

電子計算機套用程式系列 (第二階段)

化學工程教學用程式

(第三冊)

主編者：教 育 部

編撰者：國立臺灣工業技術學院

劉 清 田 · 黃 孝 平

黃 奇 · 王 逢 盛

莊 敏 哲

正 中 書 局 印 行

電子計算機套用程式系列 (第二階段)

化學工程教學用程式

第 三 冊

主編者：教 育 部

編撰者：國立臺灣工業技術學院

劉 清 田・黃 孝 平

黃 奇・王 逢 成

莊 敏 哲

江苏工业学院图书馆

藏 书 章

日 期：中華民國七十三年

正 中 書 局 印 行

版權所有



翻印必究

中華民國七十五年十二月臺初版

電子計算機套用程式系列 (第二階段)

化學工程教學用程式

第三冊 基本定價 六元七角

(外埠酌加運費滙費)

主 編 者 教 育 部

編 撰 者 國 立 臺 灣 工 業 技 術 學 院

劉 清 田 黃 孝 平

黃 奇 王 逢 盛

莊 敏 哲

發 行 人 黃 肇 珩

發 行 印 刷 正 中 書 局

新聞局出版事業登記證 局版臺業字第〇一九九號(8367)

分類號碼：310.62 (1000) 詳

正 中 書 局

CHENG CHUNG BOOK COMPANY

地址：中華民國臺灣臺北市衡陽路二十號

Address: 20 Heng Yang Road Taipei, Taiwan, Republic of China

經理室電話：3821145 編審部電話：3821147

業務部電話：3821153 門市部電話：3822214

郵政劃撥：九九一四號

海 外 總 經 銷

OVERSEAS AGENCIES

香港總經銷：集成圖書公司

總辦事處：香港九龍油蔴地北海街七號

電話：3-886172-4

日本總經銷：海風書店

地址：東京都千代田區神田神保町一丁目五六番地

電話：291-4345

東海書店

地址：京都市左京區田中門前町九八番地

電話：791-6592

泰國總經銷：集成圖書公司

地址：泰國曼谷耀華力路233號

美國總經銷：華強圖書公司

Address: 41 Division St., New York, N.Y. 10002 U.S.A.

歐洲總經銷：安華圖書公司

Address: 14 Gerrard Street London W.L. England

加拿大總經銷：嘉華圖書公司

Address: China Court, Suite 212, 208 Spadina Avenue Toronto
Ontario CANADA M5T 2C2

序

近十年來，由於計算機工業突飛猛進，計算機的使用非常普遍。亦即，計算機已成為各行各業不可缺少的工具；利用計算機從事工程理論分析，系統模擬、設計與控制等，已是每位工程人員所應具備的知識。面對這種快速的發展，如何利用計算機來輔助教學，乃為一項重要的課題，在這種情況下為使學生在計算機之應用方面有良好的基礎，教育部乃大力推展計算機在各種工程上應用之計劃，以積極的整理與發展計算機套用軟體程式之方式，來推動大專院校各學（科）系之計算機輔助教學。

本報告係屬於化學工程教學用程式之整理報告，其內容包括了二類主題：

(一)綫性系統…編號：CH 5501—5544

(二)最適化與控制…編號：CH 5601—CH 5605

每一主題分別包含數個子題，都是一些相當基本且具有一般性之問題。每子題之程式名稱之後均附有編號。例如：CH 為化學工程學科之代號，第一個數字4表示適用於研究所課程使用，第二個數字5表示此程式屬於第一類主題：綫性系統；最後兩個數字01表示該主題適用課程之編號次序。

每一個程式之內容均包括下列七項：

- (一)前言——簡述此程式之目的。
- (二)理論分析——推導出此程式所根據之理論。
- (三)程式設計——說明程式運算過程，並附上流程圖。
- (四)數據輸入與輸出——列表說明輸入與輸出變數之定義。
- (五)例題說明——舉一至三個例題，使讀者熟習利用程式來解答問題。
- (六)參考文獻——列出此程式所根據之書籍或資料。

Hmt670/09^I

(七)附錄——附上程式之原始內容，以供讀者使用。

本報告乃先整理一部份熟習的程式，希望讀者能熟習這些程式，並能活用它們，舉一反三，進一步能自我訓練設計及寫計算機程式之能力，此乃編寫本報告之主要目的。

本計劃執行期間，編寫甚為倉促，錯誤在所難免，至盼讀者不吝指正。

劉清田

中華民國七十三年八月

化學工程教學用程式 (第二階段)

(第三冊)

