



普通高等教育“十三五”规划教材

PUTONG GAODENG JIAOYU “13·5” GUIHUA JIAOCAI

# 计算机在现代 化工中的应用

李立清 邹来禧 肖友军 编著



冶金工业出版社  
[www.cnmip.com.cn](http://www.cnmip.com.cn)



普通高等教育“十三五”规划教材

# 计算机在现代化工中的应用

李立清 邹来禧 肖友军 编著



北京  
冶金工业出版社

2018

## 内 容 提 要

本书共分 7 章，分别介绍了 Origin、Chemoffice、Auto CAD、Word、Excel、PowerPoint 和 Aspen Plus 软件的使用方法以及在化工行业中的应用。

本书可作为化学工程、应用化学、冶金工程、矿冶工程、材料工程等相关专业本科生的教学用书，也可作为相关专业人员的参考书。

## 图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在现代化工中的应用 / 李立清，邹来禧，肖友军 编著。—北京：冶金工业出版社，2018.12

普通高等教育“十三五”规划教材

ISBN 978-7-5024-8012-7

I. ①计… II. ①李… ②邹… ③肖… III. ①计算机应用—化学工业—高等学校—教材 IV. ①TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 302417 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京市东城区嵩祝院北巷 39 号 邮编 100009 电话 (010)64027926

网 址 [www.cnmip.com.cn](http://www.cnmip.com.cn) 电子信箱 [yjcbs@cnmip.com.cn](mailto:yjcbs@cnmip.com.cn)

责任编辑 杨盈园 美术编辑 彭子赫 版式设计 禹 蕊

责任校对 卿文春 责任印制 李玉山

ISBN 978-7-5024-8012-7

冶金工业出版社出版发行；各地新华书店经销；三河市双峰印刷装订有限公司印刷

2018 年 12 月第 1 版，2018 年 12 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16；10.5 印张；253 千字；158 页

29.00 元

冶金工业出版社 投稿电话 (010)64027932 投稿信箱 [tougao@cnmip.com.cn](mailto:tougao@cnmip.com.cn)

冶金工业出版社营销中心 电话 (010)64044283 传真 (010)64027893

冶金工业出版社天猫旗舰店 [yjgycbs.tmall.com](http://yjgycbs.tmall.com)

(本书如有印装质量问题，本社营销中心负责退换)

## 前　　言

化学工程是一门实践性非常强的学科。有复杂的生产工艺，有大型的装置设备，有复杂的控制过程，有复杂的分子结构式和反应式，有复杂的模拟计算，有错综复杂的管路设计等。针对这些特点，用手工的方法很难高效地完成这些工作。

目前工业发展趋势是大型化、连续化、精细化、智能化。为了适应现代企业发展需求，借助计算机来辅助完成化工行业中的某些工作是必然趋势。计算机及其软件的开发研究在国外非常发达，几乎把计算机科学融入到每个学科。现代教育与传统教育有非常大的区别，学生人数和学科门类越来越多，科学和学术研究也越来越深，这些都需要计算机的辅助才能适应现代社会发展的需要，才能跟上时代前进的步伐。

本书内容有助于相关专业学生掌握撰写毕业论文所需要的基本计算机知识，有助于完成实验后的基本数据处理，有助于更快适应化工行业的岗位。本书可作为化学工程、应用化学、冶金工程、矿冶工程、材料工程等相关专业本科学生的教学用书，也可作为相关专业人员的参考书。

编写分工：肖友军编写第6章，邹来禧编写第7章，李立清编写其他章节并负责统稿。感谢江西理工大学化学化工教研室全体老师，感谢安文娟、肖焱尹、赵清华、王泽仁和赵辉五位同学，他们为本书的顺利完成付出了大量的工作。

本书涉及的软件较多，知识面较广，由于编者水平所限，书中不妥之处，恳请广大读者批评指正。

编　者  
2018年11月

# 目 录

<b>1 Origin 软件在化工中的应用</b>	1
1.1 Origin 概述	1
1.2 Origin 在化工方面的主要应用	1
1.3 Origin 与 Excel 的区别	1
1.4 Origin 基本操作	2
1.4.1 菜单栏	2
1.4.2 数据输入	3
1.4.3 图形生成	4
1.4.4 坐标轴标注	6
1.4.5 图表标题输入	6
1.4.6 线条及实验点图标的修改	7
1.4.7 其他功能	7
1.4.8 数据拟合	7
1.4.9 设置列属性	8
1.4.10 数据列排序	8
1.4.11 数据统计	8
1.4.12 数据规格化	8
1.4.13 数据范围选择	9
1.4.14 在工作表中指定多个 X 列	10
1.4.15 设置列的值	11
习题	12
<b>2 Chemoffice 软件在化工中的应用</b>	13
2.1 Chemoffice 简述	13
2.2 ChemDraw 基本知识	13
2.2.1 基本操作	14
2.2.2 ChemDraw 文件格式	23
2.2.3 ChemDraw 绘图操作	23
2.2.4 轨道工具	32
2.2.5 化学符号	33
2.3 Chem3D 绘图	33
2.3.1 Chem3D 简介	33

