



高等学校教材

HUAXUE HUAGONG  
RUANJIAN YINGYONG JIAOCHENG

# 化学化工软件 应用教程

桂香 主编  
卢运祥 金晓海 副主编



化学工业出版社

高等学校教材

# 化学化工软件应用教程

胡桂香 主 编

卢运祥 金海晓 副主编



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书介绍了 7 款常用化学化工软件的应用, 从内容上分为三部分。前两章为统计分析软件, 介绍了 Origin 和 Statistica 软件的基本操作和主要应用, 第 3~5 章为化学计算软件, 介绍了 Gaussian、ChemOffice 和 Tsar 软件的基本操作以及其在量子化学计算、化学结构式及反应流程绘制、定量构效关系等方面的应用, 第 6 章和第 7 章为制图软件, 介绍了 AutoCAD 和 SmartDraw 软件在化工制图方面的应用。

本书图文并茂, 实例丰富, 既可作为化学、化工、制药等专业高年级本科生的教材, 同时也可作为相关专业大学生和研究生、科技人员的教学或科研参考用书。

## 图书在版编目(CIP)数据

化学化工软件应用教程 / 胡桂香主编. —北京: 化学工业出版社, 2013.7  
高等学校教材  
ISBN 978-7-122-17377-5

I. ①化… II. ①胡… III. ①化学-应用软件-高等学校-教材 ②化学工业-应用软件-高等学校-教材  
IV. ①06-39②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 102194 号

---

责任编辑: 窦 臻 陆雄鹰

文字编辑: 郑 直

责任校对: 蒋 宇

装帧设计: 王晓宇

---

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: 三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 21 字数 521 千字 2013 年 9 月北京第 1 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: 39.00 元

版权所有 违者必究

# 前 言

随着现代科技的飞速发展，计算机技术已经广泛应用到化学化工的各个领域，应用化学化工软件来解决实际问题新技术发展的必然趋势，将计算机引入大学专业教学是当今教育改革的基本特征。一个成熟的化学化工专业工作者应当熟练地使用相关的软件，使自己的工作更加方便、高效与可靠。化学化工行业中需要利用计算机来解决的问题涉及很多方面，因此，出现了各式各样的化学化工工具软件，但这些软件的应用方法介绍多散见于书刊或软件说明书，很少有将这些软件有机结合在一起的实例教程。因此，涉及化学化工方面软件应用教程的编写对于培养具有创新意识和应用能力的专业人才以及今后我国化学化工业健康稳步的发展具有十分重要的意义。

近年来，国内关于化学化工软件应用的书籍陆续出版了一些，但其内容各有侧重。编写一部针对性强、实用性强、涉及面广的教程已经迫在眉睫。编者曾对毕业的学生进行调查，学生普遍反映，工作中经常用到专业软件解决实际问题，可是由于没有接受过系统训练，使用起来束手束脚，甚至不了解什么软件可以解决什么样的问题；而国内有些高校已经意识到培养学生软件使用能力的重要性，开始设置相关课程的教学。

在这样的背景下，我们编写了这部《化学化工软件应用教程》。本教程涉及三大类型共 7 个软件：统计分析类软件，包括 Origin 和 Statistica；化学计算类软件，包括 Gaussian、ChemOffice 和 Tsar；工程制图类软件，包括 AutoCAD 和 SmartDraw。每章对应一个软件，介绍内容包括：软件基本介绍，操作界面，应用方法，应用实例，习题，参考文献等。本书既可作为化学、化工、制药等专业高年级本科生的教材，同时也可作为相关专业大学生和研究生、科技人员的教学或科研参考书使用。

本书具有以下特色。

1. **定位清晰** 本书定位为本科生教材，力求通俗易懂、条理清晰。撰写的内容可以满足一个初学者拿到本书即可比较轻松地使用软件。

2. **涉及面广** 涉及三大类型共 7 个软件，涵盖了化学及化工类常用软件。

3. **实用性强** 针对专业问题介绍软件，突出化学化工软件的实例应用，重点培养使用者的知识应用能力。另外，通过专业实例来学习软件，初学者更容易接受和理解，学习起来不再枯燥。

4. **图文并茂，实例丰富** 图文并茂可以实现一本书“手把手”地教。参与编写的人员对所编写的软件具有丰富的教学经验或长期应用软件进行科研工作，对软件的应用非常熟练，针对软件有丰富的科研成果，并作为实例编写入教程。

本书由浙江大学宁波理工学院胡桂香组织编写。第 1 章和第 6 章由浙江大学宁波理工学院张艳执笔；第 2 章和第 4 章由胡桂香执笔；第 3 章由华东理工大学卢运祥执笔；第 5 章由宁波大学金海晓执笔，第 7 章由浙江大学宁波理工学院雷引林执笔完成。全书的校对、统稿

