

◎ 高等学校教材

计算机在化学 化工中的应用

□ 马江权 杨德明 龚方红 编著



高等教育出版社
Higher Education Press

高等学校教材

计算机在化学化工中的应用

马江权 杨德明 龚方红 编著

高等教育出版社

内容简介

本书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。

本书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。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在化学化工中的应用/马江权,杨德明,龚方红编著. —北京:高等教育出版社,2005.3

ISBN 7-04-016425-6

I. 计... II. ①马...②杨...③龚... III. 计算机应用-化学工业-高等学校-教材 IV. TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 009167 号

策划编辑 陈红英 责任编辑 周传红 封面设计 王凌波 责任绘图 黄建英
版式设计 王莹 责任校对 杨雪莲 责任印制 孔源

出版发行 高等教育出版社

社 址 北京市西城区德外大街4号

邮政编码 100011

总 机 010-58581000

经 销 北京蓝色畅想图书发行有限公司

印 刷 北京东光印刷厂

购书热线 010-58581118

免费咨询 800-810-0598

网 址 <http://www.hep.edu.cn>

<http://www.hep.com.cn>

网上订购 <http://www.landaco.com>

<http://www.landaco.com.cn>

开 本 787×1092 1/16

印 张 17.5

字 数 420 000

版 次 2005年3月第1版

印 次 2005年3月第1次印刷

定 价 22.10元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 16425-00

前 言

当前化学研究已达到分子设计的水平,化工生产和管理也多采用计算机控制。计算机引入化学化工领域后,在帮助深入研究化学基本理论和促进化工生产两个方面都显示了强大作用。化学化工专业的学生只学习一般的计算机文化和技术知识显然不够,因此近年来国内化工院校或专业都已经或准备开设计算机在化学化工中应用方面的课程。

江苏工业学院从1993年起就为高分子材料学生开设了“计算机在化学化工中的应用”,为化工类学生开设了“计算机在化工中的应用”,为化学类学生开设了“计算机在化学中的应用”等课程。

国内以往的一些介绍计算机在化学或化工方面应用的书籍,以介绍化工算法的居多,编程语言一般选用 Fortran 或 Basic,对现在的学生已经不太适用。为此我们编写了本教材,立足于更加系统全面介绍当今计算机在化学化工方面的应用。而在出版之前,本书已经过校内三次教学试用。

全书分为六章,第一章介绍了数据分析处理及科学绘图软件 Origin 7.5Pro 的使用;第二章介绍化学编辑排版和分子模拟计算软件 ChemOffice Ultra2004(集成化学软件桌面系统,含化学结构绘图 ChemDraw、分子模型及仿真软件 Chem3D 和化学信息搜寻整合系统 ChemFinder)和 ChemWindow 6.0(化工之窗)的使用;第三章介绍化学化工中的常用算法及计算实例,包含化学化工领域中常用的最小二乘曲线拟合和回归分析、一元非线性方程求根、线性方程组求解、数值积分、微分方程求解和样条插值等经典算法,以及笔者用可视化编程语言 Visual Basic 编写的参考程序;并以相当篇幅介绍这些方法在解决化学化工实际问题时的应用;第四章着重介绍化工过程的典型计算、算法和笔者用 Visual Basic 编写的参考程序,含气流输送系统、多效蒸发系统、喷雾干燥塔、换热系统和精馏塔的设计计算,第三、四两章对培养学生树立工程观点,提高学生综合应用知识的能力、数学建模的能力及应用计算机的能力,效果显著;第五章介绍了化工过程仿真的基本概念、工业应用、典型仿真操作界面和仿真实例;第六章介绍了 Internet 网上化学化工资源、专利文献的计算机检索和查阅。

本书编写的出发点是力求做到内容充实、新颖、实用,使其涵盖当前计算机在化学化工领域的一些主要应用。第一、二和三章适用于一般理工科的学生,第四、五和六章适用于化学化工和相近专业的学生,可为化学化工和高分子类专业的学生提高计算机水平和解决实际问题的能力做学习参考之用,从而在专业中打下良好的计算机应用基础。本书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。

