

HUAXUE GONG
CHENG CHENG XU
SHE JI LI TI XI TI JI

日本化学工学协会 编

化学工程程序设计 例题习题集



化学工业出版社

化学工程程序设计 例题习题集

日本化学工学协会 编

麻德贤 译

化学工业出版社

本书主要介绍化学工程程序设计的基本过程,供具有初步FORTRAN语言基础的读者使用。全书按化工实用的几种数值计算方法分为八章。内容不以纯数学的阐述为主,而着重解决化工应用问题。各章例题主要介绍程序设计要点、框图、程序、标识符及程序解说等,并给出了计算结果。为加深读者的理解,各章均有练习题。

书中题目是从日本全国各大学搜集的,可做为高等院校化工专业电子计算机应用教学参考书。对从事化工科研、设计和生产的技术人员也有参考价值。

日本化学工学协会 编

化学工学プログラミング演習

発行株式会社培風館(昭和53年9月初版三刷発行・東京)

化学工程程序设计例题习题集

麻德贤 译

责任编辑:孙绥中

封面设计:任 辉

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本 $850 \times 1168^{1/32}$ 印张 $11^{1/4}$ 字数298千字印数1—11,000

1984年6月北京第1版1984年6月北京第1次印刷

统一书号15063·3561定价1.40元

序

在一些化学工程研究单位和企业中,电子计算机的利用程度是很高的,无疑今后还将不断增加。因而,各大学的化学工程系都开设有各种电子计算机应用课程。各企业也都很重视这方面的教育。

1973年(昭和48年),日本召开了全国各大学化学工程系及有关学科的教育、研究讨论会(文部省主办的全国大学工业化学、化学工程联合研究会),会上提出了关于电子计算机的教育问题,参加会议的全体成员,对此都表示十分关注。据此,化学工学协会在教育委员会内设立了电子计算机小委员会,对日本各大学、企业进行了征询调查,根据调查的结果在1974年年会上讨论了“在化学工程领域中应如何进行电子计算机教学”的问题。会议期间明确了很多问题,并特别指出,当时还没有一本“针对化学工程的电子计算机教学用习题集”的问题。

化学工学协会为解决这一问题,委托电子计算机小委员会编辑这方面的书籍。电算机小委员会接受了这个任务,并确定了这本书的编辑大意应是,“以化学工程直接有关的各种问题为对象,熟练各种数值计算的程序设计”,要“脱离纯数学的数值计算,而能直接求解化学工程领域中的有关问题”。

考虑到程序设计语言、数值计算方法这类内容的书籍当前是很盛行的,其中有不少是很好的。因此,本书对于大部分这类问题,都依靠那些书去解决。本书设想读者是已经有了一般FORTRAN语言初步学习基础的。

本书把电子计算机数值计算方法分为八章。各章都给出了例题,解说了化学工程程序设计的要点,并给出了框图、程序解说、答案等。各章还给出了练习题,读者可以按问题的简单提示

自己作出程序、求解、并与给出的答案相对照。

本书编辑过程中，曾对全国各大学进行征询，在此基础上收集了100多个问题。编辑委员会（电算机小委会）对此进行了统一整理。但考虑到，读者以本科学生为主，以及读者在实地练习中所使用的电子计算机在硬件、软件两方面的条件限制，因而在编辑过程中，对化学工程、数学及电算机技术上某些深度、广度方面较好的问题，只能割爱了。

本书作为教学实习用还是个初步尝试，不周全的地方一定很多，请批评指导。与电算机教育有直接关系的各方面以及化学工程各专业方面，都很关心本书内容的提高，今后将申请出版有关高深技术内容的续卷，期待各界予以支持。

