電子計算機套用程式系列（第一階段）

化學工程教學用程式

（第一册）

主編者：教　　育　　部
編撰者：國立台灣工業技術學院
化學工程技術系
劉清田·王逢盛

正中書局印行

電子計算機套用程式系列（第一階段）

化學工程教學用程式

第　一　册

主編者：教　　育　　部
編撰者：國立臺灣工業技術學院
化學工程技術系
劉清田・王逢盛

日　期：中華民國七十一年十二月

正中書局印行

中華民國七十五年三月臺初版

電子計算機套用程式系列（第一階段）

化學工程教學用程式

第一册　基本定價　肆元捌角

（外埠酌加運費匯費）

主編者	教育部
編撰者	國立臺灣工業技術學院 化學工程技術系
	劉清田　王逢盛
發行人	蔣廉儒
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 (8340)

分類號碼：310.58　　(1000) 祥

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：0009914—5

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　電話：291—4345

地址：東京都千代田區神田神保町一丁目五六番地

東海書店　電話：791—6592

地址：京都市左京區田中門前町九八番地

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 : 135-18 Northern Blvd. Flushing, N.Y. 11354 U.S.A.

歐洲總經銷：英華圖書公司

Address : 14 Gerrard Street London W.L. England

加拿大總經銷：嘉華圖書公司

Address : 340 Spadina Avenue Toronto, Ontario CANADA M5T 2G2

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通。亦即，計算機已成爲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，乃爲一項重要的課題，在這種情況下爲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，其內容包括了五類主題：

㈠化工計算———編號 CH-2101,2102,2103

㈡化工熱力學——編號 CH-3201,3202

㈢單元操作———編號 CH-3301,3302,3303,3304,3305

㈣化工動力學——編號 CH-4401,4402,4403,4404

㈤程序控制———編號 CH-4501,4502

每一主題分別包含二至五個子題，都是一些相當基本且具有一般性之問題。每一子題分開寫爲一章，每章之程式名稱之後均附有編號。例如：第一章實驗數據之處理（CH-2101）中，CH 爲化學工程學科之代號，第一個數字 2 表示適用於大學程度二年級使用，第二個數字 1 表示此程式屬於第一類主題：化工計算，最後兩個數字 01 表示該主題適用於二年級課程之編號次序。

每一個程式之內容均包括下列七項：

㈠前　言——簡述此程式之目的。

㈡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。

(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。

本報告在編寫過程中，承蒙本院曾憲政、莊敏哲等諸位教授提供不少資料及寶貴意見，以及黃明恩、李文益、葉正信、柳德明等同學的幫助，謹此致謝。又本計劃執行期間僅為半年，編寫甚為倉促，錯誤在所難免，至盼讀者不吝指正。

編　者：劉　清　田
王　逢　盛

國立臺灣工業技術學院化學工程技術系

中華民國七十一年十二月

目　次

CH-2101

壹、實驗數據之處理

一、前言

在工程上，實驗數據之處理相當重要，通常須考慮到使用時之正確性與方便性。電子計算機之記憶，雖可用於儲存大量數據，但資料儲存得太多，則反而不容易找到要用的資料。因此，資料須先經過處理，使原始數據成爲有用的資料。

二、理論分析

關係式、近似法及內差法：

資料的處理，通常包括下列三種情形：

(1)關係式：找出能代表資料之關係式，以表 1 — 1 爲例，即找出一個正確的公式，$C_P = (P, T)$

(2)近似法：如找不到關係式，則在表 1—1 之溫度、壓力範圍內，找一個近似函數來表示（直線或拋物線函數）。

(3)內插法：如果只須要少數幾個狀態下之 C_P ，則不須要費事去求關係式或近似函數，可用較省事的方法，去求得非基點處之值，例如（ 190°K，15 atm ）時之 C_P 值。

表 1-1. **空氣之比熱** C_P (J/mole-°K) P (atm)

