




電腦在化工上之應用

洪鏡輝·柯經緯 編著

松崗電腦圖書資料股份有限公司



松崗電腦圖書資料股份有限公司
已聘任本律師為常年法律顧問，
如有侵害其著作權或其他權益者
，本律師當依法保障之。

長立國際法律事務所

陳長律師



電腦在化工上之應用

編著者：洪鏡輝·柯經緯

發行人：朱小珍

發行所：松崗電腦圖書資料股份有限公司

台北市敦化南路五九三號五樓

電話：(02) 7082125 (代表號)

郵政劃撥：0109030-8

印刷者：建發印刷設計公司

版權所有

翻印必究

每本定價 300 元整

中華民國七十八年三月初版

書號：3101345

本出版社經行政院新聞局核准登記，登記號碼為局版台業字第三一九六號

序 言

大專化工系所學生畢業後進入化工廠大部份擔任現場操作工程師或擔任方法設計工程師之職務，擔任操作工程師者，無不致力於改善工廠之操作，以節省能源，並獲致優良之產品，擔任方法設計工程師者則無不致力於設計最經濟最安全之工廠；過去，為了達到這些目的，往往須藉助於多年經驗之累積。近十餘年，由於商業化之化工程序模擬器（Chemical Process Simulator）已趨成熟，化工廠之設計或修改及操作性能之改良，藉助於模擬器不僅可節省大量的時間並可獲得準確之計算結果。

目前國內不少大專院校及公營企業已經引進這些商業化模擬器，如PROCESS，ASPEN-PLUS，CHEMSHARE，CHEMCAD等，少數大專化工系所並開了這些模擬器使用之課程，但也僅於簡單介紹如何使用這些模擬器，大多數大專化工系所只開「計算機概論」及「數值方法」之課程，所談範圍僅止於解代數方程式及微分方程式，很少談到計算機在化工上之應用，因此常使化工系所學生無法將計算機與化工結合起來。筆者任職化工廠多年，常感於新進大專化工系所畢業生，對於如何利用模擬器從事化工廠操作之改良與設計不甚瞭解，往往須耗費2至3年時間嘗試摸索使用這些模擬器，同時因為對模擬器本身之程式設計不清楚，以致使用不能得心應手，有鑒於此，筆者乃著手整理有關資料撰編此書，以利大專化工系所學生及工業界化學工程師使用。

本書採用實際化工程序設計為例，經過數學模式理論分析後再配合數值方法來設計電腦程式，程式所使用的語言為最普遍的FORTRAN 77語言，在MS-FORTRAN 77 Compiler系統下執行，每一程式並配合例題演練，使讀者更易明瞭。全書共分8章，第一章談電腦基本概論，第二章談氣體與液體性質估算，第三章談質傳操作，第四章談流體在管內流動，第五章談熱傳操作，第六章談化學反應工程，第七章談套裝軟體在化工方面應用，第八章詳論電腦應用與實驗數據分析。

理論與實例的配合以及編排有序之內容的詳細解說，希望能夠有助於讀者瞭解電腦在化工上的應用。作者於編著過程，儘管全力以赴，戰戰兢兢，相信疏漏之處在所難免，尚祈化工界各師長，前輩不吝指教，俾使本書更臻完善。

目 錄



電腦概論與程式發展

1

1-1	電腦基本概論	1
1-1.1	前言	1
1-1.2	系統與電腦組織	3
1-1.3	電腦數字系統	7
1-1.4	程式發展的過程	8
1-1.5	程式之結構化	13
1-2	個人電腦應用與化學工業	15
1-2.1	前言	15
1-3	FORTRAN 77 語法摘要	25
1-3.1	程式的格式	25
1-3.2	FORTRAN 敘述內之資料型態	30
1-3.3	表示式	33
1-3.4	指定敘述	36
1-3.5	控制敘述種類	37
1-3.6	輸入與輸出敘述	42
1-3.7	宣告敘述	44
1-3.8	FORTRAN 77 FORMAT 敘述	49
1-3.9	副程式	55
1-3.10	DATA 敘述 (輸入方式之一)	60

1-4	數值方法摘要	61
1-4.1	概說	61
1-4.2	Matrix Methods (矩陣方法)	62
1-4.3	矩陣表示法和線性方程式解法	62
1-4.4	線性獨立與矩陣的排列數	65
1-4.5	一階線性常微分方程式的運用	66
1-4.6	方程式的解	68
1-4.7	多項式近似值	73
1-4.8	數值積分	79
1-4.9	常微分方程式	80
1-4.10	函數的極值	87
1-4.11	計算過程伴隨的誤差	92