2.3.2 建立 3D 模型 .....	33
2.3.3 ChemDraw 结构式与 3D 模型间的转换 .....	36
2.3.4 整理和优化结构 .....	37
2.3.5 显示 3D 模型信息 .....	38
2.3.6 改变元素序号与替换元素 .....	40
2.3.7 原子和分子的大小 .....	41
2.3.8 计算内旋转势能 .....	44
2.3.9 Huckel 分子轨道 .....	46
习题 .....	48
<b>3 Auto CAD 软件在化工中的应用 .....</b>	<b>50</b>
3.1 初涉 Auto CAD .....	50
3.1.1 Auto CAD 2004 的界面 .....	50
3.1.2 状态栏 .....	50
3.1.3 Auto CAD 2004 的功能键 .....	51
3.1.4 设置绘图环境 .....	53
3.1.5 设置 Auto CAD 2004 的工具栏 .....	55
3.2 绘图规范 .....	56
3.2.1 图纸规范 .....	56
3.2.2 线条粗细规范 .....	58
3.2.3 线型规范 .....	58
3.2.4 单位规范 .....	58
3.2.5 文字样式规范 .....	58
3.3 平面绘图 .....	59
3.3.1 Auto CAD 2004 的主要工具栏 .....	59
3.3.2 绘图命令 .....	59
3.3.3 修改命令 .....	64
3.4 块及块的属性 .....	67
3.4.1 块的概述 .....	67
3.4.2 定义块 .....	68
3.4.3 插入块 .....	70
3.4.4 将块保存为单独的图形文件 .....	72
3.4.5 图块的编辑 .....	73
3.4.6 图块的属性 .....	73
3.5 图层 .....	77
3.5.1 设置图层 .....	77
3.5.2 定义图层 .....	78
3.5.3 定义文字样式和标注样式 .....	78
3.6 Auto CAD 2004 的设计中心 .....	80

3.6.1 Auto CAD 2004 设计中心的界面	80
3.6.2 设计中心的功能按钮	80
3.6.3 设计中心的选项卡	81
3.6.4 利用 Auto CAD 2004 设计中心插入图形对象	81
习题	82
<b>4 Word 软件在化工中的应用</b>	<b>84</b>
4.1 公式编辑器的使用	84
4.1.1 寻找公式编辑器的步骤	84
4.1.2 插入公式的另一种方法	84
4.1.3 注意点	84
4.1.4 用上下标编辑简单公式	85
4.2 三线制表格的绘制	85
4.2.1 三线制表格的绘制	85
4.2.2 斜线表头的处理	85
4.2.3 文本与表格之间的相互转换	85
4.2.4 表格编辑	86
4.2.5 计算与排序	86
4.3 文档高级处理	88
4.3.1 批注	88
4.3.2 书签	88
4.3.3 为项目建立题注	88
4.3.4 标题的使用	89
4.3.5 索引和目录	89
4.3.6 脚注和尾注	90
4.3.7 超级链接	91
4.3.8 格式刷的应用	93
4.3.9 剪切板的应用	93
4.3.10 查找与替换	93
4.4 文档的排版和打印	93
4.4.1 文字样式和字体设置	93
4.4.2 段落样式设置	93
4.4.3 使用项目符号	94
4.4.4 页面设置	94
4.4.5 页眉页脚和页码设置	95
4.4.6 去除页眉上的横线	96
4.4.7 分页符和分节符的使用	96
4.5 图文混排	96
4.5.1 绘制实验装置示意图和工艺流程图	96

