

## <<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：9787122079237

10位ISBN编号：7122079236

出版时间：2010-6

出版时间：李谦、毛立群、房晓敏 化学工业出版社 (2010-06出版)

作者：李谦，毛立群，房晓敏 编

页数：236

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>>

### 前言

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章介绍正交实验设计方法、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。

## <<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》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、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。

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 2007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。

《计算机在化学化工中的应用》可供高等及高职高专院校化学、化学工程及相关专业师生使用，也可供计算机技术爱好者参考。

# <<计算机在化学化工中的应用>>

## 书籍目录

1 计算机文献检索 1.1 Internet上的化学化工信息资源 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 3 1.3 化学化工文献数据库的检索 5 1.3.1 中国期刊全文数据库(中国知网) 5 1.3.2  
工程索引EI 9 1.3.3 科学引文索引SCI 10 1.3.4 Elsevier数据库 13 1.3.5 Wiley InterScience数据库 15 1.3.6 美国  
化学会(ACS)期刊数据库 15 1.3.7 其他文献数据库 15 1.4 专利检索 17 1.4.1 专利、专利文献与专利说明  
书 17 1.4.2 德温特世界专利创新索引 18 1.4.3 中国专利检索 18 1.4.4 美国专利检索 18 1.5 Internet上的物性  
数据库 21 1.5.1 美国国家标准与技术研究院(NIST)的物性数据库 21 1.5.2 分布式化学数据库统一查询  
接口 CS ChemFinder 21 1.5.3 溶剂数据库SOLV-DB 21 1.5.4 国际化学试剂供应商Aldrich的网站 21 1.6 网上  
化学化工标准 22 1.6.1 中国标准服务网 22 1.6.2 世界标准服务网 22 1.6.3 标准文献的导航站点 22 2 计算机  
文献管理 23 2.1 EndNote简介 23 2.2 建立EndNote数据库 23 2.3 录入文献 24 2.3.1 手工录入 24 2.3.2 联网直  
接检索 25 2.3.3 从网络数据库下载导入 26 2.4 EndNote的使用 33 2.4.1 在Word中插入并编排参考文献 33  
2.4.2 EndNote样式(Style) 35 2.4.3 利用论文模板撰写论文 35 习题 37 3 正交试验设计 38 3.1 正交试验的  
基本概念 38 3.1.1 正交表 38 3.1.2 交互作用表 39 3.1.3 混合型正交表 40 3.2 正交试验设计 40 3.3 正交试验  
的数据处理 42 3.3.1 正交试验数据的直观分析 43 3.3.2 正交试验数据的方差分析 46 3.4 Excel在正交试验  
数据处理中的应用 48 3.4.1 Excel的基本操作 48 3.4.2 Excel在正交试验数据处理中的应用 49 习题 52 4 化学  
编辑排版 53 4.1 化学结构绘制软件ACD/ChemSketch 简介 53 4.1.1 ACD/ChemSketch简介 53 4.1.2 结构模  
式和绘图模式 53 4.2 分子结构绘制 55 4.2.1 简单分子结构的绘制 55 4.2.2 复杂分子结构的绘制 59 4.2.3 化  
学反应式的绘制 62 4.3 图形的绘制 62 4.4 使用ChemSketch预测化合物的宏观性质 64 4.5 其他重要化学绘  
图软件简介 65 4.5.1 ChemOffice和ChemBioOffice 65 4.5.2 ChemWindow 66 4.5.3 ISIS Draw 67 习题 67 5 实验  
数据的图形化处理 69 5.1 Origin基础知识 69 5.1.1 Origin主界面 69 5.1.2 Origin项目文件 69 5.1.3 Origin子窗  
口 70 5.2 数据录入 71 5.2.1 手动输入 71 5.2.2 通过剪贴板传送 71 5.2.3 由数据文件导入 71 5.3 绘图 72 5.3.1  
单层二维图形 72 5.3.2 多层二维图形 73 5.3.3 图形定制 74 5.3.4 三维图形 77 5.4 图形输出 79 5.4.1 通过剪贴  
板输出 79 5.4.2 输出图形文件 79 5.5 数据拟合 80 5.5.1 线性拟合 80 5.5.2 多项式拟合 81 5.5.3 其他非线性拟  
合 81 5.5.4 自定义函数拟合 82 习题 85 6 使用Visio 2007绘制化学化工图形 86 6.1.1 Visio 2007简介 86 6.1.2  
图形绘制基础 86 6.1.3 文本的创建和编辑 94 6.1.4 图层的应用 94 6.2 化工工艺流程图的绘制 95 6.2.1 应用  
工艺流程图模板建立新图形 95 6.2.2 添加设备、管道与阀门 95 6.2.3 添加仪表与批注 97 6.2.4 工艺流程图  
的绘制 97 6.3 化工设备图的绘制 105 6.3.1 确定图幅与比例 105 6.3.2 图面安排 105 6.3.3 绘制各视图 106  
6.3.4 添加标注、明细栏、技术要求 106 习题 111 7 Matlab与化学化工计算 113 7.1 Matlab基础知识 113  
7.1.1 Matlab简介 113 7.1.2 Matlab的界面 113 7.1.3 Matlab的帮助功能 113 7.2 线性方程组的求解 115 7.2.1 线  
性方程组的一般形式 116 7.2.2 线性方程组解的判断 116 7.2.3 线性方程组的直接求解 117 7.3 数据插值  
119 7.3.1 数据插值简介 119 7.3.2 插值方法 120 7.3.3 使用Matlab进行数据插值 121 7.4 非线性方程(组)的  
求解 124 7.4.1 非线性方程(组)的数值求解 124 7.4.2 使用Matlab求解非线性方程(组) 125 7.5 常微分  
方程(组)的数值解 128 7.5.1 化工中的常微分方程(组) 128 7.5.2 常微分方程(组)的数值解法 128  
7.5.3 使用Matlab求解常微分方程(组) 132 习题 136 8 Excel与化工最优化问题 137 8.1 化工最优化问题  
137 8.1.1 化工最优化问题的提出 137 8.1.2 化工最优化问题的几个概念 138 8.1.3 化工最优化问题的分类  
138 8.2 线性规划 139 8.2.1 线性规划的基本理论 139 8.2.2 线性规划问题的常用求解方法 141 8.2.3 Excel的  
规划求解工具 142 8.2.4 使用Excel规划求解工具求解线性规划问题 143 8.3 非线性规划 149 8.3.1 解析法求  
解非线性规划问题 150 8.3.2 非线性规划问题的数值求解 152 8.3.3 使用Excel求解非线性规划问题 152 习  
题 153 9 化工过程模拟 155 9.1 化工过程模拟技术 155 9.1.1 化工过程模拟技术简介 155 9.1.2 稳态模拟与动  
态模拟 155 9.2 Aspen Plus的基本操作 156 9.2.1 Aspen Plus软件介绍 156 9.2.2 Aspen Plus的用户界面 157  
9.2.3 使用Aspen Plus进行过程模拟的一般步骤 158 9.3 使用Aspen Plus进行过程模拟的应用实例 159 9.3.1  
闪蒸单元模拟 159 9.3.2 C2组分精馏分离过程设计 164 9.3.3 复杂过程的模拟 174 9.4 计算流体力学 176  
9.4.1 CFD简介 176 9.4.2 CFD模拟的基本步骤 177 9.4.3 商品化通用CFD软件 177 习题 178 10 计算机在科技  
论文撰写及演讲中的应用 179 10.1 科技论文 179 10.1.1 科技论文简介 179 10.1.2 科技论文的基本结构 179  
10.1.3 期刊发表的学术论文 180 10.1.4 学位论文 180 10.1.5 科技论文的内容与格式要求 180 10.2 Microsoft  
Word在论文撰写中的应用 182 10.2.1 Microsoft Word 2007的用户界面 182 10.2.2 Microsoft Word的基本操