工作和最后的审阅由胡桂香完成。

在编写过程中，我们得到了化学工业出版社的大力支持，在此表示衷心的感谢。

本书编写力求严谨，但由于编者的水平有限，书中的疏漏及不足在所难免，殷切希望读者不吝批评指正。

**编 者**

**2013 年 5 月**

# 目 录

|                                 |                                 |
|---------------------------------|---------------------------------|
| <b>第 1 章 Origin</b> .....1      | <b>2.3 统计分析</b> ..... 51        |
| 1.1 软件功能介绍..... 1               | 2.3.1 多元回归..... 51              |
| 1.2 主界面..... 1                  | 2.3.2 高级回归..... 62              |
| 1.2.1 菜单栏..... 2                | 2.3.3 聚类分析..... 64              |
| 1.2.2 工具栏..... 7                | 2.3.4 因素分析..... 72              |
| 1.3 工作表格与数据处理..... 8            | 2.3.5 主成分分析..... 81             |
| 1.3.1 工作表的增加与删除..... 8          | 2.3.6 偏最小二乘分析..... 88           |
| 1.3.2 工作表数据的导入..... 8           | 2.3.7 判别分析..... 94              |
| 1.3.3 工作表数据的编辑..... 10          | 习题..... 100                     |
| 1.4 图形的绘制和编辑..... 16            | 参考文献..... 104                   |
| 1.4.1 图形的绘制..... 16             | <b>第 3 章 Gaussian</b> ..... 105 |
| 1.4.2 图形的编辑..... 23             | 3.1 Gaussian 基础..... 105        |
| 1.5 数据拟合..... 30                | 3.1.1 概述..... 105               |
| 1.5.1 线性拟合..... 30              | 3.1.2 主界面..... 106              |
| 1.5.2 多项式拟合..... 31             | 3.1.3 初始化设置..... 107            |
| 1.5.3 S 曲线拟合..... 34            | 3.2 G03 输入文件..... 108           |
| 1.5.4 高斯曲线拟合..... 35            | 3.2.1 输入概述..... 108             |
| 1.5.5 多峰曲线拟合..... 35            | 3.2.2 输入文件的创建方法..... 109        |
| 1.5.6 多条曲线拟合..... 37            | 3.2.3 批处理..... 122              |
| 1.6 其他常用功能..... 38              | 3.3 运行作业和输出结果..... 124          |
| 1.6.1 曲线寻峰..... 38              | 3.3.1 运行作业..... 124             |
| 1.6.2 曲线的平滑..... 39             | 3.3.2 输出结果的解释..... 125          |
| 1.6.3 曲线的移动..... 39             | 3.4 基组..... 129                 |
| 习题..... 41                      | 3.4.1 Pople 型基组..... 130        |
| 参考文献..... 42                    | 3.4.2 其他常用基组..... 131           |
| <b>第 2 章 Statistica</b> .....43 | 3.5 Gaussian 常见计算..... 131      |
| 2.1 Statistica 基础..... 43       | 3.5.1 优化..... 131               |
| 2.1.1 概述..... 43                | 3.5.2 频率计算..... 134             |
| 2.1.2 主界面..... 44               | 3.5.3 单点能计算..... 137            |
| 2.1.3 菜单栏..... 44               | 3.6 Gaussian 使用实例..... 138      |
| 2.1.4 工具栏..... 46               | 3.6.1 前言介绍..... 139             |
| 2.2 数据表..... 46                 | 3.6.2 计算方法..... 139             |
| 2.2.1 数据输入..... 46              | 3.6.3 结果与讨论..... 140            |
| 2.2.2 数据编辑..... 47              | 3.6.4 小结..... 142               |
| 2.2.3 数据输出..... 50              | 习题..... 142                     |

|                               |     |                            |     |
|-------------------------------|-----|----------------------------|-----|
| 参考文献 .....                    | 143 | 5.3.2 主成分分析 .....          | 210 |
| <b>第 4 章 ChemOffice</b> ..... | 144 | 5.3.3 偏最小二乘分析 .....        | 215 |
| 4.1 化学结构绘图软件 ChemDraw .....   | 144 | 习题 .....                   | 223 |
| 4.1.1 软件介绍 .....              | 144 | 参考文献 .....                 | 223 |
| 4.1.2 主界面 .....               | 144 | <b>第 6 章 AutoCAD</b> ..... | 225 |
| 4.1.3 模板 .....                | 146 | 6.1 概述 .....               | 225 |
| 4.1.4 绘制化学结构式 .....           | 147 | 6.2 AutoCAD 的初步认识 .....    | 225 |
| 4.1.5 结构与命名互换 .....           | 150 | 6.2.1 打开程序 .....           | 225 |
| 4.1.6 反应方程式 .....             | 151 | 6.2.2 工作界面 .....           | 226 |
| 4.1.7 实验装置图 .....             | 153 | 6.2.3 控制屏幕的显示 .....        | 227 |
| 4.1.8 预测 NMR 位移 .....         | 153 | 6.2.4 帮助系统 .....           | 227 |
| 4.2 Chem3D .....              | 156 | 6.2.5 保存图形 .....           | 228 |
| 4.2.1 软件介绍 .....              | 156 | 6.2.6 保存图形样板 .....         | 229 |
| 4.2.2 主界面 .....               | 156 | 6.3 创建 AutoCAD 图形对象 .....  | 231 |
| 4.2.3 分子模型的构建 .....           | 160 | 6.3.1 直线的绘制 .....          | 231 |
| 4.2.4 分子模型操作 .....            | 164 | 6.3.2 多段线的绘制 .....         | 234 |
| 4.2.5 分子结构信息 .....            | 166 | 6.3.3 正多边形的绘制 .....        | 237 |
| 4.2.6 分子的计算 .....             | 167 | 6.3.4 矩形的绘制 .....          | 238 |
| 4.2.7 分子表面和分子轨道图形的显示 .....    | 172 | 6.3.5 圆弧的绘制 .....          | 240 |
| 4.2.8 分子谱图的预测 .....           | 174 | 6.3.6 圆的绘制 .....           | 241 |
| 4.3 ChemFinder .....          | 176 | 6.3.7 椭圆的绘制 .....          | 243 |
| 4.3.1 软件介绍 .....              | 176 | 6.3.8 椭圆弧的绘制 .....         | 243 |
| 4.3.2 化学物质检索方法 .....          | 177 | 6.3.9 点的绘制 .....           | 244 |
| 4.3.3 化学反应的检索 .....           | 178 | 6.3.10 图案的填充 .....         | 245 |
| 4.4 ChemOffice 系统使用实例 .....   | 179 | 6.3.11 表格的绘制 .....         | 248 |
| 习题 .....                      | 183 | 6.3.12 文字的绘制 .....         | 250 |
| 参考文献 .....                    | 184 | 6.4 修改 AutoCAD 图形对象 .....  | 252 |
| <b>第 5 章 Tsar</b> .....       | 185 | 6.4.1 图形删除命令 .....         | 253 |
| 5.1 构效关系软件 Tsar .....         | 185 | 6.4.2 图形复制 .....           | 253 |
| 5.1.1 软件介绍 .....              | 185 | 6.4.3 图形镜像 .....           | 255 |
| 5.1.2 主界面 .....               | 185 | 6.4.4 图形偏移 .....           | 256 |
| 5.1.3 菜单栏 .....               | 186 | 6.4.5 图形阵列 .....           | 257 |
| 5.1.4 工具栏 .....               | 187 | 6.4.6 图形移动 .....           | 260 |
| 5.2 Tsar 基本操作 .....           | 188 | 6.4.7 图形旋转 .....           | 261 |
| 5.2.1 数据导入 .....              | 188 | 6.4.8 图形缩放 .....           | 262 |
| 5.2.2 数据显示 .....              | 191 | 6.4.9 图形拉伸 .....           | 262 |
| 5.2.3 数据处理 .....              | 195 | 6.4.10 图形修剪 .....          | 264 |
| 5.2.4 数据计算 .....              | 199 | 6.4.11 图形延伸 .....          | 265 |
| 5.3 数据统计 .....                | 203 | 6.4.12 打断于点 .....          | 267 |
| 5.3.1 多元线性回归 .....            | 203 | 6.4.13 打断 .....            | 268 |