4.5.2 艺术字的插入 .....	97
4.5.3 图形处理 .....	97
4.6 快捷键及文档保护 .....	98
4.6.1 常用快捷键 .....	98
4.6.2 保护文档 .....	99
4.6.3 为文档增加密码 .....	99
习题 .....	100
<b>5 Excel 软件在化工中的应用 .....</b>	<b>101</b>
5.1 功能简介 .....	101
5.2 Excel 工作表 .....	101
5.2.1 工作表概述 .....	101
5.2.2 在工作簿中的操作 .....	101
5.2.3 网格线和表格线 .....	102
5.3 Excel 表格中数据的处理 .....	105
5.3.1 重复输入相同数字或文字内容 .....	105
5.3.2 “填充”作用 .....	105
5.3.3 输入具有固定小数的数字 .....	107
5.3.4 使用自动更正 .....	107
5.3.5 输入时间和日期 .....	108
5.3.6 基本计算方法 .....	108
5.4 工作表的格式化技巧 .....	109
5.4.1 自动套用格式 .....	109
5.4.2 快速复制和粘贴格式 .....	110
5.4.3 字体、对齐、边框、图案和保护等 .....	110
5.4.4 格式化行和列 .....	110
5.5 Excel 图表的建立 .....	110
5.5.1 简介 .....	110
5.5.2 图表编辑 .....	110
习题 .....	113
<b>6 PowerPoint 软件在化工中的应用 .....</b>	<b>114</b>
6.1 PowerPoint 的基本功能 .....	114
6.2 PowerPoint 的基本概念和术语 .....	114
6.2.1 演示文稿 .....	114
6.2.2 幻灯片 .....	115
6.2.3 版式 .....	115
6.2.4 模板 .....	115
6.2.5 母版 .....	115

6.3 PowerPoint 的编辑 .....	115
6.3.1 幻灯片的基本操作 .....	115
6.3.2 外观设计 .....	116
6.4 PowerPoint 的放映 .....	117
6.4.1 调整幻灯片顺序 .....	117
6.4.2 自定义放映 .....	117
6.5 其他小技巧 .....	118
6.5.1 添加背景音乐 .....	118
6.5.2 添加页眉和时间 .....	119
6.5.3 在幻灯片中查找属性 .....	119
6.5.4 给图片加上文字说明 .....	119
6.5.5 指针及画笔使用 .....	119
6.5.6 合并多个演示文稿 .....	120
6.5.7 整齐排列多个对象 .....	120
习题 .....	120
<b>7 Aspen Plus 软件在化工中的应用 .....</b>	<b>121</b>
7.1 Aspen Plus 简述 .....	121
7.1.1 化工过程模拟简述 .....	121
7.1.2 Aspen Plus 简介 .....	123
7.2 Aspen Plus 操作流程 .....	126
7.2.1 软件启动 .....	126
7.2.2 文件保存 .....	127
7.2.3 组分输入 .....	128
7.2.4 物性方法选择 .....	129
7.2.5 全局设定输入 .....	130
7.2.6 流程搭建 .....	131
7.2.7 数据输入 .....	132
7.2.8 运行模拟 .....	133
7.2.9 查看结果 .....	135
7.3 Aspen Plus 应用实例 .....	136
7.3.1 基本流程案例 .....	136
7.3.2 设计规定 .....	143
7.3.3 灵敏度分析 .....	146
7.3.4 优化 .....	149
习题 .....	156
<b>参考文献 .....</b>	<b>158</b>

# 1

# Origin 软件在化工中的应用

## 1.1 Origin 概述

Origin 是美国 Origin Lab 公司出的数据分析和绘图软件，本书以 8.0 版本为例。其特点：使用简单，采用直观的、图形化的、面向对象的窗口菜单和工具栏操作，全面支持鼠标右键等。

两大类功能：数据分析和 Origin 绘图。

数据分析包括数据的排序、调整、计算、统计、频谱变换、曲线拟合等各种完善的数学分析功能。准备好数据后，进行数据分析时，只需选择所要分析的数据，然后再选择相应的菜单命令即可。

Origin 的绘图是基于模板的，Origin 本身提供了几十种二维和三维绘图模板而且允许用户自己定制模板。绘图时，只要选择所需要的模板就行。用户可以自定义数学函数、图形样式和绘图模板；可以和各种数据库软件、办公软件、图像处理软件等方便的连接；可以用 C、C++ 等高级语言编写数据分析程序，还可以用内置的 Lab Talk 语言编程等。

## 1.2 Origin 在化工方面的主要应用

此软件属于专用软件之一，对于化工专业的实验数据处理十分有用。其主要有以下功能：

- (1) 将实验数据自动生成在二维坐标中的图形，有利于对实验趋势的判断。
- (2) 在同一幅图中可以画上多条实验曲线，有利于对不同的实验数据进行比较研究。
- (3) 不同的实验曲线可以选择不同的线型，并且可将实验点用不同的符号表示。
- (4) 可对坐标轴名称进行命名，并可进行字体大小及型号选择。
- (5) 可将实验数据进行各种不同的回归计算，自动打印出回归方程及各种偏差。
- (6) 可将生成的图形以多种形式保存，以便在其他文件中应用。
- (7) 可使用多个坐标轴，并可对坐标轴位置、大小进行自由选择。

