'_a = (c'_{a0} - c'_{as}) / c_{as}, C'_b = (c'_{b0} - c'_{bs}) / c_{bs}$$

$$a_{11} = -1/[(m/n)] - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} p\eta^{-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta,$$

$$a_{12} = -\left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} r\eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$a_{21} = p\eta^{1-r} \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1}$$

$$C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta = -\{1/[(m/n)] - a_{11}\}\eta$$

$$a_{22} = -1/[(m/n)] + r \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} \eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta \\ = -a_{12}\eta - 1/[(m/n)]$$

區域穩定是由 Jacobian matrix 之特徵值決定。

而特徵值  $\lambda_1, \lambda_2$  可以由特徵方程式求得。

$$\lambda^2 - (tr \underline{A})\lambda + \det \underline{A} = 0$$

$$\det \underline{A} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} =$$

$$1/[(m/n)]^2 + \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta / [(m/n)]$$

$$- \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

$$tr \underline{A} = a_{11} + a_{22} =$$

$$-2/[(m/n)] - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta$$

$$+ \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta$$

$$= -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

$\lambda_1, \lambda_2$  值可以由下面式子求

$$\lambda_1 = \frac{(tr \underline{A}) - \sqrt{\{[tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}\}}}{2},$$

$$\lambda_2 = \frac{(tr \underline{A}) + \sqrt{\{[tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}\}}}{2}$$

$$(\lambda_2 - \lambda_1)^2 = [tr \underline{A}]^2 - 4 \det \underline{A}$$

$$= \{-1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}\}^2 > 0$$

即  $\lambda_1, \lambda_2$  值無虛根。

另一方面， $tr \underline{A} = 0, \det \underline{A} > 0$  也可以知道系統無週期解。與非預先混合情況所分析的結果相類似，可知  $\det \underline{A} < 0$  時不論  $tr \underline{A}$  值為何， $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$  皆存在。只有在  $\det \underline{A} > 0$  與  $tr \underline{A} < 0$  皆滿足時，系統才穩定 ( $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ )。

所以系統穩定之策略為系統控制在

$\det \underline{A} > 0$  與  $tr \underline{A} < 0$ ，即可以讓系統穩定。

又由下式可知

$$tr \underline{A} = -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

$$\det \underline{A} > 0 \text{ 時皆滿足 } tr \underline{A} < 0$$

所以  $tr \underline{A} = 0$  時

$$\det \underline{A} = -1/[(m/n)]^2 \text{ 為邊界點，}$$

$$-1/[(m/n)]^2 \leq \det \underline{A} \leq \infty \text{ 皆滿足}$$

$tr \underline{A} < 0$ ，但在  $-1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A}$ ，無法滿

足  $\text{tr } \underline{A} < 0$

結果(三)：

(1) 只要  $\det \underline{A} > 0$  時皆滿足  $\text{tr } \underline{A} < 0$ ，

$\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ ，系統穩定

(2) 在  $-1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A}$ ，

$\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$ ，系統不穩定

注意：

$$\begin{aligned} & -1/[(m/n)]^2 \geq \det \underline{A} \\ & = 1/[(m/n)]^2 \\ & + \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta / [(m/n)] \\ & - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{p+r-1} r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)] \end{aligned}$$

$$r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

即當  $\geq 2/[(m/n)]^2 \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)}$  時，

$$+ p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta / [(m/n)]$$

系統不穩定

結論 (二)

(1) 非預先混合無控制時系統不穩定之條件

$$\begin{aligned} & r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)] \\ & \geq 2/[(m/n)]^2 \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} \\ & + p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta / [(m/n)] \end{aligned}$$

(2) 預先混合無控制時系統不穩定之條件

$$\begin{aligned} & r\eta^{1-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta / [(m/n)] \\ & \geq 2/[(m/n)]^2 \\ & + p\eta^r C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta / [(m/n)] \end{aligned}$$