T(°K)	1	10	20	30
180	29.52	31.24	33.51	36.14
200	29.38	30.59	32.10	33.73
220	29.26	30.14	31.23	32.38
240	29.16	29.88	30.72	31.60

圖形分析：

實驗所得的原始數據，如果先予以處理，然後再作圖，則可使原始的曲線關係成為較方便使用之直線關係。

以表1—2(a)之數據為例，若直接作圖，則為一曲線，如圖1—1所示。若將表1—2(a)中之x，y值，計算x／y，列表於1—2(b)。以Y＝x／y對X＝x作圖，則Y與X成一直線關係，如圖1—2所示。以方程式表示之，則為

$$Y = mx + b \qquad (1-1)$$

即 $$x/y = 0.667x + 0.333$$

移項、整理之，得

$$y = \frac{3x}{1+2x} \qquad (1-2)$$

表 1-2.(a)

y	x
0.339	0.146
0.477	0.233
0.694	0.430
0.934	0.825
1.111	1.430

表 1-2.(b)

Y＝x／y	X＝x
0.431	0.146
0.488	0.233
0.620	0.430
0.883	0.825
1.287	1.430

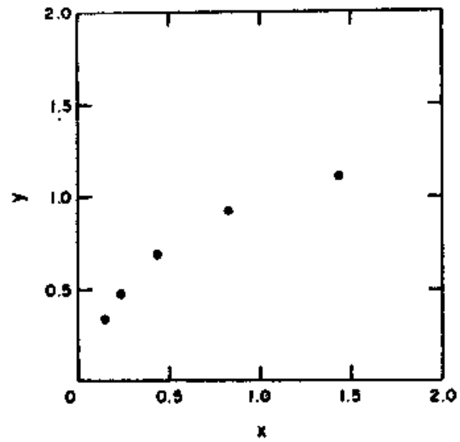

圖 1-1. 以 X,Y 作圖

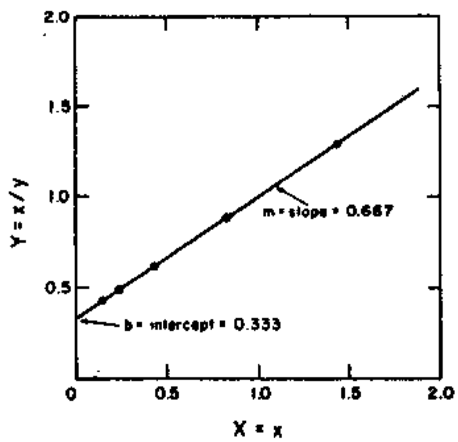

圖 1-2. 以 X,Y 作圖

由（ 1－2 ）式，很容易求得內插或外插之（ x , y ）值。例如：

$$\lim_{x \to \infty} y = 1.5$$

$$\lim_{x \to 0} \frac{dy}{dx} = 3.0$$

若由原始資料，表 1-2 (a)或圖 1-1，則不易求得 $y = f(x)$ 之形式，也無法得到準確的 $\lim_{x \to \infty} y$ 及 $\lim_{x \to 0} \frac{dy}{dx}$ 之值。

