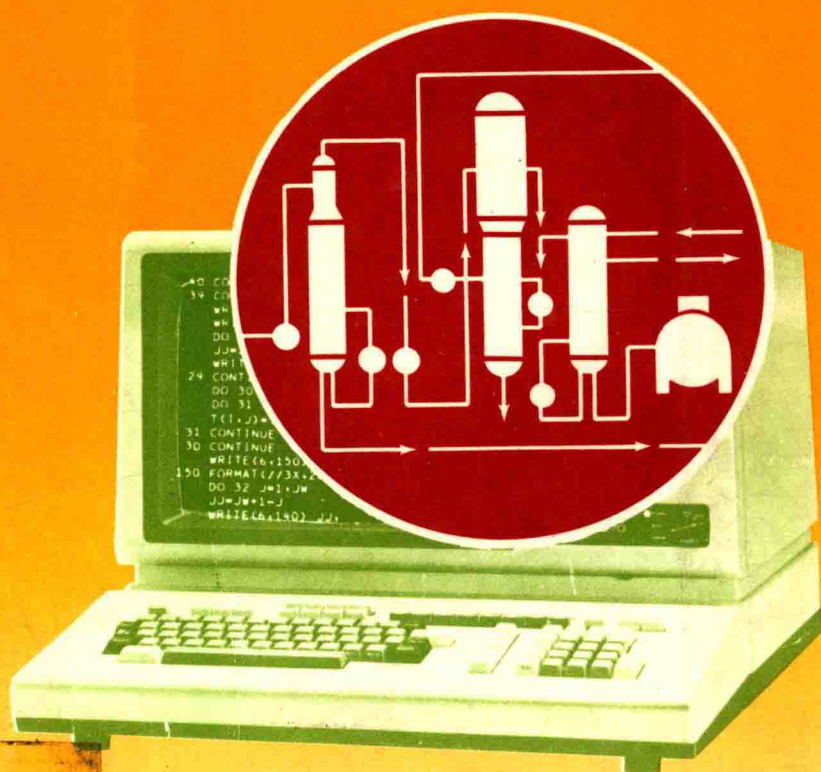


計算機 在化工上之應用

國立台灣大學化工系副教授
呂理平博士 編譯



高立圖書有限公司
總經銷新科技書局

計算機 在化工上之應用

修訂本

國立台灣大學化工系副教授

呂理平 博士 編譯

江苏工业学院图书馆
藏书章

高立圖書有限公司

總經銷新科技書局

計算機在化工上之應用

中華民國73年8月30日初版發行

中華民國74年元月15日修訂版

編 著：呂 理 平

版權人：高 阿 輝

出版者：高 立 圖 書 有 限 公 司

電 話：3615330 郵撥：0105614-7

總經銷：新 科 技 書 局

電 話：3311179 郵撥：0532768-2

住 址：臺 北 市 襄 陽 路 13—2 號 三 樓

登記證 行政院新聞局局版臺字第 1423 號

有著作權 ● 不准翻印

定價：新台幣 260 元

序

在化學工程的領域內，電子計算機的應用範圍非常廣泛，而且今後勢必將日益增大。爲了順應此時勢，各大專的化學工程科系，幾乎都以某種形式，開課講授有關電子計算機在化工方面的應用；而各企業也挖空心思從事推行其在職教育。

本書乃針對化學工程有關連的各種問題爲對象，熟練各種數值計算之程式計劃，以便擺脫單調數學上的數值計算領域，直接解析化學工程的主要之問題爲目的。

本書的大部份編排主要在於問題及其解答。因此，本書以「已經學會初步FORTRAN文法的讀者」爲對象。

本書內容是將利用電子計算機的數值計算技巧區分成八章，每一章均舉出例題，解釋化學工程上之物理意義以及編寫程式時須注意的要點，並附加了流程圖、程式及其解，暨問題答案。除此之外，每一章均有豐富的習題，加上提示比例題更簡單的答案，期望讀者能讀完本書之後融會貫通，能自行編寫程式，求得答案，以便和所舉示的答案，相互對照。

本書爲國內首先發行「計算機在化工上之應用」之教學參考課本。恐有疏漏之誤，尙期各界讀者不吝批評指教，俟再版時加以修正，無任企幸。

1984 年 9 月

呂 理 平 謹識
於台灣大學化學工程系

計算機在化工上之應用

目錄

緒 論

1	電子計算機的結構	2
2	電子計算機的功能與軟體	6
3	利用電子計算機時應注意事項	8
4	FORTRAN文法—執行時的誤差	9
5	本書的編排與使用方法	18

