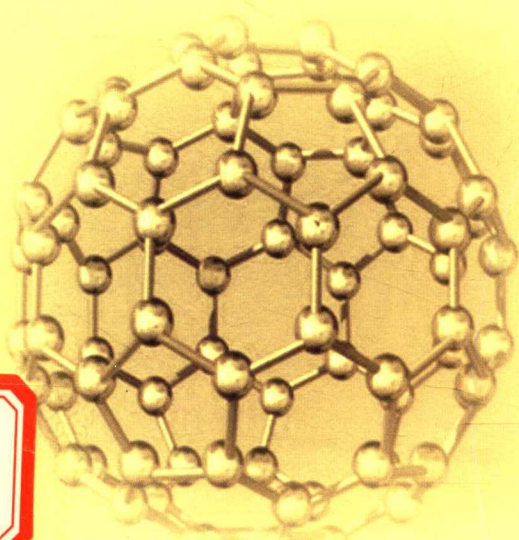



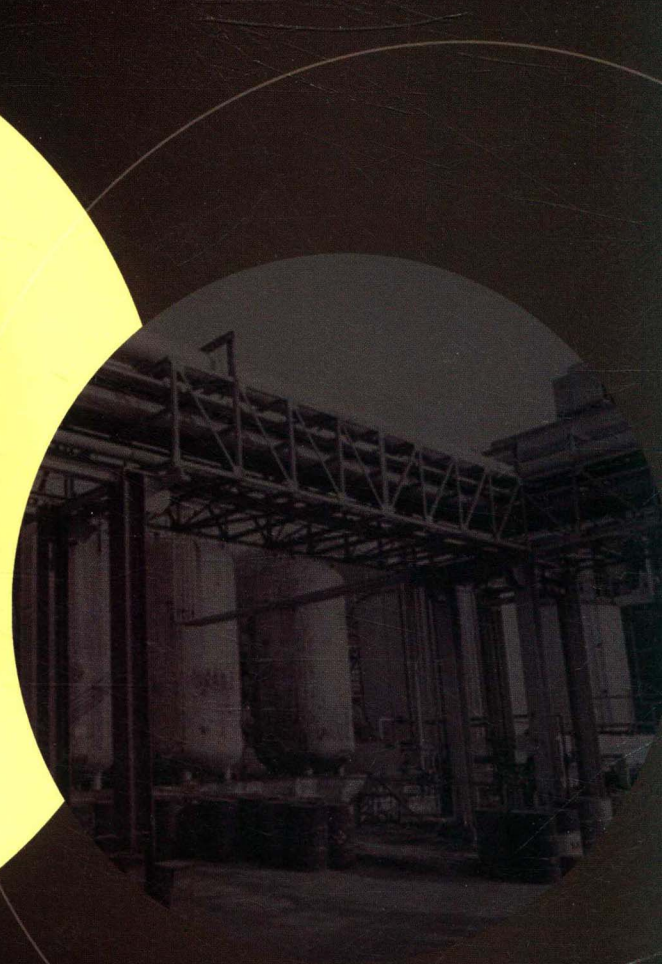
计算机在 化学化工中的应用

主 编 ● 吕利平 徐建华 魏顺安

JISUANJI ZAI
HUAXUE HUAGONG ZHONG DE YINGYONG



 西安交通大学出版社



计算机在化学化工中的应用

主 编 吕利平 徐建华 魏顺安

副主编 张淑琼 董立春 诸 林 封京华

西南交通大学出版社

· 成 都 ·

图书在版编目(CIP)数据

计算机在化学化工中的应用 / 吕利平, 徐建华, 魏
顺安主编. —成都: 西南交通大学出版社, 2017.7
ISBN 978-7-5643-5619-4

I. ①计… II. ①吕… ②徐… ③魏… III. ①计算机
应用—化学—高等学校—教材②计算机应用—化学工业—
高等学校—教材 IV. ①O6-39②TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 176055 号