由以上之分析知，若有一個非線性函數 $y = f(x)$，如圖 1-1 或（1-2）式，我們可設法找到兩個新函數 F_1, F_2，使得

$$F_1(x, y) = m F_2(x) + b$$

上式中，m，b 皆爲常數，分別表示斜率和截距，以（1-2）式爲例，則

$$F_1(x, y) = Y = x / y$$

$$F_2(x) \quad = X = x$$

$$m = 0.667 \quad , \quad b = 0.333$$

但是，如何找到 $F_1(x, y)$，$F_2(x)$ 呢？主要關鍵在於由原始的圖 1-1，分析其特性，是屬於什麼類型。常見的工程圖形，大致可分爲下述各類型：

(a) $y = x^n$

此類型有幾個特點，如圖 1-3 (a)所示

(1) 一定通過（1，1）這一點。

(2) $n = 1$ 時，爲一直線。

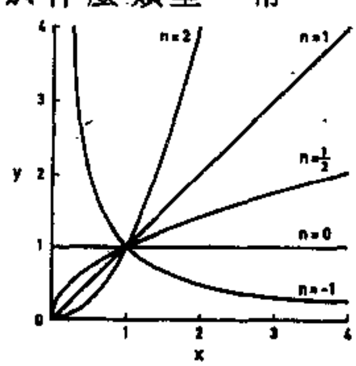

圖 1-3. (a) $y = x^n$

$n = -1$時，爲雙曲線。

欲轉換成一線性關係式，可對原式左右同時取對數（常用或自然對數皆可），則得 $\ln y = n \ln x$

令　$Y = \ln y$, $X = \ln x$，則得 $Y = nX$

這是通過原點的直線，如圖 1－3 (b)所示。