液體和氣體性質估算

97

2-1	概說	97
2-2	真實氣體體積的計算	100
2-3	液體體積的計算	110
2-4	氣體的逸壓與逸壓係數的計算	112
2-5	蒸氣壓的計算	119
2-6	泡點溫度及露點溫度的計算	119
2-7	泡點壓力與露點壓力的計算	128
2-8	液相活性係數之計算方法	136
2-8.1	wilson 方程式	137
2-8.2	NRTL 方程式	138
2-8.3	UNIQUAC 方程式	139
2-9	二成份系參數之估計	143



質傳操作

163

3-1	概說	163
3-2	蒸餾	163
3-3	吸收與氣提	211
3-4	液體萃取	229



流體在管內流動

243

4-1	概說	243
4-1.1	不可壓縮流體流動	244
4-1.2	管子大小計算	247
4-2	可壓縮流體流動之壓力降	252
4-3	非牛頓流體在管內之流動	255
4-3.1	Bingham plastic 流體	256
4-3.2	次方定律流體	257
4-3.3	一般化的雷諾數	259
4-3.4	非牛頓流體流動管徑大小計算	261
4-4	管子網路計算	266
4-5	兩相流動系統	283
4-5.1	氣—液流動	283
4-5.2	固體—液流動	297
4-5.3	氣體—固體流動	301



熱 傳 送

313

-
- 5-1 前言 313
 - 5-2 無相變化之殼管式熱交換器 314
 - 5-3 冷凝器 346
 - 5-4 再沸器 387



化學反應工程

405

-
- 6-1 前言 405
 - 6-2 反應程度 405
 - 6-3 化學反應平衡 407
 - 6-4 反應速率數據之分析 416
 - 6-5 理想反應器模式 427
 - 6-6 化學反應器之非理想性 438
 - 6-7 利用滯留時間分佈分析反應器性能 448
 - 6-8 均勻系反應器之溫度效應 457



套裝軟體與化工應用

471

-
- 7-1 概說 471
 - 7-2 速算表應用與化學工程 472
 - 7-2.1 速算表的格式和它的基本觀念 472
 - 7-2.2 非線性與微分方程式組在速算表內之運作 473
 - 7-2.3 內插法和積分方法 475
 - 7-2.4 解代數方程式 478

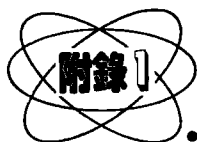
7-2.5	微分方程之解和速算表應用	485
7-2.6	利用差分法來解偏微方程式	487
7-2.7	程序分離與 Lotus 1-2-3 應用	493
7-2.8	速算表和泵送設備計算	505
7-3	AutoCad 與化學工程應用	505
7-3.1	前言	505
7-3.2	Auto CAD 指令說明	510
7-3.3	造型的描述	512
7-3.4		
7-3.5	建立化工流程所須的圖件例子	518
7-3.6	慣用的標準數位板功能表	524
7-3.7	化工程序流程實例說明	524



電腦應用與實驗數據分析 533

8-1	概說	533
8-2	圖形分析法	535
8-2.1	常見的單變數圖形表示式	535
8-3	最小平方方法與實驗數據分析	549
8-3.1	概說：數學方法與實驗數據分析	549
8-3.2	最小平方方法	550
8-3.3	最小平方方法應用於單變數之線性方程式 (又稱單變數線性迴歸)	553
8-4	非線性多項函數分析法	563
8-4.1	契比希夫多項式法	563
8-4.2	佛西哲多項式應用	577
8-5	線性迴歸分析法	583

8-5.1	概說	583
8-5.2	單變數線性迴歸分析	583
8-5.3	多變數線性迴歸分析法	588
8-5.4	線性迴歸與化工動力學應用	602
8-6	快速多條曲線繪製分析	605
8-6.1	概論	605
8-6.2	使用步驟	607
8-6.3	實例執行	609



附錄 1 **PC DOS 簡介** **621**

附 1-1		624
附 1-2	檔案的命名	627
附 1-3		628
附 1-4	DOS 之基本指令	629
附 1-4.1	重要的DOS 指令	633
附 1-5		636
附 1-5.1		637