本书执笔人员如下:马江权(第一章、第二章、第三章的五~七节及编程、第六章 CA、EI 和 SCI 检索部分),杨德明(第四、第五和第六章),龚方红(第三章的一~四节)。编写工作得到江苏工业学院教务处及化工系领导的关心和支持,在此特别表示感谢。

郑重声明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其为人将承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人给予严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话：(010) 58581897/58581896/58581879

传 真：(010) 82086060

E - mail：dd@hep.com.cn

通信地址：北京市西城区德外大街4号

高等教育出版社打击盗版办公室

邮 编：100011

购书请拨打电话：(010)58581118

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
1.2 Origin 使用入门	2
1.3 Origin 工作表(Worksheet)的使用	6
1.3.1 输入、编辑和保存工作表格	6
1.3.2 调整工作表格的基本操作	8
1.4 Worksheet 数据分析	9
1.4.1 工作表格计算	9
1.4.2 统计	13
1.5 数据绘图	13
1.5.1 基本知识	13
1.5.2 数据绘图	14
1.5.3 坐标轴的调整	21
1.5.4 文字及图例说明	24
1.5.5 页面设置和层设置	25
1.5.6 绘制多层图形	26
1.5.7 绘制三维图形	29
1.5.8 创建版面页	32
1.5.9 应用举例	33
1.6 曲线拟合	36
1.6.1 线性拟合	37
1.6.2 非线性曲线拟合	40
1.6.3 Origin 自定义公式拟合技巧	45
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 ChemWindow 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 (Caption)	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 6.0	69
2.2 集成化学软件桌面系统 ChemOffice	71
2.2.1 化学结构绘图软件 ChemDraw	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 ChemFinder	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	4.5 精馏	181
3.3.5 全选主元消去法及计算程序	125	4.5.1 概述	181
3.3.6 计算例题	130	4.5.2 精馏塔的计算模型	182
3.4 数值积分	131	4.5.3 计算示例	184
3.4.1 数值积分算法	131	第五章 化工过程仿真	193
3.4.2 数值积分算法程序	133	5.1 仿真基本概念	193
3.4.3 由 DSC 谱图计算化学反应动力学 参数	136	5.2 过程仿真的工业应用	193
3.5 函数插值	140	5.2.1 计算机辅助教学(CAI)	193
3.5.1 三次样条插值法	140	5.2.2 仿真辅助实验教学	194
3.5.2 三次样条插值计算程序	141	5.2.3 仿真辅助实习教学	194
3.5.3 计算例题	144	5.2.4 仿真辅助设计、生产与研究	194
3.6 常微分方程数值解	144	5.3 典型仿真操作界面简介	195
3.6.1 四阶龙格-库塔法	145	5.3.1 智能控制(IPC)模式	195
3.6.2 四阶龙格-库塔法计算机程序	145	5.3.2 仿 TDC-3000 系统	200
3.6.3 计算例题	148	5.3.3 仿 CENTUM-CS 系统	208
3.7 一元非线性方程求根	148	5.4 仿真实例	213
3.7.1 牛顿迭代法	148	5.4.1 工艺流程	213
3.7.2 计算程序	149	5.4.2 控制系统简介	215
3.7.3 计算例题	151	5.4.3 操作程序说明	216
第四章 化工过程计算	152	第六章 化学化工资源的计算机检索	219
4.1 气流输送系统	152	6.1 计算机检索发展简史及发展趋势	219
4.1.1 概述	152	6.1.1 计算机检索发展简史	219
4.1.2 气-固两相流动的数学模型	152	6.1.2 计算机检索发展趋势	220
4.1.3 计算示例	155	6.2 网上化学数据库	222
4.2 多效蒸发系统	159	6.2.1 Internet 上的免费化学数据库	222
4.2.1 概述	159	6.2.2 免费的基于 Web 的 MEDLINE	223
4.2.2 并流多效蒸发过程的数学模型	160	6.2.3 NIST 的 Chemisty WebBook	226
4.2.3 计算示例	161	6.2.4 分布式化学数据库统一查询接口 CS ChemFinder	229
4.3 喷雾干燥塔的设计计算	165	6.2.5 Internet 上的其他免费化学数 据库	231
4.3.1 概述	165	6.2.6 Internet 上其他的化学数据库 信息	234
4.3.2 喷雾干燥塔计算模型	166	6.3 网上化学化工期刊	234
4.3.3 计算示例	169	6.3.1 化学化工期刊的 Internet 电子版	235
4.4 换热系统	175	6.3.2 Internet 免费化学化工期刊资源	236
4.4.1 概述	175	6.4 网上专利信息资源	240
4.4.2 换热系统计算模型	175	6.4.1 IBM 知识产权网	240
4.4.3 计算示例	177		