目 次

序.....	I
壹、計算 e^{At} 之方法 (CH-5501)	1
一、前言.....	3
二、理論分析.....	3
三、程式設計.....	4
四、輸入與輸出變數名稱及格式.....	6
五、例題說明.....	7
六、參考文獻.....	7
七、計算機報表.....	8
貳、狀態轉移矩陣之求解 (CH-5502)	17
一、前言.....	19
二、理論分析.....	19
三、程式設計.....	21
四、輸入與輸出變數名稱及格式.....	23
五、例題說明.....	24
六、參考文獻.....	25
七、計算機報表.....	25
叁、靜態 Riccati 方程之解 (CH-5503)	31
一、前言.....	33
二、理論分析.....	33
三、程式設計.....	34

四、輸入與輸出變數名稱及格式	38
五、例題說明	39
六、參考文獻	40
七、計算機報表	40
肆、Riccati 方程式之積分求解 (CH - 5504)	47
一、前言	49
二、理論分析	49
三、程式設計	50
四、輸入與輸出變數名稱及格式	54
五、例題說明	55
六、參考文獻	55
七、計算機報表	55
伍、線性迴歸法 (CH - 5505)	63
一、前言	65
二、理論分析	65
三、程式設計	66
四、輸入與輸出變數名稱及格式	69
五、例題說明	70
六、參考文獻	70
七、計算機報表	70
陸、非線性最小平分法 (CH - 5506)	81
一、緒言	83
二、程式設計及使用說明	84
三、使用實例	87
四、計算機報表	89
柒、多項式線性變換之計算程式 (CH - 5507-5510)	117

一、多項式的線性變換 (CH- 5507)	119
二、矩陣多項式的線性變換 (CH- 5508)	125
三、多項式的雙線性變換 (CH- 5509)	131
四、矩陣多項式的雙線性變換 (CH- 5510)	139
捌、線性系統之能量與簡化模式之平方誤差計算程式 (CH- 5511—5514)	145
一、連續時間系統脈衝應答能量的計算 (CH- 5511)	147
二、連續時間系統的簡化模式之平方誤差積分值計算 (CH- 5512)	157
三、間斷時間系統脈衝應答能量的計算 (CH- 5513)	165
四、間斷時間系統的簡化模式之平方誤差和值計算 (CH-5514)	175
玖、線性系統之應答計算程式 (CH- 5515—5518)	183
一、從狀態空間模式計算連續系統的脈衝及單位階梯應答 (CH- 5515)	185
二、從有理轉移函數求逆 Laplace 變換的數值解 (CH-5516)	195
三、從 Z 轉移函數計算間斷系統的脈衝及單位階梯應答 (CH- 5517)	207
四、從狀態空間模式計算間斷時間系統的應答 (CH-5518)	215
拾、線性系統之矩陣運算程式 (CH- 5519—5521)	221
一、求 Resolvent 矩陣 $(SI_n - A)^{-1}$ (CH- 5519)	223
二、從狀態空間模式求系統轉移函數矩陣 (CH-5520)	229
三、兩個方形矩陣的 Kronecker 乘積 (CH- 5521)	235
拾壹、線性系統的 Lyapunov 方程式之計算程式 (CH- 5522—5523)	243

一、連續時間系統的 Lyapunov 方程式 (CH-5522)	245
二、間斷時間系統的 Lyapunov 方程式之解 (CH-5523)	253
拾貳、線性系統之 Markov 參數計算方程式 (CH-5524-5532)	263
一、從轉移函數計算單一輸入單一輸出連續時間系統的 Mar - kov 參數 (CH-5524)	265
二、從轉移函數矩陣計算多輸入多輸出連續時間系統的 Mar - kov 參數矩陣 (CH-5525)	271
三、從狀態空間模式計算連續時間系統的 Markov 參數線性系 統之時間慣量計算程式 (CH-5526)	279
四、從轉移函數計算單一輸入單一輸出連續時間系統的時間慣 量 (CH-5527)	285
五、從轉移函數矩陣計算多輸入多輸出連續時間系統的時間慣 量 (CH-5528)	293
六、從狀態空間模式計算連續時間系統的時間慣量 (CH-5529)	303
七、從 Z 轉移函數計算間斷時間系統的時間慣量 (CH-5530)	311
八、從 Z 轉移函數矩陣計算多輸入多輸出間斷時間系統的時間 慣量 (CH-5531)	321
九、從狀態空間計算間斷時間系統的時間慣量 (CH-5532)	331
拾叁、求 Cauer 之各種型式之連分數展開程式 (CH-5533-5540)	339
一、從轉移函數求 Cauer 第一型連分數展開程式 (CH-5533)	341
二、從狀態空間模式求 Cauer 第一型連分數展開程式 (CH- 5534)	351
三、從轉移函數求 Cauer 第二型連分數展開程式 (CH-5535	