|                        |                      |     |        |                  |     |
|------------------------|----------------------|-----|--------|------------------|-----|
| 6.4.14                 | 合并                   | 268 | 7.2.3  | Insert 菜单        | 304 |
| 6.4.15                 | 倒角                   | 269 | 7.2.4  | Page 菜单          | 305 |
| 6.4.16                 | 圆角                   | 271 | 7.2.5  | Table 菜单         | 305 |
| 6.4.17                 | 分解                   | 271 | 7.2.6  | Chart 菜单         | 307 |
| 6.5                    | 标注图形对象               | 272 | 7.2.7  | Picture 菜单       | 308 |
| 6.5.1                  | 线性标注                 | 272 | 7.2.8  | PowerPoint 菜单    | 309 |
| 6.5.2                  | 对齐标注                 | 272 | 7.2.9  | Review 菜单        | 309 |
| 6.5.3                  | 弧长标注                 | 272 | 7.2.10 | Help 菜单          | 310 |
| 6.5.4                  | 坐标标注                 | 272 | 7.3    | 自动图形连接           | 310 |
| 6.5.5                  | 半径、折弯、直径标注           | 273 | 7.3.1  | 流程图              | 310 |
| 6.5.6                  | 角度标注                 | 273 | 7.3.2  | 示意图              | 313 |
| 6.5.7                  | 基线标注                 | 273 | 7.3.3  | 自动移动连接图          | 314 |
| 6.5.8                  | 连续标注                 | 273 | 7.3.4  | 替换图形             | 314 |
| 6.5.9                  | 标注样式                 | 274 | 7.3.5  | 折叠分支图形           | 315 |
| 6.6                    | 图形对象的布局与打印           | 275 | 7.4    | 工作区操作            | 315 |
| 6.6.1                  | 进行图纸布局               | 276 | 7.4.1  | 图形符号操作           | 315 |
| 6.6.2                  | 制作图框和标题栏并进行粘贴至布局     | 279 | 7.4.2  | 线条操作             | 317 |
| 6.6.3                  | 在“布局”视口调入图形对象并确定输出比例 | 280 | 7.4.3  | 表格操作             | 317 |
| 6.6.4                  | 图纸打印                 | 281 | 7.4.4  | 文本操作             | 317 |
| 6.7                    | 化工 AutoCAD 图形对象的一般规定 | 282 | 7.4.5  | 尺寸改变             | 318 |
| 6.7.1                  | 化工设备图                | 282 | 7.4.6  | 旋转图形             | 319 |
| 6.7.2                  | 化工流程图                | 283 | 7.4.7  | 组合图形             | 319 |
|                        | 习题                   | 290 | 7.4.8  | 绘制图表             | 319 |
|                        | 参考文献                 | 291 | 7.4.9  | 图表尺寸             | 321 |
| <b>第 7 章 SmartDraw</b> |                      | 293 | 7.5    | 图形的输出和打印         | 322 |
| 7.1                    | 建立图表                 | 293 | 7.5.1  | 页面设置             | 322 |
| 7.1.1                  | 打开视图模板               | 293 | 7.5.2  | 输入图形到 PowerPoint | 323 |
| 7.1.2                  | 进入应用视屏               | 295 | 7.5.3  | 输入图形到 Word       | 323 |
| 7.1.3                  | 加入颜色和风格              | 297 | 7.5.4  | 输入图形到 Excel      | 323 |
| 7.2                    | 功能区介绍                | 299 | 7.5.5  | 保存为 PDF 文件       | 324 |
| 7.2.1                  | Home 菜单              | 299 | 7.5.6  | 保存为其他文件          | 324 |
| 7.2.2                  | Design 菜单            | 300 | 7.5.7  | 打印图形             | 324 |
|                        | 习题                   |     |        | 习题               | 324 |
|                        | 参考文献                 |     |        | 参考文献             | 326 |

# 第 1 章 Origin

Origin 是美国 OriginLab 公司（其前身为 Microcal 公司）开发的图形可视化和数据分析软件，是科研人员和工程师常用的高级数据分析和制图工具。Origin 是公认的简单易学、操作灵活、功能强大的软件，既可以满足一般用户的制图需要，也可以满足高级用户数据分析、函数拟合的需要。Origin 自 1991 年问世以来，由于其操作简便、功能开放，很快就成为国际流行的分析软件之一，是公认的快速、灵活、易学的工程制图软件。本章将对 Origin 7.0 版的软件及模块功能进行介绍。