6.4.2 美国专利商标局的 Web 专利 数据库	242	6.6 工程索引 Ei	256
6.4.3 中国知识产权局	244	6.7 科学引文索引 SCI	259
6.5 CA 检索	245	6.7.1 SCI 网络版检索	260
6.5.1 词条检索	247	6.7.2 SCI 光盘版检索	263
6.5.2 索引浏览式检索	252	6.8 文献检索常见问题	266
6.5.3 化学物质名检索	254	6.9 应用举例	267
6.5.4 分子式检索	255	参考文献	269

第一章 科学绘图及数据分析软件 Origin

1.1 Origin 功能简介

图表是显示和分析复杂数据的理想方式,因此高端图表工具是科学家和工程师们必备的软件。Origin Lab 公司的 Origin 软件(演示版可以从 <http://www.Originlab.com> 下载)一直在科学作图和数据处理领域享受较高的声誉。与它的主要竞争对手 SPSS Scientific 公司的 Sigma-Plot(可以从 <http://www.spss.com/> 下载)和 MathSoft 公司的 Axum 相比,它的功能更强大但需要花费更多时间来学习。在最新发布的 Origin 7.5 中,OriginLab 公司对它的易用性进行了大量的改进,并彻底调整了其编程语言战略,从而使该软件在同类产品中脱颖而出。

现流行的 Origin 版本有 5.0、6.0、6.1、7.0 和 7.5。Origin 包括两大类功能:数据分析和科学绘图。Origin 的数据分析功能包括:给出选定数据的各项统计参数平均值(Mean)、标准偏差(Standard Deviation, SD)、标准误差(Standard Error, SE)、总和(Sum)以及数据组数 N;数据的排序、调整、计算、统计、频谱变换;线性、多项式和多重拟合;快速 FFT 变换、相关性分析、FFT 过滤、峰找寻和拟合;可利用约 200 个内建的以及自定义的函数模型进行曲线拟合,并可对拟合过程进行控制;可进行统计、数学以及微积分计算。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。绘图时,只需选择所要绘图的数据,然后再单击相应的工具栏按钮即可。二维图形模板有 Line、Scatter、Line + symbol、Special line/symbol、Area、Fill area、Inclusive/exclusive area fill、Bar、Stack bar、Floating bar、Pie、High-low-close、Function graphs、Column、Stack column、Floating column、XYAM vector、XXY vector、Polar、Line series、Time series、Waterfall、Ternary diagram、Double Y axis、Multi-panel XY。3D 图形模板有 XYZ scatter with drop lines and/or projections、Trajectory、Bar、Ribbon、Walls、Waterfall、Color map surface with projected contour、Wire frame、Surface with constant slices in X/Y direction、Cube frame。二维图形可独立设置页、轴、标记、符号和线的颜色,可选用多种线型。选择超过 100 个内置的符号。调整数据标记(颜色、字体等),选择多种坐标轴类型(线性、对数等)、坐标轴刻度和轴的显示,选择不同的记号,每页可显示多达 50 个 XY 坐标轴,可输出为各种图形文件或以对象形式拷贝至剪贴板。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连接;可以方便地进行矩阵运算,如转置、求逆等,并通过矩阵窗口直接输出三维图表;可以用 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。

Microcal Origin 像 Microsoft Word、Excel 等一样,是一个多文档界面应用程序。它将用户的所有工作都保存在后缀为 OPJ 的项目文件(Project)中。保存项目文件时,各子窗口也随之一起存盘;另外各子窗口也可以单独保存,以便别的项目文件调用。一个项目文件可以包括多个子

窗口,可以是工作表窗口(Worksheet)、绘图窗口(Graph)、函数图窗口(Function Graph)、矩阵窗口(Matrix)和版面设计窗口(Layout Page)等。一个项目文件中的各窗口相互关联,可以实现数据实时更新,即如果工作表中的数据被改动之后,其变化能立即反映到其他各窗口,比如绘图窗口中所绘数据点可以随源数据被改动而进行立即更新。

