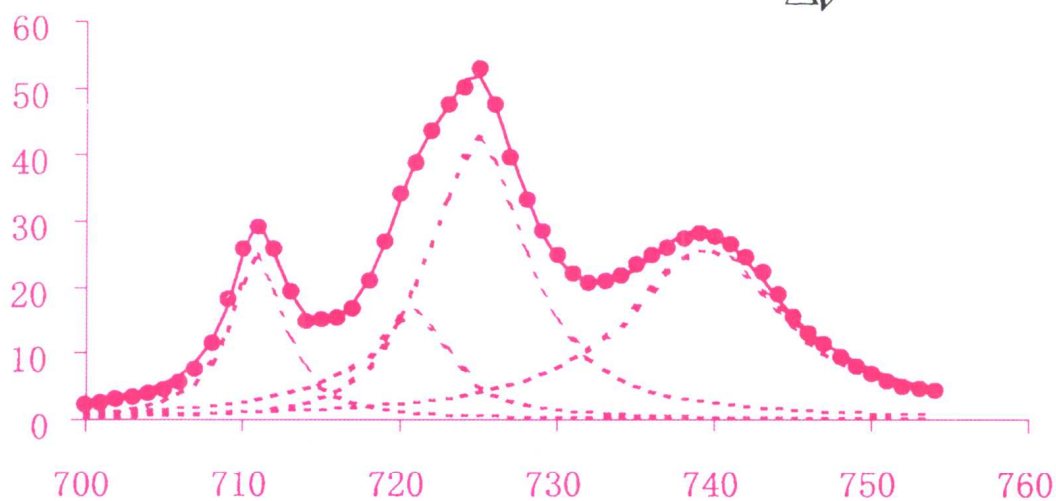


Excel 数值方法

及其在化学中的应用

徐抗成 编著

$$A = \frac{A_{\max}}{1 + 4 \frac{(v - v_{\max})^2}{\Delta v^2}}$$



兰州大学出版社

Excel 数值方法

及其在化学中的应用

徐抗成 编著

兰州大学出版社

内容提要

Excel 数值方法完全能满足化学教学和科研在数据处理方面的需要。

本书从化学应用角度介绍 Excel 的数值计算、图表制作、解方程、线性回归和非线性回归等功能。全书可分两部分。前六章为第一部分,详细介绍 Excel 基本数值方法,内容浅显易懂、循序渐进,并且用实例和图形说明操作步骤。后四章为第二部分,以光谱分析、溶液平衡、稳定常数测定及动力学数据处理为例,介绍用 Excel 解决具体问题的方法和技巧。

本书适用于化学化工专业的学生、研究生、教师和研究人員。对于物理、生物、工程技术等方面的科学工作者及使用 Excel 的其他人員也有一定的参考价值。

Excel 数值方法及其在化学中的应用

徐抗成编著

兰州大学出版社出版发行

兰州市天水路 308 号 电话:8617156 邮编:730000

E-mail:press@lzu.edu.cn

<http://www.lzu.edu.cn/press/index.htm>

兰州大学出版社激光照排中心排版

兰州人民印刷厂印刷

开本:787×1092 1/16 印张:11.875

2000 年 5 月第 1 版 2000 年 5 月第 1 次印刷

字数:298 千字 印数:1~5000 册

ISBN7-311-01659-2/O·147 定价:20.00 元

前言

每一科学工作者都要收集记录数据、编辑加工数据、分析统计数据、以适当的形式表达数据,从而解释某个现象或论证某一理论。所有这些数据处理过程均可在电子表格上进行。微软公司的 Microsoft Excel 是当今世上最普及的电子表格软件。

Excel 集文字、数据、图表和图形为一体,对数据作计算、分析和统计。其特点是:操作简便易行、模型简明直观、函数种类繁多、易生成图表,并且备有一系列数据分析工具,故智能程度高、数据处理能力强。Excel 另一特点是通用性强,能与其它数学分析软件相互传递以及能直接输入现代仪器以 ASCII 语言(文本文件)记录的实验数据。

本书以化学教学和科研中遇到的问题为例,着重介绍 Excel 的数值计算、图表制作、解方程、线性回归和非线性回归等功能。全书可分为两部分。前六章为第一部分,详细介绍 Excel 基本数值方法。内容上力求浅显易懂、循序渐进,尽量用实例和图形说明操作步骤。后四章为第二部分,以光谱分析、溶液平衡、稳定常数计算及动力学数据处理为例,介绍 Excel 解决具体问题的方法和技巧。

本书重点是 Excel 在数值分析上的应用,故未逐个介绍 Excel 的菜单和指令。然而对用到的 Excel 指令做了详尽的介绍,其中一些为笔者心得,在其它书上是找不到的。未接触过 Excel 的读者可先按书中示例一步一步的做,经过几次实际操作后,即可入门。一经入门,再要精通就不难了。读者可用尝试的方法使用书中未介绍的指令(如打印、页面设置等),遇到困难可利用 Excel 的“帮助”菜单。本书第三章较为详细的介绍了“帮助”菜单的使用。

本书使用中文 Office 97 的 Excel 版本,它与早期版本 Excel 4.0、5.0 和 7.0 在个别指令和对话框的结构上略有差异,与最近出现的 Excel 2000 基本相同。

本书仅介绍 Excel 最基本的操作。许多高级功能,例如为经常性的数值处理过程编制宏、自定义工作界面等均未涉及。本书也未介绍如何应用 Excel 强大的数据库管理功能分析、归纳、总结和存放浩瀚的文献资料和数据信息。