## 1.3 Origin 与 Excel 的区别

Excel 虽然也具有数据可视化功能，但它提供的主要是电子表格功能，并可简单地将数据可视化。Excel 在作图方面不如 Origin 功能强大，比如对数据的行数有一定限制，不能超过 65536 行，对图形分析时也只能添加简单的趋势线，不能进行 Gaussian 或 Lorentzian 等函数拟合。

## 1.4 Origin 基本操作

点击 Origin 后启动的界面如图 1.1 所示。

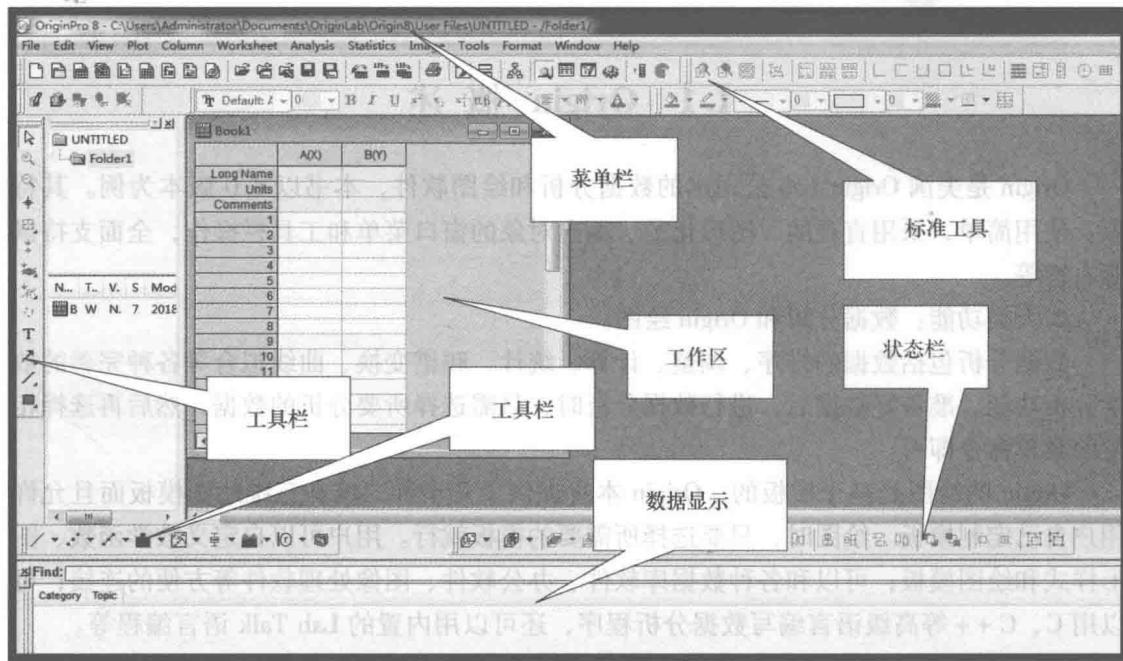


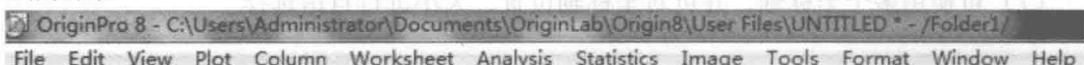
图 1.1 点击 Origin 后启动的界面

- (1) 菜单栏 顶部：一般可以实现大部分功能。
- (2) 工具栏 菜单栏下面：一般最常用的功能都可以通过此实现。
- (3) 绘图区 中部：所有工作表、绘图子窗口等都在此。
- (4) 项目管理器 下部：类似资源管理器，可以方便切换各个窗口等。
- (5) 状态栏 底部：标出当前的工作内容以及鼠标指到某些菜单按钮时的说明。