计算机在化学化工中的应用

责任编辑 / 牛 君
主 编 / 吕利平 徐建华 魏顺安 助理编辑 / 黄冠宇
封面设计 / 何东琳设计工作室

西南交通大学出版社出版发行
(四川省成都市二环路北一段 111 号西南交通大学创新大厦 21 楼 610031)
发行部电话: 028-87600564
网址: <http://www.xnjdcbs.com>
印刷: 成都中铁二局永经堂印务有限责任公司

成品尺寸 185 mm × 260 mm
印张 13.25 字数 314 千
版次 2017 年 7 月第 1 版 印次 2017 年 7 月第 1 次

书号 ISBN 978-7-5643-5619-4
定价 35.00 元

课件咨询电话: 028-87600533
图书如有印装质量问题 本社负责退换
版权所有 盗版必究 举报电话: 028-87600562

前 言

由于计算机具有高速计算的能力,使其与传统的化学化工学科不断整合和交叉渗透。化学化工学科中的化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域都离不开计算机的帮助。对于化学化工专业的学生,熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。本书根据简明、实用的原则,对化工专业所用的软件,结合相关案例,进行详细讲解。由于本书面向的是应用型高校的化工专业学生,所以对软件的理论 and 原理上没有过多介绍,着重为学生介绍软件使用的方法。

本书分为 5 章,主要包括:化学化工信息检索与管理, Microsoft Office 在化学化工中的应用, Origin 在化学化工中的应用, AutoCAD 在化学化工中的应用, Aspen Plus 在化学化工中的应用等。其中,第 1 章是有关化学化工相关文献、专利、文摘等的检索及文献的管理与应用,也是作为化学化工工作者所必须掌握的内容。第 2, 3, 4, 5 章介绍化学化工中常用的一些软件的使用方法。

本书由长江师范学院的吕利平、徐建华和重庆大学魏顺安主编,重庆大学董立春教授,西南石油大学诸林教授等参编。全书由吕利平统稿。陈淑蓉、曾行艳、赵俊程、张继、范文龙、龙春燕、彭波、黄东等同学也参与了本书的文本输入及部分章节的编校工作。

本书在编写过程中,参考了大量的科技图书及教材,在此向原作者表示感谢。本书经编者多年编写,并以讲义的形式在长江师范学院试用 3 年,但由于编者水平所限,书中不妥之处在所难免,敬请广大读者和专家批准指正。

编 者

2016 年 12 月于重庆

目 录

1 化学化工信息检索与管理	1
1.1 化学化工数字信息资源	1
1.2 通过 Internet 上的搜索引擎查找目标化学化工信息	1
1.3 利用数据库检索化学化工文献	6
1.4 专利检索	16
1.5 Internet 上的物性数据库	18
1.6 网上化学化工标准	19
2 Microsoft Office 在化学化工中的应用	20
2.1 概 述	20
2.2 Microsoft Office 在化学化工中的应用	20
2.3 Microsoft Word 在论文撰写中的应用	21
2.4 Microsoft Excel 在化工中的应用	32
2.5 最优化与 Excel 规划求解	41
2.6 Microsoft PowerPoint 在化工中的应用	45
2.7 WPS 文字 2016 的用户界面	49
3 Origin 在化学化工中的应用	58
3.1 Origin 简介	58
3.2 Origin 的基本操作	59
3.3 Origin 功能设置	66
3.4 多图层绘制	69
4 AutoCAD 在化学化工中的应用	73
4.1 AutoCAD 软件概述	73
4.2 AutoCAD 软件的主要功能	74
4.3 化工制图概述	103

