

高等学校“十三五”规划教材

JISUANJI
ZAI HUAXUE HUAGONG ZHONG DE YINGYONG

计算机

在化学化工中的应用

李 谦 毛立群 房晓敏 主编

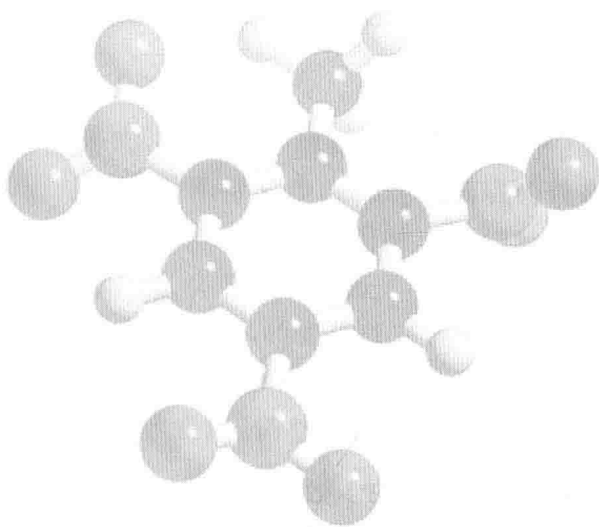
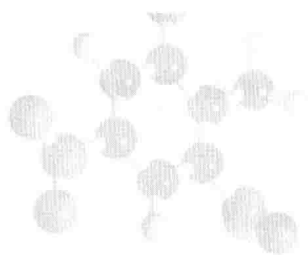


化学工业出版社



第3版
The Third Edition

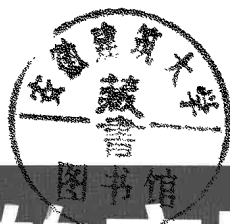
高等学校“十三五”规划教材



JISUANJI
ZAI HUAXUE HUAGONG ZHONG DE YINGYONG

计算机

在化学化工中的应用



李 谦 毛立群 房晓敏 主编

第3版

The Third Edition



化学工业出版社

· 北京 ·

本书主要介绍应用计算机解决化学、化工领域一些常见问题的基本理论、方法、软件和应用。全书分为文献检索与管理、试验设计与数据处理、化学化工图形与图像处理、化学化工计算、论文撰写与演示五个相对独立的部分。具体内容包括：计算机文献检索，计算机文献管理，正交试验设计，化学编辑排版，实验数据的图形化处理，使用 Visio 绘制化学化工图形，Matlab 与化学化工计算，Excel 与化工最优化问题，化工过程模拟，计算机在科技论文撰写及演讲中的应用，附录部分介绍了 Matlab 应用基础及学术论文撰写规范示例。

本书可供高等院校化学、化学工程与工艺及相关专业师生使用，也可供计算机技术爱好者参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在化学化工中的应用 / 李谦, 毛立群, 房晓敏主
编. —3 版. —北京: 化学工业出版社, 2018.7
高等学校“十三五”规划教材
ISBN 978-7-122-32357-6

I. ①计… II. ①李… ②毛… ③房… 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 (2018) 第 124126 号

责任编辑: 窦臻 王海燕
责任校对: 宋夏

装帧设计: 刘丽华

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印装: 北京市白帆印务有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 17½ 字数 424 千字 2018 年 9 月北京第 3 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 42.00 元

版权所有 违者必究

感谢读者们的关注和厚爱,本书第二版经历了多次重印。为了与相关方法、软件、网站的更新保持同步,把这一领域的最新成果及时介绍给读者,在保留原书基本结构的同时,我们对第二版进行了较大的修改,主要体现在以下几个方面。

一是根据相关网站界面、软件版本的变化改写、重写了全书部分章节,重点如第1、2、3、6、9、10章。

二是根据近年来编者的教学实践,调整了部分章节的顺序和结构;补充了部分例题和作业题;编写了部分习题的解题思路与参考答案。

三是为了方便教师教学和学生自学,更新了本书的电子教案;并为本书中大部分例题制作了操作视频,读者可通过书中所附的二维码查看相关视频。

四是根据教材使用中读者的反馈,规范了部分术语、专用词的使用。

第三版修订内容由李谦完成,缙利胜也参与了部分修订内容的编写;褚俊杰、欧阳俊毅、周卓奇、邹毅臻、刘丹妮为本书制作了电子教案和操作视频;感谢化学工业出版社编辑对本书的热情鼓励与大力支持,她们认真、严谨、细致的工作为本书增色颇多。