### 3. 控制行為之探討

爲了達成去偶合 PID 控制，避免偶合作用，考慮使用文獻(Ray, 1981)之模式控制(modal control)可達成上述之去偶合結果。其控制系統如下

#### 3.1 預先混合

已知系統方程式爲

$$\dot{\underline{X}} = \underline{A}\underline{X} + \underline{B}\underline{U}$$

$$\underline{Y} = \underline{C}\underline{X}$$

假設輸出爲比例控制，

$$\underline{U}(t) = -\underline{G}_c \underline{Y} = -\underline{G}_c \underline{C}\underline{X}$$

引入特徵根與特徵向量的觀念，設對角向量

$$\underline{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

$\lambda_1$  與  $\lambda_2$  可由  $|\underline{A} - \lambda \underline{I}| = 0$  求得

滿足  $\underline{R}\underline{\Lambda} = \underline{A}\underline{\Lambda}$  與  $\underline{\Lambda}\underline{L} = \underline{L}\underline{A}$ ， $\underline{R}$  與  $\underline{L}$  分別爲右特徵向量與左特徵向量所組合之矩陣。

$\underline{R} = [\underline{r}_1 \quad \underline{r}_2]$  與  $\underline{L} = [\underline{l}_1 \quad \underline{l}_2]$ 。同時滿足

$$\underline{R}\underline{L} = \underline{I} = \underline{L}\underline{R} \quad , \quad \underline{\Lambda} = \underline{L}\underline{A}\underline{R} \quad \text{與} \quad \underline{R}\underline{\Lambda}\underline{L} = \underline{A} \quad .$$

將上述結果代入得

$$\begin{aligned} \dot{\underline{X}} & = (\underline{R}\underline{\Lambda}\underline{L} - \underline{B}\underline{G}_c\underline{C})\underline{X} \\ & = (\underline{R}\underline{\Lambda}\underline{L} - \underline{B}\underline{B}^{-1}\underline{R}\underline{K})\underline{X} \\ & = (\underline{R}(\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{L})\underline{X} \\ & = (\underline{A} - \underline{R}\underline{K}\underline{L})\underline{X} \end{aligned}$$

令  $\underline{G}_c = \underline{B}^{-1}\underline{R}\underline{K}$ ，其中  $\underline{K} = \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix}$ ，並

使  $\underline{C} = \underline{L}$  代入得

$$\begin{aligned}\dot{\underline{X}} &= (\underline{R}\underline{\Lambda}\underline{L} - \underline{B}\underline{G}_C\underline{C})\underline{X} \\ &= (\underline{R}\underline{\Lambda}\underline{L} - \underline{B}\underline{B}^{-1}\underline{R}\underline{K})\underline{X} \\ &= (\underline{R}(\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{L})\underline{X} \\ &= (\underline{A} - \underline{R}\underline{K}\underline{L})\underline{X}\end{aligned}$$

因

$$\dot{\underline{Y}} = \underline{C}\dot{\underline{X}} = \underline{L}\dot{\underline{X}} = \underline{L}(\underline{R}(\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{L})\underline{X} = (\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{Y}$$

所以  $y_i = \alpha_i e^{(\lambda_i - k_i)t}$  與

$$x_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i r_i e^{(\lambda_i - k_i)t}, \quad i=1, 2$$

由上述分析之結果，我們系統

$$\text{tr } \underline{A} = -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

與

$$\det \underline{A} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} =$$

$$1/[(m/n)]^2$$

$$+ p\eta^r C_a^{r-p-1} C_b^{r-p} \theta / [(m/n)]$$

$$- r\eta^{1-r} C_a^{r-p} C_b^{r-p-1} \theta / [(m/n)]$$

代入  $\lambda_1, \lambda_2$  公式得到  $\lambda_1 =$

$$-1/[(m/n)], \lambda_2 = \text{tr } \underline{A} + 1/[(m/n)] =$$

$$a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)]$$

右特徵向量(right eigenvector)可由  $\underline{A}\underline{r} = \lambda\underline{r}$  分別求得為

$$\text{當 } \lambda_1 = -1/[(m/n)],$$

$$\underline{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \end{bmatrix},$$