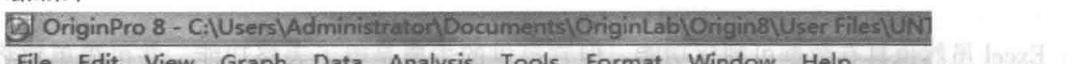
### 1.4.1 菜单栏

菜单栏的结构取决于当前的活动窗口：

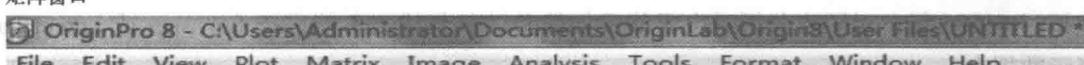
工作表菜单



绘图菜单



矩阵窗口



**菜单简要说明：**

File 文件功能操作打开文件、输入和输出数据图形，保存和打印等。

Edit 编辑功能操作包括数据和图像的编辑等，比如复制、粘贴、清除等，特别注意 undo 功能。

View 视图功能操作控制屏幕显示，“go to row” 到第几行。

Plot 绘图功能操作主要提供 5 类功能：

(1) 几种样式的二维绘图功能：包括直线、描点、直线加符号、特殊线（符号）、条形图、柱形图、特殊条形图（柱形图）和饼图。

(2) 三维绘图。

(3) 气泡（彩色）映射图、统计图和图形版面布局。

(4) 特种绘图：包括面积图、极坐标图和向量。

(5) 模板：把选中的工作表数据导入绘图模板。

Column 列功能操作，比如设置列的属性，增加删除列等。

Graph 图形功能操作，主要功能包括增加误差栏、函数图、缩放坐标轴、交换 X、Y 轴等。

Data 数据功能操作。

Analysis 分析功能操作：

(1) 对工作表窗口：提取工作表数据；行列统计；排序；数字信号处理（快速傅里叶变换 FFT、相关 Corelate、卷积 Convolute、解卷 Deconvolute）；统计功能（T - 检验）、方差分析（ANOAV）、多元回归（Multiple Regression）；非线性曲线拟合等。

(2) 对绘图窗口：数学运算；平滑滤波；图形变换；FFT；线性多项式、非线性曲线等各种拟合方法。

Plot3D 三维绘图功能操作，根据矩阵绘制各种三维条状图、表面图、等高线等。

Matrix 矩阵功能操作，对矩阵的操作，包括矩阵属性、维数和数值设置，矩阵转置和取反，矩阵扩展和收缩，矩阵平滑和积分等。

Tools 工具功能操作：

(1) 对工作表窗口：选项控制；工作表脚本；线性、多项式和 S 曲线拟合。

(2) 对绘图窗口：选项控制；层控制；提取峰值；基线和平滑；线性、多项式和 S 曲线拟合。

Format 格式功能操作：

(1) 对工作表窗口：菜单格式控制、工作表显示控制，栅格捕捉、调色板等。

(2) 对绘图窗口：菜单格式控制；图形页面、图层和线条样式控制，栅格捕捉，坐标轴样式控制和调色板等。

Window 窗口功能操作，控制窗口显示。

Help 帮助。

## 1.4.2 数据输入

双击 Origin 快捷方式进入 Origin 界面，默认状态的数据区域为 2 列 30 行，如果数据超过这个范围可以增加行和列。数据输入方法跟 Excel 相仿。

增加行的方法：将单元格移到最末一行中的任何一个单元格，然后按“回车”就可以增加 10 行，以此类推，可以增加到你所需要的行数为止。

增加列的方法：点击“Column”菜单中，选择“Add New Columns”选项，将出现一个对话框，在对话框中输入你要增加的列数即可，如图 1.2 所示。

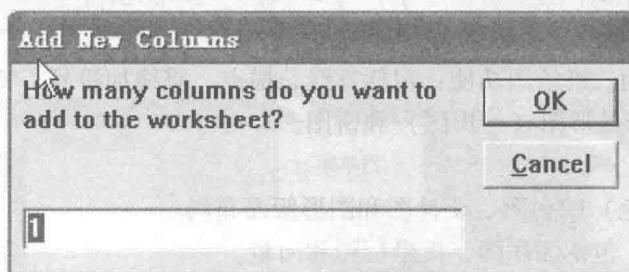


图 1.2 增加列对话框

注意小技巧：选中某个区域，点击“Column”菜单中，选择“Fill Column with”选项，再在其下级菜单中选中“Raw Numbers”，则在选中区域将会出现 1、2、3、…系列号。

另外，除了直接输入数据外也可以将在其他程序计算和测量中获取的数据直接引用过来。点击“File”菜单中选择“Import”，再在弹出的菜单中选择一种你所储存的数据形式。然后点击你储存的文件名，这样就可以将你的数据直接导入到 Origin 数据表中。