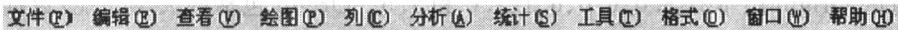
Origin 7.5 系统要求为:Windows 98/Me/NT 4.0/2000/XP/2003, Internet Explorer 5.0, Pentium III 以上 CPU,100MB 以上空余硬盘空间,64 MB 以上内存。由于 Origin 的功能强大,本章将重点介绍本软件 7.5 Pro(专业版)的数据处理及科学绘图的部分,其余的功能可参考软件的说明书或帮助文件自己学习。

1.2 Origin 使用入门

Origin 具有 Office 的多文档界面,主要包括以下几个部分:

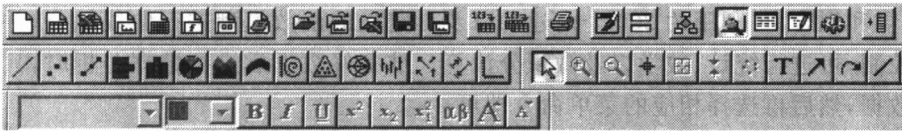
1. 菜单栏(顶部)

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. 工程管理器(下部)

类似资源管理器,可以方便切换各个窗口等。

Name	Type	View	S..	Modified	Created	Depe...	L...
D... Wor...	N...	6...	2003-8-...	2003-8-...	1		
G... Graph	N...	6...	2003-8-...	2003-8-...	0		

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。

Origin 的使用主要有两个部分,工作表格(Worksheet)和绘图窗口(PlotWindows)。使用绘图窗口,可以方便地更改图形的外貌、直观地进行数学分析、拟合。使用工作表格可以迅速进行大量的数据处理及转换。绝大多数实验数据的处理可以在 Origin 中完成,并且其数据处理和绘图可以同时完成。

例 1-1 尿中胆色素经处理后,在 550 nm 处有很强的吸光性,现测得配置好的不同的胆色素浓度的标准溶液的吸光率数据如表 1-1 所示,假定标准曲线可以用 $y=a+bx+cx^2$ 来表示,试计算出方程的参数 a 、 b 、 c 的值,在 $y-x$ 图上绘出拟合曲线,标出实验数据点。

表 1-1 不同胆色素浓度标准溶液的吸光率

胆色素浓度(mg/100 ml)	50	75	100	125	150	175	200	225	250
吸光率	0.039	0.061	0.087	0.107	0.119	0.163	0.179	0.194	0.213