在收集问题的过程中，全国各大学曾多方提出宝贵意见。对足立毅太郎，诹野贵明，今石宣之，上田光三郎，植田洋匡，上村 浩，江口 弥，加藤滋雄，金冈千嘉男，河村祐治，鬼头繁治，熊沢英博，品川秀夫，寺本正明，西川正史，古田 武，牧野和孝，舩冈弘胜，三宅寿夫，宫南 启，室山胜彦，吉村尚真各位的协助深表谢意。编辑委员会的各位，特别是三位干事作了突出的努力。对培风馆野原、本间两位的大力支持在此一并致谢。

社团法人 化学工学协会

“化学工程程序设计例题习题集”编辑委员长

桐荣良三

昭和50年12月

目 录

绪论	1
1 电算机的结构	1
2 电算机的功能和软件	4
3 使用电算机的注意事项	6
4 FORTRAN文法——使用时的错误	7
5 本书的构成及使用方法	13
一、代数式的计算	20
例题	20
1.1 多级连续槽式反应器的设计（2次反应）	20
1.2 沉降法测定液体粘度的计算	23
1.3 气液相平衡关系的计算	27
1.4 热传导方程式解析解的计算	31
练习题	36
1.1 多级连续槽式反应器的转化率（2次反应）	36
1.2 混合气体的假临界参数	37
1.3 搅拌动力的计算	29
1.4 2组分蒸馏的塔板计算	41
1.5 化学平衡常数的计算	43
二、插值、微分、积分	46
例题	46
2.1 分子比容数据的插值	46
2.2 粘度的插值	52
2.3 用间歇反应器测定反应速度	55
2.4 示踪响应	60
2.5 固定床吸附塔的转效时间	66
练习题	76
2.1 水蒸汽压的插值	76

2.2 除尘装置的除尘效率	77
2.3 绝热间歇反应器的设计	78
2.4 吸收塔的高度	79
2.5 间歇单级蒸馏蒸汽和馏出液的组成	81
三、线性方程式、矩阵	83
例题	83
3.1 过程的物料平衡	83
3.2 粉碎过程的解析	90
3.3 蒸馏塔内组分的分布	95
练习题	110
3.1 混合液制品的调合	110
3.2 配管网的解析	112
3.3 复合反应系的独立反应数	114
四、非线性代数方程式	116
例题	116
4.1 完全溶液的蒸气压	116
4.2 由范德华方程式推算气体体积	120
4.3 板状材料的热风干燥	123
4.4 绝热连续搅拌槽反应器的反应率	129
4.5 单级蒸馏的最佳化	135
练习题	139
4.1 多元组分物系溶液的沸点	139
4.2 由R-K (Redlich-Kwong) 方程式计算气体密度	141
4.3 逆流多段萃取塔	143
4.4 连续槽组反应器的设计 (1.5次反应)	145
五、参数推算	147
例题	147
5.1 SO_2 的溶解度式	147
5.2 固相催化反应的速度方程式	153
5.3 液相吸附平衡式	163
练习题	176
5.1 传热装置的传递函数	176
5.2 膜给热系数的关联式	177

5.3 蒸汽压的实验式	178
六、常微分方程式	180
例题	180
6.1 球形粒子的运动轨迹	180
6.2 自动控制系统的应管	190
6.3 催化反应装置内的温度、转化率分布	197
6.4 翅片的温度分布	203
练习题	210
6.1 复合反应的选择性	210
6.2 球形粒子的轨迹 (修正Euler法)	211
6.3 翅片的温度分布 (搜索法)	213
6.4 翅片的温度分布 (未定系数法)	214
6.5 边界层的速度分布	215
6.6 气流中微粒的碰撞效率	216
七、偏微分方程式	219
例题	219
7.1 气体吸收速度	219
7.2 热传导方程式的有限差分法求解	224
7.3 催化反应装置中的温度、转化率分布 (2维解法)	232
7.4 稳定2维热传导	243
练习题	250
7.1 过滤澄清液的过滤时间	250
7.2 多孔性填充床层内的流体流动	251
7.3 平板内的不稳定传热	253
八、概率·统计	254
例题	254
8.1 粉尘的粒度分布	254
8.2 测定值的置信界限	261
8.3 圆周率的估算	265
8.4 设备材料的置信性	268
练习题	275
8.1 资料的整理	275
8.2 复杂立体的体积	276