## 1.1 软件功能介绍

使用 Origin 就像使用 Excel 和 Word 那样简单，只需点击鼠标，选择菜单命令就可以完成大部分工作，获得满意的结果。Origin 是个多文档界面应用程序。它将所有工作都保存在 Project(\*.OPJ)文件中，该文件可以包含多个子窗口，如 Worksheet、Graph、Matrix、Excel 等，各子窗口之间是相互关联的，可以实现数据的即时更新。子窗口既可以随 Project 文件一起存盘，也可以单独存盘，以便其他程序调用。

Origin 具有两大主要功能：数据分析和绘图。Origin 的数据分析主要包括统计、信号处理、图像处理、峰值分析和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可以了。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地连接。Origin 可以导入包括 ASCII、Excel、pClamp 在内的多种数据。另外，它可以把 Origin 图形输出为多种格式的图像文件，譬如 JPEG、GIF、EPS、TIFF 等。

## 1.2 主 界 面

Origin 软件的主界面如图 1-1 所示。主界面包含 5 个区，分别为菜单栏、常用工具栏、辅助工具栏、数据统计绘图工具栏及数据分析区。

菜单栏位于主界面的最上边，单击每项菜单均会出现与菜单相关的命令。

常用工具栏位于菜单栏下方，主要提供新建、打开、数据导入、打印、视图放大缩小等功能；辅助工具栏位于最左侧，提供了可供选择的绘图工具，同时还提供了文字编写功能；数据统计绘图工具栏位于数据分析区的左下方，主要提供图形绘制功能。以上工具栏中彩色实标显示表示选择该项工具可执行相关操作，灰色虚标显示表示该工具不可执行，工具栏中的命令在菜单栏下拉菜单中均有对应的操作命令。

数据分析区位于灰色空间，在里面可以出现类似于 Excel 的表格。将数据输入该表格，即可运用相应工具进行数据分析及绘图工作，所绘制的图形也同样可以出现在该灰色区域