當

$$\lambda_2 = a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)] = a_{11} - a_{12}\eta,$$

$$\underline{r}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -\eta \end{bmatrix}$$

所以

$$\begin{bmatrix} \underline{r}_1 & \underline{r}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \\ -\eta & -\eta \end{bmatrix},$$

經正規化得

$$\underline{R} = \frac{1}{-\eta + \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}} \begin{bmatrix} \underline{r}_1 & \underline{r}_2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{T} \begin{bmatrix} -\frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \\ -\eta & -\eta \end{bmatrix}$$

其中  $T = -\eta + \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}$ , 所以

$$\underline{R}^{-1} = \frac{1}{\det \underline{R}} \begin{bmatrix} -\eta/T & -1/T \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}/T & 1/T \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{1/T} \begin{bmatrix} -\eta/T & -1/T \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}/T & 1/T \end{bmatrix} = \underline{L} = \begin{bmatrix} \underline{l}_1 & \underline{l}_2 \end{bmatrix}$$

因為  $\underline{L}\underline{R} = \underline{R}\underline{L} = \underline{I}$ ，又由上述理論得知

$$\underline{C} = \underline{L}$$

$$\underline{U} = -\underline{R}\underline{K}\underline{L}\underline{X} = -\underline{G}_C\underline{Y} = -\underline{G}_C\underline{L}\underline{X}$$

$$= -\frac{1}{T} \begin{bmatrix} -\frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \\ -\eta & -\eta \end{bmatrix}$$

$$\cdot \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\eta & -1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \end{bmatrix} \underline{X}$$

$$= -\frac{1}{T} \frac{\begin{bmatrix} -k_1\eta + k_2 \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \\ (k_1 - k_2)\eta \{a_{11} + 1/[(m/n)]\} \end{bmatrix}}{a_{12}}$$

$$\begin{bmatrix} -k_1 + k_2 \\ k_1 \{a_{11} + 1/[(m/n)]\} - \eta k_2 \end{bmatrix} \frac{\underline{X}}{a_{12}}$$

$$\dot{\underline{X}} = (\underline{A} - \underline{R}\underline{K}\underline{L})\underline{X}$$

$$= -\frac{1}{T} \begin{bmatrix} a_{11}a_{11}T - k_1\eta + k_2 \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \\ a_{21}T - \frac{(k_1 - k_2)\eta \{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \\ a_{12}T - k_1 + k_2 \\ a_{22}T - k_1 \{a_{11} + 1/[(m/n)]\} - \eta k_2 \end{bmatrix} \underline{X}$$

可以求出  $x_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i r_i e^{(\lambda_i - k_i)t}$  所以，

$$\underline{Y} = \underline{C}\underline{X} = \underline{L}\underline{X} = \begin{bmatrix} -\eta & -1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \end{bmatrix} \underline{X}$$

$$\dot{\underline{Y}} = \underline{C}\dot{\underline{X}} = \underline{L}\dot{\underline{X}} = \underline{L}(\underline{R}(\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{L})\underline{X} = (\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{Y}$$

，即  $y_i = \alpha_i e^{(\lambda_i - k_i)t}$ ，其中  $\alpha_i$  與初值條件有

$$\text{關。所以 } y_1 = \alpha_1 e^{(\lambda_1 - k_1)t} = \alpha_1 e^{\left(\frac{1}{(m/n)} - k_1\right)t}$$

$$y_2 = \alpha_2 e^{(\lambda_2 - k_2)t} = \alpha_2 e^{(a_{11} - a_{12}\eta - k_2)t}$$