### 1.4.3 图形生成

在输入完数据后，就可以开始绘制实验数据曲线图，实验曲线图有单线图和多线图。

#### 1.4.3.1 单线图绘制

##### A 方法一

步骤：

(1) 点击“Plot”菜单，在其下拉菜单中选择曲线类型，一般选择“Line + Symbol”，它是将实验数据用直线分别连接起来，在每一格数据点上有一个特殊的记号。

(2) 在弹出的对话框中选择 X、Y 轴的数据列。

##### B 方法二

步骤：选中所要生成的数据列，然后点击常用工具栏下面的绘制曲线工具，如

#### 1.4.3.2 多线图绘制

在化工实验中常常是多条实验曲线画在一起，有利于说明和比较实验结果的最佳条件，这时数据列一般都大于 2，下面介绍这种曲线图的画法。

##### A 方法一

步骤：

(1) 按上面画单线图的方法画好一条曲线，然后在此基础上点击绘图菜单“Graph”，

在其下拉菜单中选择“Add Plot to Layer”，再在展开的菜单中选择你要的曲线类型，如“Line + Symbol”，系统将弹出如图 1.3 所示对话框。

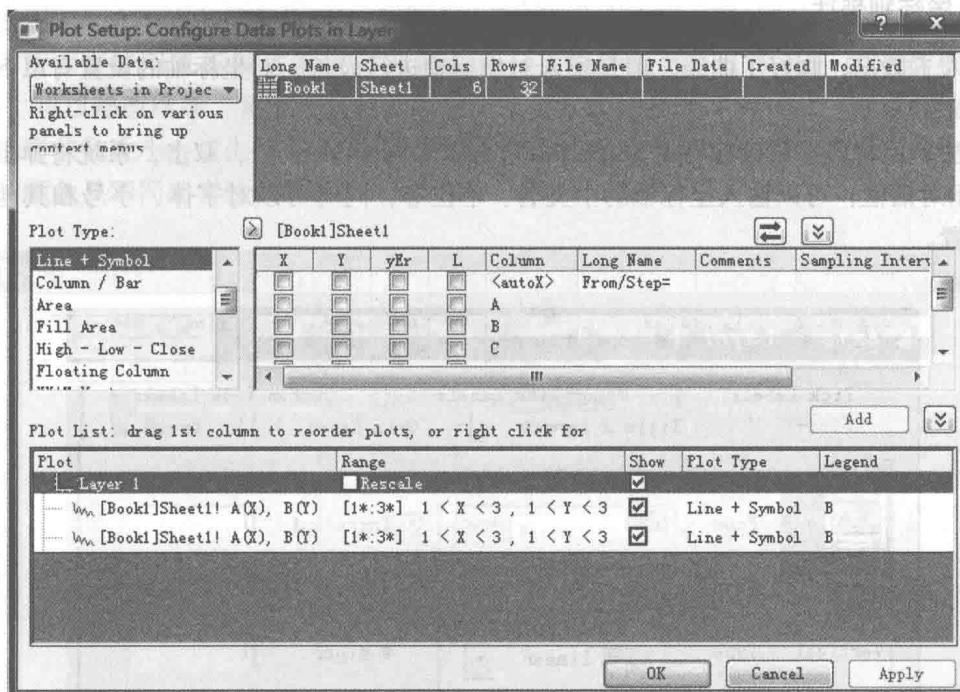


图 1.3 选择图中的坐标轴对话框

(2) 在对话框中选择所要的  $X$ 、 $Y$  轴数据列，单击“OK”，即可在原来的基础上增加一条曲线。

(3) 重复以上操作可以绘制多条实验曲线图于一张图表内。

注意事项：

这样操作系统将不会出现“数据标识”，此时要将“数据标识”标在图中可以按“”，这样系统就会出现数据标识。

如果系列标识要将其 A、B、C……更改为其他的中文字体，可以双击该系列标识图表，可以“\L(1)”(在 6.0 版本中)后面的符号删除、在 8.0 版本中符号“%(1)”直接删除，然后写上自己想要的中文字体，然后确定。

## B 方法二

(对于多条曲线中  $X$  轴相同的情况)

步骤：

(1) 选中要制作多线图的所有数据列。

(2) 点击多线图线条类型中一种，如选择 ，则直接生成多线图。方法一和方法二的区别：方法一绘画的曲线图形是一条一条单独的曲线，在下面进行“线条及实验点图标的修改”时可以对每条曲线进行单独的修改。而方法二产生的曲线是一个整体，在

进行“线条及实验点图标的修改”时所有的曲线是一个整体，不能单独地进行修改，如果要对每条曲线进行单独修改，则必须在 Group 选项中选择“independent”。