中。表格和图形可同时多个进行操作。

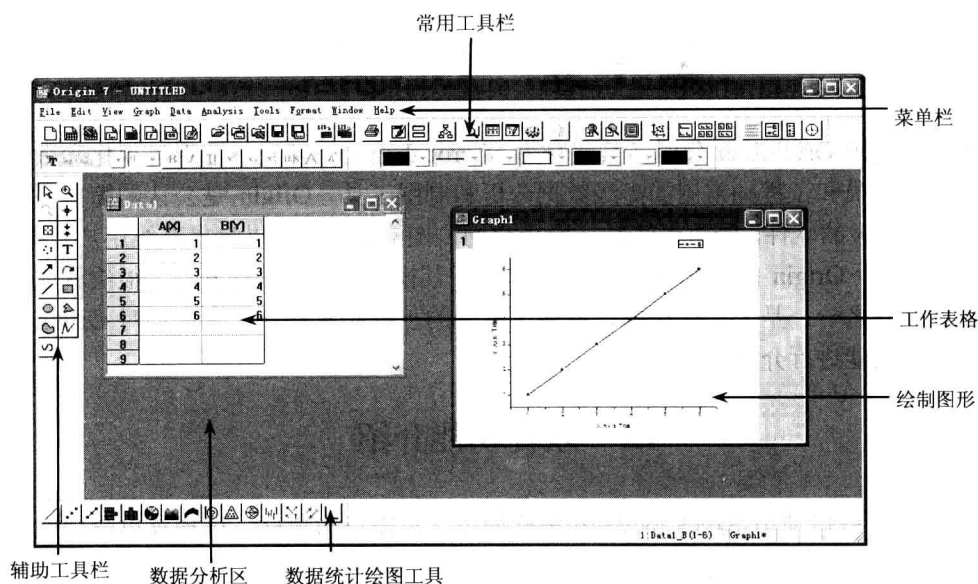


图 1-1 Origin 的主界面（激活图形窗口时）

## 1.2.1 菜单栏

Origin 软件共有两套菜单，当激活“绘制图形”的窗口时，菜单栏显示如图 1-1 所示；而当激活“表格”窗口时，菜单栏显示如图 1-2 所示。

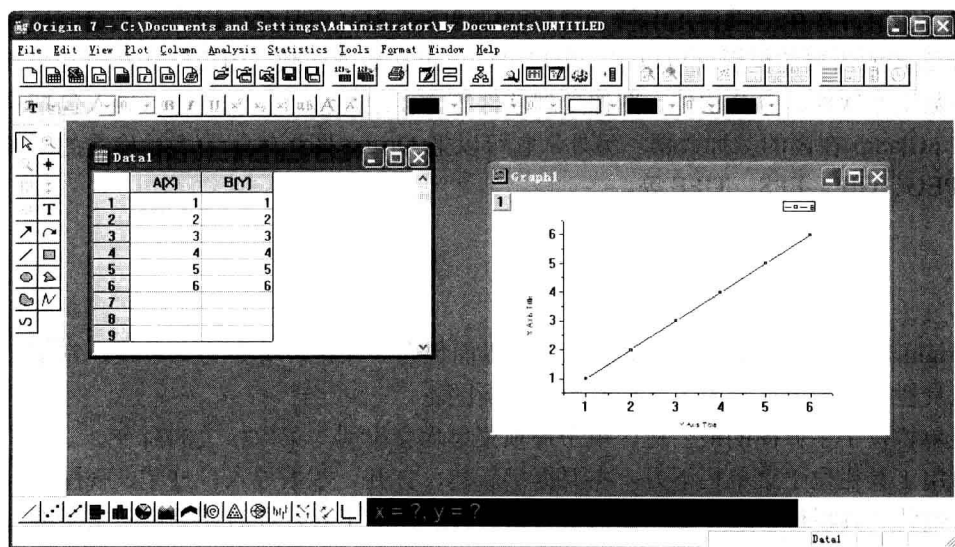


图 1-2 Origin 的主界面（激活表格窗口时）

### 1.2.1.1 图形窗口菜单

图形窗口菜单中共有 10 项，分别为 File, Edit, View, Graph, Data, Analysis, Tools,

Format, Window, Help。每项菜单下又包含与之相关的各项命令。如果命令后有三角符号,则表明该条命令有子菜单;如果命令显示为灰色,表示该条命令暂时尚未激活;如果命令后有“...”,则表明该命令被激活后会出现对话框,进行指令或参数的输入后,才能完成该项命令。在某些命令后面所显示的为快捷键,即按照菜单中所显示的键盘按键操作也可以实现该命令的调用。如在 Copy Page 后面有 Ctrl+J,这表明同时按下 Ctrl 键和 J 键,即可调用 Copy Page 命令,即复制命令。

(1) File 菜单 主要对数据分析文件进行相关操作,如新建(New)、打开(Open)、关闭(Close)、保存(Save Project)、另存为(Save Project As)等。也可以进行数据导入(Import ASCII)和图形导入(Import Image)操作,如图 1-3 所示。

(2) Edit 菜单 主要对绘图进行剪切(Cut)、复制(Copy 和 Copy Page)、粘贴(Paste)、添加坐标轴[New Layer (Axes)]和坐标图旋转(Rotate Page)等操作(见图 1-4)。

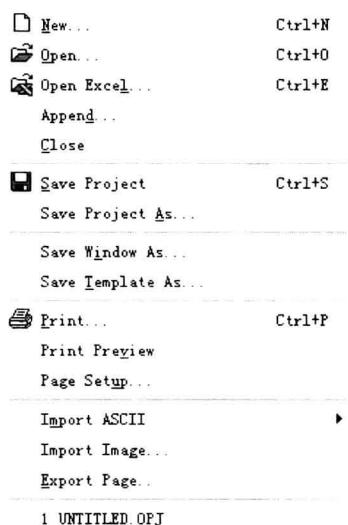


图 1-3 Origin 的 File 菜单(图形窗口)

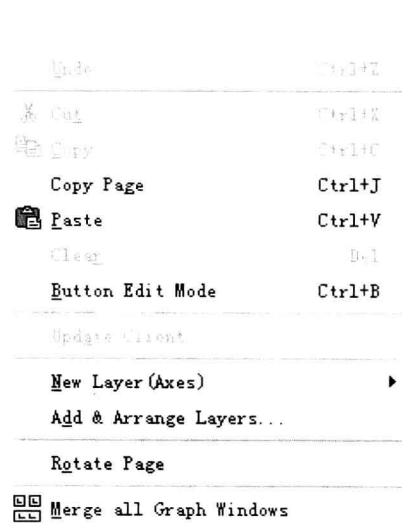


图 1-4 Origin 的 Edit 菜单(图形窗口)

(3) View 菜单 主要进行工具栏的设定(Toolbars)、视图模式(View Mode)、视图的放大(Zoom In)或缩小(Zoom Out),甚至可以全屏显示视图窗口(Full Screen)等操作(见图 1-5)。其中,当激活 Toolbars 后,会出现如图 1-6 所示的对话框。在对话框中的 Toolbars 一栏中显示的是 Origin 软件中的各种工具名称,勾选其前面的复选框,即可在工具栏中显示相应的工具命令;也可单击 Button Groups 标签,根据相应图标选择工具种类。

(4) Graph 菜单 主要对数据进行分析后进行坐标图的绘制,包括直线图(Line)、散点图(Scatter)、直线符号图(Line+Symbol)、柱状图(Column)或面积图(Area)等。另外,对某些数据的输入作图时,该命



图 1-5 Origin 的 View 菜单(图形窗口)

令可将该数值的相对误差 (Add Error Bars) 也在图形上标出。Graph 菜单还可实现增加图标 (New Legend)、改变 X-Y 坐标轴的位置 (Exchange X-Y Axis) 等功能 (见图 1-7)。

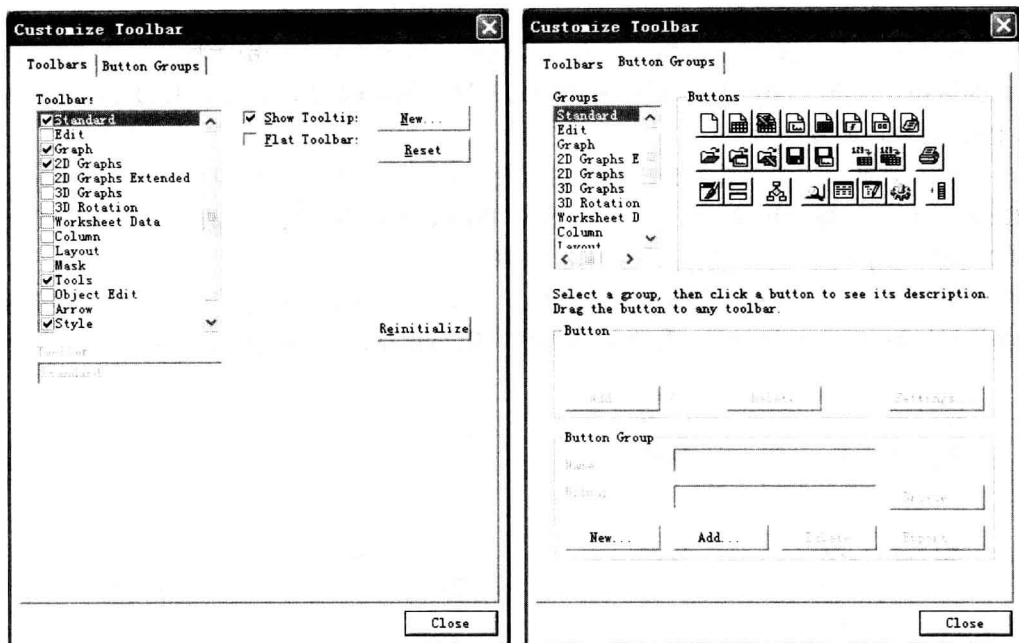


图 1-6 Toolbar 工具对话框 (图形窗口)