8.3 中心极限定理	277
附录	279
1. 练习题解答	279
2. 辅程序及其使用法	341
3. FORTRAN初步文法一览表	350

绪 论

根据经验痛感工具的难得，一把螺丝刀或一把扳手可以顺利完成的作业，如果离开这些工具，即使付出更多的劳动也难以奏效。人类区别于其他动物的特征，就在于使用工具，可以说这是今日人类文明的基础。在近代工具中，电子计算机（这里所说的电算机，是指最少有 4K 存贮容量，程序以作业形式实施的数字电子计算机）的出现，具有划时代的意义。当前对需不需要使用电算机的议论已是多余的，问题已集中在如何才能把它使用好。

我们知道，即使工具很珍贵，但如果不能熟知它的性质和功能，则就不能充分发挥它的作用。化学工程技术人员、研究人员对电算机的需求若何，对于这个问题即使在此一一陈述，恐怕大多数读者也难于得到切实的感受。莫如读者各自由实践去作亲身体会。本书也就按这个出发点作为编集的目的。化学工程既是化学过程又是环境系统，在工程上特别是对于复杂对象的处理，需要借助于电算机，不然的话，在工程领域中将有大量的问题得不到解决。当前多数化学工厂，是在没有电算机就不能运转的前提下设计的。其中各种装置的设计也离不开电算机，例如在精馏塔的设计中，采用了一系列高精度的计算式，这种复杂的设计计算，实际上用手算已成为不可能的。

对于电算机的功能，同样也要通过亲身体验，才能有真正的理解。至于对其理解的水平，本书设想读者并非是电算机的设计、制造人员，仅从使用者的立场出发，对电算机的结构、功能作出必要的最低限度的知识介绍。

1. 电算机的结构

电算机组成的概念见图0-1。

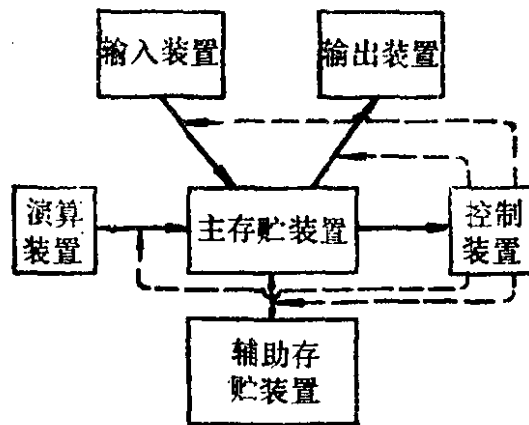


图 0-1 电计算机的组成

——信息流

.....控制信号流

(1) 输入装置

电计算机通过输入装置接受程序及数据等信息。各种电计算机系统的输入装置有所不同，具有代表性的是卡片和纸带读入装置。也可以从打字机键盘，以会话的形式输入信息。磁带读入装置用于高速送入大量信息的场合。每隔一定间隔取样的，连续变化的模拟信息，通过 AD 转换（把模拟量转变成数字量）后输入，其它各种各样的输入装置，就不在此一一列举了。

电计算机的输入与时间有关，因而不可能同时输入两个以上的信息，这对电计算机的应用技术来说有比较重要的意义。例如，在电计算机用于化工流程控制时，要使电计算机同时读入流量、温度等大量数据是不可能的，只能逐次地高速读入。假定电子计算机监视着 n 个变量，若电计算机读入一个变量所需要的时间为 τ ，则取样周期就是 $n\tau$ 。这取决于信息的变化速率与监视精度要求。在这种情况下，要想成功地使用电计算机，必须掌握取样周期与信息变化速率之间的关系，要学习初步的傅立叶解析和取样理论，并需要有选取数值积分和微分方程数值解的步长的知识。