现行介绍计算机在化学中的应用的书籍和有关课程多以程序语言为主,这些内容完全能用 Excel 替代。而且 Excel 易于掌握,在某些方面做得更好。在计算机飞速发展、软件日新月异的今天,不妨试一下以软件为主的方法,必将事半功倍。愿本书能抛砖引玉。

本书虽从化学角度介绍 Excel 的应用,其原理完全适合于其它学科,如物理、生物、工程技术等。对于使用 Excel 的其它人员也有参考价值。

致谢:本书得到甘肃省自然科学基金资助(编号:041209)。

徐抗成
2000 年 3 月

目 录

前言

第一章 数据输入	1
1.1 Excel 环境	1
1.2 单元格数据输入	4
1.2.1 选定单元格	4
1.2.2 输入常量	5
1.2.3 输入公式	8
1.2.4 数据编辑简介	11
1.3 文件数据的输入	14
1.3.1 打开文件	14
1.3.2 实例	16
1.4 保存和关闭工作簿	18
第二章 图表绘制	21
2.1 绘制 XY 散点图基本步骤	21
2.2 编辑 XY 散点图	28
2.2.1 实验数据点与理论曲线	28
2.2.2 组合图表	33
2.2.3 添加误差线	38
2.3 高级绘图技术	39
2.3.1 比较光谱	39
2.3.2 内嵌小插图	41
2.3.3 图表中加图形和文字	43
2.3.4 化极坐标为直角坐标	45
第三章 数值计算	48
3.1 Excel 函数的使用	48
3.1.1 函数使用方法	48
3.1.2 矩阵运算	51
3.2 数值求导	58
3.3 数值积分	61
3.4 微分方程数值解	65
3.4.1 Euler 法	66
3.4.2 Runge-Kutta 法	68
3.4.3 RK 法解微分方程组	69

第四章 方程求根	73
4.1 一元方程求解	73
4.1.1 图形法求解	73
4.1.2 逐步逼近法	75
4.1.3 Newton-Raphson 法	77
4.2 用“单变量求解”解方程	79
4.2.1 Excel 迭代过程	79
4.2.2 单变量求解	83
4.3 解线性联立方程	84
4.3.1 行列式法	85
4.3.2 矩阵解法	87
4.3.3 Newton-Raphson 迭代法	87
第五章 线性回归	91
5.1 一元线性回归	91
5.1.1 用函数 SLOPE()和 INTERCEPT()	92
5.1.2 用 LINEST 函数	94
5.1.3 LINEST 中的线性回归分析	95
5.2 使用“数据分析”线性拟合	98
5.2.1 “数据分析”中的“回归”程序使用方法	98
5.2.2 线性回归统计	101
5.3 多元线性回归	105
5.3.1 多元一次方程	105
5.3.2 多项式拟合	108
5.3.3 多元线性回归系数的相关性	110
第六章 规划求解	112
6.1 非线性回归	112
6.1.1 用“规划求解”做最小二乘法非线性曲线拟合	113
6.1.2 应用实例	114
6.2 用“规划求解”解方程组	118
6.2.1 解线性方程组	118
6.2.2 解非线性方程组	119
6.3 “规划求解”选项	121
第七章 光谱分析	124
7.1 谱线的解析拟合	124
7.1.1 峰形分析	124

7.1.2 基线扣除·····	129
7.2 组成分析·····	131
7.2.1 含量分析·····	131
7.2.2 混合物组成分析·····	133
第八章 溶液平衡·····	137
8.1 溶液中各物种浓度计算·····	137
8.1.1 多元弱酸的各种存在形式及其分配比·····	137
8.1.2 平衡浓度计算·····	141
8.2 滴定分析·····	147
8.2.1 滴定曲线·····	147
8.2.2 用 Gran 法确定滴定终点·····	151
第九章 稳定常数测定·····	156
9.1 生成函数·····	156
9.1.1 计算公式·····	156
9.1.2 图解法·····	158
9.2 pH 法测量稳定常数·····	160
9.2.1 实验方法·····	160
9.2.2 pH 法测定乙二胺的逐级质子加合稳定常数·····	162
9.2.3 pH 法测定乙二胺合铜的逐级稳定常数·····	164
9.3 分光光度法测定稳定常数·····	166
9.3.1 简单体系配合物的组成和稳定常数·····	166
9.3.2 对应溶液法测定硫酸铈酰配合物的逐级稳定常数·····	168
第十章 动力学数据分析·····	171
10.1 简单体系动力学数据分析·····	171
10.1.1 反应级数·····	171
10.1.2 一级反应动力学·····	172
10.2 较复杂体系的动力学·····	174
10.3 生物化学反应动力学·····	178

第一章 数据输入

若要分析和处理化学问题，首先得罗列有关的资料、信息或数据，然后根据一定法则加工。Excel 存放和处理数据的工作区间称为工作表。将数据输入工作表的方法通常有二种：一是手动操作，将数据输入到工作表内的单元格或某一区域；二是将实验数据文件或其他数学分析软件的文件转变为 Excel 工作表。