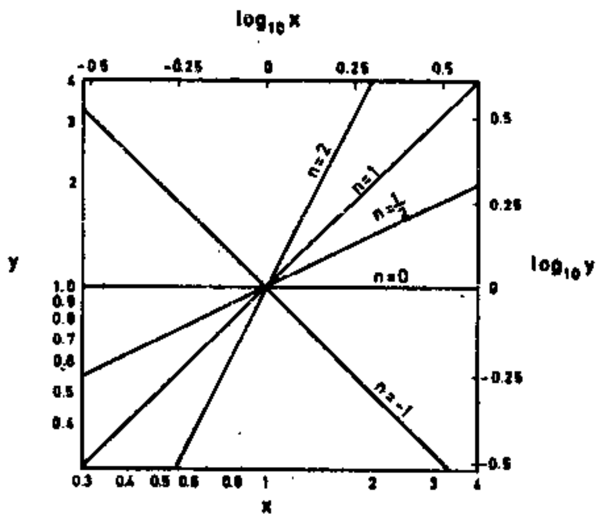

圖 1-3.(b)　$y = x^n$

爲了方便起見，可將原始數據（ x , y ）直接在全對數座標上作圖，其斜率爲

$$n = \frac{\Delta(\ln y)}{\Delta(\ln x)}$$

$$y = e^{mx}$$

此類型之曲線，如圖 1－4 (a)所示，其特點爲：

(1)一定通過（ 0 , 1 ）這一點。

(2)m＜0時，當x增大，y→0；m＞0時，當x增大，y→∞。

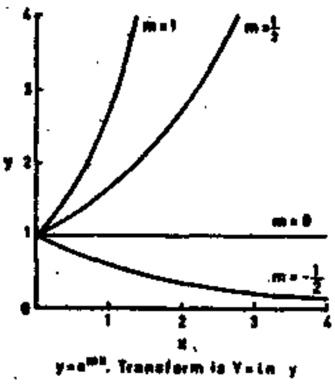

圖 1-4.(a)　$y=e^{mx}$

欲轉換成一線性關係式，可令 $Y=\ln y$，$X=x$，則得 $Y=mX$，這也是通過原點的直線，如圖 1－4(b)所示。

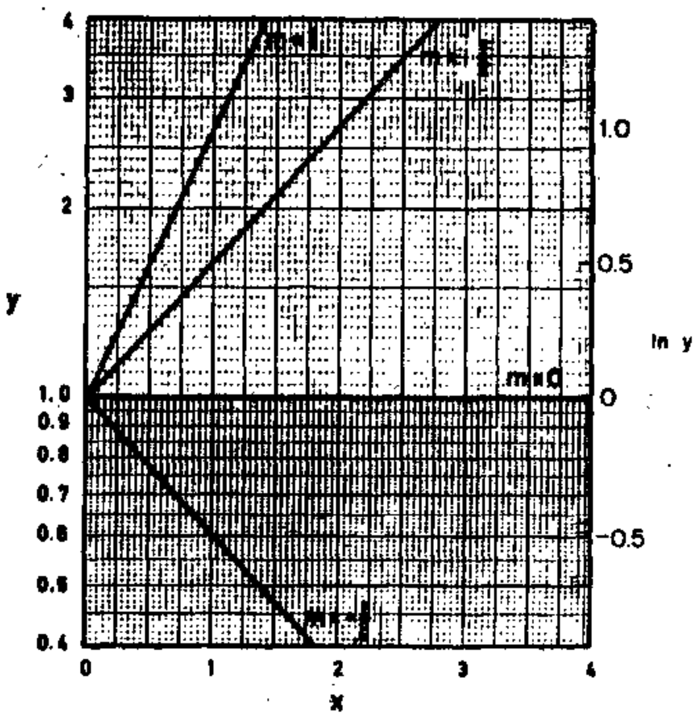

圖 1-4.(b)　$y=e^{mx}$

也可將原始數據（ x , y ）直接在半對數座標上做圖，其斜率

$$m = \frac{\triangle(\ln y)}{\triangle x}$$

$$y = \frac{cx}{1 + cx}$$

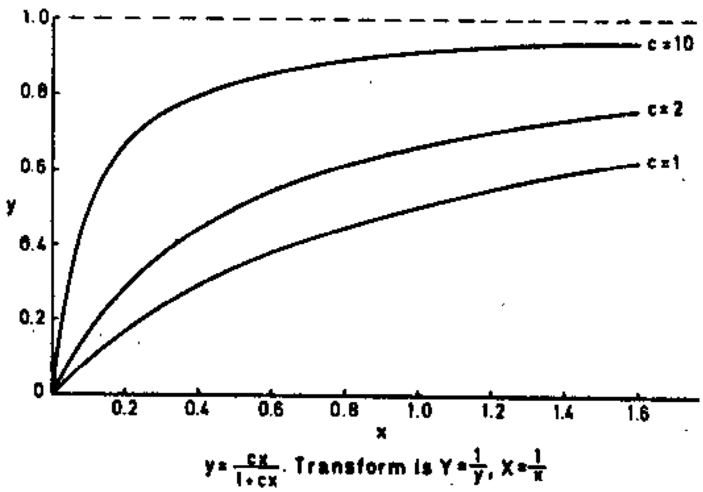

圖 1-5. (a) y =cx/(1 +cx)