由於  $-1/[(m/n)] - k_1 < 0$  永遠成立，而

$$a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)] - k_2 = a_{11} - a_{12}\eta - k_2 < 0$$

$$\text{結果(四): } a_{11} - a_{12}\eta - k_2 = -\frac{m}{n} \det \underline{A} - k_2$$

$$= -1/[(m/n)] - p\eta^{-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta$$

$$+ r\eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta \eta - k_2 < 0$$

之條件為滿足

$$k_2 > r\eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \theta \eta -$$

$$1/[(m/n)\theta] - p\eta^{-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta \text{ 系統才會穩定。}$$

### 3.2 非預先混合

非預先混合與上述分析之結果相同，我們系統為

$$\text{tr } \underline{A} = -1/[(m/n)] - (m/n) \det \underline{A}$$

與

$$\det \underline{A} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} =$$

$$1/[(m/n)]^2$$

$$+ \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} p\eta^r C'_a{}^{p-1} C'_b{}^r \theta / [(m/n)]$$

$$- \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} r\eta^{1-r} C'_a{}^p C'_b{}^{r-1} \theta / [(m/n)]$$

代入  $\lambda_1, \lambda_2$  公式得到  $\lambda_1 =$

$$-1/[(m/n)], \lambda_2 = \text{tr } \underline{A} + 1/[(m/n)] =$$

$$a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)]$$

右特徵向量(right eigenvector)可由  $\underline{A}\underline{r} = \lambda\underline{r}$  分別求得為

$$\text{當 } \lambda_1 = -1/[(m/n)] \text{ ,}$$

$$\underline{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \end{bmatrix} \text{ ,}$$

當

$$\lambda_2 = a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)] = a_{11} - a_{12}\eta \text{ ,}$$

$$\underline{r}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -\eta \end{bmatrix}$$

所以

$$\begin{bmatrix} \underline{r}_1 & \underline{r}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & -\eta \end{bmatrix} \text{ ,}$$

經正規化得

$$\underline{R} = \frac{1}{-\eta + \frac{1}{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}} \begin{bmatrix} r_1 & r_2 \\ \frac{1}{a_{12}} & -\eta \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{T} \begin{bmatrix} \frac{1}{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}} & 1 \\ -\frac{1}{a_{12}} & -\eta \end{bmatrix}$$

其中  $T = -\eta + \frac{1}{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}$ , 所以

$$\underline{R}^{-1} = \frac{1}{\det \underline{R}} \begin{bmatrix} -\eta/T & -1/T \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}/T & 1/T \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{1/T} \begin{bmatrix} -\eta/T & -1/T \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}}/T & 1/T \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -\eta & -1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \end{bmatrix} = \underline{L} = \begin{bmatrix} l_1 & l_2 \end{bmatrix}$$

因為  $\underline{LR} = \underline{RL} = \underline{I}$ , 又由上述理論得知

$$\underline{C} = \underline{L}$$

$$\underline{U} = -\underline{RKLX} = -\underline{G}_c \underline{Y} = -\underline{G}_c \underline{LX}$$

$$= -\frac{1}{T} \begin{bmatrix} -\{a_{11} + 1/[(m/n)]\} & 1 \\ \frac{1}{a_{12}} & -\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -\eta & -1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \end{bmatrix} \underline{X}$$

$$= \frac{1}{T} \begin{bmatrix} -k_1\eta + k_2 \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & -k_1 + k_2 \\ \frac{(k_1 - k_2)\eta \{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & \frac{k_1 \{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} - \eta k_2 \end{bmatrix} \underline{X}$$

$$\dot{\underline{X}} = (\underline{A} - \underline{RKL}) \underline{X}$$

$$= \frac{1}{T} \begin{bmatrix} a_{11}T - k_1\eta + k_2 \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \\ a_{21}T - \frac{(k_1 - k_2)\eta \{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} \\ a_{12}T - k_1 + k_2 \\ \frac{a_{22}T - k_1 \{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} - \eta k_2 \end{bmatrix} \underline{X}$$