限于编者能力和水平,书中难免有疏漏不当之处,真诚地希望读者提出意见和建议。

编 者

2018年5月8日



随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合,现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化学、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、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,计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员,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。

本书主要介绍应用计算机解决化学、化工领域一些常见问题的基本理论、方法、软件和应用。在全书的编排组织上,根据化学化工专业科研问题的一般研究思路和常用方法,全书分为文献检索与管理、实验设计与数据处理、化学化工图形与图像处理、化学化工计算、论文撰写与演示五个相对独立的部分。第1、2章主要介绍化学化工相关文献、专利、文摘等的检索及文献的管理与应用;第3章介绍正交试验设计方法、实验结果的分析处理方法及计算机实现;第4~6章介绍化学、化工常用图形的编辑制作,包括化学分子式、实验设备图形的绘制,实验数据的图形化以及工艺流程图和设备图的绘制;第7~9章主要介绍化学化工常见计算问题,包括 Matlab 在插值、方程求根、方程组求解等方面的应用,最优化问题的模型、算法及计算机求解,以及过程模拟技术。第10章主要介绍学术论文的撰写思路、结构、格式要求,相关排版技术及演示文稿的制作。

本书由李谦、毛立群、房晓敏任主编,郭泉辉、李润明、徐元清任副主编。全书由李谦统稿。唐少峰、李静茹、孙伟娜、王虹、朱琳等参加了本书部分章节的编校工作。

由于编者水平所限,不妥之处在所难免,敬请广大读者和专家批评指正。

编 者
2010年1月



《计算机在化学化工中的应用》第一版自出版以来已过四载，承蒙广大读者的厚爱和化学工业出版社的努力，第一版的发行量大大超出编者预期，也使我们倍感责任重大。计算机辅助化学工程是一个快速发展的领域，相关的方法、软件、网站都在不断更新。把这一领域的最新成果及时介绍给读者，是促使我们对其进行修订的主要原因。

本次修订在保持本书整体结构的基础上，做了较大的改动。与本书第一版相比，部分网站和软件的界面、功能、操作都发生了较大的变化，为此编者改写、重写了部分章节（如第1章、第2章、第6章、第9章的部分或全部章节），规范了名词术语。根据编者近年来的教学实践，增加了部分例题和习题。为了便于读者的学习，制作了本书的电子教案以及大部分例题的教学视频。

第二版修订工作主要由李谦完成，闫梦甜参与了部分章节的修订工作；李闪闪、李秋为本书制作了电子教案和操作视频。

限于编者能力和水平，书中难免有疏漏和不妥之处，真诚地希望读者提出意见和建议。

编者
2014年3月

1 计算机文献检索 / 1

1.1 Internet 上的化学化工信息资源	1
1.2 通过 Internet 搜索引擎查找化学化工信息	1
1.2.1 谷歌	1
1.2.2 百度	4
1.3 化学化工文献数据库的检索	6
1.3.1 中国期刊全文数据库 (中国知网)	6
1.3.2 科学引文索引 SCI	12
1.3.3 工程索引 EI	14
1.3.4 Elsevier 数据库	16
1.3.5 Wiley InterScience 数据库	17
1.3.6 美国化学会 (ACS) 期刊数据库	18
1.3.7 其他文献数据库	18
1.4 专利检索	20
1.4.1 专利、专利文献与专利说明书	20
1.4.2 德温特世界专利创新索引	21
1.4.3 中国专利检索	22
1.4.4 美国专利检索	23
1.4.5 欧洲专利局的 espacenet 数据库	23
1.5 Internet 上的物性数据库	26
1.5.1 美国国家标准与技术研究院 (NIST) 的物性数据库	26
1.5.2 分布式化学数据库统一查询接口 CS ChemFinder	26
1.5.3 溶剂数据库 SOLV-DB	26
1.5.4 国际化学试剂供应商 Aldrich 的网站	26
1.6 网上化学化工标准	27
1.6.1 中国标准服务网	27
1.6.2 标准文献的导航站点	27
习题	27