4.4 利用 Auto CAD 2008 绘制化工工艺流程图	106
5 Aspen Plus 在化学化工中的应用	121
5.1 概述	121
5.2 图形界面与流程建立	126
5.3 流体输送单元概述	141
5.4 混合器/分流器	148
5.5 换热器单元模拟	155
5.6 分离单元模拟	159
5.7 工业流程模拟	167
Aspen Plus 常用词汇中英文对照表	176
附录 1 科研论文撰写介绍	189
1.1 科研论文简介	189
1.2 科研论文的基本结构	190
1.3 科研论文的内容与格式要求	191
1.4 学术道德规范	193
1.5 学术不端行为	194
附录 2 SQL 的安装教程	196
参考文献	206

1 化学化工信息检索与管理

1.1 化学化工数字信息资源

作为一名化工专业的工作人员，如何从 Internet 上快速准确地获取有用的化学化工信息，已经成为其专业素质的一种象征。那么，Internet 上的化学化工信息有哪些？

按照化学化工信息在 Internet 上的存在形式，主要有以下几种：

- (1) 化学化工新闻。
- (2) 化学化工电子期刊。
- (3) 化学化工图书。
- (4) 化学化工类会议信息。
- (5) 专利信息。
- (6) 化学化工类的数据库。
- (7) 化学化工类相关的学会、组织、机构、实验室及小组信息。
- (8) 化学产品目录、电子商务及相关的公司。
- (9) 化学化工相关的教学资源和应用软件。
- (10) 化学化工文献。
- (11) 化学化工的在线服务、在线讨论、论坛等。

1.2 通过 Internet 上的搜索引擎查找目标化学化工信息

1.2.1 百 度

百度 (<http://www.baidu.com>) 是全球最大的中文搜索引擎。2000 年 1 月由李彦宏创立于北京中关村，致力于向人们提供“简单，可依赖”的信息获取方式。其首页如图 1-1 所示。

1.2.1.1 常规检索

可直接在搜索框内输入关键词，如“页岩气”，然后单击“百度一下”按钮（或直接按回车）进行搜索，就可以搜索出关于页岩气相关的信息，如图 1-2 所示。当需要搜索的关键词有两个或两个以上时，可以使用逻辑运算符进行搜索。如空格表示逻辑“与”操作，“_”表示“非”操作。如“页岩气 运输”表示搜索结果须同时含有“页岩气”和“运输”这两

个关键词，如图 1-3 所示；如果需要搜索含有“页岩气”且不含有“运输”关键词的结果，则检索时输入“页岩气-运输”，再回车就可以找到相关搜索结果。大写的“OR”表示逻辑“或”操作，如输入“页岩气 or 运输”，表示搜索结果含有关键词“页岩气”或者“运输”。在检索信息时还需要注意，如果检索关键词加上双引号，则代表精确查找。上述逻辑算符可混合使用，搜索引擎将按照从左向右的顺序进行读取。



图 1-1 百度首页



图 1-2 关键词常规搜索结果



图 1-3 逻辑“与”操作搜索结果

此外，在进行百度搜索时，注意使用书名号“《》”的检索功能的特殊性。其特殊性包含两个方面：一是书名号会出现在搜索结果中，二是被书名号括起来的内容不会被拆分。例如，检索《计算机在化学化工中的应用》教材，可以在检索的时候直接输入“《计算机在化学化工中的应用》”，获得的搜索结果，如图 1-4 所示。



图 1-4 “《》”检索结果示例

1.2.1.2 文档搜索

百度支持对特定格式二进制文件的检索，例如，对微软的 Office 文档（Word，Excel，PowerPoint）、Adobe pdf 文档、rtf 文档进行全文搜索。限定所搜索文档的格式需使用“filetype”