可以求出  $x_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i r_i e^{(\lambda_i - k_i)t}$  所以,

$$\underline{Y} = \underline{CX} = \underline{LX} = \begin{bmatrix} -\eta & -1 \\ \frac{\{a_{11} + 1/[(m/n)]\}}{a_{12}} & 1 \end{bmatrix} \underline{X}$$

$$\dot{\underline{Y}} = \underline{C} \dot{\underline{X}} = \underline{L} \dot{\underline{X}} = \underline{L}(\underline{R}(\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{L})\underline{X} = (\underline{\Lambda} - \underline{K})\underline{Y}$$

, 即  $y_i = \alpha_i e^{(\lambda_i - k_i)t}$ , 其中  $\alpha_i$  與初值條件有

$$\text{關。所以 } y_1 = \alpha_1 e^{(\lambda_1 - k_1)t} = \alpha_1 e^{(-\frac{1}{(m/n)} - k_1)t},$$

$$y_2 = \alpha_2 e^{(\lambda_2 - k_2)t} = \alpha_2 e^{(a_{11} - a_{12}\eta - k_2)t}$$

由於  $-1/[(m/n)] - k_1 < 0$  永遠成立, 而

$$a_{11} + a_{22} + 1/[(m/n)] - k_2 = a_{11} - a_{12}\eta - k_2 < 0, \text{ 系統才會穩定。}$$

結果(五):

$$a_{11} - a_{12}\eta - k_2 = -\frac{m}{n} \det \underline{A} - k_2 =$$

$$-1/[(m/n)] - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} p \eta^{-r} C_{as}^{p-1} C_{bs}^r \theta$$

$$+ \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} r \eta^{-r} C_{as}^p C_{bs}^{r-1} \theta \eta - k_2 < 0$$

之條件為滿足

$$k_2 > \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} r \eta^{-r} C_{as}^p C_{bs}^{r-1} \theta \eta -$$

$$1/[(m/n)\theta] - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} p \eta^{-r} C_{as}^{p-1} C_{bs}^r \theta$$



系統才會穩定。

結論(三)

(1)非預先混合模式控制(Modal control)之穩定條件

$$k_2 > \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} r \eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \eta \theta -$$

$$1/[(m/n)\theta] - \left(\frac{q}{q_a}\right)^{-(p+r-1)} p \eta^{-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta$$

(2)預先混合模式控制(Modal control)之穩定條件

$$k_2 > r \eta^{-r} C'_{as}{}^p C'_{bs}{}^{r-1} \eta \theta -$$

$$1/[(m/n)\theta] - p \eta^{-r} C'_{as}{}^{p-1} C'_{bs}{}^r \theta$$

#### 4.結果與展望

本文已推導出連續攪拌反應槽進行自身催化反應時，預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料之混合效應對多重穩態、動態分析與控制之影響做一深入分析。其結果總結如下：

- (1)預先混合與未預先混合對於發生多重穩態之必要與充分條件有不同程度影響，
- (2)也從理論分析得知預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料系統皆不會產生振蕩。
- (3)推導出以模式控制之控制架構時，避免系統非穩態之控制器設計，控制器參數調整也分別受到預先混合與未預先混合之混合效應影響。

未來將針對預先混合之單一進料與未預先混合之雙進料之混合效應對轉化率與選擇性影響做一深入之研究，進一步找出高轉化率與選擇性之設計操作，配合本文之分析結果，可作為產業界反應器設計與控制之參考。

#### 5.符號說明

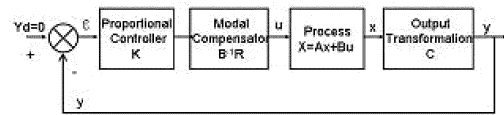
$C_a, C_b$	反應器中 A 與 B 成分濃度
$C'_a, C'_b$	反應器完全混合區中 A 與 B 成分濃度
$k$	反應速率常數
$k_1, k_2$	反應器中 A 與 B 成分控制器參數
$m$	反應器中完全混合體積與總體積之比