附錄 2 **PE2 使用說明** **643**

附 2-1	使用 PE 2 必備的軟體	643
附 2-2	PE 2 的功用	644
附 2-3	準備工作磁片	644
附 2-4	啓動 PE 2 系統	646
附 2-5	使用 PE 2 來鍵入程式或資料	647
附 2-5.1	鍵入程式	647

附 2-5.2	修改程式	651
附 2-6	各種直接指令簡介	651
附 2-6.1	Edit 指令	652
附 2-6.2	Quit 指令	652
附 2-6.3	SAVE 指令	652
附 2-6.4	FILE 指令	653
附 2-6.5	NAME 指令 (PE 指令)	653
附 2-6.6	LOCATE 指令	653
附 2-6.7	CHANGE 指令	653
附 2-6.8	Erase 、Rename 和 Dir	653
附 2-6.9	PRINT 指令	654
附 2-7	DEFINE 與間接指令	654
附 2-7.1	移動游標	656
附 2-7.2	區塊指令	656
附 2-7.3	其他的基本指令	656



MS-FORTRAN 77 V3.31系統程式操作說明 667

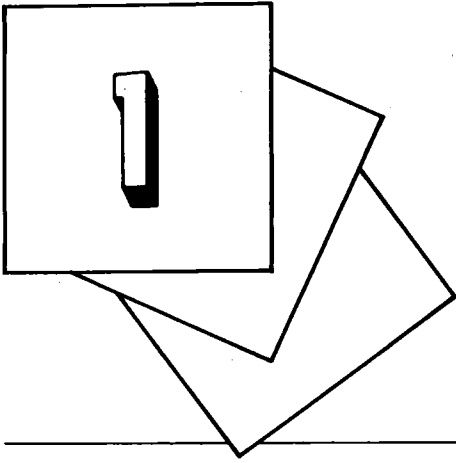
附 3-1	概說	667
附 3-2	IBM PC FORTRAN 77 所需軟體	668
附 3-3	編譯MS-FORTRAN 原始程式過程	672
附 3-4	MS-FORTRAN 77 連結過程	677
附 3-5	執行MS-FORTRAN 77 可執行程式	680



IBM PC FORTRAN 77 V3.31 錯誤訊息與錯誤代碼 683



數系和ASCII 碼對照表 717

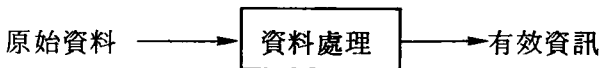


電腦概論與 程式發展

1-1 電腦基本概論

1-1.1 前言

電腦自 1940 年代推出，至今已有一段相當的時間，它已廣被應用於工商界、科學家、實驗室及學校政府機關。而今，電腦已是一種日常生活中不可缺少的工具。因它有超強的能力協助人類儲存資料，處理資料，而這些原始資料經過有系統的處理，能表現出它的具體意義之事實和特定的知識，供使用者之研究、分析、判斷等工作，因而這些原始資料透過電腦協助即變成有用的資訊。亦即



然而如何將原始資料和電腦構通加以輸入？如何將輸出資料整理、演譯成為有用的資訊？有與電腦構通之能力不可。否則只有吾人常提及的 Garbage in-Garbage out (GIGO) 而已。因而近代工程科學上相當重要的一門電腦科學也就孕育而生。本書最大之目的，再於使化學工程人員，無論在學生或工商界人士，對於電腦應用於化學工程有初步之瞭解，能大量使用電腦協助自己的學業或工作。

2 電腦在化工上之應用

1-1.1.1 電腦分類與應用

由於電子技術之突飛猛進，使電腦在硬體上由第一代真空管電腦演進到當今進步的第四代超大型積體電路（VLSI）電腦。它的製造技術也是快速更新，導致電腦種類繁多，可適用於各種不同之場合，但依其用途可以區分為：

1. 一般用途的電腦（General purpose）

此類電腦設計是針對一般功能而設計，處理程序變更容易適合多方面用途。

電腦所能處理的資料型態，將隨電子訊號結構不同而可區分為類比電腦（Analog），如速度、長度、聲音、電流、電壓、溫度等。另一種是處理數值型態資料的數位（Digital）型電腦，由於在化學工程應用上，以上所述兩類電腦均有使用，在化學工程領域裏，這兩類都必須熟悉。