(1) 启动 Origin

在“开始”菜单单击 Origin 程序图标,即可启动 Origin。Origin 启动后,自动给出名称为 Datal 的工作表格,见图 1-1。

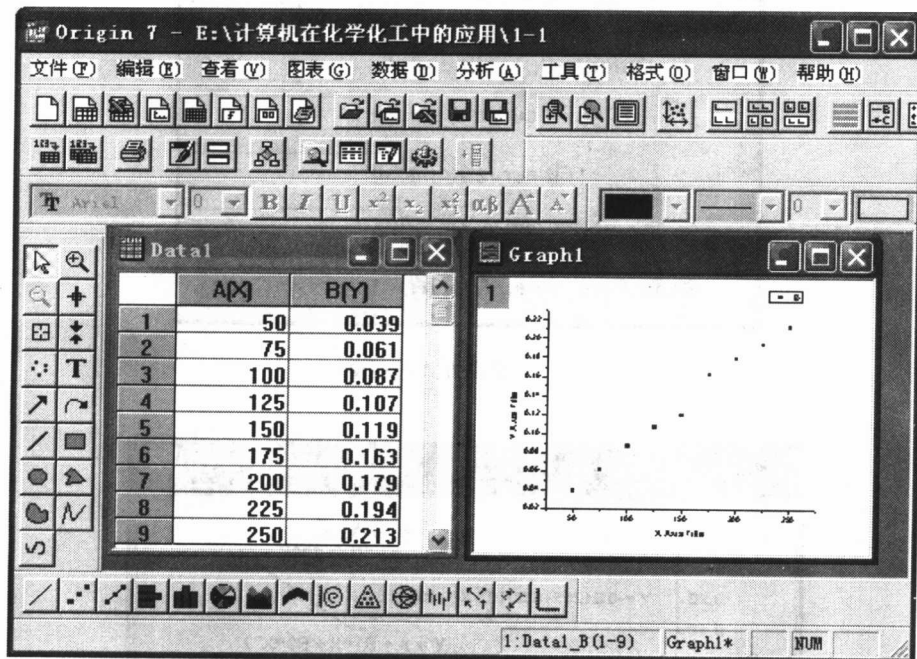


图 1-1 在 Origin 的工作窗口中输入数据作图

(2) 在 Worksheet 中输入数据

工作表 Worksheet 最左边的一列为数据的组数,一般默认 A 和 B 列分别为 X 和 Y 数据。在工作表 Datal 的 A(X)、B(Y)分别依序输入胆色素浓度和吸光率的数据。

(3) 使用数据绘图

打开 Worksheet 窗口,用鼠标选中所有的数据,使用菜单 Plot(绘图)中 Scatter 命令,或使用工具栏 Scatter 按钮绘图。该图形上点的形状、颜色和大小、坐标轴的形式、数据范围等均可在相应内容所在位置处用鼠标左键点击后出现的窗体中进行调整。

(4) 回归分析

绘图后,选 Analysis(分析)菜单中的 Polynomial Regression(多项式拟合)命令,出现图 1-2 所示对话框,在“Order”栏中输入“2”,表示作 2 次曲线拟合,在“Show Formula on Graph?”一栏打钩,拟合结果见图 1-3。在 ResultsLog 窗口(图 1-3 中曲线右下侧)给出回归求出的参数值,包括拟合参数(A、B1、B2)及各自的标准误差(Error)、标准偏差(SD)、相关系数 R、数据点个数

N 、 $R=0$ 的概率 P 等。该窗口的内容可以拷贝粘贴到其他程序中或保存为一个文本文件。相关系数 R 反映了 x 和 y 的相关程度, $R=1$, 表示 x 、 y 之间严格符合关系式; R 越接近 1, x 和 y 的相关程度越大。本题 R 为 0.99063, 说明拟合结果很好。

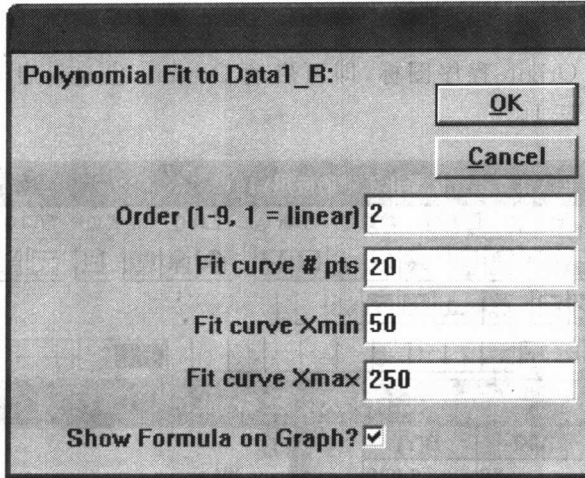


图 1-2 拟合方式选项窗口

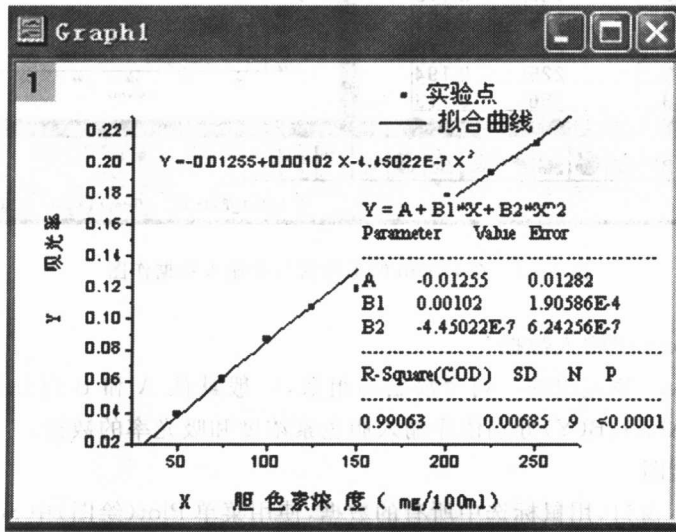


图 1-3 拟合结果

(5) 文件保存和调用

Origin 可以将图形及数据保存为扩展名为“.OPJ”的文件, 可以随时编辑和处理其中的数据和图形。所绘图形可以直接打印或拷贝粘贴到其他编辑软件(如 Word)中。