#### 1.4.4 坐标轴标注

输入了数据，画好了曲线，但是还未对坐标轴进行设置，对坐标轴的设置有以下两种方法：

方法一：将鼠标移到标有“X axis title”和“Y axis title”处，双击，系统将弹出如图 1.4 所示对话框，可以输入坐标轴的中文名、单位等，同时可以对字体、字号和其他项目进行设置。

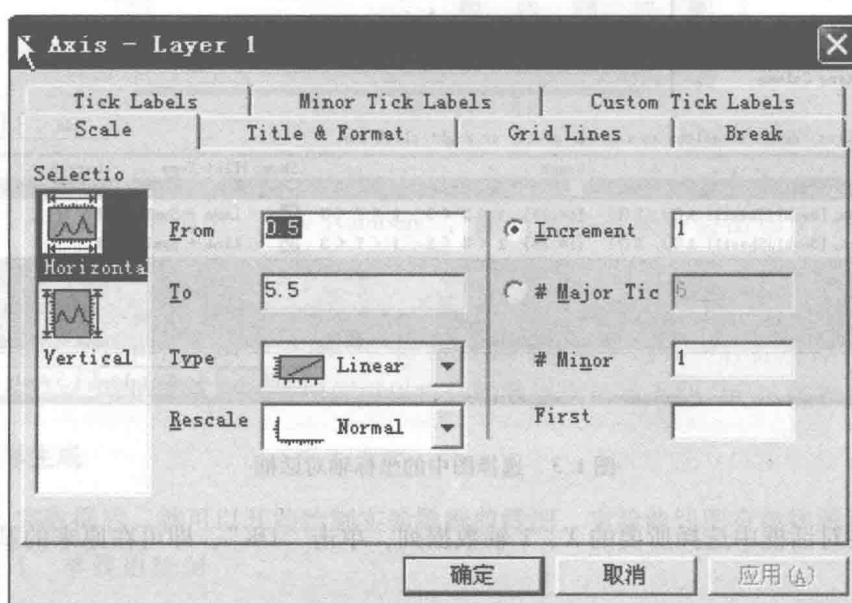


图 1.4 坐标轴设置对话框

在字体选择上建议使用“宋体”，这样可以保证在 Word 文档中可以显示坐标轴的名称，因为有些 Origin 里面的字体在 Word 里面是不识别的。

方法二：点击“Format”菜单，在其下拉菜单中选择“X axis”、“Y axis”，系统将弹出对话框；在对话框中选择“Title & Format”，在 Title 栏中输入坐标轴名称，还可以对坐标的起始位置、坐标间隔、坐标轴位置及间隔小标签的方向等进行设置。

#### 1.4.5 图表标题输入

对图表添加标题，方法如下：

先使鼠标移到需要添加标题的图表区，通过选择图表工具栏中的文字添加按钮“T”，可以输入中英文题标。

注意利用 Symbol Map 可以方便地添加特殊字符。做法：在文本编辑状态下，点右键，然后选择：Symbol Map。

### 1.4.6 线条及实验点图标的修改

在化学或化工实验多线图中，每一条曲线表示不同的含义。为了区分不同的曲线，常常需要用不同实验点的图标表示。这样就要对不同的曲线用不同的图标进行区分。

方法：直接用鼠标双击需要修改的曲线，系统弹出如图 1.5 所示的对话框，点击“Line”可以修改线条、宽度、颜色、风格及连接方式；点击“Symbol”可以修改实验点的图标形状和大小；点击“Group”可以进行线条的组态设置，系统自动设定每一条线条不同的颜色及不同的实验点图标。