第1章	代數式計算	27
-----	-------	----

例 題

1-1	連續槽列反應器之設計（二次反應）	27
1-2	利用沈降法求液體黏度	30
1-3	氣液平衡關係之計算	35
1-4	熱傳導方程式解析解之計算	38

習 題

1-1	連續槽列反應器之轉化率（二次反應）	44
1-2	混合氣體的擬臨界常數	45
1-3	攪拌所需之動力	47
1-4	二成分蒸餾之層板數計算	49
1-5	化學平衡常數	51

第2章 插值、微分與積分 55

例 題

- 2-1 分子摩爾體積插值 55
- 2-2 黏度之插值 61
- 2-3 測分批式反應器之反應速度率 65
- 2-4 追蹤劑之響應 70
- 2-5 固定層吸附塔之失效時間 77

習 題

- 2-1 水蒸氣壓之插值 86
- 2-2 集塵裝置的集塵效率 87
- 2-3 絕熱型分批反應器之設計 88
- 2-4 吸收塔之高度 89
- 2-5 在分批單蒸餾中蒸氣與餾出液之組成 91

第3章 線性方程式、矩陣 93

例 題

- 3-1 程序之物料平衡 93
- 3-2 粉碎過程之分析 99
- 3-3 蒸餾塔內的成分分布 104

習 題

- 3-1 混合液製品之混和 116
- 3-2 管路網之分析 118
- 3-3 在複合反應系統中的獨立反應 120

第4章 非線性代數方程式 123

例題

- 4-1 理想溶液的蒸氣壓 123
- 4-2 van der Waals氣體之體積 127
- 4-3 板狀材料利用熱風傳導乾燥 129
- 4-4 絕熱連續攪拌槽之轉化率 135
- 4-5 單蒸餾之最適化 141

習題

- 4-1 多成分溶液系統之沸點 146
- 4-2 應用Redlich-Kwong式的氣體密度 147
- 4-3 逆流多段萃取塔 149
- 4-4 連續槽列反應器之設計 (1.5 次反應) 152

第5章 參數的推斷 155

例題

- 5-1 SO_2 之溶解度 155
- 5-2 固體觸媒反應之速率式 160
- 5-3 液相吸附之平衡式 170

習題

- 5-1 傳熱裝置之轉移函數 180
- 5-2 境膜傳熱係數之關連式 181
- 5-3 蒸氣壓之實驗式 182

第6章 常微分方程式.....185

例題

- 6-1 球形粒子之軌跡.....186
- 6-2 自動控制系統之響應.....194
- 6-3 觸媒反應裝置內溫度、轉化率的分布 (1 維
解法)200
- 6-4 散熱片之溫度分布.....206

習題

- 6-1 複合反應之選擇性.....212
- 6-2 球形粒子之軌跡 (歐拉 (Euler) 法)214
- 6-3 散熱片之溫度分布 (探索 (Search) 法)216
- 6-4 散熱片之溫度分布 (未定係數法)217
- 6-5 境界層內的速度分布.....219
- 6-5 氣流中所含微小粒子之捕集效率.....220

第7章 偏微分方程式.....223

例題

- 7-1 氣體吸收速率.....223
- 7-2 利用有限差分法解熱傳導方程式.....228
- 7-3 觸媒反應裝置內溫度、轉化率的分布 (2 維
解法)235
- 7-4 穩定 2 維熱傳導.....244

習題

- 7-1 澄清過濾所需的過濾時間.....250

7 - 2	多孔性填充層內之流動.....	251
7 - 3	平板內非穩定傳熱.....	253

第8章	或然率、統計.....	255
-----	-------------	-----

例 題

8 - 1	粉粒體之粒徑分布.....	255
8 - 2	測定值之可靠限度.....	261
8 - 3	圓周率之推定.....	266
8 - 4	裝置材料之可靠性.....	270

習 題

8 - 1	資料之整理.....	277
8 - 2	複雜物體之體積.....	278
8 - 3	中心極限定理.....	279

附 錄		281
-----	-------	-----

1	習題解答.....	282
2	副程式及其使用法.....	315
3	FORTRAN初步文法一覽表.....	326

中英文對照		329
-------	-------	-----

緒 論

各位是否曾在偶然的機會裏，有爲了缺少某種工具而感到不方便的經驗？只要有一支螺絲起子，一支扳手，本來可以輕輕鬆鬆完成的工作，却因爲沒有這些工具而大費周章，總是無法把工作完成。人之所以爲萬物之靈就是因爲人能夠使用工具，有其他動物所沒有的特徵，因此也才有今天的人類文明。在這些工具之中，近來已經爲大眾所重視，而且將來還有發展餘地的電子計算機(註)當可以說是其中的佼佼者。時至今天，有關如何利用它或者是否應利用它的議論，只有留下空虛的迴響而已。問題在於如何巧妙地利用它。