例 1-2 对离心泵性能进行测试的实验中, 得到流量 q_v 、压头 H 和效率 η 的数据如表 1-2 所示, 绘制离心泵特性曲线。

表 1-2 流量 q_v 、压头 H 和效率 η 的关系数据

序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$q_v/(m^3/h)$	0.0	0.4	0.8	1.2	1.6	2.0	2.4	2.8	3.2	3.6	4.0	4.4
H/m	15.0	14.84	14.56	14.33	13.96	13.65	13.28	12.81	12.45	11.98	11.30	10.53
η	0.0	0.085	0.156	0.224	0.277	0.333	0.385	0.416	0.446	0.468	0.469	0.431

本例涉及多层图形的绘制,绘制的图形见图 1-4,具体步骤如下:

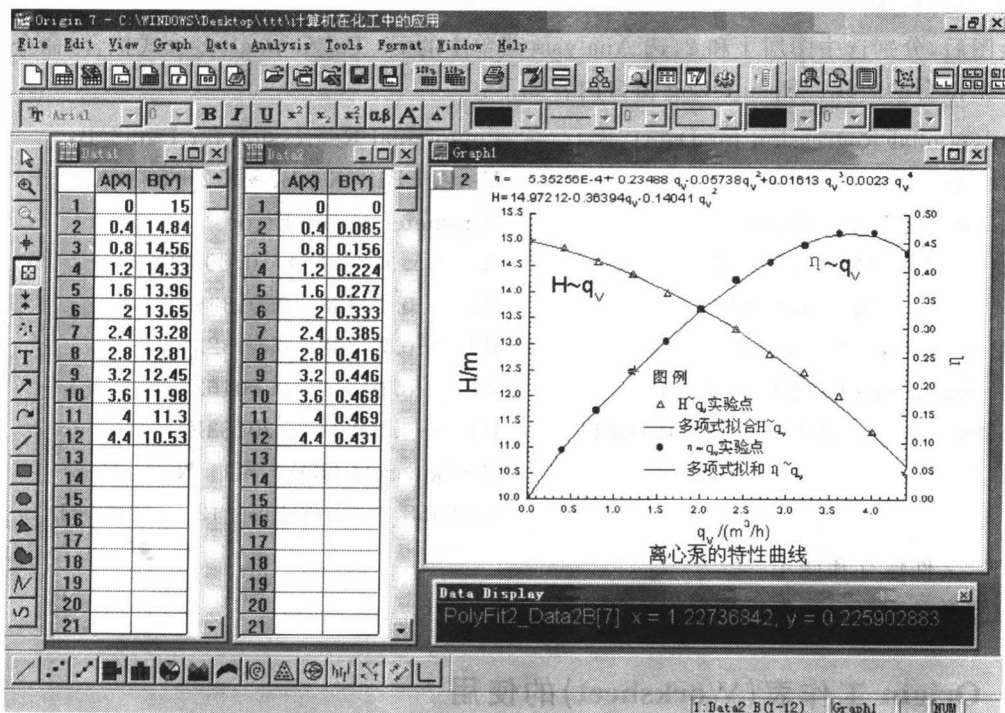


图 1-4 Origin 操作界面(离心泵特性曲线示例)

(1) 启动 Origin

(2) 在 Worksheet 中输入数据

在工作表 Data1 的 A(X)、B(Y) 分别依序输入流量 q_v 和压头 H 的数据。从 File(文件) 菜单运行 New 命令打开 New 对话框,选择 Worksheet,单击 OK,在新建的工作表 Data2 的 A(X)、B(Y) 列分别输入流量 q_v 和效率 η 的数据。

(3) 使用数据绘图

[方法一]