(5) Data 菜单 主要对图形中的数据点进行移动 (Move Data Points)、删除 (Remove Bad Data Points) 或设置显示范围 (Set Display Range) 等操作 (见图 1-8)。

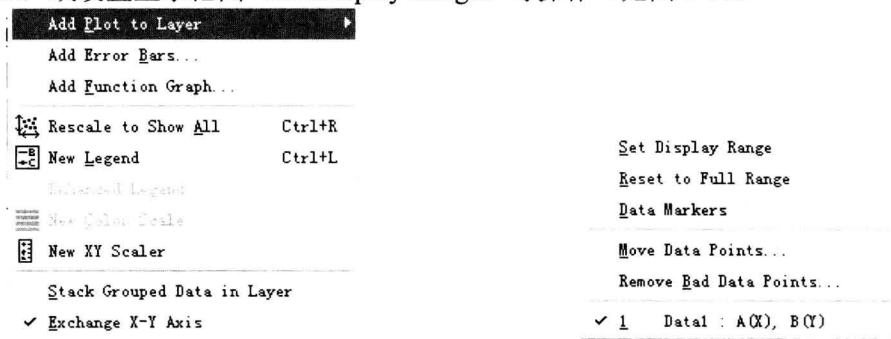


图 1-7 Origin 的 Graph 菜单 (图形窗口)

图 1-8 Origin 的 Data 菜单 (图形窗口)

(6) Analysis 菜单 主要对数据点进行平滑 (Smoothing)、上下移动 (Translate)、微分 (Differentiate)、积分 (Integrate) 以及拟合 (线性 Fit Linear、多项式 Fit Polynomial、指数衰减拟合 Fit Exponential Decay、指数增长拟合 Fit Exponential Growth、S 曲线 Fit Sigmoidal、高斯 Fit Gaussian、多峰 Fit Multi-peaks) 等操作 (见图 1-9)。其中, 指数衰减拟合和指数增长拟合可以按照不同阶数进行拟合。

(7) Tools 菜单 可以对绘图窗口进行选项 (Options) 和层 (Layer) 控制; 提取峰值 (Pick Peaks); 绘制基线 (Baseline) 和平滑 (Smooth); 也可以进行线性 (Linear Fit)、多项式 (Polynomial Fit) 和 S 曲线 (Sigmoidal Fit) 拟合, 见图 1-10。

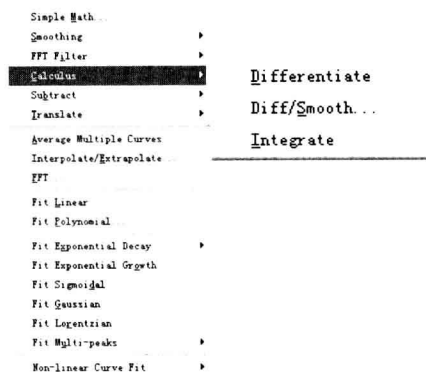


图 1-9 Origin 的 Analysis 菜单（图形窗口）

(8) Format 菜单 可以进行控制菜单格式 (Menu); 改善图形页面 (Page)、图层 (Layer) 和线条样式 (Plot) 控制; 栅格捕捉 (Snap Axes to Grid 和 Snap Objects to Grid); 坐标轴样式控制 (Axes) 和调色板 (Color Palette) 等操作, 如图 1-11 所示。

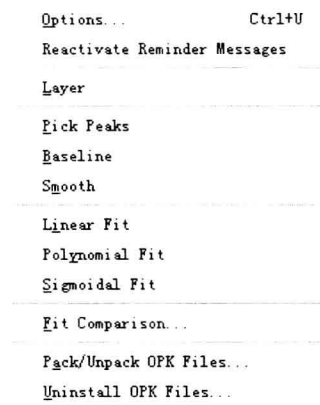


图 1-10 Origin 的 Tools 菜单（图形窗口）

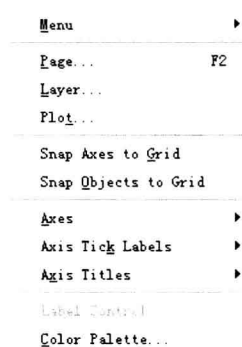


图 1-11 Origin 的 Format 菜单（图形窗口）

(9) Window 菜单 包括对主界面窗口的调整命令。

(10) Help 菜单 帮助命令。

### 1.2.1.2 表格窗口菜单

表格窗口菜单中共有 11 项, 分别为 File, Edit, View, Plot, Column, Analysis, Statistics, Tools, Format, Window, Help。每项菜单下又包含与之相关的各项命令, 如图 1-12 所示。虽然从菜单上看, 表格窗口菜单与图形窗口菜单有某些重复的菜单名称, 但在子命令上却有不同的功能。