(2) 输出装置

电计算机的计算结果可以卡片、纸带、磁带、模拟量等形式输出。最普通的形式是用打印机打字输出。普通打印机是逐字打印

的，而行式打印机则是成行打印的。前者打印的最高速度是每分钟1000字左右，而后者按每行最多130字计，打印能力为每分钟250行左右。这两种打印机除了打印速度不同之外，在其本质上也是有差异的。行式打印机打印的计算结果，是从电算机的暂时缓冲存贮器取出来的。电算机把计算结果先放到相当于仓库的缓冲存贮器，马上就去进行下面的计算。单字打印型式的打印机，大都没有缓冲存贮装置。电算机以打印指令处理成批的计算结果，送到打印机逐次的输出。若此，必须全部打印完了才能转去执行下面的计算。这种打印机的打印时间，要比电算机的运算、存贮、判断等动作所需要的时间长得多，很有可能成为控制步骤。因而，使用的计算机其输出设备若没有缓冲存贮装置时，应注意力求减少输出打印字数。

与输入、输出装置有关的是，今后将着重使用远程终端设备的倾向。上述的输入、输出装置，都是设置在电算机附近的。电算机也可以利用通讯回路在远程设置接受、发送信息的输入、输出装置。这种具有接受、发送信息及有关控制功能的终端装置本身是一架小型电算机，它配备有缓冲存贮装置，具有高度接收、发送信息的功能。对于信息的接收、发送容量（速度）有各种不同的水平。利用这种远程终端装置与电算机本体（硬件）直接联系，可以高效地利用其功能。更为重要的是，远程地区也可以利用各种程序和数据等软件资源。

当前生产的小型到大型的各种电算机，有带多终端的超大型电算机，以及台式单一功能的超小型电算机（例如分析仪器的数值计算输出），目前的生产有向两极分化的倾向。

（3）存贮装置

电算机本体中最重要的部分是存贮装置。数字电算机的存贮装置，就象一个巨大的资料架，按相等的大小分割成很多区间，对这些区间都按顺序予以编号。这种架子过大的话，对容纳资料的发送、接收就需要花费较长的时间。因而，操作员需要就近设置一个规模比较小的主架，用以贮放眼前必要的资料。这就是用通

常称作磁芯的材料构成的主存贮装置。当然，如图0-1所示，对操作员来说还有运算、控制等部分。当主架的存贮容量不足时，那就要设置非常大的辅助架。当须要辅助架内的资料时，电算机则把辅助架中一批与主架同等数量的资料与主架相置换。这样，就可以使大批资料得到快速的接收和发送。这种电算机的辅助存贮装置，有磁鼓、磁盘、磁带等。

在电算机存贮装置里，每一个区间贮放一个2进制数，称作1个字。这个2进制数的位数称作字长，如12~41位。十进数的范围大多是4~12位。

(4) 运算及控制装置

为完成电算机运算功能而使用的存贮装置称作寄存器。电算机控制解释程序指示的动作、发布命令，主要靠寄存器来实施。

2. 电算机的功能和软件

很多人都认为电算机是万能的。事实上它的能力虽然很大，然而它的基本功能却是惊人的简单。其强大的能力，只不过是出于把那些简单功能巧妙组合的结果。完成这种组合作业的就是程序，程序的集合称作软件。

电算机的功能一般分为存贮、运算、判断三种。以其运算功能为例而言，电算机电路（硬件）所能做的，只不过是2进数的算术运算、逻辑运算、进位等这么少数的几种。连进行算术运算中乘法、除法的电路都没有，这一点使很多读者感到非常惊讶。其判断能力，也只不过是判断数的正负而已。虽然硬件极其简单，可是电算机却能解算高等数学问题，具有对化学工厂最佳运转的判断能力。这些能力都是依靠软件来完成的。