## <<计算机在化学化工中的应用>>

作 183 10.2.3 使用Microsoft Word撰写论文 198 10.3 PowerPoint在制作幻灯片中的应用 199 10.3.1  
PowerPoint的用户界面 199 10.3.2 PowerPoint的基本操作 199 附录 Matlab应用基础 207 1.1 Matlab的数据  
类型与计算功能 207 1.1.1 变量和常量 207 1.1.2 数字、变量的运算与格式 207 1.1.3 字符串及其运算 208  
1.1.4 矩阵及其运算 210 1.2 变量和工作空间的管理 219 1.2.1 变量的查找 219 1.2.2 变量的保存和读取 219  
1.2.3 变量的清除 220 1.3 Matlab的常用图形处理功能 221 1.3.1 图形窗口与子图的操作命令 221 1.3.2 二维  
图形绘制命令 222 1.3.3 三维图形绘制命令 224 附录 学术论文撰写规范示例 229 .1 某期刊投稿简则  
229 .2 某研究所研究生学位论文撰写规则 230 参考文献 236

## <<计算机在化学化工中的应用>>

### 章节摘录

插图：专利、专利文献与专利说明书专利（Patent）是发明人或设计人所做出的发明、实用新型和外观设计，经申请批准后，在法律规定的有效期内，授予受保护的专利权，即专利权人享有独占利益。专利可分为发明专利、实用新型专利和外观设计专利3种类型。

专利文献的内容包括：一切与工业产权（包括专利权和显著标记权）有关的文献，尤其指专利局出版的公报（专利公报）、专利说明书、专利文献、专利题录、与专利有关的法律文件、专利检索工具等。

据统计有90%～95%的创新发明最先表现在专利文献中，因此专利文献是及时跟踪科学技术领域最新进展的重要媒介。

专利文献的主体是专利说明书，专利说明书包含如下内容：发明的名称、所属技术问题领域、现有技术、发明的目的、发明的内容、发明的效果、附图及附图简单说明、实施例等。

## <<计算机在化学化工中的应用>>

### 编辑推荐

《计算机在化学化工中的应用》是高等学校“十五”规划教材。

## <<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>