)	361
四、從狀態空間模式求 Cauer 第二型連分數展開程式 (CH-5536)	369
五、從轉移函數求 Cauer 第三型連分數展開程式 (CH-5537)	377
六、從狀態空間模式求 Cauer 第三型連分數展開程式 (CH-5538)	387
七、從轉移函數求 Cauer 修正型連分數展開程式 (CH-5539)	399
八、從狀態空間模式求 Cauer 修正型連分數展開程式 (CH-5540)	407
拾肆、求 Stieltjes 型連分數展開程式 (CH-5541-5542)	419
一、從轉移函數求 Stieltjes 型連分數展開程式 (CH-5541)	421
二、從狀態空間模式求 Stieltjes 型連分數展開程式 (CH-5542)	429
拾伍、求 Jordan 型連分數展開程式 (CH-5543-5544)	437
一、從轉移函數求 Jordan 型連分數展開程式 (CH-5543)	439
二、從狀態空間模式求 Jordan 型連分數展開程式 (CH-5544)	447
拾陸、控制週期反應系統最佳設計 (CH-5601-5603)	457
一、前言	459
二、理論分析	459
三、程式設計	473
四、數據輸入與輸出	474
五、例題說明	475

六、參考文獻·····	477
七、計算機報表·····	477
拾柒、氣體吸收單元控制 (CH - 5604) ·····	495
一、前言·····	497
二、理論分析·····	497
三、程式設計·····	498
四、數據輸入與輸出·····	498
五、例題說明·····	499
六、參考文獻·····	500
七、計算機報表·····	500
拾捌、反應器最佳控制 (CH - 5605) ·····	513
一、前言·····	515
二、理論分析·····	515
三、程式設計·····	518
四、數據輸入與輸出·····	520
五、例題說明·····	521
六、參考文獻·····	521
七、計算機報表·····	522

CH-5501

壹、計算 e^{At} 之方法

編撰者 黃孝平

壹 ■ 計算 e^{At} 之方法

一、前言

PROGRAM EXPAT 是利用級數展開法用以計算 e^A 或 $e^{A \cdot T}$ 後者常用於考慮將線性連續時間之動態問題轉成非連續時間動態問題。其中， A 為一個方陣。

二、理論分析

依照無窮級數法，則 e^{AT} 可以展開成：

$$e^{AT} = I + AT + A^2 T^2 / 2! + A^3 T^3 / 3! + \dots \quad (1)$$

將上式加以改寫：

$$\text{令 } D^{(n)} = A^n T^n / n! , S^{(n)} = I + \sum_{n=1}^n D^{(n)}$$

則：

$$S^{(n+1)} = S^{(n)} + D^{(n+1)} \quad (2)$$

當 n 趨近於窮大時，則 $S^{(n)}$ 即為所求之 e^{AT} 。唯，一般情形，當 n 值稍大時， $S^{(n)}$ 值即已收斂到容限範圍，並無需無限制的計算下去。為了保證在有限之 n 值（一般情形 n 值不致於超過 20）內，能得到收斂之結果， AT 必需先作處理，即：

$$\text{令 } \|A\| = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

其中， a_{ij} 為方陣 A 之元素。

然後，定義一個N值，滿足下列之(4)式，即：

$$\|A\| T / (2^M) < 1 \quad (4)$$

當N值確定之後， e^{AT} 可以改寫成：

$$e^{AT} = \{ [e^{AT} / 2^M]^2 \}^M \quad (5)$$

三、程式設計

EXPAT 之程式設計是依照下列之順序：

- (1) 讀入必需之資料。
- (2) 依照(3)，(4)兩式，定義M值。
- (3) 計算 $AT / 2^M$ 。
- (4) 依照(2)式之遞迴結構計算多項式之和。
- (5) 檢查第(4)項之結果是否已經收斂。
- (6) 將EXPAT 之結果輸出。

其中，有關收斂之檢定，是以每一次計算所得之 $A^n T^n / n!$ 中，絕對值最大之元素是否已小於事先設定之容限值為依據。

若需要將本程式改成副程式使用時，則可加入一張卡片，即：

SUBROUTINE EXPAT (A, N, DT, TOLE, B)

