

<<计算机在化学化工中的应用>>

图书基本信息

书名：<<计算机在化学化工中的应用>>

13位ISBN编号：9787040164251

10位ISBN编号：7040164256

出版时间：2005-3

出版时间：高等教育出版社（蓝色畅想）

作者：马江权 编

页数：268

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<计算机在化学化工中的应用>>

内容概要

《计算机在化学化工中的应用》是介绍计算机在化学化工中应用的实用基础教材。全书分为6章，内容包括数据分析处理及科学绘图软件Origin 7.5的使用，化学编辑排版和分子模拟计算软件ChemOffice Ultra 2004和ChemWindow 6.0的使用，化学化工中的常用算法，典型化工单元操作的计算，化工过程的仿真，Internet网上化学化工资源、专利文献的计算机检索和查阅。

《计算机在化学化工中的应用》涵盖了当今计算机在化学化工领域的一些主要应用，可作为高等院校化学化工及相近专业本科学生的计算机应用教材，对化学化工、高分子及相关专业的广大科技和教育工作者也有重要的参考价值。

<<计算机在化学化工中的应用>>

书籍目录

第一章 科学绘图及数据分析软件	origin.....1	1.1 Origin功能简介.....1	1.1.1 Origin使用入门.....2	1.1.2 Origin工作表(Worksheet:)的使用6	1.1.3 1输入、编辑和保存工作表格...6	1.1.3.2调整工作表格的基本操作.....8	1.1.4 Wot ' ksheet数据分析.....9	1.1.4.1工作表格计算.....9	1.1.4.2统计.....13	1.1.5数据绘图.....13	1.1.5.1基本知识.....13	1.1.5.2数据绘图.....14	1.1.5.3坐标轴的调整.....21	1.1.5.4文字及图例说明.....24	1.1.5.5页面设置和层设置.....25	1.1.5.6绘制多层图形.....26	1.1.5.7绘制三维图形.....29	1.1.5.8创建版面页.....32	1.1.5.9应用举例.....33	1.1.6曲线拟合.....36	1.1.6.1线性拟合.....37	1.1.6.2非线性曲线拟合.....40	1.1.6.3Origin自定义公式拟合技巧45	1.1.6.4应用举例.....46	第二章 化学编辑排版和分子模拟计算... 52	2.1化学结构绘制软件ChemWindow.....54	2.1.1("hemWindow简介.....54	2.1.2化学键的绘制.....57	2.1.3与环有关的工具.....58	2.1.4与画箭头有关的工具.....60	2.1.5化学符号标记和文字说明(Captiqn).....61	2.1.6编辑工具.....62	2.1.7画框、括号及画线工具.....64	2.1.8原子标记符号.....65	2.1.9轨道符号.....65	2.1.10组合工具.....65	2.1.11其他工具.....66	2.1.12附加库使用.....67	2.1.13菜单命令.....68	2.1.14三维绘图程序SymApps 6 . O 69	2.2集成化学软件桌面系统Chem()ffice 71	2.2.1. 化学结构绘图软件(2heml)raw 73	2.2.2分子模型及仿真软件Chem 3D 89	2.2.3化学信息搜寻整合系统 ChemF?inder..... 99	2.3应用举例.....107	第三章 化学化工中的常用算法及计算 实例..... 112	3.1数据的输入输出.....112	3.1.1用作粉末涂料的聚酯的相对分子质量和酸值的控制.....112	3.1.2数均相对分子质量与酸值的 计算.....112	3.2最小二乘法.....113	3.2.1最小二乘法公式的推导.....114	3.2.2化非线性回归为线性回归.....115	3.2.3多项式的线性回归.....116	3.2.4带统计分析的任意阶多项式最小 二乘拟合程序.....117	3.2.5例题习题.....121	3.3线性方程组的求解.....122	3.3.1克莱姆法则.....122	3.3.2高斯消去法...123	3.3.3主元素消去法123	3.3.4按列选主元素消去法的计算机 步骤.....124	3.3.5全选主元消去法及计算程序125	3.3.6计算例题.....130	3.4数值积分.....131	3.4.1数值积分算法.....131	3.4.2数值积分算法程序.....133	3.4.3由【)SC : 谱图计算化学反应动力学 参数.....136	3.5函数插值.....140	3.5.1三次样条插值法.....140	3.5.2三次样条插值计算程序.....141	3.5.3计算例题.....144	3.6常微分方程数值解.....144	3.6.1四阶龙格-库塔法.....145	3.6.2四阶龙格-库塔法计算机程序145	3.6.3计算例题.....148	3.7一元非线性方程求根.....148	3.7.1牛顿迭代法.....148	3.7.2计算程序.....149	3.7.3计算例题.....151	第四章 化工过程计算.....152	4.1气流输送系统.....152	4.1.1概述.....152	4.1.2气-固两相流动的数学模型152	4.1.3计算示例.....155	4.2多效蒸发系统.....159	4.2.1概述.....159	4.2.2并流多效蒸发过程的数学模型160	4.2.3计算示例.....161	4.3喷雾干燥塔的设计计算.....165	4.3.1概述.....165	4.3.2喷雾干燥塔计算模型.....166	4.3.3计算示例.....169	4.4换热系统.....175	4.4.1概述.....175	4.4.2换热系统计算模型.....175	4.4.3计算示例.....177	4.5精馏.....181	4.5.1概述.....181	4.5.2精馏塔的计算模型.....182	4.5.3计算示例.....184	第五章 化工过程仿真.....193	5.1仿真基本概
-----------------	--------------	----------------------	------------------------	----------------------------------	-------------------------	--------------------------	------------------------------	---------------------	------------------	------------------	--------------------	--------------------	----------------------	-----------------------	------------------------	----------------------	----------------------	---------------------	--------------------	------------------	--------------------	-----------------------	--------------------------	--------------------	-------------------------	------------------------------	---------------------------	--------------------	---------------------	-----------------------	----------------------------------	------------------	------------------------	--------------------	------------------	-------------------	-------------------	--------------------	-------------------	------------------------------	-----------------------------	------------------------------	--------------------------	-------------------------------------	-----------------	-------------------------------	--------------------	-------------------------------------	------------------------------	------------------	-------------------------	--------------------------	-----------------------	------------------------------------	-------------------	---------------------	--------------------	----------------------------	--------------------------	-------------------------------	----------------------	-------------------	-----------------	---------------------	-----------------------	-------------------------------------	-----------------	----------------------	-------------------------	-------------------	---------------------	-----------------------	-----------------------	-------------------	----------------------	--------------------	-------------------	-------------------	--------------------	-------------------	-----------------	----------------------	-------------------	-------------------	-----------------	-----------------------	-------------------	-----------------------	-----------------	------------------------	-------------------	-----------------	-----------------	-----------------------	-------------------	---------------	-----------------	-----------------------	-------------------	--------------------	----------