1.1 Excel 环境

启动 Microsoft Excel 后，出现 Excel 操作窗口（图 1.1.1）。电子报表处理在此进行，故称为工作簿，顶端为缺省文件名 Book1，底部指明工作簿的第一张工作表 Sheet1。工作簿从上到下分五部分：菜单栏、工具栏、编辑栏、工作簿窗口以及状态栏。屏幕大部分空间为工作簿窗口，数据等编辑在此操作，而这些操作靠选择菜单中的指令和工具栏按钮来完成。

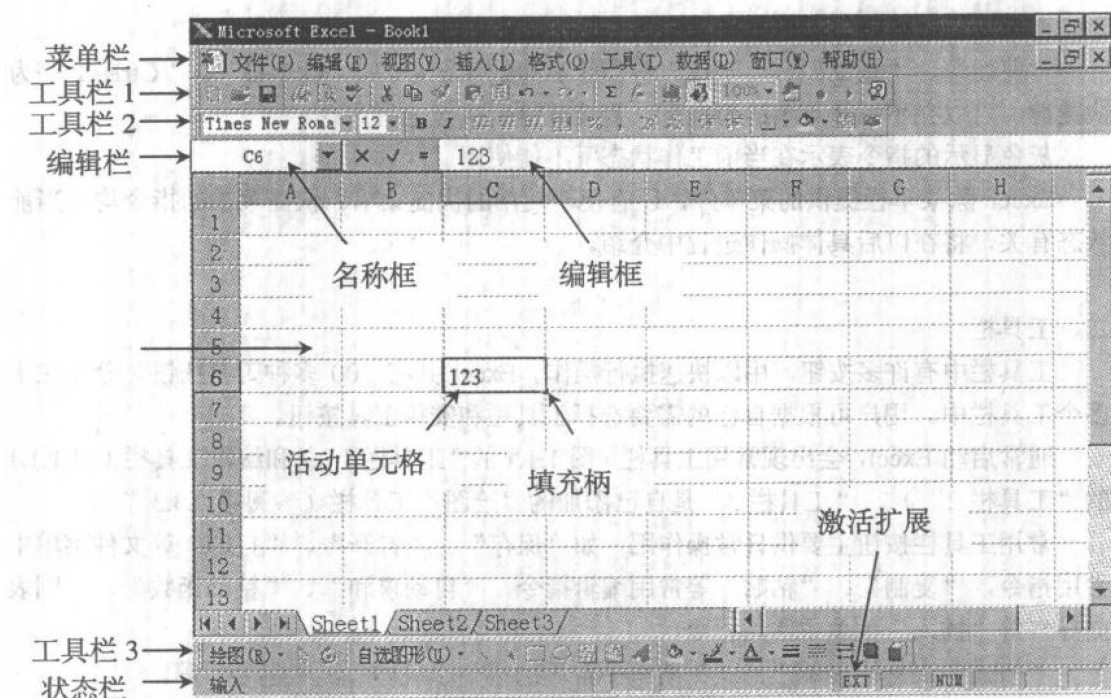


图 1.1.1 Excel 工作界面

一、菜单栏

菜单栏列出几个菜单。用鼠标单击菜单按钮可打开该菜单。也可用键盘，同时按 Alt 和菜单名后括号中的字母打开。例如打开“编辑”菜单可按 Alt+E。图 1.1.2 为打开了的“编辑”菜单，它含有编辑用的各项指令。“编辑”按指令的功能分区，用横线隔开。鼠标指针指向的命令（如图中的“选择性粘贴”）为光亮区。

选取菜单指令也有两种方法：用鼠标和用键盘。将鼠标指向要选取的命令，单击左键即可。每一命令名后圆括号内有一下画线字母，打开菜单后，在键盘上单击该字母即可选取相应的命令。例如打开“编辑”菜单，单击键盘上的字母 S 即可选取“选择性粘贴”指令。指令一经选取，就会出现如何执行命令的对话框。

“填充”和“清除”右边有“▶”符号，它们不是指令，而是子菜单。若光标指向“填充”，则将打开该子菜单。

“剪切”、“复制”、“定位”等指令右边的“Ctrl+X”、“Ctrl+C”、“Ctrl+G”等为快捷键。可以在不打开菜单的情况下，直接从键盘执行这些命令。

灰色显示的指令表示在当前工作状态下不能使用。

Excel 除菜单栏提供的菜单外，还有便于使用的快捷菜单。快捷菜单的指令均与当前状态有关，将在以后具体操作过程中介绍。

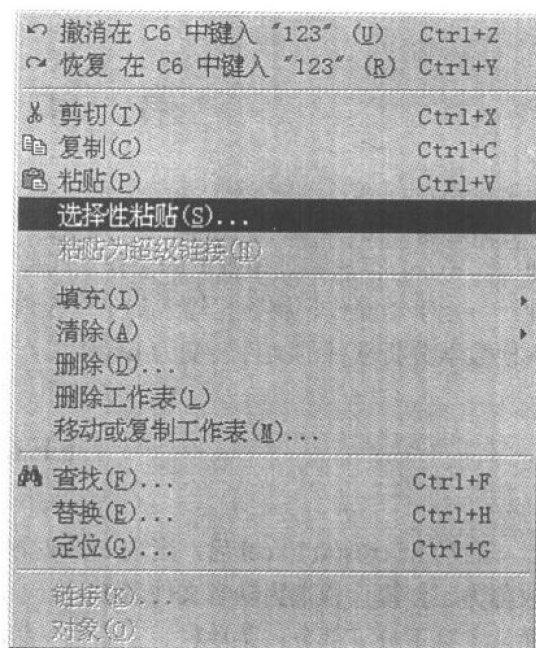


图 1.1.2 “编辑”菜单

二、工具栏

工具栏中有许多按钮，用以快速执行操作。Excel 共有 200 多种工具按钮，分布在十多个工具栏中。用户可根据自己的需要选择工具栏和安排工具按钮。

通常启动 Excel，会出现常用工具栏（图 1.1.1 的“工具栏 1”）和编辑工具栏（图 1.1.1 的“工具栏 2”）。“工具栏 3”是自己添加的“绘图”工具栏（参阅第 2.3.3 节）。