能夠處理連續性資料，如原始物理量的電腦被稱為類比電腦（Analog Computer），它大都被應用於科學研究與工業生產方面，如流體力學、化學工廠、航空工業等。

使用數值性資料的電腦稱為數位電腦（Digital computer）它在資訊的表達方式都以數字來運作，因此較具準確性與可讀性。

如果電腦能同時處理類比資料和數值資料，則稱為混合式（Hybrid computer）電腦。此類電腦大都是利用類比電腦的特性取得連續的物理量，再將此物理量轉換成數字量後，利用數位電腦之功能對此數字量作分析統計後輸出結果。例如分析儀器、電腦斷層掃描器等。

2. 特殊用途之電腦（Special purpose computer）

此類之設計旨在合於某特殊用途，處理程式難以更改因此沒有互容性（Compatibility）。

由於數位電腦處理物理量，其專業性較高。因此一般吾人所稱電腦就是指一般用途之數位電腦這類電腦依其性能、計算能力與執行速度，大約可分為下列三種：

(1) 微電腦（Micro computer）：即一般常見的 PC 個人用電腦，此型電腦

由於可攜性高 (Portability)，適用於小企業的資料管理、生產自動化、儀控系統……等各方面。

- (2) 迷你級電腦 (Mini computer)：適用於中小型資料處理系統，大型工廠自動化、控制等。
- (3) Mainframe computer 或 Host computer：此類屬大型電腦，不但記憶容量大、處理速度又快，它屬於多人同時使用之 Mutiuser 型。終端機 (terminal) 是此系統內主要的工作站 (Workstation)。

這類 Mainframe computer 又可分為：

- ① 小型的電腦。
- ② 中型的主電腦。
- ③ 大型的主電腦：適用於大型企業統一管理系統、科學工程之大量計算、氣象預測及軍事太空等複雜系統。

1-1.2 系統與電腦組織

由於吾人要具體化某些已存在之觀念，必須努力的去設定某些存在的事實成爲一可接受的觀念，此種觀念就是系統。

在科學的應用上，系統是指某個裝置或機器，它有固定輸入口、輸出配合設施以及它具有的輸入、輸出方式。而系統以外之部分吾人稱爲週邊。電腦吾人亦可視爲一獨立之系統，它是由很多組件所構成，每個組件均有其獨立之特性與功能。

但要指揮電腦執行某些工作，就必須有另外之系統。因而在電腦的組織上吾人可分為兩主要系統(1)硬體系統 (Hardware) (2)軟體系統 (Software)。

硬體是指組成電腦的各機器設施，其構造非常複雜，而軟體是指揮電腦執行工作的程式。其中包括系統軟體和應用軟體。因此電腦組織的設計原理，其機能與人類的機能相似，硬體如人之軀體；而軟體猶如人之知識、智慧、語言。

4 電腦在化工上之應用

1-1.2.1 硬體系統 (Hardware)

電腦之硬體結構一般可分為下列五大單元，每單元均有其特殊之功能：

1. 輸入單元 (Input unit)

使用者之程式或資料，必須經輸入單元才能進入電腦，此類週邊設備如：鍵盤 (keyboard)、紙帶閱讀機、電傳打字機、磁帶機 (tape)、磁碟機 (disk driver)、終端機等。

2. 輸出單元 (Output unit)

資料或數據經電腦處理後，所產生的結果須作永久或暫時性的儲存時，都需經輸出單元輸出。一般用來做為輸出之裝置有列印機 (printer)、螢幕 (CRT)、磁碟機等。

3. 儲存單元 (Memory unit)

儲存單元指在電腦內之記憶體部分，因而又稱記憶單元，是主要的程式儲存、存取資料及放置指令之位置。電腦之儲存裝置，一般可分為主要記憶體 (Main memory) 與輔助記憶體。主記憶體內又分為 RAM 和 ROM。RAM 為隨機讀取記憶體；ROM 為唯讀記憶體。兩者最大區別在於資料儲存之時間性與快慢，主記憶體 RAM 的存取速度快，但關機後，所有在 Main memory 內之程式命令全部消失。而輔助記憶體存取速度慢，但可將資料永久保存，這些記憶體包括磁碟、磁帶等。

4. 算術與算術邏輯運算單元 (ALU) (Arithmetic and Logical Unit)