2 计算机文献管理 / 28

2.1 EndNote 简介	28
2.2 建立 EndNote 数据库	29
2.3 录入文献	30
2.3.1 手工录入	30
2.3.2 联网直接检索	31
2.3.3 从网络数据库下载导入	33
2.3.4 从 PDF 文件导入文献题录	44
2.4 EndNote 的使用	45
2.4.1 在 Word 中插入并编排参考文献	45
2.4.2 EndNote 样式 (Style)	47
2.4.3 利用论文模板撰写论文	48
习题	49

3 正交试验设计 / 50

3.1 正交试验的基本概念	50
3.1.1 正交表	50
3.1.2 交互作用表	51
3.1.3 混合型正交表	52
3.2 正交试验设计	52
3.3 正交试验的数据处理	54
3.3.1 正交试验数据的直观分析	55
3.3.2 正交试验数据的方差分析	58
3.4 Excel 在正交试验数据处理中的应用	60
3.4.1 Excel 的基本操作	60
3.4.2 Excel 在正交试验数据处理中的应用	61
习题	67

4 化学编辑排版 / 68

4.1 化学结构绘制软件 ACD/ChemSketch 简介	68
4.1.1 ACD/ChemSketch 简介	68
4.1.2 结构模式和绘图模式	68
4.2 分子结构绘制	69
4.2.1 简单分子结构的绘制	70
4.2.2 复杂分子结构的绘制	74
4.2.3 化学反应式的绘制	77
4.3 图形的绘制	78

4.4 使用 ChemSketch 预测化合物的宏观性质	79
习题	80
5 实验数据的图形化处理 / 82	
5.1 Origin 基础知识	82
5.1.1 Origin 主界面	82
5.1.2 Origin 项目文件	82
5.1.3 Origin 子窗口	83
5.2 数据录入	84
5.2.1 手工输入	84
5.2.2 通过剪贴板传送	84
5.2.3 由数据文件导入	84
5.3 绘图	86
5.3.1 单层二维图形	86
5.3.2 多层二维图形	87
5.3.3 图形定制	88
5.3.4 三维图形	91
5.4 图形输出	93
5.4.1 通过剪贴板输出	93
5.4.2 输出图形文件	93
5.5 数据拟合	94
5.5.1 线性拟合	94
5.5.2 多项式拟合	94
5.5.3 其他非线性拟合	95
5.5.4 自定义函数拟合	96
习题	99
6 使用 Visio 绘制化学化工图形 / 100	
6.1 Visio 基本绘图	100
6.1.1 Visio 简介	100
6.1.2 图形绘制基础	100
6.1.3 文本的创建和编辑	110
6.1.4 图层的使用	111
6.2 化工工艺流程图的绘制	112
6.2.1 应用工艺流程图模板建立新图形	112
6.2.2 添加设备、管道、阀门与仪表	112
6.2.3 形状数据与自动列表	114
6.2.4 工艺流程图的绘制	116

6.3 化工设备图的绘制	123
6.3.1 确定图幅与比例	123
6.3.2 图面安排	123
6.3.3 绘制各视图	124
6.3.4 添加标注、明细栏、技术要求	124
习题	129

7 Matlab 与化学化工计算 / 132

7.1 Matlab 基础知识	132
7.1.1 Matlab 简介	132
7.1.2 Matlab 的界面	132
7.1.3 Matlab 的帮助功能	133
7.2 线性方程组的求解	135
7.2.1 线性方程组的一般形式	135
7.2.2 线性方程组解的判断	135
7.2.3 线性方程组的直接求解	136
7.3 数据插值	138
7.3.1 数据插值简介	138
7.3.2 插值方法	139
7.3.3 使用 Matlab 进行数据插值	140
7.4 非线性方程（组）的求解	143
7.4.1 非线性方程（组）的数值求解	143
7.4.2 使用 Matlab 求解非线性方程（组）	144
7.5 常微分方程（组）的数值解	147
7.5.1 化工中的常微分方程（组）	147
7.5.2 常微分方程（组）的数值解法	147
7.5.3 使用 Matlab 求解常微分方程（组）	151
习题	155

8 Excel 与化工最优化问题 / 156

8.1 化工最优化问题	156
8.1.1 化工最优化问题的提出	156
8.1.2 化工最优化问题的几个概念	157
8.1.3 化工最优化问题的分类	157
8.2 线性规划	158
8.2.1 线性规划的基本理论	158
8.2.2 线性规划问题的常用求解方法	160
8.2.3 Excel 的规划求解工具	161
8.2.4 使用 Excel 规划求解工具求解线性规划问题	162