可是，工具的寶貴只有能熟悉該工具的性質、機能，以及要求那種工作的人士方才能知道。對一個化學工程師、研究者而言，電子計算機究竟如何因應要求呢？即使在此說明許多讀者可能也無法詳細了解，同時也可能沒有這種實感。毋寧說也許有個人因應各事情以切身地感覺到其必需性然後初步體驗才是良策。本書就是以這種程序爲出發點，以成爲讀者良好伴侶爲目標所編輯而成的。然而，一想到化學工程是在化學程序或環境系統等工程中，特別以複雜現象爲對象的實際的學問，讓我們應該明確相信對電子計算機應有所要求，否則，許多無法解決的問題會在這個領域裏堆積如山。更進一步，撇開其可能性不談，目前的許多化學工廠已經成爲如果沒有電子計算機就無法操作的那種設計，以及在各工廠所使用的各種裝置，譬如說，蒸餾塔的

註：這裏所謂電子計算機，是指複雜而具有4 K位元以上的記憶容

量，藉內裝的程式方式實施任務(JOB)之形式的數位計算機。

2 計算機在化工上之應用

設計，如果用手計算，事實上無法計算得那麼複雜，唯有如此也就可以使用精度很高的一群公式等，這一個事實也在這裏附帶說明。

至於電子計算機的機能也可以作這樣的說法。爲了要進一步瞭解，對我們的助益最大的就是要多多體驗。可是，至於應如何了解各機能，在這裏可以設想到若干之標準。本書假設的對象是站在利用電子計算機的立場的人士，而不是電子計算機的設計者或製作者。在此摘要歸納一個優秀的利用者最低限度必須具備的有關電子計算機結構，以及機能的知識說明如下。

I 電子計算機的結構

電子計算機的結構如圖 1 所示。

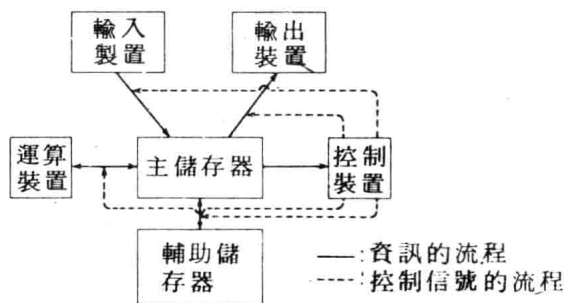


圖 1 電子計算機的結構

(1) 輸入裝置

凡是電子計算機都是透過輸入裝置接收資訊(information)，亦即程式(program)或數據(data)等。不同的電子計算機系統有不同的輸入裝置(input unit)，其中以讀卡機或讀帶機最具代表性。除了這些裝置之外，如果藉和人類的會話形式進行工作時，輸入資訊(in-

put information) 既會從終端機(terminal)的鍵盤輸入,也可以藉讀帶機(tape reader)高速地送入大量資訊,或以一定時間間隔將連續地發生變化的類比信號抽樣,進行AD變換(註2),予以讀取;不用說有各種不同變形形式。

這情況下,電子計算機的輸入在基本上是與時間成串聯的,亦即不能同時並聯取得兩個以上的資訊。這一點,對於電子計算機的應用技術來說有重要的意義。譬如說,要讓電子計算機進行化學程序的控制時,電子計算機不能同時讀取流量,溫度等許多資料。雖然非常高速。但只不過能依次讀取這些量而已。現假設要讓電子計算機監視幾個數變吧,假設電子計算機為讀取一個變數與為了處置它所需要的時間是 τ ,則某特定的變數也只不過是藉著這個時間間隔(抽樣週期)接受核對而已。如此是否足夠這一點,則因信號變化的快慢,所要求監視的精確度等情形而有所不同。無論任何情形,為了養成一個優秀的電子計算機利用者,確實地把握信號變化的快慢以及其信號之正確,則必須具備抽樣周期有關的知識。這也是在數值積分法或微分方程式的數值解法,要選擇刻紋寬度(step size)時所要求的知識,同時這些都是在學習傅利葉(Fourier)解析與抽樣值理論的初步時所獲得的知識。

(2) 輸出裝置

藉卡片、紙帶、磁帶、類比信號等的形式也能輸出利用電子計算機計算的結果,但最普通的形式就是利用打字機來印字。打字機區分為按一個字印字的普通打字機,以及按每一行每一行歸納起來印字的所謂列表機(line printer)。前一種打字機頂多每一分鐘只能有1000字程度的印字速度;但後一種列表機最大能將多達130字的行在一分鐘內印250行以上。除了各種打字機本身的印字速度之差別外,兩種之