选择第一组数据(Data1),打开 Worksheet 窗口,用鼠标选中所有的数据,使用菜单 Plot 或工具栏中 Line+Symbol(线+点图)/Scatter(散点图)命令绘图。在 Edit 菜单选择 New Layer (Axes)→Right Y 命令,页面显示有第二层,双击层标,打开 Layer2 对话框,将 Data2 加入到 Layer2。调整图形格式,可完成多层图形的绘制。

[方法二]

1) 在工作表中输入数据

在 Data1 中按 Ctrl+D 快捷键/点鼠标右键选 Add New Column,使工作表增加到 3 栏。在工作表的 A(X)、B(Y)、C(Y)中分别输入流量 q_v 、压头 H 和效率 η 数据。

2) 使用数据绘图

用鼠标选中 Data1 中所有的数据,采用 Plot→Special line/symbol→Double - Y 命令绘图。调整图形格式,可完成多层图形的绘制。

(4) 回归分析

绘图后,分别选中图层 1 和 2,选 Analysis 菜单中的 Fit Polynomial(多项式拟合)命令,在图中会产生拟合的曲线。ResultsLog 窗口内容如下:

Polynomial Regression for Data1_B:

$$Y=A+B1 * X+B2 * X^2$$

Parameter Value Error

A 14.97212 0.05635

B1 -0.36394 0.05954

B2 -0.14041 0.01304

R-Square(COD) SD N P

0.9977 0.07621 12 <0.0001

Polynomial Regression for Data2_B:

$$Y=A+B1 * X+B2 * X^2+B3 * X^3+B4 * X^4$$

Parameter Value Error

A -5.35256E-4 0.00386

B1 0.23488 0.01338

B2 -0.05738 0.01323

B3 0.01613 0.00462

B4 -0.0023 5.20183E-4

R-Square(COD) SD N P

0.99958 0.00409 12 <0.0001

(5) 文件保存和调用

将图形及数据保存为扩展名为“.OPJ”的文件。

1.3 Origin 工作表(Worksheet)的使用

1.3.1 输入、编辑和保存工作表格

Origin 工作表格支持许多种不同的数据类型,包括数字、文本、时间、日期等,Origin 提供了许多向工作表格输入数据的方法:

1. 从键盘输入数据

打开或选择一个工作表格,选择一个工作表格单元格(鼠标单击该处),输入数据,然后按 Tab(→)到下一列或按 Enter(↓)键到下一行,也可以用鼠标选定任意位置的单元格,再继续输入下一个值(在某单元格输入数据后必须按 Tab 键、方向键或 Enter 键将光标移动到其他单元格,则确认刚输入的数据)。

←→ ↓ ↑

光标移动键

Enter

光标向下移动一单元格

←或 shift+Tab

光标向左移动一单元格(如已是最左边一列,将移到最右边一列)

→或 Tab

光标向右移动一单元格(如已是最右边一列,将移到最左边一列)

Home	光标移到当前列的第一个单元格
End	光标移到当前列的最后一个单元格
PgDn	光标向下移一页
PgUp	光标向上移一页
Ctrl+Home	光标移到最左列的第一个单元格
Ctrl+End	光标移到最右列的最后一个单元格
Ctrl+PgDn	光标向右移一页
Ctrl+PgUp	光标向左移一页
Ctrl+↓	光标移到当前列的最后一个有值的单元格
Ctrl+↑	光标移到当前列的最后一个有值的单元格或第一单元格
Ctrl+←	光标移到最左列同行的单元格
Ctrl+→	光标移到最右列同行的单元格

如果某一单元格的数值输错了或想更改某一单元格的数值,可以选择该单元格并键入新数据,Origin 自动覆盖原数据。

要编辑一个单元格的数值,可以选择相应的单元格,按 F2 键或用鼠标单击指定的位置(单元格数值由反像显示变为正常显示,可以防止覆盖),可用下列的键编辑单元格的数值。可以按 ↑、↓、PageUp、PageDn 或 Tab 键结束编辑状态。如果变更错误,可以按 Ctrl+Z 撤销刚进行的更改。

Delete	删除光标右的一个值或所有选定的(反像显示)数值
Backspace	删除光标左的一个值或所有选定的(反像显示)数值
Home	移到单元格的最左端
End	移到单元格的最右端
←	光标向左移动一字符
→	光标向右移动一字符