常用工具栏按钮主要供日常操作用，如“保存”、“打开”、“打印”等文件菜单中常用指令，“复制”、“粘贴”等常用编辑指令，“自动求和”、“粘贴函数”、“图表向导”等“插入”菜单中常用指令。

“格式”工具栏显示“格式”菜单中常用的指令“字体”、“字号”等。

三、编辑栏

编辑栏用于编辑电子表格内容，共有三部分（图 1.1.1）。左边是名称框，显示当前编辑的工作区地址，图中为 C6。

右边是编辑框，在框内可对选定的工作区输入和修改数据、公式或函数。将鼠表指向

编辑框，指针变为“I”形，单击左键，光标变为竖杠“|”即可进行编辑。

激活编辑框后在编辑框和名称框之间出现两个按钮。叉号“×”表示“取消”，单击此按钮将取消编辑框内键入的内容。对号“√”表示“输入”，单击此按钮将输入编辑框的内容。

四、工作簿窗口

中间大部区域为工作簿，是数据处理操作界面。工作簿由多个工作表组成。区域底端显示工作表标签按钮“Sheet1”，“Sheet2”等等，用以选择工作簿中不同的工作表。当前工作表为白色，未选取的工作表有阴影。

工作表标签左面有四个箭头按钮，用于移动显现出来的工作表标签。

工作表有 256 列和 65 536 行。每列上端为大写字母的列标，每行左端为阿拉伯数字的行号。行和列将工作表分为单元格。每一单元格的地址由它所在列的列标和行的行号决定，例如 C6 在 C 列第 6 行。用列标和行号标识单元格称为单元格引用。多个单元格组成单元格区域，例如 B2:D4 表示由 B2 和 D4 单元格为对顶角的矩形区，它们是 B2、B3、B4、C2、C3、C4、D2、D3、D4 共 9 个单元格。

单元格或单元格区域一经选定，其周边由粗线围住，成为工作区。工作区方框右下角小黑点称为“填充柄”（图 1.1.1），用以自动填充。当前选定的单元格称为活动单元格，它的引用出现在编辑栏的名称框里。

五、状态栏

状态栏为当前工作区状态提供简短说明。状态栏左端显示选取的菜单、命令等相关的功能说明，如图 1.1.1 的“输入”。一般情况下在此位置出现“就绪”，表明工作表准备接受输入。

状态栏右部为键盘模式指示框，共有八个。图中显示的“EXT”表示按了 F8 键，激活扩展模式（参阅下节）。

六、指针

鼠标指针在 Excel 工作界面的不同区域有不同形状，表示不同的功能：

- | | |
|-------|---|
| 空心箭头↗ | 鼠标指针位于菜单栏、工具栏、状态栏等处，或指向选定的单元格区域时出现空心箭头，表示准备选择指定目标。 |
| 竖直光标 | 鼠标在编辑框或名称框内时为 I 形闪烁指针，单击左键变为竖直光标 ，表明在此可进行输入、删除等编辑操作。 |
| 空心十字+ | 鼠标指针在工作表单元格中时为空心十字，用以选定单元格，或单元格区域。 |
| 黑十字+ | 鼠标指针指向填充柄时变为黑十字，按下左键拖曳，可以自动填充。 |

还有其他形状，后面章节中遇到时再作介绍。熟悉鼠标指针变化是灵活快速地在 Excel 界面上工作的关键之一。

1.2 单元格数据输入

1.2.1 选定单元格

输入数据前必须选定单元格或单元格区域。若只对一个单元格操作，则只需用鼠标空心十字指针(☿)指向要操作的单元格，单击左键即可，或用方向键(←、↑、→或↓)将工作区移到要选定的单元格。选定相邻单元格区域的作法是：移动鼠标空心十字指针☿，使其指向区域中第一个单元格，按下鼠标左键，拖曳到最后一个单元格才放开。选中区域为粗线框住，除区域中的第一个单元格外，区域中其余单元格均填充黑色。

选定相邻区域另一种方法是：

1. 选定区域的第一个单元格。
2. 按下 Shift 键。
3. 用方向键将区域扩展到需要的位置，此时可看到扫过的区域均填充黑色。

选定相邻区域的第三种方法是：

1. 选定区域的第一个单元格。
2. 单击键盘上的 F8 键，此时工作簿最下端状态栏一小框内出现“EXT”（图 1.1.1），表明已激活扩充功能。
3. 用方向键扩展区域至指定位置，或将鼠标指向区域的最后一单元格单击左键。此时选定区域由黑框框住。
4. 单击键盘的 F8 键，退出扩展状态，“EXT”从工作簿下的状态栏小框中消失。