$n$	實際進入反應器流量與總流量之比
$n_a, n_b$	實際分別進入反應器 A 與 B 成分流量與總流量之比
$q$	總流量
$q_a, q_b$	分別進入反應器 A 與 B 成分流量
$p$	反應物 A 成分反應階數
$r$	反應物 B 成分反應階數
$V$	反應器總體積
$\eta$	反應計量係數

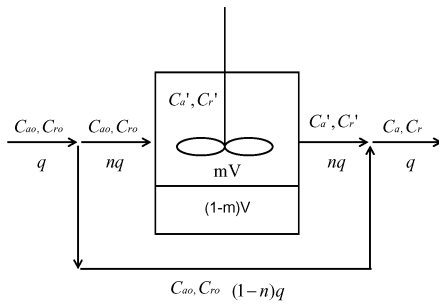
#### 6.參考文獻

- [1] Lo, S. N. and A. Cholette, "Multiplicity of conversion in a cascade of imperfectly tank reactor", *Chem. Eng. Sci.* Vol.38, No.8, pp.367-371, 1983.
- [2] C. T. Liou and Yu-Shu Chien, "Steady-state multiplicity caused by nonideal mixing in two isothermal CSTR's", *AIChE Journal*, Vol.36, No.6, pp.951-954. 1990a.
- [3] C. T. Liou and Yu-Shu Chien, "Uniqueness Region for the start-up of two CSTRs in sequence with a non-ideal mixing", *Journal of the Chin. I. Ch. E.* Vol.21, No.5, pp.309-313, 1990b.
- [4] C. T. Liou and Yu-Shu Chien, "The effect of macromixing and micromixing on multiplicity in a CSTR", *Journal of the Chin. I. Ch. E.* Vol.21, No.5, pp.283-291, 1990c.
- [5] C. T. Liou and Yu-Shu Chien, "The effect of nonideal mixing on input multiplicity in a CSTR", *Chem. Eng. Sci.* Vol.46, No.8, pp.2113-2116, 1991.
- [6] C. T. Liou and Yu-Shu Chien, "The effect of micromixing of steady-state multiplicity for autocatalytical reactions in a nonideal mixing of CSTR", *Chem.Eng.Sci.* Vol.50, No.22, pp.3637-3644. 1995a.
- [7] Y. S. Chien and Ching-Tien Liou, "Steady-State multiplicity for autocatalytical reactions in a nonideal mixing of CSTR with two unpremixed feeds", *Chem.Eng.Sci.* Vol.50, No.22, pp.3645-3650. 1995b.

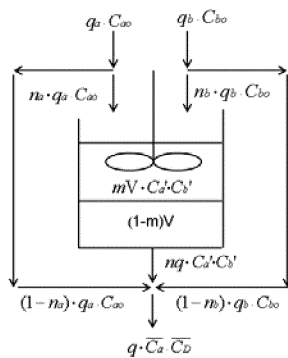
- [8] Lin, K. F. "Concentration multiplicity and stability for autocatalytic reaction in a continuous stirred tank reactor", Can. J. Chem. Eng. Vol. 57 476-480, 1979.
- [9] Lin, K. F. "Exact uniqueness and multiplicity criteria of n-th order reaction in non-adiabatic CSTR via simple tangent analysis", J. Chem. Eng. Japan. Vol. 13, 292-297, 1980.
- [10] Lin, K. F. "Multiplicity uniqueness for binary reaction in a non-adiabatic continuous stirred tank reactor", Chem. Eng. Sci. Vol. 35, 1537-1543. 1980.
- [11] Ray, W. H. "Advanced Process Control", McGraw-Hill, New York, Chapter 3, pp78-83, 1981.



圖三 模式控制



圖一 預先混合圖



圖二 非預先混合圖