此類型之曲線，如圖 1 — 5 (a)所示，其特點爲：

(1)一定通過（ 0 , 0 ）這一點。

(2)當 x 增大時， $y \rightarrow 1$ ，C 值越大， y 值越快趨近於 1 ，轉換成線性關係式之法，不只一個，例如：

①令 $Y = \frac{1}{y}$ ， $X = \frac{1}{x}$ ，則 $Y = 1 + \frac{1}{c}X$

此直線如圖 1 — 5 (b)所示。

②令 $Y = \frac{x}{y}$ ， $X = x$ ，則 $Y = \frac{1}{c} + X$

此直線如圖 1 — 5 (c)所示。斜率恒爲 m = 1 ，截距則隨 c 值而變。

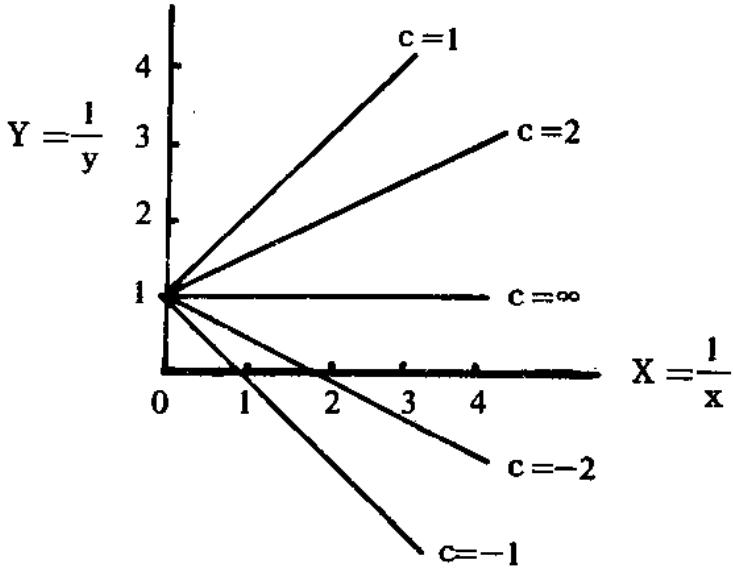

圖 1-5. (b) y = cx/(1 + cx)

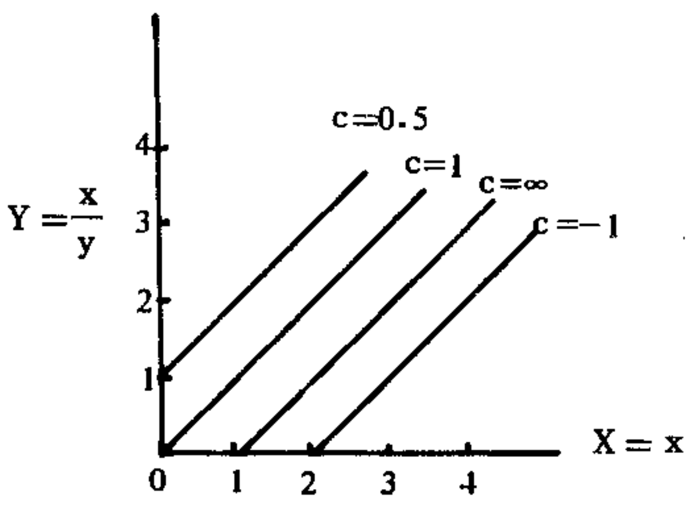

圖 1-5. (c) y = cx/(1 + cx)

〔例 1 — 1 〕：已知甲醇的蒸發熱，如表 1 — 3 所示。求其線性關係式。

表 1-3. 甲醇的蒸發熱

λ (cal/mole)	T (°K)
8,420	337.85
7,731	373.15
6,200	433.15
4,746	473.15
3,521	493.15
0	513.15

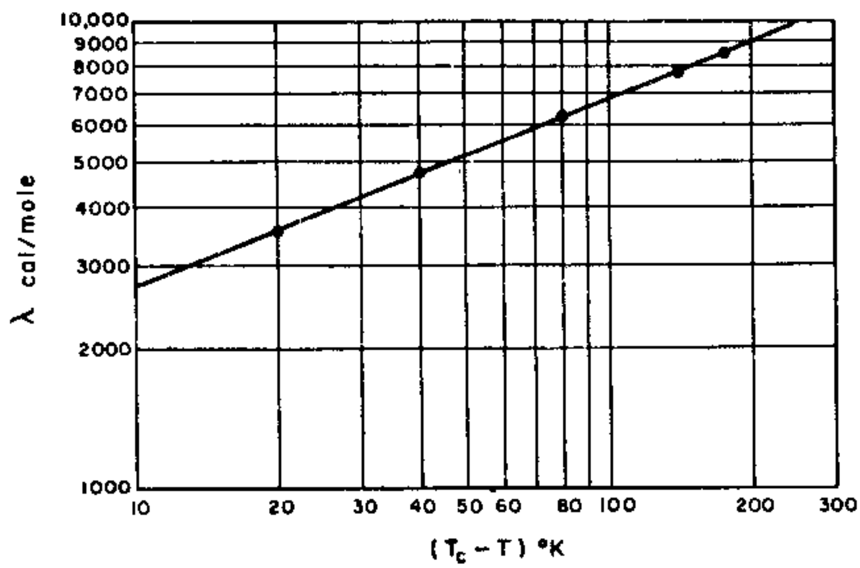

圖 1-6.