不论让电算机完成什么样的工作任务，都要把这个工作任务分解成为电算机的一系列基本动作。电算机的基本动作指令，是按电算机所固有的2进制代码形成的。例如在指令语句开头有3位数字是100，这是个进行加法运算的指令。命令电算机动作的指令群就是程序，它是由1和0构成的一系列数值，这就是机器

语言。用这样的代码写成的机器语言程序非常繁杂。因而，常是按人用语言及数学式以一定的语法写成程序，然后再用翻译程序把它翻译成机器语言贮入电算机。

程序设计所使用的语言与其翻译程序是一一对应的。其中称作汇编程序语言的可以使用户比直接用机器语言稍微容易一些，这是一种为各种机型所固有的语言。后来又有了和人用语言相近并含有数学表达式的语言，叫作编译程序语言，这是一种与机种无关的通用语言（参照图0-2）。有代表性的这种程序语言如FORTRAN、ALGOL、PL/1等。它们各有所长，当前在科学计算上广泛使用FORTRAN，本书也用FORTRAN。对一种语言精通了，再学习其他的也就容易了。

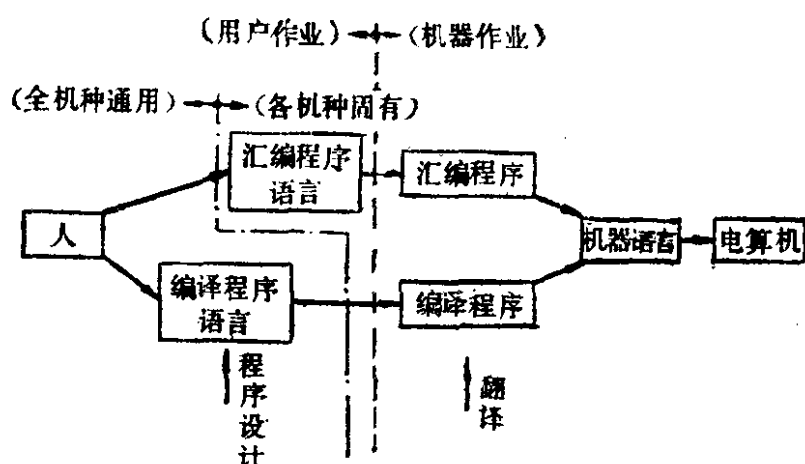


图 0-2 汇编程序和编译程序

这种语言使用容易，可是同样的程序内容比用机器语言及汇编语言书写，要牺牲一些运算处理能力，这一点读者也许还感受不到。每一行这种程序要对应许多行机器语言的程序。在使用时要注意，不要由于疏忽而使程序的能力降低。关于这一点，熟读本章第4节中的例子以及各章例题的程序解说，就会有所体会。

以上谈到了把人类语言翻译成机器语言的软件，这种翻译在电算机使用上是很重要的一个方面。电算机不能进行的高级运算，则要翻译成算术语言，这相当于数值计算方法领域的处理。例如，电算机就没有计算三角函数和定积分，以及求解代数方程

式和微分方程式的运算电路。把所有的高级运算都变成加减乘除的组合，这是一种很必要的翻译。要把所有的这种程序都建立起来，那是很了不起的。幸好，对于一般的运算已有可供使用的现成的SUBROUTINE和FUNCTION程序。但是，要想把数值计算方法通用程序的形式都统一起来则是很难的，本书例题就遇有这种情况。

3. 使用电算机的注意事项

电算机可说是非常锐利的武器，但在使用时也有失误的事情。下面例举几方面的情况。

(a) 基础科学与电算机 有些现象虽然对其机理并不理解，但应用电算机可以作出符合观测数据的黑箱模型，又如多数不知解析解的常微分方程式，可由电算机得出其数值解。若此，就可能产生电算机不需要一切基础理论的错觉。然而，电算机却正是立足于基础理论而具体处理解析、设计、数值的。如果没有基础理论，那么在工程上电算机的地位也就沦落成为单纯的存贮装置了。因而在当前的电算机时代，基础理论的重要性不是减轻而是更增加了，这一点是应予以特别强调的。