命令。

语法为：关键词 filetype: 文件扩展名。

例如：页岩气 filetype: pdf。

表示：所有包含关键词“页岩气”的 pdf 格式的文档。

按以上案例的要求，搜索得到的结果如图 1-5 所示。

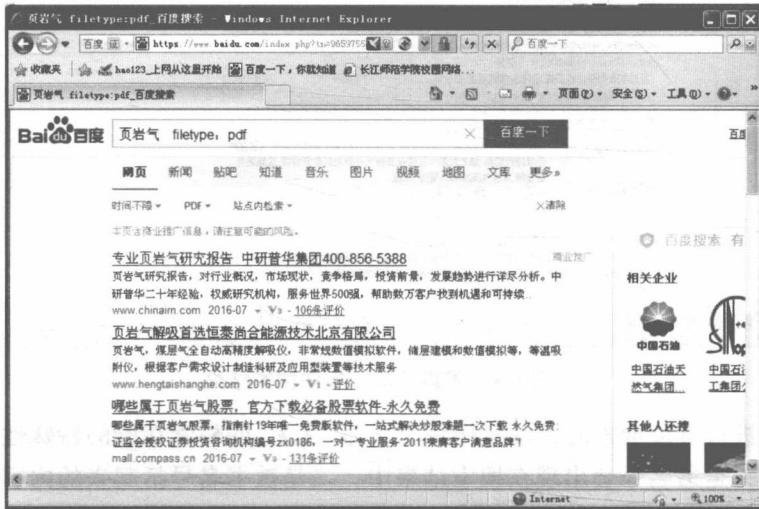


图 1-5 案例“页岩气 filetype: pdf”搜索结果

1.2.1.3 学术搜索

为了方便广大科技工作者，百度还提供了专用的学术检索工具——百度学术搜索 (<http://xueshu.baidu.com/>)，其首页如图 1-6 所示。该检索平台提供大量的中英文文献检索的学术资源，如来自学术著作出版商、专业性社团、各大学及其他学术组织发表的论文、图书和摘要等。



图 1-6 百度学术首页

以搜索“页岩气”相关资料为例，简单介绍百度学术查找文献的步骤。首先，在检索栏输入“页岩气”，点击“百度一下”（或者敲击“回车键”）就可以查看检索结果，检索页面如图 1-7 所示。百度学术的默认排序方式为相关度，还可以通过调整排序方式来进一步检索，如按“被引量”和“时间排序”等。



图 1-7 百度学术“页岩气”相关文献检索结果

同时在检索时也可以进行跨语言检索，如页岩气英文检索结果如图 1-8 所示。



图 1-8 百度学术“页岩气”相关英文文献检索结果

1.3 利用数据库检索化学化工文献

1.3.1 中国期刊全文数据库(中国知网)

CNKI (http://www.cnki.net/), 全称国家知识基础设施工程(National Knowledge Infrastructure, CNKI), 由清华大学、同方知网公司于1999年发起, 目前已建成世界上全文信息量最大的“CNKI 数字图书馆”。该数据库包含的子数据库有: 期刊全文数据库、学位论文数据库、会议论文数据库、中国引文数据库等。本书主要介绍中国期刊数据库。

进入到 CNKI 的首页, 选择“中国期刊全文数据库”即可以进入到该数据库的检索页面, 检索页面如图 1-9 所示。



图 1-9 中国期刊全文数据库检索页面

提供的检索项包括: 主题, 篇名, 关键词, 摘要, 作者, 第一作者, 单位, 刊名, 参考文献, 全文, 年, 期, 基金, 中图分类号, ISSN, 统一刊号等。此外, CNKI 还支持多条件检索、二次检索和跨库检索等高级功能。

1.3.1.1 主题检索

主题检索是最为常用的检索方式, 通过这种方式检索得到的结果较为全面且精确。选择“主题”项, 可同时在“篇名、关键词、摘要”三个字段中检索用户输入的关键词。与单独使用“篇名”“摘要”或“关键词”进行检索相比, 选择主题项可以获得更多的相关文献。为了避免出现漏检。也可以使用“全文检索”选项获得更多的检索结果, 但这样会使检索的精度变差。

图 1-10 为在篇名中检索“页岩气”关键词的检索结果。除通过关键词检索外，还可以对时间跨度、期刊类别、匹配度等条件进行限定，也可以指定检索结果的排序方式和每页显示数量。



图 1-10 在篇名中检索“页岩气”关键词的检索结果

1.3.1.2 作者检索

在进行科研工作时，需要检索自己感兴趣的作者发表的论文，可以选择“作者”项，其中第一作者检索则只检索该作者以第一作者署名发表的文献。当匹配选项设定为“模糊”时，输入第一作者名“李四”，系统将搜索第一作者姓名中包含“李四”两个字的作者发表的论文。检索结果如图 1-11 所示。



图 1-11 第一作者“李四”模糊匹配检索结果

支持基金: 模糊 ...