<<计算机在化学化工中的应用>>

念.....	193	5.2过程仿真的工业应用.....	193	5.2.1计算机辅助教学(CAI).....	
...193		5.2.2仿真辅助实验教学.....	194	5.2.3仿真辅助实习教学.....	194
5.2.4仿真		辅助设计、生产与研究194		5.3典型仿真操作界面简介.....	195
5.3.1智能控制(IP(:)模式.....	195	5.3.2仿‘FD(:-3000系统.....	200	5.3.3仿CENTUM—CS系统.....	208
5.4仿		真实例.....	213	5.4.1工艺流程.....	213
5.4.2控制系统简介.....	215	5.4.3操作程序说明.....	216	第六章化学化工资源的计算机检索...—219	
6.1计		算机检索发展简史及发展趋势219		6.1.1计算机检索发展简史.....	219
6.1.2计算机检索发展趋势	220	6.2网上化学数据库.....	222	6.2.1 Internet上的免费化学数据库222	6.2.2
6.2.2		免费的基于‘Web的MEI)LINE223	6.2.3 NISei、的(;hemisty WebBook 226	6.2.4分布式化学数	226
据库统一查询接口 CS ChemFinder229	6.2.5 Internet上的其他免费化学数据库231	6.2.6 Internet		，上其他的化学数据库信息234	6.3
6.3网上化学化工期刊.....	234	6.3.1化学化工期刊		的Internet电子版235	6.3.2
6.3.2Internet免费化学化工期刊资源236	6.4网上专利信息资源.....	240		6.4.1 IBM知识产权网.....	240
6.4.2美国专利商标局的Web专利 数据库.....	242	6.4.3中国知识产权局.....	244	6.5 CA检索.....	245
6.5.1词条检索.....	247	6.5.2索引浏览式检索.....	252	6.5.3化	252
学物质名检索.....	254	6.5.4分子式检索.....	255	6.6工程索引Ei	256
6.6.7科学引文索引SCI.....	259	6.7.1 SCI网络版检索.....	260	6.7.2 SCI	260
光盘版检索.....	263	6.8文献检索常见问题.....	266	6.9应用举例.....	267
参考文献.....	269				

<<计算机在化学化工中的应用>>

章节摘录

书摘6.3 Origin自定义公式拟合技巧 Origin7.5中虽然提供了强大的拟合曲线库,但在实际使用中,用户可能会发觉在所提供的曲线库中没有自己想要拟合的公式,这时就可以使用用户自定义公式进行拟合。

过程如下: 1)打开主工具栏中analysis的non—linear curve fit...,会出现一个选择公式界面。

2)选择编辑公式,需要你提供公式名称以供系统保存;还要提供参数的个数及自变量及因变量符号。

3)将公式写在编辑框内(注意千万别写错了),写完后按Save进行保存。

4)开始拟合:在action中选dataset,提供自变量和因变量的一些相关参数。

5)在action中选simulate,在参数中填上你根据数据及其他一些条件确定的粗略的初始参数以及拟合起始点的位置及拟合点数,然后按下create curve就会在图上出现一条拟合曲线,但这往往与期望值差距较大,因此接下来需要进行参数优化。

6)参数优化采用试错法,根据曲线形状逐渐改变参数,注意,多参数时改变任何一个参数都会改变曲线形状,因此可以一次变一个参数,直到达到满意的形状。

7)在action中选fit,按下Chi—sqr和10—lit。

8)在action中选-restllts,按下param worksheet生成拟合曲线及数据。

此时可以关闭拟合界面。

9)在图左上角右键点1,选add / remove!plot,将多余的曲线删除,将nlsf系列曲线留下。

拟合数据可在param WOI ' ksheet中看到。

这样就完成了一次自定义曲线拟合。

——第44页

<<计算机在化学化工中的应用>>

编辑推荐

本书是介绍计算机在化学化工中应用的实用基础教材，做到内容充实、新颖、实用，涵盖了当今计算机在化学化工领域的一些主要应用，可作为高等院校化学化工及相近专业本科生的教材或教学参考书，也可供化学工作者及其他科技工作者使用。

<<计算机在化学化工中的应用>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>