图 1-12 Origin 的菜单（表格窗口）

File、Edit、View、Window、Help 的命令功能与图形窗口的命令相似, 这里不再赘述。

(1) Plot 菜单 主要对表格数据进行统计分析后进行绘图的命令工具, 主要提供二维绘图 (直线 Line、散点 Scatter、直线加符号 Line+Symbol、特殊线加符号 Special Line/Symbol、条状图 Bar、柱状图 Column、特殊条/状图 Special Bar/Column 和饼图 Pie)、三维绘图 (3D)、气泡/彩色映射图 (Bubble/Color Mapped)、统计图 (Statistical Graphs)、图形版面布局 (Panel)、特种绘图 (面积图 Area、极坐标图 Polar、向量 Vector 等) 和模板 (Template Library), 见图 1-13。

(2) Column 菜单 主要对数列进行功能操作, 比如设置列的属性 (将选中的某列数据作为 X 轴/Y 轴/Z 轴 Set as X/Y/Z, 将选中的某列数据设置为 X/Y 轴的误差列 Set as X/Y Error), 增加列 (Add New Columns) 等, 见图 1-14。



图 1-13 Origin 的 Plot 菜单 (表格窗口)

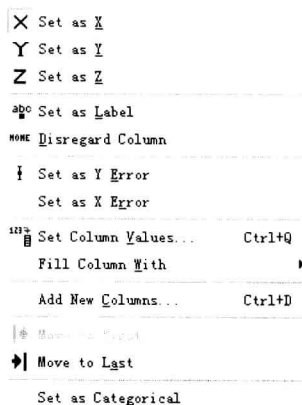


图 1-14 Origin 的 Column 菜单 (表格窗口)

(3) Analysis 菜单 进行工作表数据的提取 (Extract Worksheet Data); 排序 (Sort Columns, 升序 Ascending, 降序 Descending); 数字信号处理 (快速傅里叶变换 FFT、相关 Correlate、卷积 Convolute、解卷 Deconvolute); 非线性曲线拟合 (Non-linear Curve Fit) 等, 见图 1-15。

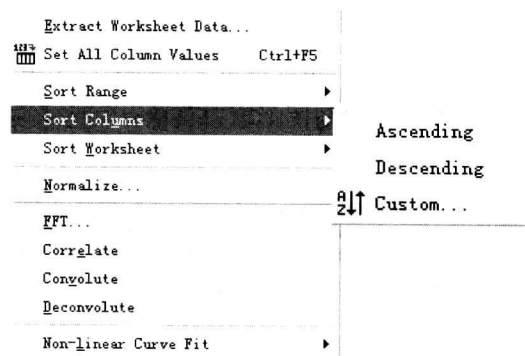


图 1-15 Origin 的 Analysis 菜单 (表格窗口)

(4) Statistics 菜单 对工作表数据进行描述统计 (Descriptive Statistics)、假设统计 (Hypothesis Testing)、方差分析 (ANOVA)、生存分析 (Survival Analysis) 等, 见图 1-16。

(5) Tools 菜单 与图形窗口中的 Tools 命令稍有不同, 该命令除了可以进行选项控制 (Options), 线性 (Linear Fit)、多项式 (Polynomial Fit) 和 S 曲线 (Sigmoidal Fit) 拟合以外, 还增加了对工作表脚本设置的操作命令 (Worksheet Script), 见图 1-17。



图 1-16 Origin 的 Statistics 菜单 (表格窗口)

图 1-17 Origin 的 Tools 菜单 (表格窗口)

(6) Format 菜单 与图形窗口中 Format 命令的不同之处为, 该命令除了可以进行菜单设置 (Menu)、栅格捕捉 (Snap to Grid) 和调色板 (Color Palette) 以外, 还可以对工作表 (Worksheet) 以及数列 (Column) 的显示进行控制, 见图 1-18。

## 1.2.2 工具栏

工具栏由常用工具栏、辅助工具栏、数据统计绘图工具栏三部分组成, 其功能的调用可以通过直接单击相应图标获得, 也可以通过单击菜单中的相应命令获得。

### 1.2.2.1 常用工具栏

对于表格窗口主要提供新建、打开文件、保存、打印、数据增列等一般功能; 对图形窗口, 除前述功能外, 还提供图形放大或缩小、图标/图层的设置、数轴的增加等功能。当鼠标放置在相应图标上时, 系统会自动弹出该图标的功能注释, 初学者可以予以利用。

    : 该组图标主要为新建, 比如新建 Origin 新工作对象 (New Project)、新建工作表 (New Worksheet)、新建 Excel 工作表 (New Excel)、新建矩阵 (New Matrix)、新建函数 (New Function) 等。也可以通过 File 菜单中的相应子命令进行调用。

    : 该组图标主要为打开和保存, 比如打开文件 (Open)、打开模板 (Open Template)、打开 Excel 表格 (Open Excel)、保存 (Save)、保存模板 (Save Template)。

 : 该组图标主要为数据导入。为一个数据文件的导入; 为多个文件可以同时导入。

: 打印 (Print)。

   : 该组图标主要为刷新 (Refresh)、复制 (Duplicate)、查找 (Project Explore) 以及结果栏设置 (Results Log) 等。

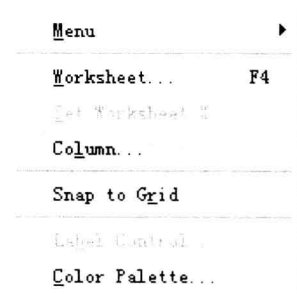


图 1-18 Origin 的 Format 菜单 (表格窗口)