〔解〕將原始數據（λ，T）作圖，爲一曲線，如圖 1-6 (a)所示。此曲線與前述各曲線之類型似乎都不相符合。但是若以 $T=T_c=513.15K$（此乃 $\lambda=0$ 時之 T 值）爲鏡面，將此曲線左右對映，則得其鏡像。亦即，以 λ 對 T_c-T 作圖，如圖 1-6 (b)所示。此一曲線形式，與 $y=x^n$，$0<n<1$ 之形式相近（圖 1-3 (a)）。

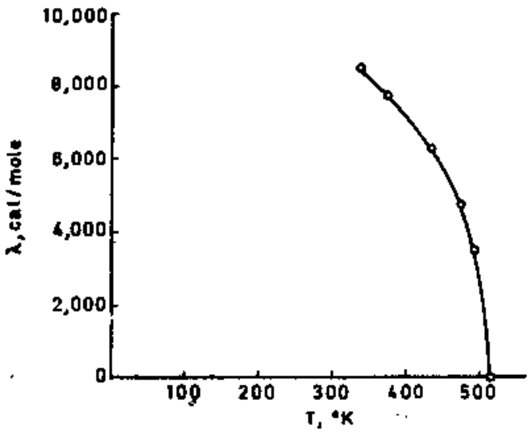

圖 1-6. (a)

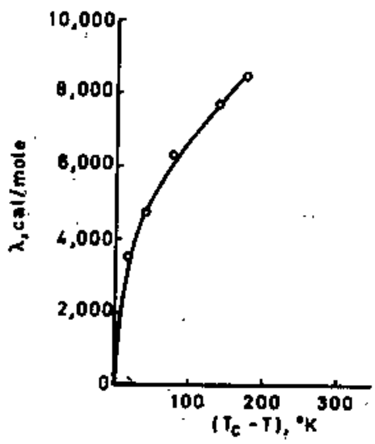

圖 1-6. (b)

因此，將 λ，（T_c-T）在全對數座標上作圖，可得一直線如圖 1-6。其斜率爲

$$m=\frac{\triangle \log \lambda}{\triangle \log(T_c-T)}\doteqdot\frac{\log 9000-\log 2750}{\log 200-\log 10}=0.396$$

於對數座標上，無法直接求得截距，先設其爲 $b = \log C$，則：

$$\log \lambda = 0.396 \quad \log(T_c - T) + \log C$$

$$\therefore \lambda = C(T_c - T)^{0.396}$$

$$C = \lambda(T_c - T)^{-0.396} = (9000)(200)^{-0.396} = 1104$$

$$\therefore \lambda = (1104)(513.15 - T)^{0.396}$$

〔例 1 — 2〕已知苯之蒸汽於 563.15 K°時之莫耳體積如表 1 — 4 所示。假設此蒸汽符合維里氣體狀態式（Virial equation of state）：

$$\frac{pv}{RT} = 1 + \frac{B}{v} + \frac{C}{v^2} \qquad (1-3)$$

求B與C值。

〔解〕將原始數據（p，v）作圖，得一曲線，如圖 1 — 7(a)所示。欲將此曲線以直線表示之，可將維里氣體狀態式改寫成

$$v\left[\frac{pv}{RT} - 1\right] = B + C\left[\frac{1}{v}\right]$$

令 $\quad Y = v\left[\frac{pv}{RT} - 1\right] \quad , \quad X = \frac{1}{v}$

則 $Y = B + CX$ 爲一直線，由斜率及截距即可求得C，B值。

先計算Y，X值，列於表 1 — 4 (b)中，再以（X，Y）作圖，如圖 1 — 7 (b)所示。

於圖 1 — 7 (b)中，虛線是利用最小平方法所得通過所有（X_i，Y_i）各點的最佳直線。

其斜率爲 $\quad C = 3.525 \times 10^4$

截距爲 $\quad B = -323$

驗證： 當 $v = 591 \dfrac{cm^3}{mole}$（即，$X = 1.692$）