註2 亦即將類比量變換為數位量。

4 計算機在化工上之應用

間本質上有更大的差異。在電子計算機方面，却具有將應該印字的計算結果暫時記憶下來的緩衝記憶器(buffer)。因此，電子計算機只要把計算結果存放在相當於出貨用倉庫的這種緩衝記憶器，便能立即進行下一個計算。但，按一個字一個字印字那種型式的打字機幾乎全然不以緩衝記憶器為介，所以當電子計算機發出了輸出的指令的一群結果，就會一心一意地進行將它依次向打字機送去的工作。於是在這些字還沒全部被印完以前不能轉移為下一個計算。這種打字機的印字所需要的時間，比電子計算機的演算，記憶、判斷各動作的所需時間長很多，所以該部分說不定成為律速階段。因此，使用不藉緩衝記憶器的輸出裝置的計算機來進行計算時，必須設法盡可能減少輸出印字數。

我們應當留意到遠程終端機在今後將和輸出入裝置相關而將成為重要任務的傾向。上面所述是假設輸出入裝置在空間上和電子計算機本體接近。但，也可以利用從遠程的輸出入裝置的收發裝置，以通信線路為介利用電子計算機。這種終端機有兩種，一種是僅具有和收發以及控制有關的機能；另一種是它本身是一種小型電子計算機，將其記憶裝置當做一種緩衝記憶器使用，藉以完成高速的收發機能。此外其資訊的收發容量（速度）也有不同的水準。要利用遠程終端機時，不但能利用和此遠程終端機連結的電子計算機本體（硬體）的高水準之功能，它所有的各種程式（軟體）或資料等也能夠在遠距離加以利用。

目前雖然很難正確地估計，但現在生產的小型以至大型各種電子計算機，可認為分成具有許多終端機的超大型電子計算機；以及桌上用或單一機能（譬如說僅用於分析儀器的輸出數據之解析）的超小型電子計算機之分極化的傾向。

(3) 記憶裝置

電子計算機本體中負有非常重要任務的就是記憶裝置 (storage memory device)。數位電子計算機的記憶裝置可以比喻為藉許多段落，分割成大小相等的巨大的資料架。各段落均按照順序編以門牌。如果這個架子過大，存放於其一隅之段落的資料出入時間就較長，所以必須在作業員近旁設置一個僅能輸入所需資料的較小型的主架。這就是主儲存器 (main storage)，主儲存器通常由磁心所構成。圖 1 的運算、控制部即相當於作業員。可是，如果僅僅是主架的話存放容量尚嫌不足，所以須另外裝設足夠大的補助架，遇到需要這個資料時，將補助架的一群資料歸納起來和主架同數資料調換來使用。這樣做的話，雖然有大的容量却能很迅速地把資料給出納。這在電子計算機相當於補助儲存器 (auxiliary storage)，例如磁鼓 (magnetic drum)、磁碟 (magnetic disk)、磁帶 (magnetic tape) 等均以此目的使用。

就以電子計算機而言，被存放於各區域亦即記憶位置的是為一個二進數，這些二進數稱為一語句 (word)。二進位數，亦即位元組數稱為語句長，為 12~41 位元 (bit)，以十進數而言大多數是在 4~12 位數的範圍。

(4) 運算及控制裝置

在記憶位置中之一部分，以使電子計算機完成運算等功能的特殊目的使用，稱為暫存器 (register)。電子計算機藉控制裝置解讀由程式 (program) 所指示的動作，向各部發出控制指令 (control instruction)，主要是利用暫存器來執行指令。

2 電子計算的功能與軟體

有很多人認為電子計算機是萬能的。事實上其能力非常之大。但比較基本的機能却單純得令人不敢相信，而且種類也少。所謂大的能力都是由它的巧妙的組合產生的。這種組合的作業就是程式計劃(programming)，而其成果的累積就是軟體(software)。

電子計算機普通具備記憶、運算、判斷等三種功能。其中以運算機能為例，電子計算機所具備的電路（硬體）所能執行的，只不過是二進數的算術運算、邏輯運算、進位等少數而已。要是說它連執行算術運算中的乘法、除法的電路也沒有的話，也許有很多讀者會大吃一驚。就拿判斷能力來說，只能判斷某數是正、負或零而已。如前所述，儘管所謂硬體非常幼稚，但是電子計算機却能解高等數學的問題，以及具有化學工程中最佳運轉所需的判斷能力，如前所述，這一點的確有賴軟體的威力。