作者单位: 模糊

2. 输入内容检索条件:

篇名 词频 并且包含 词频 精确

并且 词频 并且包含 词频 模糊

中英文扩展检索

您可以按如下文献分组排序方式选择文献: (分组只对前4万条记录分组, 排序只在800万条记录以内有效)

文献分组浏览: 学科类别 期刊名称 研究资助基金 研究层次 文献作者 作者单位 中文关键词 不分组

文献排序浏览: 发表时间 相关性 被引频次 下载频次 每页记录数: 10 20 50

摘要显示 列表显示

共有记录8条 首页 上页 下页 末页 1/1 转页

序号	篇名	作者	刊名	年/月	被引频次	下载次数
<input type="checkbox"/> 1	页岩气措施返排液重复利用技术研究	吴玉昆, 邓明坚, 易建湘	江汉石油职工大学学报	2014/03		91
<input type="checkbox"/> 2	页岩气开发中的环境保护问题	李劲, 孙刚, 李范书	石油与天然气化工	2014/03		144
<input type="checkbox"/> 3	陆相页岩气井压裂返排液处理工艺	何飞, 胡耀强, 李辉	油田化学	2014/03		78
<input type="checkbox"/> 4	页岩气压裂返排液处理工艺研究	黄飞, 陈湘萍, 杨和平	环境科学与技术	2013/S		256

图 1-13 多次检索结果图

节点文献

页岩气措施返排液重复利用技术研究
A Study of Recycling Measure Flowback Fluid in Shale Gas

不支持迅雷等下载工具, 请取消加速工具后下载。

【作者】 吴玉昆; 邓明坚; 易建湘;
【Author】 WU Yu-kun, DENG Ming-jian, YI Jian-xiang, Oil Production Technology Institute of Jiangnan Oilfield Company, SINOPEC.

【机构】 中国石化江汉油田分公司采油工艺研究院;

【摘要】 页岩气主要通过采用大规模顺层多段压裂获得。顺层水裂会产生大量的返排液, 返排液若直接排放会对周边的生态环境造成一定的影响, 必须对其进行有效处理。如果能够实现对返排液中顺层水裂液的重利用, 就可减少对环境的污染, 降低开采成本, 节约水资源。研究其处理方法具有极大的技术价值和经济价值。根据页岩气措施液性能要求在仔细分析返排液性质的基础上, 评选出絮凝剂、杀菌剂等水处理药剂, 筛选出适合返排液重利用的减阻剂。在页岩 8-2HF 和集页 12-3HF 井应用中取得较好的效果。
【Abstract】 Shale gas is obtained mainly by multistaged fracturing with large-scale anti-drag water, which brings about a large amount of flowback fluid. Recycling anti-drag water fracturing fluid in flowback fluid is available for reducing environmental pollution as well as production cost and saving water resource. In response to performance requirement of measure fluid in shale gas and based on analysis of property of flowback fluid, this paper selects flocculants and bactericide for water treatment and screen... 更多

【关键词】 页岩气开发; 返排液; 水处理剂; 减阻剂;
【Key words】 Development of Shale Gas; Flowback Fluid; Water Treatment Agent; Drag Reducer;

【文献出处】 江汉石油职工大学学报, Journal of Jiangnan Petroleum University of Staff and Workers, 编辑部邮箱, 2014年03期
【分类号】 TE377 【下载次数】 91