➡: 数据列表中列的增加 (Add New Columns)。

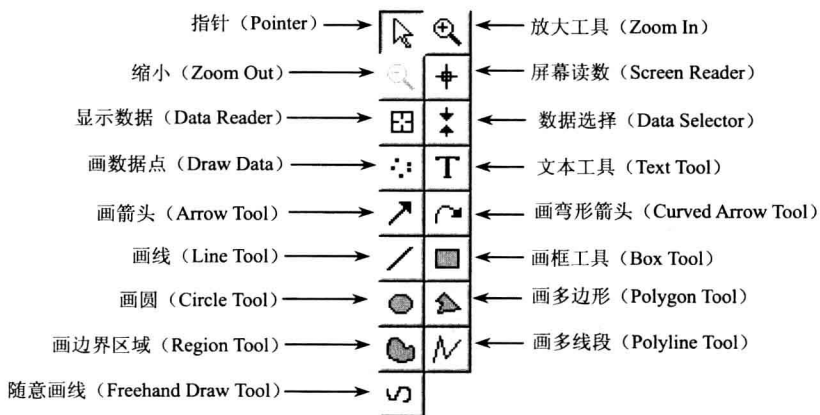
🔍🔍🔍🔍: 该组图标主要为图形的放大或缩小, 比如图形的放大 (Zoom in)、图形缩小 (Zoom Out)、整页显示 (Whole Page) 等。

🖼️🖼️🖼️: 主要为图层 (Layer) 的管理。

📌📌📌: 该组图标主要为图标 (New Legend)、数轴 (Add XY Scale) 及时间 (Date & Time) 的设置。

### 1.2.2.2 辅助工具栏

主要对图形进行一些辅助性的操作, 比如绘制箭头、画圆、数据的捕捉与选择等。



数据统计绘图工具栏: 与辅助绘图工具栏不同, 此工具栏是根据工作表中的数据, 在确定好 X、Y 轴后, 对数据进行分析后绘图的工具, 比如绘制点、线、柱状图等。Plot 菜单中有相应的子命令可以调用相同的操作程序。图形标志的解释可参照 1.2.1 节中对 Plot 菜单的介绍。

## 1.3 工作表格与数据处理

Origin 的工作表格与 Excel 相似, 由列和行组成, 行列交叉之处所形成的格子被称为单元格。单元格内可以填充数字、文本、日期以及时间等。

### 1.3.1 工作表的增加与删除

工作表格可以同时展开多个, 选择 File→New...命令, 会弹出如图 1-19 所示的对话框,

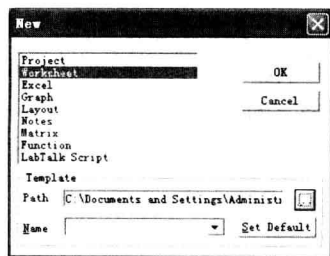


图 1-19 New 对话框

选择 Worksheet 后单击 OK 即可添加新工作表, 该表的模板 (Template) 可以通过选择 Path 中的路径来进行调用; 或者也可以单击常用工具栏中的 [Icon] 按钮来实现。

当删除工作表时, 单击所要删除的工具表右上角的 [Icon] 按钮, 即可删除。

### 1.3.2 工作表数据的导入

Origin 工作表中的数据导入可以有多种方式。

✧ 可选择单元格后, 通过键盘直接输入数据。

- ◇ 当数据较多时，可以将整个数据文件导入工作表格。
- ◇ 可以通过将剪贴板上或其他工作表中的数据粘贴到目标工作表格中。
- ◇ Origin 软件中也提供了与 Excel 兼容的功能，可直接利用 Excel 表格中的数据进行绘图操作。

导入整个数据文件时，选择 File→Import 命令，在出现的子菜单（图 1-20）中即为可以导入的文件类别。较为常用的是 ASCII 文件。导入 ASCII 的命令可以通过上述菜单命令激活，也可以在工具栏中找到  按钮，单击该按钮来激活导入 ASCII 的命令。

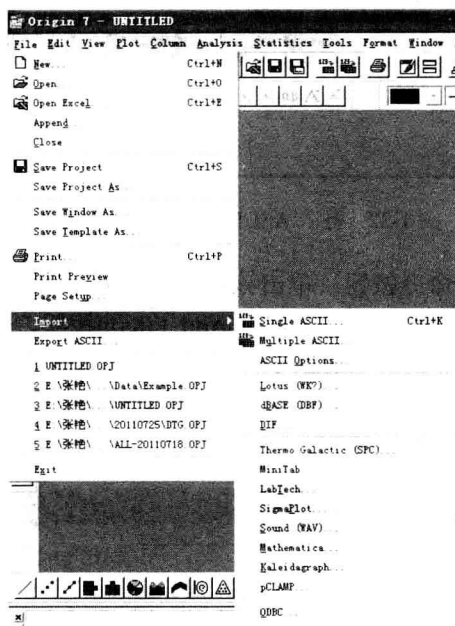


图 1-20 导入文件类别

单击  按钮后，出现如图 1-21 所示的对话框。在“查找范围”下拉列表框中选择目标文件夹，在“文件类型”下拉列表框选择所要的文件类型，单击“打开”，在工作表格中即可导入相应数据，如图 1-22 所示。

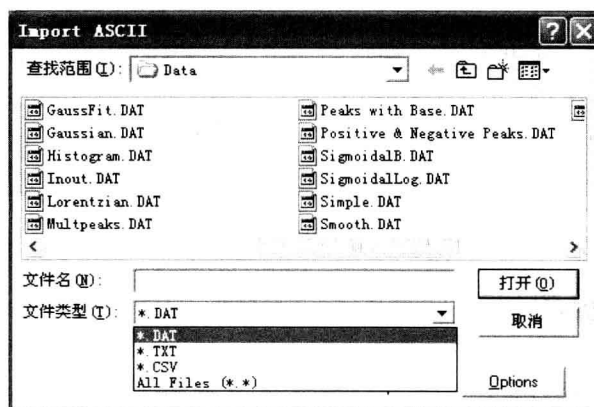


图 1-21 导入单个 ASCII 文件