上述三种方法结果相同：除区域中的第一个单元格外，区域中其余单元格均填充黑色，所选区域的右下角有填充柄。

若要选择不相邻区域，则可用“Ctrl”键，作法是：

1. 选定一个单元格或区域。
2. 按下 Ctrl 键，用单击鼠标或拖曳鼠标的方法，扩展选定区域。

选定的不相邻区域四周无粗线框，右下角也无填充柄。选中的各个区域，除最后选定的区域的第一个单元格外，均填以黑色。

光谱测量可能获得大量数据，若要快速选取单元格或区域，应使用“编辑”菜单的“定位”指令。步骤如下：

1. 单击菜单栏的“编辑”，出现“编辑”菜单各项指令（图 1.1.2）。选其中的“定位”。显现“定位”对话框（图 1.2.1.1）
2. 对话框有一个“定位”列表框和“引用”编辑框。“定位”列表框列出最近使用过的四个定位位置。图 1.2.1.1 中显示使用过的定位位置是：Excel 文件 e2(工作簿)的 Sheet8 工作表上的 A1 单元格。注意：文件名用方括号“[]”括住，工作表名后有一个惊叹号“！”，美元符号“\$”表示绝对引用（下面将介绍）。
3. “引用”编辑框用于指定定位位置，它可以是一个单元格，如 C300。也可以是单元格区域。图中给出区域 A1:D300。还可以是不相邻的若干区域，输入区域要用逗号分隔

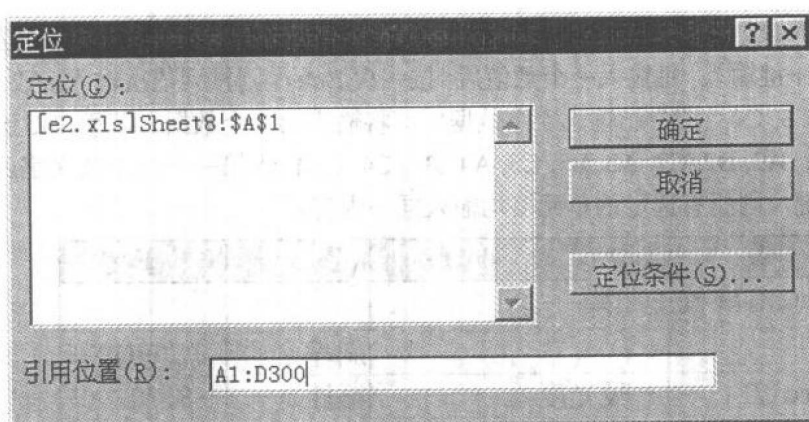


图 1.2.1.1 “定位”对话框

开，如 A1:C3,B5:D6 表示引用两个区域：A1:C3 和 B5:D6。

4. 填好“引用位置”后，按 Enter 键，屏幕显示工作表被选定的区域。选定区域同样是被粗黑线框住，若是单一区域，则右下角有填充柄，若是几个区域，则无填充柄。
5. 显现“定位”对话框的快捷键是“Ctrl+G”。

1.2.2 输入常量

选定单元格或区域后即可在所选工作区输入常量和公式。常量是直接键入到单元格的数据，这些数据可以是文字和数值。常量的值不能改变，除非选定常量所在单元格，在编辑框中进行修改。通常输入的文字在单元格靠左对齐，输入的数值在单元格靠右对齐。但可以利用工具栏的“居中”、“左对齐”或“右对齐”按钮改变对齐方式。

往活动单元格键入时，数字将同时出现在编辑框和单元格中。编辑结束后，有几种方式让 Excel 接受输入：

1. 单击 Enter，原活动单元格填入数据，工作区移至下一个单元格。
2. 单击编辑栏的“输入”按钮“√”，单元格接受输入结果，编辑框显示输入数据，工作区维持不动。若输入公式（参阅下节），则单元格显示的值与编辑框不一样。例如输入：=12+34，单击输入“√”按钮后，单元格显示“46”，编辑框仍为“=12+34”。
3. 按 Tab 键，接受输入的同时，活动单元格右移一位。
4. 用方向键，原单元格接受输入值，工作区往相应方向移去。
5. 将鼠标移到工作表其它区域，单击左键。这种方法用于数值输入。若用于公式输入，则会引起混乱，Excel 会误认为引用其它单元格。
6. 若要取消输入，可单击编辑框的取消按钮“×”，或单击键盘上的 Esc 键。

	A	B	C	D
1				
2	1	4		
3	2			
4	3			
5				

图 1.2.2.1 向 A2:C4 区域输入数据

向区域内输入数据略有不同，输入顺序由 Excel 控制。如图 1.2.2.1 所示，选定区域 A2:C4。若用 Enter 键输入，每输入一个数值后，按一次 Enter，则按列依次输入：A2, A3, A4, B2, B3, B4, C2, C3, C4。图中已输入 4 个数据，即将输入第 5 个数据。若用 Tab 键输入，则按行依次输入：A2, B2, C2, A3, B3, C3, A4, B4, C4。若输入第一个数字或文字后，同时按 Ctrl 和 Enter 键，则所有选定的单元格均输入同一内容。

	A	B	C	D	E
1	KMnO ₄ 溶液校正曲线				
2				斜率 $a =$	0.0004026
3	$C(\text{mol/L})$	$A(\text{吸光度})$		截距 $b =$	-8.72E-07
4	0.00E+00	0			
5	1.03E-04	0.257		测量 $A =$	0.423
6	2.06E-04	0.518		浓度 $C =$	1.69E-04
7	3.09E-04	0.771			
8	4.12E-04	1.021			