(b) 直观能力的训练与电算机 对于工程学科的学习来说，作习题是非常必要地。使用计算尺和图表对规模较大的习题进行试差求解，工作量虽然很大，但可以很好的给予直观的知识，这一点是不可否认的。电算机在实际上确是工程上的有效工具。在使用时，除了输出最终结果以外，最好把计算途径的要点以及相应的参数变化都打印出来。能用图形表示这些变化则更好。

(c) 关于整体的匀称 设想用电算机对某种现象进行解析。对应现象模型的精度、数学上数值计算方法的精度、从取得数据实验的精度到穿孔员数据穿孔的可信赖程度等等，在这些精度中的最差者决定着全体解析的精度。这已经是工程上的一个常识。然而，在这些因素中，与电算机有关部分的精度往往是最高

的。因而要特别注意在解析现象过程中，对整体中各种精度的匀称。

(d) 关于定量化 电算机的一大特征是只能处理定量化的信息，为了使电算机进行各种判断，需要定量表达其判断基准。这在理工学科领域的很多情况下是较难的。在当前一般社会问题都广泛使用电算机的情况下，判断基准定量化的难度更增加了，这是不难想象的。

(e) 关于大型电算机系统 如前所述，本书是为初学者在较小型电算机上实习而提供的，对硬件、软件两方面都没有过高的选择要求。但这并不等于局限本书读者于电算机技术方面的低水平。当前，电算机硬件、软件两方面的发展日新月异，因而要积极努力吸取最新技术，这是我们要时常关心的。

4. FORTRAN文法——使用时的错误

本书设想读者都学过 FORTRAN 基本文法。为了把本书更多的篇幅分给应用问题举例，所以，关于 FORTRAN 文法的解说就让给最近出版的其他有关书籍了。本书为使读者或便于掌握设置了简单的 FORTRAN 文法一览表（见附录）。

对于初学者当然会发生程序误差，程序设计的进步程度与所犯错误的次数是成正比例的。当自己的程序功能不正常时要反复研究程序追查原因，这就要有牢固的程序设计知识。查找程序错误总是很辛苦的。初学者的错误多是共同的，其中存在着一定的查找误差要领。下面将在这方面予以陈述。

在程序错误中，电算机的错误信息分为执行前错误和通过编译后妨碍正常运算的执行错误。其区别随各电算机软件而不一样。完备的电算机软件将尽量按执行前错误给出。

一般按执行前错误给出错误信息并不困难。担心的倒是编译通过、运算开始但不能给出全部的结果，或者给出乱七八糟的结果。这是一种不容易搞清楚的执行错误。像这样各种文法上、理论上的问题，是各种各样的。下面将例举一些比较常犯的错误供

读者熟悉，以作为查找执行错误的借鉴。

(1) FORMAT的不一致

(a)

A = 实数 WRITE (6, 10) A 10 FORMAT (1H, I5)
--

又

J = 整数 WRITE (6, 10) J 10 FORMAT (1H, F10.5)

(b) READ (5, 10) MAX

 10 FORMAT (1 10)

在卡片（或是纸带）中实型数要带小数点穿孔。若上例，则由计算机给出错误信息。

(2) 说明范围的数值

DIMENSION A (10)

.....

READ (5, 10) (A (I), I=1, 20)

若此对输出什么样的错误信息，难于理解的例子很多。

(3) 变量的数、型及顺序不一致

调用 SUBROUTINE SUB (N, A, B) 的时候，虚拟变量和实在变量的正确对应关系是 $N \leftarrow M$, $A \leftarrow P$, $B \leftarrow Q$

(a) CALL SUB (M, Q, P) P与Q的位置错了。

(b) CALL SUB (M, P, Q, R) 变量数不符合。

(c) CALL SUB (S, P, Q) 变量的数型不对。

(a) 所得出的答案的错误比其他两个更严重。

(4) 数组说明不一致

主程序