8.3 非线性规划	170
8.3.1 解析法求解非线性规划问题	170
8.3.2 非线性规划问题的数值求解	172
8.3.3 使用 Excel 求解非线性规划问题	172
习题	174

9 化工过程模拟 / 176

9.1 化工过程模拟技术	176
9.1.1 化工过程模拟技术简介	176
9.1.2 稳态模拟与动态模拟	176
9.2 Aspen Plus 的基本操作	177
9.2.1 Aspen Plus 软件介绍	177
9.2.2 Aspen Plus 的用户界面	179
9.2.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟的一般步骤	180
9.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟的应用实例	180
9.3.1 闪蒸单元模拟	180
9.3.2 C ₂ 组分精馏分离过程设计	187
9.3.3 复杂过程的模拟	198
9.4 计算流体力学	200
9.4.1 CFD 简介	200
9.4.2 CFD 模拟的基本步骤	201
9.4.3 商用 CFD 软件	201
习题	202

10 计算机在科技论文撰写及演讲中的应用 / 203

10.1 科技论文	203
10.1.1 科技论文简介	203
10.1.2 科技论文的基本结构	204
10.1.3 期刊发表的学术论文	204
10.1.4 学位论文	204
10.1.5 科技论文的内容与格式要求	205
10.2 Microsoft Word 在论文撰写中的应用	206
10.2.1 学位论文写作的一般次序	206
10.2.2 Microsoft Word 2016 的用户界面	207
10.2.3 页面设置	208
10.2.4 章节划分	208
10.2.5 页眉与页脚的设置	209
10.2.6 目录的操作	211
10.2.7 多级列表	214

10.2.8	插入脚注和尾注	215
10.2.9	插入符号	215
10.2.10	公式的编辑	215
10.2.11	图表、公式编号	218
10.2.12	表格的制作	220
10.2.13	图形的编辑	225
10.2.14	文档的修订与批注	226
10.2.15	文档的打印	226
10.3	PowerPoint 在制作幻灯片中的应用	228
10.3.1	PowerPoint 的用户界面	228
10.3.2	PowerPoint 的母版	228
10.3.3	PowerPoint 模板	230
10.3.4	幻灯片的设计	230
10.3.5	动画设置	234

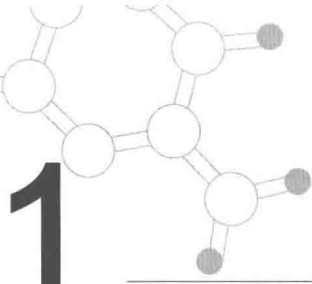
附录 I Matlab 应用基础 / 236

I.1	Matlab 的数据类型与计算功能	236
I.1.1	变量和常量	236
I.1.2	数字、变量的运算与格式	236
I.1.3	字符串及其运算	238
I.1.4	矩阵及其运算	239
I.2	变量和工作区的管理	248
I.2.1	变量的查找	248
I.2.2	变量的保存和读取	249
I.2.3	变量的清除	250
I.3	Matlab 的常用图形处理功能	250
I.3.1	图形窗口与子图的操作命令	250
I.3.2	二维图形绘制命令	251
I.3.3	三维图形绘制命令	253

附录 II 学术论文撰写规范示例 / 258

II.1	某期刊投稿简则	258
II.2	某研究所研究生学位论文撰写规则	259

参考文献 / 265



计算机文献检索

1.1 Internet 上的化学化工信息资源

Internet 是当今世界上最大的信息传播媒介,为化学化工信息检索提供了十分重要而便捷的途径,Internet 上的化学化工信息主要有如下类型。

- ① 化学化工新闻。
- ② 化学化工电子期刊与杂志。
- ③ 化学化工图书。
- ④ 化学化工会议信息。
- ⑤ Internet 上召开的化学、化工类电子会议。
- ⑥ 化学化工专利信息。
- ⑦ 化学化工数据库。
- ⑧ 化学、化工相关的学会、组织、机构、实验室及小组信息。
- ⑨ 化学产品目录、电子商务及相关公司。
- ⑩ 化学化工教学资源、软件。
- ⑪ 化学化工文献选读。
- ⑫ 化学化工相关在线服务、在线讨论、论坛等。