其中，B即為 e^{AT} 之結果。

又，若要計算 e^A ，則只需將DT之值定為1即可。

A之輸入是依照下述之順序，即：

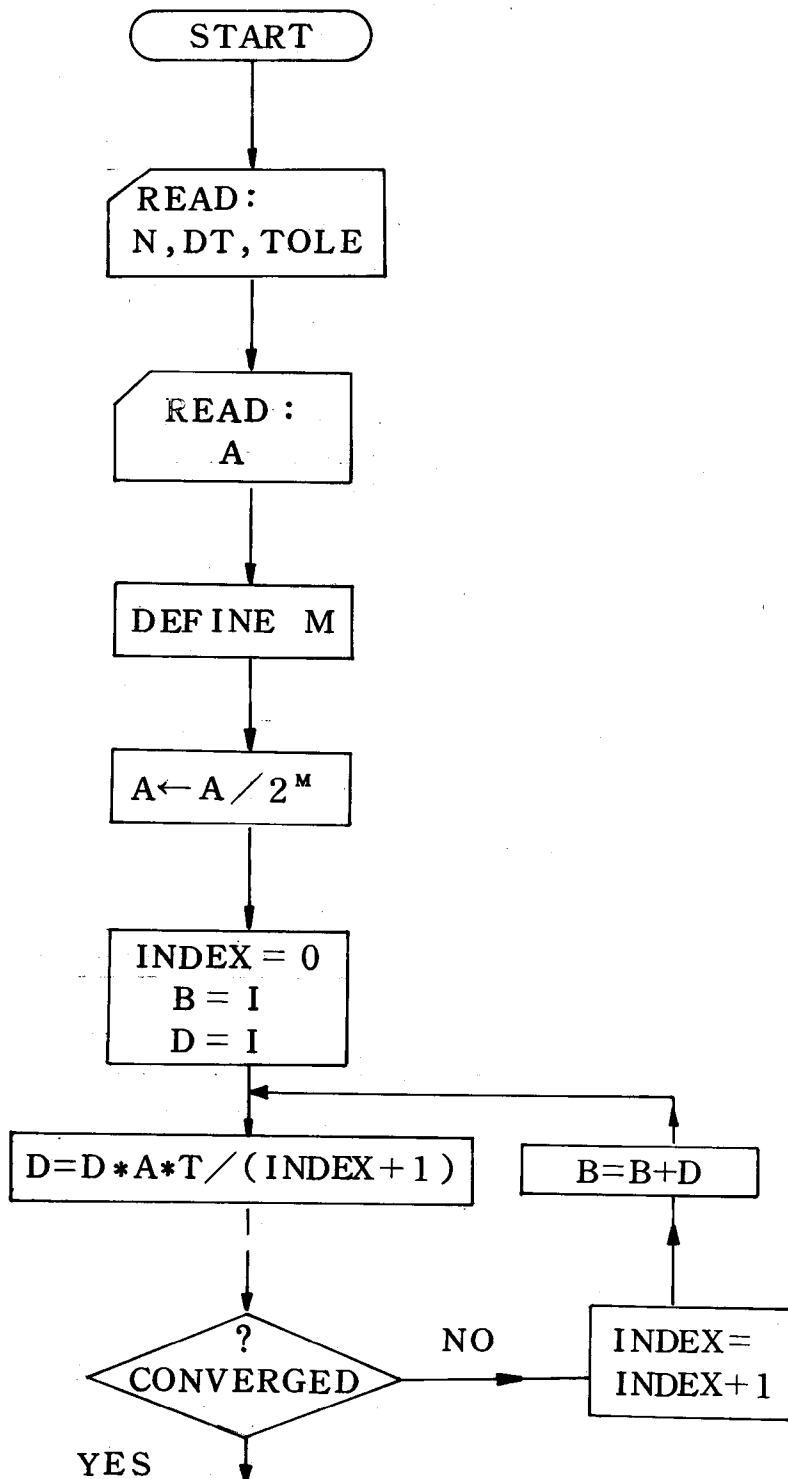
第一張： $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}$

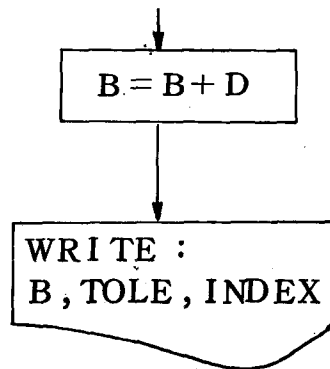
第二張： $a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}$

⋮

第 n 張： $a_{n1}, a_{n2}, \dots, a_{nn}$

程式流程如下：





四、輸入與輸出變數名稱及格式

輸入變數：

輸 入 名 稱	輸入變數	格 式
dimension of A	N	Integer
Time duration	DT	real
convergent limit	TOLE	real
matrix	A	real

輸出變數：

輸 出 名 稱	輸出變數	格 式
e^{AT}	B	14X,5(F10.5,3X)
number of terms used	INDEX	I 4