图 1.2.2.2 KMnO₄ 校正曲线工作表

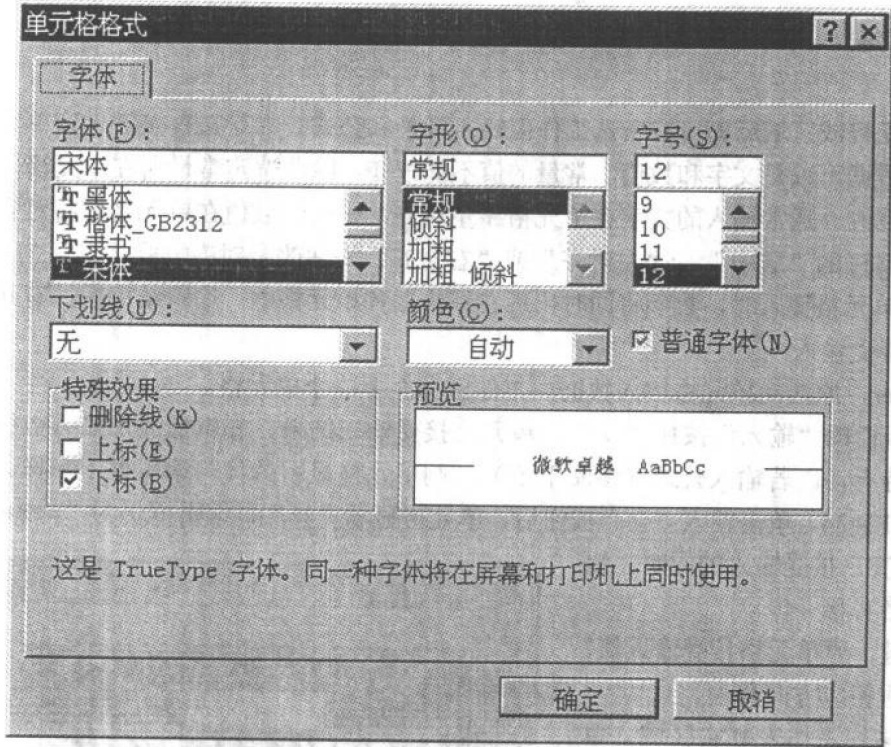


图 1.2.2.3 单元格格式对话框，单独格式化“KMnO₄”的下标 4

图 1.2.2.2 是用分光光度法测定高锰酸钾溶液浓度的校正曲线数据表。A1 单元格输入文字“KMnO₄溶液校正曲线”。一个单元格最多可容纳 32000 个字符（一个汉字

算 2 个字符)。虽然文字内容似乎溢出到 B1 单元格, 它仍在 A1 单元格, B2 单元格是空的。“KMnO₄”的下标 4 要单独格式化, 作法是:

1. 输入上述文字, 空出 4 未填。
2. 在编辑框中将竖直光标“|”指在“O”和“溶”之间, 单击菜单栏的“格式”按钮, 出现“格式”菜单, 单击其中的“单元格”指令, 出现“单元格格式”的字体对话框(图 1.2.2.3)。
3. “字体”对话框有字体、字形、字号等选择列表框。在“特殊效果”选项框中选定“下标”, 单击“确定”。完成格式设定, 回到编辑框。
4. 输入 4, 在单元格中 O 的后面即出现下标 4。

A4:A8 区域逐个输入 KMnO₄ 标准溶液浓度, B4:B8 区域逐个输入各浓度下的吸光度。常用的数字输入格式是“常规”、“数值”和“科学记数”, 默认格式是“常规”。常规格式不包含任何特定数字格式, 将数字显示为整数、小数、或者在数字长度超出单元格宽度时, 以科学记数的形式表示。科学记数格式是用 E 表示的指数格式: 1.029E-04 表示 1.029×10^{-4} 。数值格式用于一般数字的表示。数值表示和科学记数都要设置小数点位置, 默认值是 2。化学问题常要考虑有效数字, 小数点设置可保证数据有适当的有效数字, 使数据排列规整。为此应作:

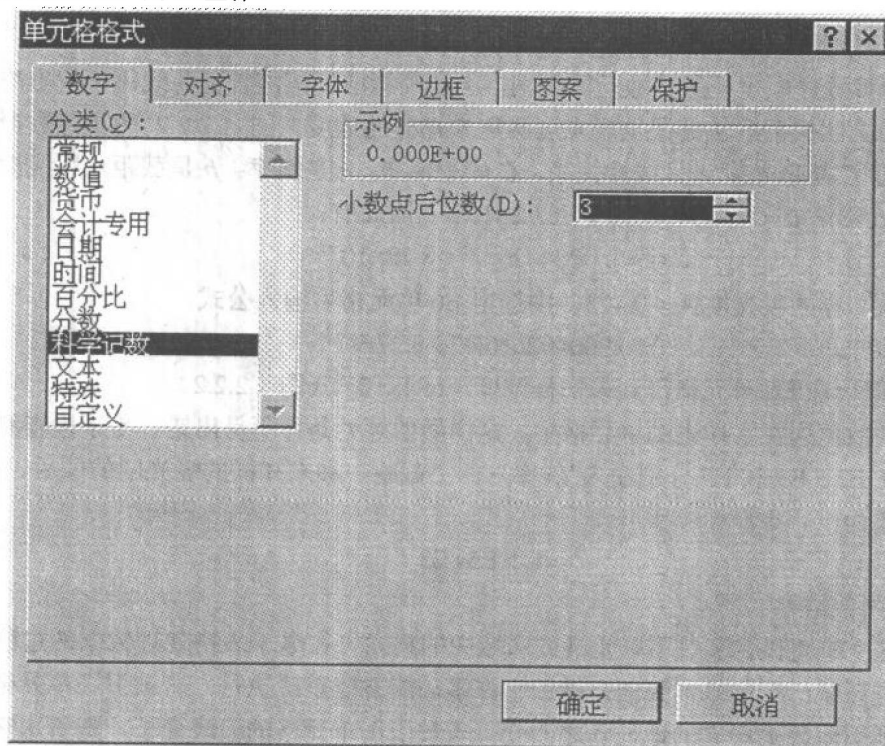


图 1.2.2.4 设置科学记数格式对话框

1. 图 1.2.2.2 中的标准溶液浓度输入完毕, 选定 A4:A8 区域。
2. 打开菜单栏的“格式”菜单, 单击“单元格”, 出现“单元格格式”对话框。
3. “单元格格式”对话框共有 6 个选项卡按钮, 单击其中“数字”按钮, 出现数字分类列表框, 选其中“科学记数”(图 1.2.2.4)。

4. 出现“小数点后位数”编辑框，用其右边微调按钮选定 3，此时示例中显示格式：0.000E+00。
 5. 单击“确定”，浓度值即成为有 4 位有效数字的科学记数格式。
- 以及：
1. 图 1.2.2.2 中的吸光度输入完毕，选定 B4:B8 区域。
 2. 打开菜单栏的“工具”菜单，单击“单元格”，出现“单元格格式”对话框。
 3. 选其中“数字”选项卡，出现数字分类列表框，选“数值”，出现“小数点后位数”编辑框，用微调按钮选定 3。
 4. 单击“确定”，吸光度即成为有 3 位小数的数值。

1.2.3 输入公式

公式是由常量、单元格引用、名称、函数或操作符组成的一串序列，它以等号“=”开始输入。利用公式可以从工作表中已有值产生所需新值。

算数计算符有：

+	-	*	/	^
加	减	乘	除	乘幂

它们的运算顺序同于一般算数运算规则。上述高锰酸钾溶液校正曲线用于找出浓度与吸光度之间的函数关系，从而根据吸光度测定未知样的浓度。图 1.2.2.2 的实验数据表明 KMnO_4 的浓度 C 与吸光度 A 呈线性关系： $C = aA + b$ 。 a 是斜率， b 是截距。用线性回归求得(参阅第五章)： $a = 0.0004026$ ， $b = -8.72 \times 10^{-7}$ 。因此有：

$$C = 0.0004026 \times A - 8.72 \times 10^{-7}$$

如果测得一未知样的吸光度 $A = 0.423$ ，则选定 E6 单元格后输入公式：

$$=0.0004026*0.423-8.27\text{E-}7$$

单击 Enter，即可在 E6 单元格得到未知样浓度 1.694×10^{-4} （图 1.2.2.2）。

通常将常数数列在工作表的单元格中，这样做的好处是：不易出错、易于检查和便于多次引用。在 E2、E3 和 E5 分别输入“斜率”、“截距”和未知样的吸光度的值后，在 E6 输入的公式成为：

$$=E2*E5+E3$$

按 Enter，得同一结果。

Excel 通过地址和名字引用单元格或区域中的数据。在电子表格处理数据的过程中，单元格地址是系统运行的基本要素，借助它许多功能方能正确执行。若被引用单元格的地址改变了，则引用公式中它的地址随之改变；若被引用单元格的值改变了，则引用它的单元格的值随之改变。这在使用校正曲线计算未知样浓度很方便。例如测得另一样品的吸光度为： $A = 0.626$ ，则在 E5 单元格输入这一值，单击 Enter，于是 E6 单元格的值自动变为： 2.511×10^{-4} 。

引用单元格的地址分为绝对地址、相对地址和混合引用地址。上述公式 $E2*E5+E3$ 的单元格引用地址均为相对地址。相对地址的形式同于普通单元格地址，即仅用列标和行号标识单元格。相对单元格是以活动单元格为基准，其它单元格地址相对此单元格的相对位

置变化。绝对地址告诉 Excel 被引用单元在工作表的确切位置，不以任何单元格为基准。绝对地址的列标和行号前均加美元符号\$，例如绝对地址\$E\$2。混合引用地址只在行号或列标其中之一前面加美元符号\$，表示仅对该行或该列绝对引用。例如\$E2 表示引用过程中列标不变，行号 2 随活动单元格改变而改变。E\$2 表明列标 E 随活动单元格而变，行号 2 不变。

在介绍活动单元格及相对引用和绝对引用等概念之前，先介绍 Excel 的自动填充功能。用自动填充功能，可以方便地输入有一定变化规律（如以固定值递增或递减）的一系列数据。这一功能可用鼠标拖曳填充柄，或用“编辑”菜单的“填充”指令完成。