倘欲讓電子計算機執行某些工作，我們必須把該工作分解，改寫為電子計算機所具有基本動作的一連串系列。要使電子計算機進行各種基本動作的指令(instruction)，都是依賴於各電子計算機所固有的二進碼(binary code)。譬如說，如果指令語句的最初三位元是100，則可以具體決定那是一種加法指令。因此，電子計算機所能解讀的最終性的動作指令，亦即程式，是由1與0所構成的數值列。稱此謂之機器語言(machine language)。可是要記牢各電子計算機的指令碼以寫機器語言的程式，那就太過於複雜。於是，使用按照最接近人類語言或數學所使用的公式以一定文法的語言寫程式，使用翻譯程式翻譯成機器語言，讓電子計算機記憶、執行。

正如所述，一定的程式計劃用的語言，以及它的翻譯程式，無論

何時都成爲一對，但是在這些語言與程式之中，所謂組合程式(assembler)，是各機種固有的使機器語言成爲稍微偏向人類所容易使用的一種語言。比它們更接近於人類語言，而且含有近乎於公式表現法而容易使用的語言（翻譯程式），總稱爲編譯程式(compiler)，而編譯程式的語言部分的文法爲不取決於機種的共通用語言（見圖2）。較具代表性者，例如有FORTRAN，ALGOL，PL/1等。各有各的長處與短處，而目前對於技術計算用者而言，通常使用FORTRAN，同時本書也僅使用FORTRAN。精通其中一種語言的人當較容易學會其他編譯程式語言。

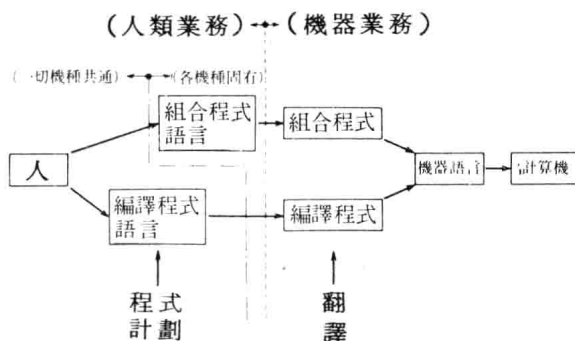


圖2 組合程式與編譯程式

目前來說，也許讀者沒有實際感覺到，這些語言容易使用，但有時候比起藉機器語言或組合程式編寫一樣程式內容時，多犧牲了運算處理能力。將利用這些語言所寫的一行程式和龐大數量的機器語言程式互相對應這一點，通常需放在腦海裏，至少必須防止因程式設計員疏忽而引起的效率降低。關於這幾點，請各位讀者熟讀本章第四節之例，或各章例題的程式解釋之項，裨以領會。

以上所說的就是將人類的語言翻譯成機器語言的有關軟體的一些瑣事。但是和翻譯相關而利用電子計算機時另有一種比較重要的一面

8 計算機在化工上之應用

。那就是要把比較高級的運算，翻譯成電子計算機所能做的算術的語言，例如總稱為數值計算法的領域即相當於此。譬如說，電子計算機並不具備三角函數或定積分的計算，代數方程式或微分方程式等求解所用的運算電路。因此，需要一種藉加法、減法、乘法、除法之組合而達成一切高級運算的一種翻譯。如果由程式設計員把這些一一執行的話那就是一件不得了的事，幸虧關於常見的運算，均準備了名叫做SUBROUTINE 或FUNCTION的既成的程式。可是這些在數值計算法中，有的很難把它歸納為一般性的既成程式的形態，而本書中的例題舉出了這種情況下的程式。

3 利用電子計算機時應注意事項

電子計算機可以說是一把非常鋒利的刀，但是要有效運用它時却往往有危險性。以下扼要說明這些。

(a) 基礎學科與電子計算機 既使不了解現象的機構，使用電子計算機也許能預測可能符合觀測數據的所謂black box model，而且即使不知道許多常微分方程式的解析性解法，電子計算機也能幫我們求出其數值的解法。正如所述，有時候會發生有了電子計算機就不必學基礎學問中的一部分的錯覺。但，電子計算機只不過是一種站在基礎原理上，使用數值較具體地實施解析或設計，所使用的工具而已。如果沒有基礎原理，則在工程方面的電子計算機的地位就淪落為只不過是一種記憶裝置而已。因此，在我們已邁進了電子計算機時代的今天，基礎科目的重要性一天一天增加，無論如何也不會減輕這一點，是筆者要在此特別強調的。

(b) 直感力的養成與電腦 例題對於工程學的學習是需要的。使用計算尺或圖表，一面反複試行錯誤一面解龐大的例題是一件