2. 从文件中输入数据




数据可以从 ASCII 文件、Excel 文件、dBASE 文件等形式导入,具体步骤:打开或选择一个工作表格;选择 File 菜单中 Import 命令下相应的文件类型,打开文件对话框,选择文件单击 OK。

如要输入 ASCII 数据文件,可以在打开前设置选项,File - Import - ASCII Option,打开 ASCII Import Option for XXX 对话框设置诸如列数,文件首忽略标题行数等。然后选择文件输入。

3. 通过剪贴板传递数据

工作表格的数据也可以通过剪贴板来从别的应用程序(如 Word 等)获得,具体应用方式与一般拷贝、粘贴一样。同样,数据也可以在同一或不同的工作表格中交换。

4. 用行号或随机数填充列

可以用以下操作将一列或选定区域的单元格快速填充为行号、正随机数或一般随机数。选择相应的单元格区域,工具栏中单击按钮  (将列填充为行号);  (将列填充为正随机数);  (将列填充为一般随机数);或选择 Column 菜单中 Fill Column With 命令;也可以右击鼠标选择 Fill Column With 命令。(欲显示该按钮,可选择 View→Toolbar→Work sheet Data)。

5. 用函数或数学表达式设置列的数值(见 1.4.1)

6. 改变工具格中 X 的默认值

当我们用工作表格中的数据绘图而不指定 X 列时,Origin 假定 X 的初始值为 1,且其增加值为 1。

选择一个工具表格;如果已有 X 列,删除或忽略它;选择 Format 菜单中 Set Worksheet X 命令,出现对话框,输入初始 X 值和增加值;单击 OK。从该工作表格绘图将使用默认的 X 值。

7. 选择工作表格数据

选择整个工作表格:鼠标单击工作表格左上角的空白处;

选择一个单元格:鼠标单击单元格可选择单元格;

选择一列:单击列标;

选择一行:单击行的数码;

选择多个单元格:鼠标向右下拖动(或选择初始单元格,Shift-单击终止单元格);

选择多列:在列标行拖动鼠标(或单击起始列标,Shift-单击终止列标);

选择多行:在行数码处拖动鼠标(或单击起始行,Shift-单击终止行,间隔选取可按 Ctrl 键单击)。

8. 在一列中插入数据

在一列中插入一个单元格,可选择要插入单元格的位置,选择 Edit:Insert 命令或右击鼠标在快捷菜单中选择 Insert 命令,新的单元格出现在选中单元格上面;如插入 n 个单元格,可以先选择 n 个单元格,然后用 Insert 命令。

9. 删除单元格和数据

清除整个工作表格内的数值:选择工作表格,在 Edit 菜单中选择 Clear Worksheet 命令,该工作表格中所有的内容均被删除。

删除工作表格中的部分单元格:选择工具表格,选择某个单元格或多个单元格,Edit 菜单中选择 Delete 命令即可。如果该数据已被绘图,绘图窗口将重新绘图以除去删除的点。

如仅欲删除数据而不删除单元格,可选择相应单元格,按 Delete 键。被删除数据的单元格将显示“--”,表示没有数值。


10. 保存数据

保存 Origin 文档的同时就保存了 Worksheet 中的数据。如欲将 Worksheet 中的数单独保存成文件,可选择 Worksheet 窗口;在 File 菜单中选择 Export ASCII 命令,出现 File Save As 对话框,输入相应的文件名即可。一般数据文件可以“.dat”为扩展名。

1.3.2 调整工作表格的基本操作

1. 增加列

选择一个工作表格,Column 菜单中选择 Add New Columns 命令;打开 Add New Columns 对话框,在其中输入要增加的列数,这样在工作表格的结尾处加上了所输个数的列(默认为 Y),所加的列按字母顺序标记(A,B,C,...,X,Y,Z,AA,BB,CC,...),从尚未使用的第一个字母开始。

可在标准工具栏中单击 Add New Column 按钮,也可在工作表格空白处右击鼠标,快捷菜单中选择 Add New Column 命令在工作表格的结尾处增加一列。

2. 插入列(行)

欲在工作表格的指定位置插入一列(行),可将其右(下)侧的一列(行)选定,然后选择 Edit→

原书缺页