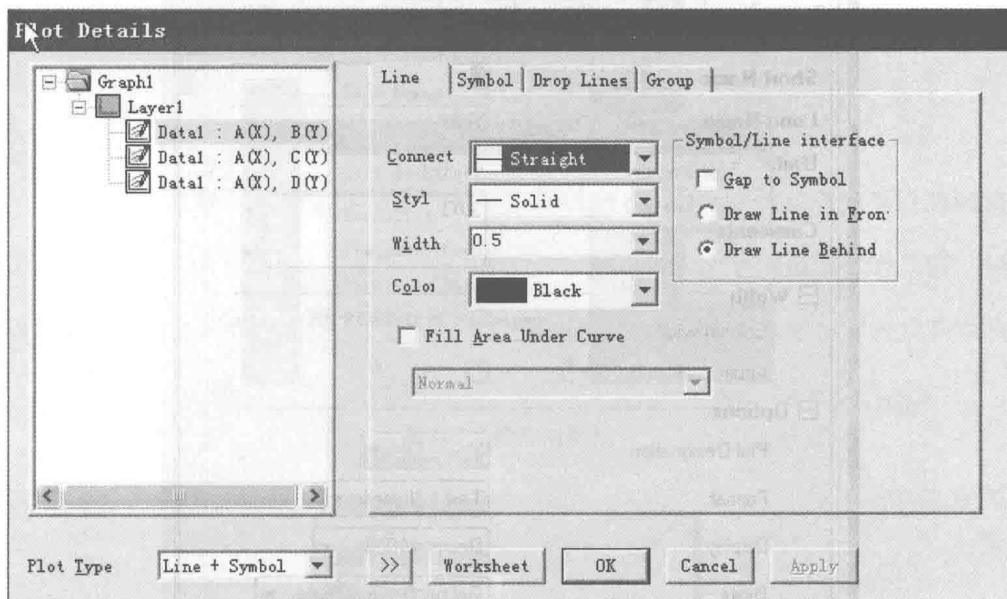


图 1.5 线条及实验点图表设置对话框

### 1.4.7 其他功能

如果要将 Origin 中的图复制到 Word 文档中去，只要激活该图，按下“Ctrl + C”，在 Word 文档中再按下“Ctrl + V”即可。也可以点击“EDIT”，在其下拉菜单中点击“Copy Page”，在 Word 文档中点击“粘贴”即可。Origin 还有许多其他功能，请读者自行在实际应用中练习掌握。

注意：图片或表格中的数据一定要设置为“宋体”。

### 1.4.8 数据拟合

完成前述任务后，一幅实验曲线图基本完成，但如果需要对实验数据进行一些回归计算，则可以通过以下方法进行。

- (1) 点击“Data”，选中要回归的某一条曲线。
- (2) 点击“Tools”，选择回归的方法。
- (3) 在弹出的对话框中，进一步确定回归的标准，点击“Fit”，系统就会对所选择的

曲线按指定的方法进行回归。

#### 1.4.9 设置列属性

双击 A 列或其他列，或点右键，选择 Properties，这里可以设置一些列的属性。如图 1.6 所示。

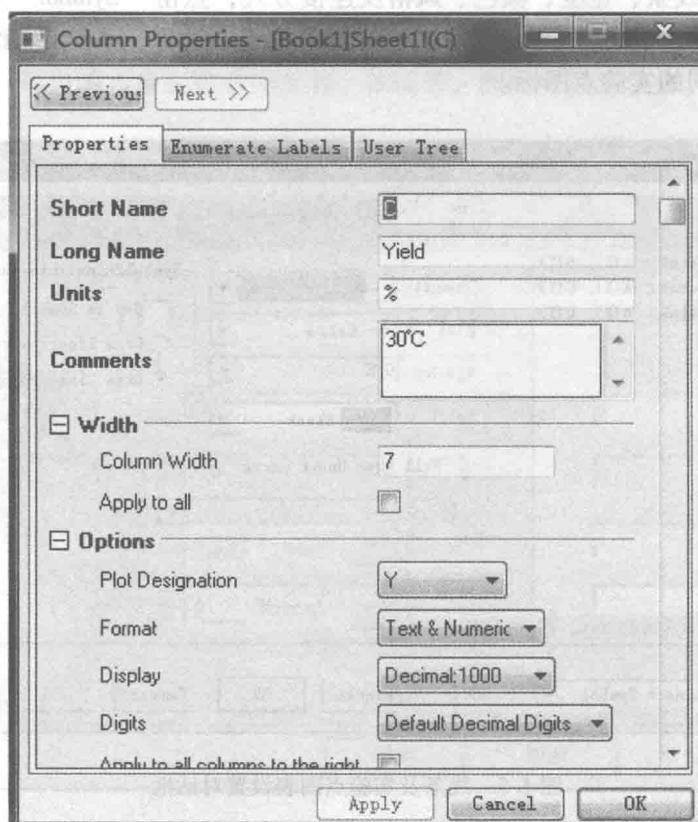


图 1.6 设置列属性对话框

#### 1.4.10 数据列排序

Origin 可以做到单列、多列甚至整个工作表数据排序，选中“列”或“数据表”后按右键，选择命令为“sort…”，如图 1.7 所示。

#### 1.4.11 数据统计

选中要统计的列，按右键，选择 Statistics on Column。可以对数据的最大值、最小值、总和等统计，统计操作如图 1.8 所示。

#### 1.4.12 数据规范化

选择某一列，右键→Normalize，规范化数据操作如图 1.9 所示。