資料由輸入單元傳送到記憶體後，若要執行算術或邏輯運算時，電腦依程式之指令，將資料傳送到 ALU，執行指定之運算，然後再將結果傳回主記憶體各單元間資料傳輸之方向，可由下圖示意之：

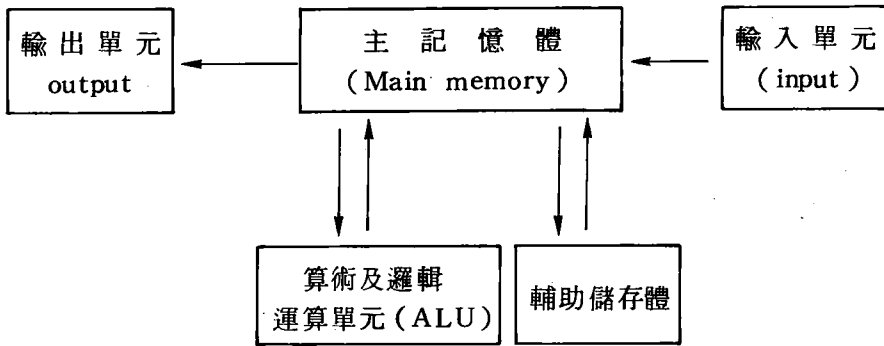
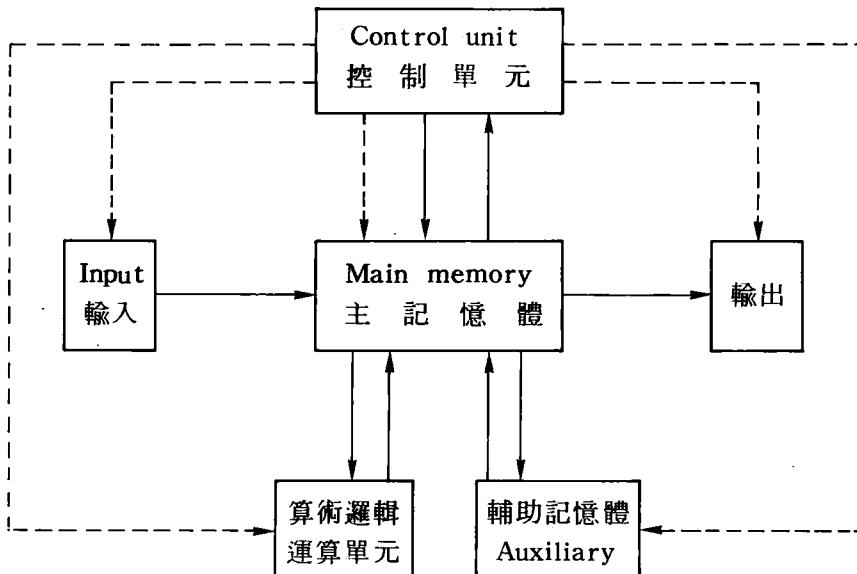


圖 1.1 電腦五大單元構造

5. 控制單元 (control unit)

在主記憶體內所存放之指令 (instruction) 會傳到控制單元，以控制電腦的所有活動。包括資料的輸入、輸出與運算。因此控制單元其主要在協調各單元間之資料傳輸，指揮電腦之運算執行。

爲了使讀者便於瞭解電腦中五大單元間之相互關係，特將五大單元間以信號線表示如下圖：各單元間箭頭方向即爲資訊送傳方向。



註：虛線部分表示控制單元之控制信號。

1-1.2.2 軟體系統 (Software system)

軟體就是一般我們所稱的電腦程式，依其用途與功能可分為應用軟體 (Application software) 與系統軟體 (System software) 兩大類。