也可按学科把 Internet 上的化学化工信息分为无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、生物化学、高分子化学、化学工程、化学教育及其他类型(如环境化学、材料化学、应用化学、立体化学、医药化学等)。与印刷版文献相比,网络化学信息容量大、检索速度快、便于管理使用。此外,Internet 还提供如期刊与杂志电子版、电子会议、化学化工软件、在线服务、在线讨论等多种功能。中国科学院过程工程研究所主办的《化学学科信息门户网站》提供了很多化学化工信息检索途径,其网址为 <http://chemport.ipe.ac.cn/>,如图 1-1 所示,读者可自行浏览。

1.2 通过 Internet 搜索引擎查找化学化工信息

1.2.1 谷歌

谷歌(Google)是全世界最大也是最受欢迎的搜索引擎,网址为 <http://www.google.com>。



图 1-1 化学学科信息门户网站首页

1.2.1.1 常规搜索

可直接在搜索框内输入关键词，如“纳米材料”，然后单击“Google 搜索”按钮（或直接回车）进行搜索。当要求搜索两个或两个以上的关键词时，可以使用逻辑运算符进行搜索。谷歌使用空格表示逻辑“与”操作，如“纳米材料 制备”表示搜索结果须同时含有“纳米材料”和“制备”这两个关键词；减号“-”表示逻辑“非”操作，如“纳米材料-制备”，表示搜索含有“纳米材料”且不含“制备”关键词的结果；大写的“OR”表示逻辑“或”操作，如输入“纳米材料 OR 制备”，则返回所有含有关键词“纳米材料”或“制备”的搜索结果。Google 还支持占位符*的使用。例如，输入“乙酸*醋”可返回含乙酸甲酯、乙酸乙酯、乙酸丙酯等关键词的结果。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。

1.2.1.2 文档和学术搜索

谷歌支持对特定格式二进制文件的检索,例如微软的 Office 文档(如 .doc、.docx、.ppt、.pptx、.xls、.xlsx 等),Adobe 的.pdf 文档,Adobe Flash 文档(.swf),HTML(.htm、.html)等。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。例如在搜索框中输入“表面活性剂 filetype:pdf”,将获得所有包含关键词“表面活性剂”的 pdf 格式的文档,如图 1-2 所示。

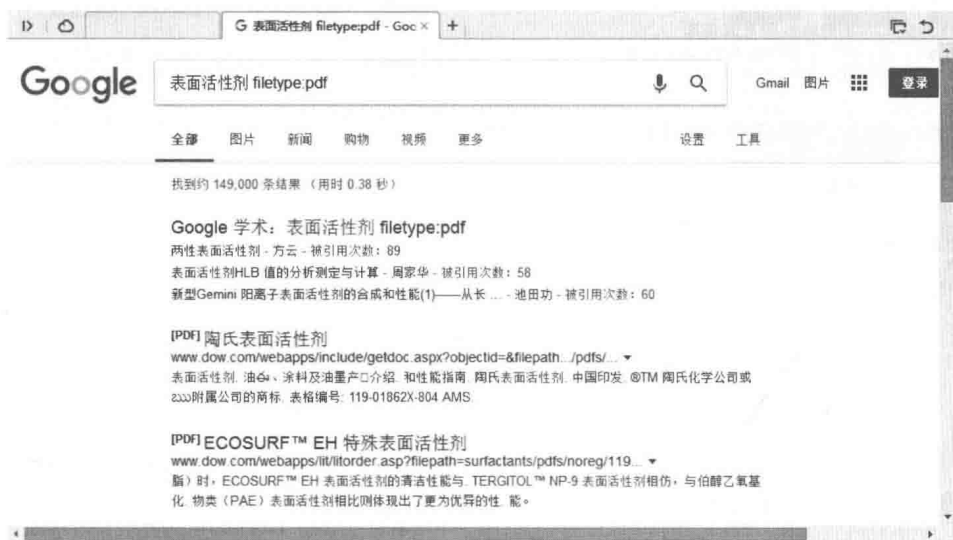


图 1-2 Google 文档搜索结果

为了方便广大科技工作者,Google 还提供了专用的学术搜索工具 Google Scholar,其首页如图 1-3 所示。用户可以同时检索众多学术资料来源,如来自学术著作出版商、专业性社团、预印本、各大学及其他学术组织发表的论文、图书和摘要等。可使用网址 <http://scholar.google.com> 登录 Google 学术搜索进行检索。例如,使用 Google 学术搜索检索关键词“手性合成”获得的检索结果如图 1-4 所示。