现以图 1.2.3.1 为例介绍用拖曳填充柄自动填充过程：

1. 复制功能（A 列数据）。在 A1 单元格输入 10 后，选定 A1，鼠标指向填充柄，这时鼠标指针由空心十字（ Φ ）变为实心十字（ $\blackstar$ ），按住左键不放，拖曳到 A9 单元格，所有单元格均填入 10。
2. 扩展序列（B 列数据）。B1 单元格输入 1，B2 单元格输入 3。选定 B1 和 B2 单元格，鼠标指针指向填充柄，将实心十字（ $\blackstar$ ）拖曳到 B9 单元格。Excel 根据 B1 和 B2 的递增量 2，继续填充下面的单元格。于是得：5，7，9，...。
3. 相对引用（C 列数据）。在 C1 单元格输入公式： $=2*B1$ ，单击 Enter，C1 的值为 2。公式中 B1 是相对地址。选定 C1 单元格，使其成为活动单元格。若向下拖曳填充柄，公式引用地址的行号随之而变：C2 单元格为： $=2*B2$ （=6）；C3 单元格为： $=2*B3$ （=10）；...。若向右拖曳，则公式引用地址的列标随之而变：D1 单元格为： $=2*C1$ （=4）；F1 单元

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	10	1	2	4	8	2	2	2
2	10	3	6			2	6	2
3	10	5	10			2	10	2
4	10	7	14			2	14	2
5	10	9	18			2	18	2
6	10	11	22			2	22	2
7	10	13	26			2	26	2
8	10	15	30			2	30	2
9	10	17	34			2	34	2

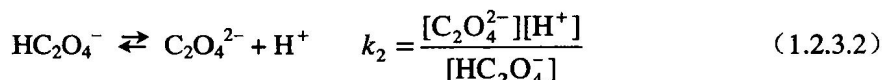
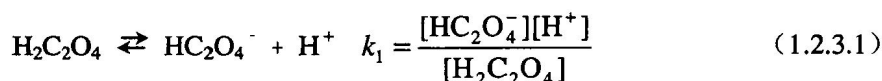
图 1.2.3.1 用填充柄自动填充数据

格为： $2*D1$ （=8）。

4. 绝对引用（F 列数据）。F1 输入： $=2*\$B\1 ，得值 2。公式中 $\$B\1 是绝对引用，选中 F1 后向下拖曳填充柄，自动填充同一值 2。在 F2，F3，... 单元格中的公式均为 $2*\$B\1 ，引用地址未变。
5. 混合引用（G 列和 H 列）。G1 输入公式： $=2*\$B1$ ，得值 2。 $\$B1$ 是混合引用地址，G1 为活动单元格后向下拖曳填充柄，列标不变，行号变。因此向下拖曳效果同于向下拖曳相对引用公式（C 列）。H1 输入公式： $=2*B\$1$ ，得值 2。 $B\$1$ 是混合引用地址，H1

为活动单元格后拖曳填充柄，列标变，行号不变，向下拖曳填充柄效果同于绝对引用（F 列）。

现以草酸 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液在不同 pH 下各物种平衡浓度为例，说明自动填充在数值计算中的应用。 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液有如下解离平衡：



由物料平衡得各物种占总酸浓度的比例是：

$$\text{C}_2\text{O}_4^{2-}: \alpha_0 = \frac{1}{1 + [\text{H}^+]/k_2 + [\text{H}^+]^2/k_1k_2} \quad (1.2.3.3)$$

$$\text{HC}_2\text{O}_4^-: \alpha_1 = \frac{[\text{H}^+]/k_2}{1 + [\text{H}^+]/k_2 + [\text{H}^+]^2/k_1k_2} = \alpha_0 \frac{[\text{H}^+]}{k_2} \quad (1.2.3.4)$$

$$\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4: \alpha_2 = \frac{[\text{H}^+]^2/k_1k_2}{1 + [\text{H}^+]/k_2 + [\text{H}^+]^2/k_1k_2} = \alpha_1 \frac{[\text{H}^+]}{k_1} \quad (1.2.3.5)$$

图 1.2.3.2 是计算不同 pH 下 α_0 、 α_1 、 α_2 值的工作表。用 Excel 公式表示的氢离子浓度 $[\text{H}^+]$ 与 pH 的关系是： $[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}}$ 。

1. 在 B3 和 C3 单元格填入解离常数 k_2 和 k_1 的值。
2. 在 A5、B5、C5、D5 单元格分别填入标题 pH、 α_0 、 α_1 、 α_2 。
3. 在 A6 单元格输入 1，A7 单元格输入 2。选定 A6 和 A7，拖曳填充柄至 A15 单元格，填入从 1 到 10 的 pH 值。
4. 根据 (1.2.3.3) 式，在 B6 单元格输入公式：
 $=1/(1+10^{-A6}/\$B\$3+(10^{-A6})^2/\$B\$3/\$C\$3)$

	A	B	C	D
1	不同 pH 下 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液中各物种分布			
2		k_2	k_1	
3		6.40E-05	5.90E-02	
4				
5	pH	α_0	α_1	α_2
6	1	2.37E-04	3.71E-01	6.29E-01
7	2	5.44E-03	8.50E-01	1.44E-01
8	3	5.92E-02	9.25E-01	1.57E-02
9	4	3.90E-01	6.09E-01	1.03E-03
10	5	8.65E-01	1.35E-01	2.29E-05
11	6	9.85E-01	1.54E-02	2.61E-07
12	7	9.98E-01	1.56E-03	2.64E-09
13	8	1.00E+00	1.56E-04	2.65E-11
14	9	1.00E+00	1.56E-05	2.65E-13
15	10	1.00E+00	1.56E-06	2.65E-15

图 1.2.3.2 计算 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液在不同 pH 下各物种的分布