节点文献中:

本文链接的文献网络图示:

» 本文的引文网络

图 1-14 检索结果的阅读页面

1.3.2 科学引文数据库 (SCI)

《科学英文索引》(Science Citation Index, SCI) 是由美国科学信息研究所 (ISI) 1961

年创办出版的引文数据库，也是世界著名的四大科技文献检索之首。SCI 收录了自然科学、生物、医学、农业、技术和行为科学等领域、94 个类、40 多个国家、50 多种文字的 12 000 余种重要期刊。所选用的刊物来源国家主要有美国、英国、荷兰、德国、俄罗斯、法国、日本、加拿大等，也收录一定数量的中国刊物。SCI 已成为国际公认的反应基础学科研究水准的代表性工具，世界上大部分国家和地区的学术界将其收录的科技数量的多寡，看做是体现一个国家的基础科学研究水平及其科技实力的指标之一。统计结果显示，我国 SCI 收录科技论文从 2008 年的 11.7 万篇增加到 2012 年的 16.5 万篇，连续五年居世界第二位。

Web of Science 是美国 Thomson Scientific 公司开发的机遇 WEB 的产品，包括三引文库（科学引文索引 SCI、社会科学引文索引 SSCI 和艺术与人文科学引文索引 A&HCI）和两个化学数据库（CCR、IC），以 ISI Proceedings, Derwent Innovation Index, Journal Citation Reports 等。Thomson Scientific 的网站主页为 <http://ip-science.thomsonreuters.com/>，ISI. web of Knowledge 的网址为：<http://wokinfo.com/>。用户在购买了使用权限后，可登录到 ISI Web of Knowledge 上进行检索，其首页如图 1-15 所示。

Web of Science 的检索途径有 4 种：普通检索（Search）、引文检索（Cited Reference Search）、结构检索（Structure Search）和高级检索（Advance Search）。其中，结构检索需下载并安装 Wos_Chemistry Plugin 插件，用户可以使用该插件画出化合物的结构，然后进行检索。本节主要介绍普通检索方式。