1. 系統軟體是為適應於硬體和應用程式間之一種系統程式，主要具有翻譯之功能。它是溝通機器與程式間之橋樑，它可以協助使用者設計各種功能的應用程式。

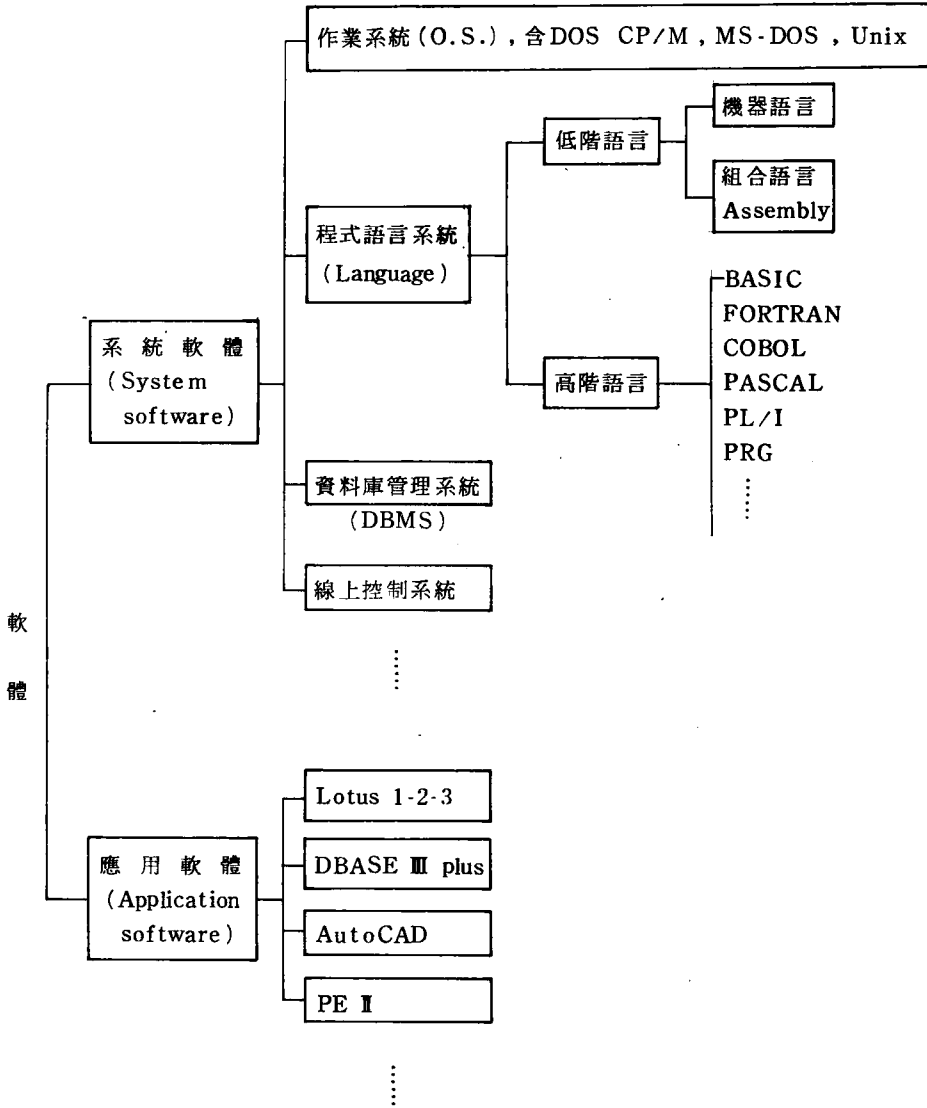
常見的系統程式主要包括：

- (1) 作業系統 (Operating system)，如磁碟作業系統，吾人稱 Disk Operating System (DOS)。
- (2) 語言編譯系統 (Compiler)，如 FORTRAN Compiler, C-Compiler …… 等。
- (3) 組合語言編譯程式 (Assembler)。
- (4) 編輯程式 (Editor)。
- (5) 鏈結程式 (Linker) 及庫存副程式 (Library) 等多種。因此作業系統可以執行下列四項工作①記憶體區域分配②處理機管理③週邊設備管理④檔案存取管理等。

2. 應用軟體

有了硬體，有了作業系統，程式設計師為利用電腦執行各方面的工作，必須將很多的命令 (instruction) 依各種不同語法編撰完成一可讀的指令集合，這些指令就是應用軟體的軟體程式，如 BASIC 語言程式，FORTRAN 語言程式，C- 程式等。吾人俗稱的 package 即是應用程式或應用軟體。由於軟體的重要性日益升高，因而在軟體界的發展，可說是一日千里。

關於上述兩系統程式間關係，可由下圖形表示：



1-1.3 電腦數字系統

電腦最大的用途在於能存取和處理大量資料，然而它如何表示資料？只有靠兩個數字“0”和“1”來執行。0和1構成儲存資料最基本之單位Bit(Binary digit)。0和1即表示電流的接通與否，而任何一位元(Byte)即有8個