图 1-3 Google 学术搜索首页



图 1-4 Google 学术搜索检索结果

1.2.2 百度

百度 (http://www.baidu.com) 是全球最大的中文搜索引擎，其首页如图 1-5 所示。



图 1-5 百度首页

百度支持中文书名号的查询。加上书名号的查询词有两个特殊功能，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，搜索《高等有机化学》教材，可在检索时直接输入“《高等有机化学》”，获得的搜索结果如图 1-6 所示。

与谷歌类似，百度也支持“filetype”命令，可对 Office 文档 (Word、Excel、Powerpoint)、Adobe pdf 文档、rtf 文档进行全文搜索。“filetype:”后可以跟以下文件格式：doc, xls, ppt, pdf, rtf。例如查找有关碳纳米管制备方面的文献时，可以在百度搜索栏中输入“碳纳米管制备 filetype:pdf”，获得同时包含关键词“碳纳米管”和“制备”的全部 pdf 文档，如图 1-7 所示。



图 1-6 百度搜索结果

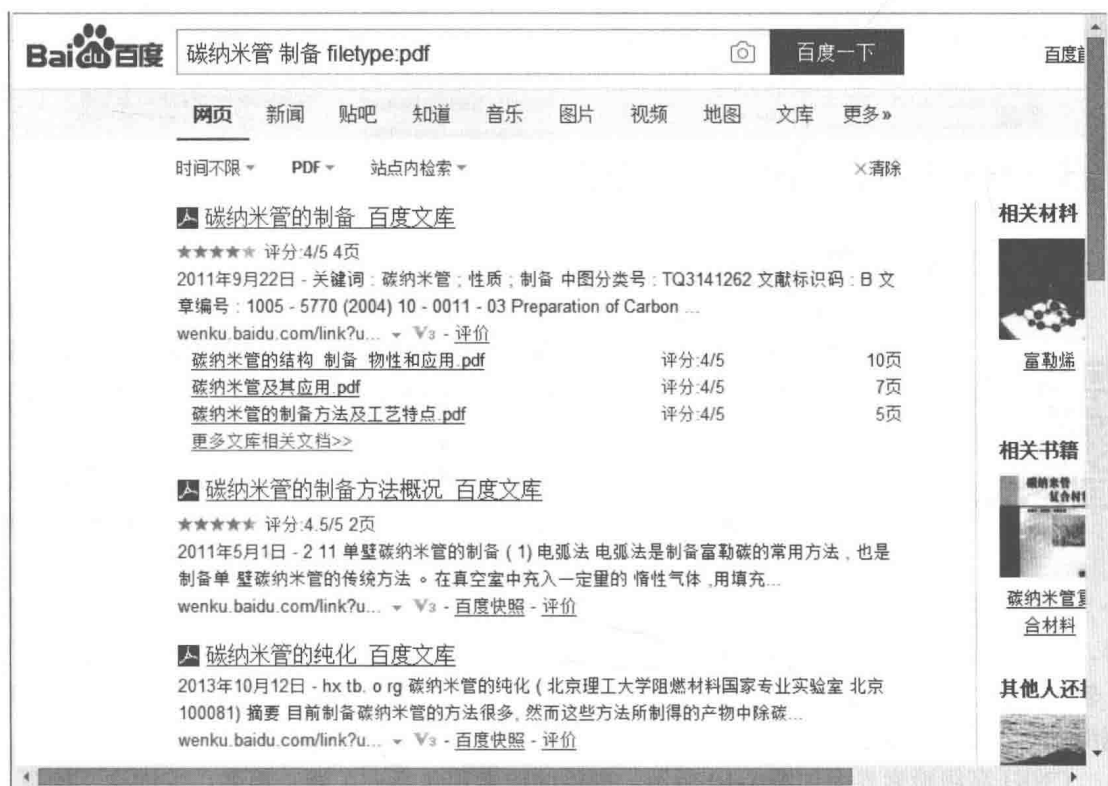


图 1-7 百度指定文档类型搜索结果

百度文库是百度发布的在线分享文档的平台。百度文库的文档由百度用户上传，包括教学资料、考试题库、专业资料、公文写作、法律文件等多个领域的资料。百度文库平台于2009年11月12日推出，截至2017年9月文档数量已突破1.8亿。可通过地址 <http://wenku.baidu.com> 直接进入“百度文库”进行文档搜索，如图1-8所示。