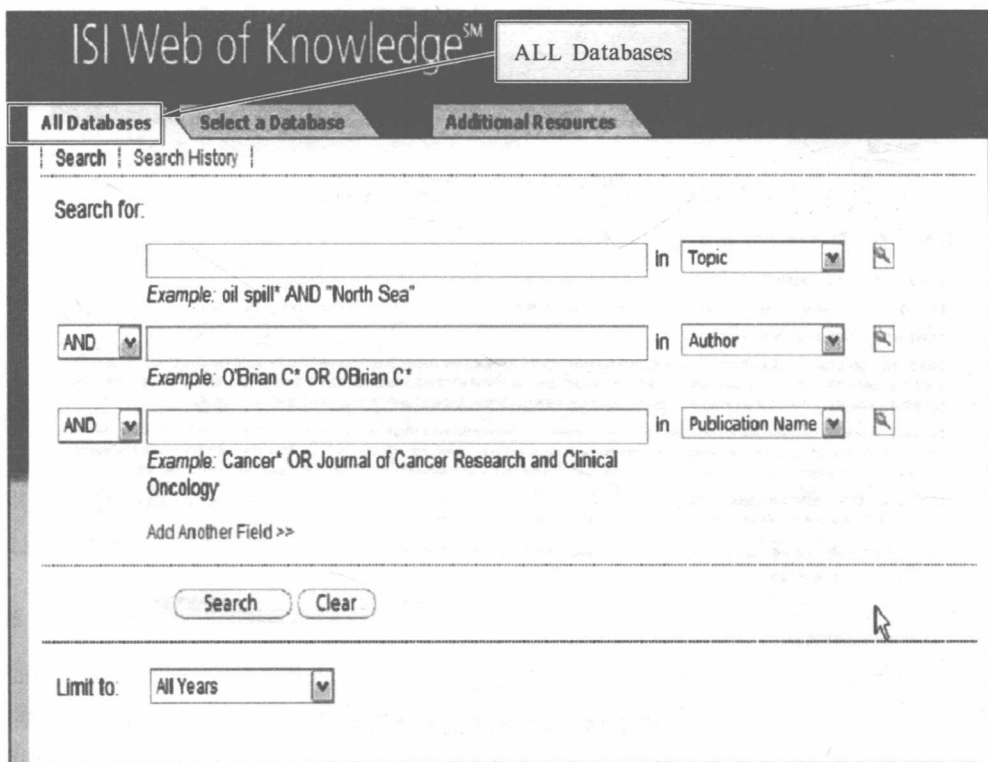


图 1-15 ISI Web of Knowledge 首页

使用普通检索时，用户可直接在搜索栏中输入检索词，如“carbon nanotubers”，然后

单击“检索”按钮即可获得检索结果。为了便于快速找到所需文献，可对检索结果做如下处理。

(1) 检索结果排序。

在右上角的“排序方式”栏，可使用下拉菜单选择检索结果的排序方式。可供选择的排序方式有：时间（Latest date）、被引用次数（Time cited）、相关度（Relevance）、第一作者（First author）、文献来源（Source title）和出版年份（Publication year）等。

(2) 结果限定。

在左侧的“精炼检索结果”栏中。可以对检索结果进行进一步的限定，常用选项有：二次检索（Search within results for）、文献类型（Document types）、作者（Authors）、文献来源（Source titles）、出版年（Publication years）、研究机构（Institutions）、语种（Languages）、国家/地区（Countries/Territories）等。也可以直接单击“分析检索结果”按钮对检索结果进行更加详细的分析。例如，通过对文献来源的分析可以得到发表该领域论文最多的期刊排行，为投稿指明方向。

(3) 检索结果处理。

在检索结果列表的顶部有一排按钮，可以对检索结果进行打印（Print）、发送 E-mail、添加到标记结果列表（Add to Marked List）或导入到 EndNote 文献管理程序等处理。

(4) 查看结果。在检索结果列表中可看到的信息包括：文章题目（Title）、作者（Author）、来源（Source）（含期刊名、卷、期、页码、出版年份）和被引次数（Time cited）等。单击搜索结果中任一文献的提名，可以查看其详细信息。SCI 的一大优势就是可以检索到文献之间的相互引证信息。检索者可以单击页面中被引频次（Time cited）后的数字 5015 来查看该文献被别人引用的情况，也可单击引用的参考文献（Reference）后的数字 20 来查看该文献引用的参考文献情况。

1.3.3 Engineering Village Compendex（原工程索引 EI）

Engineering Village（原 Engineering Information Inc. 简称 EI 公司）始建于 1884 年，是爱思唯尔公司旗下的分公司，作为世界领先的应用科学和工程学在线信息服务提供者，它一直致力于为科学研究者和工程技术人员提供专业化、实用化的在线数据信息服务。

Engineering Village Compendex 是目前全球最全面的工程领域二次文献数据库，侧重提供应用科学和工程领域的文摘索引信息，收录了 1969 年至今，源自 5100 种工程类期刊、会议论文集和技术报告的 700 多万篇论文的参考文献和摘要。其范围涵盖了工程和应用科学领域的各学科，涉及机械工程、土木工程、环境工程、电气工程、结构工程、材料科学、固体物理、超导体、生物工程、能源、化学和工艺工程、照明和光学技术、空气和水污染、固体废弃物的处理、道路交通、运输安全、控制工程、工程管理、农业工程和食品技术、计算机和数据处理、电子和通信、石油、宇航、汽车工程以及这些领域的子学科和其他主要的工程领域。

有检索权限的用户在登录进入之后，即可进入图 1-16 所示的 EI 检索页面。EI 的检索方式有 3 种：快速检索（Quick Search）、专家检索（Expert Search）和词表检索（Thesaurus