

Computational Thinking and  
Computational Culture

# 计算思维与计算文化

王永全 单美静 © 主编



中国工信出版集团



人民邮电出版社  
POSTS & TELECOM PRESS

Computational Thinking and  
Computational Culture

# 计算思维与计算文化

王永全 单美静 © 主编

人民邮电出版社  
北京

## 图书在版编目 (C I P) 数据

计算思维与计算文化 / 王永全, 单美静主编. — 北京: 人民邮电出版社, 2016. 12  
ISBN 978-7-115-43814-0

I. ①计… II. ①王… ②单… III. ①电子计算机  
IV. ①TP3

中国版本图书馆CIP数据核字(2016)第289285号

## 内 容 提 要

本书以提升知识和技能、素养和能力为目标, 兼顾广度和深度, 融多学科交叉领域知识为一体, 对计算思维与计算文化涉及的基本概念和知识、基本技能和应用等相关内容进行了较为全面系统地阐述和分析。主要包括: 计算思维概述、信息与信息处理技术、数学与数学模型、计算与计算方法、计算文化、程序设计思想与算法基础、网络与网络通信、互联网与新型网络、数据分析与科学决策、人工智能与智能计算、案例与实践等知识和内容。

本书不仅可作为高等院校各专业, 特别是非计算机专业开设《计算思维与计算文化》等相关课程的参考书, 同时也可供社会各领域工作者了解和学习计算思维与计算文化等相关知识参考或使用。

---

◆ 主 编 王永全 单美静

责任编辑 邢建春

责任印制 彭志环

◆ 人民邮电出版社出版发行 北京市丰台区成寿寺路 11 号

邮编 100164 电子邮件 315@ptpress.com.cn

网址 <http://www.ptpress.com.cn>

三河市中晟雅豪印务有限公司印刷

◆ 开本: 787×1092 1/16

印张: 15

2016 年 12 月第 1 版

字数: 366 千字

2016 年 12 月河北第 1 次印刷

---

定价: 86.00 元

读者服务热线: (010)81055488 印装质量热线: (010)81055316

反盗版热线: (010)81055315

## 本书编写组

主 编：王永全 单美静

副主编：杨年华 陈德强 刘 洋

编 著：（以撰写章节为序）

单美静 刘 琴 宋 蕾 陈德强

孙 华 廖根为 程 燕 杨年华

刘 洋 王 弈 王学光 唐 玲

焦 娜 王永全 陈海燕

# 前 言

随着科学技术的不断进步，信息技术在社会各领域被广泛运用、集成和融合，特别是互联网的普及，以及世界各国“云计算”“大数据”“移动互联网”“物联网”等战略规划目标的实施，人类社会已经进入“智慧时代”。

当前，创新已成为“智慧时代”经济社会发展的重要驱动力，知识创新则是国家竞争力的核心要素。这些都离不开复合型和创新型卓越人才的培养。而这类人才的培养，其基础和关键在于人才的“科学思维”培养。因为“科学思维不仅是一切科学研究和技术发展的起点，而且始终贯穿于科学研究和技术发展的全过程，是创新的灵魂”。一般认为，科学方法分为“理论方法”“实验方法”“计算方法”三大类。与三大科学方法相对应的是三大科学思维，即“理论思维”“实验思维”“计算思维”。理论思维以数学为基础，实验思维以物理等学科为基础，计算思维则以计算机科学为基础。三大科学思维构成了科技创新的三大支柱。作为科学思维三大支柱之一，且具有鲜明时代特征的计算思维，尤其应当引起高度重视，特别是在“智慧时代”，培养人们的“计算思维”并作为其基本的认知能力，提升人们的“计算文化”并作为其基本的信息素养，具有重要意义。

自2006年美国计算机科学家 Jeannette M. Wing（周以真）在《美国计算机学会通信》上发表了《计算思维》（Computational Thinking）一文，并将计算思维作为一种基本技能和普通思维方法提出以来，从2007年开始，美国的许多大学面向全体学生开设了“计算思维”等基础课程，以增强人才的创新意识和创新能力。我国一些高等院校也逐步认识到在“智慧时代”开设“计算思维与计算文化”（Computational Thinking and Computational Culture）等相关课程对各专业领域复合型和创新型卓越人才培养的重要作用。2010年以来，国内一些高等院校也先后将“计算思维”课程作为全校通识类课程进行建设并适时开设，包括自然科学和社会科学等各类专业学生都踊跃学习，因而具有及时性、先进性和前瞻性，这也非常符合现代信息技术发展在培养人才的科学思维，特别是计算思维方面（对各专业领域人才）所提出的基本素质要求。

在此背景下，为切合当今时代发展对人才培养的客观要求，引导人们自觉地将计算思维的思想贯穿于今后的学习、工作和研究过程之中，促使人们比较深入地理解计算在延伸人的想像力、创造力以及理解力方面的巨大作用，力图使计算思维方法真正成为人们基本素质中的一个要素，为今后持续性地运用计算思维分析并解决各专业领域的具体实际问题提供基础，我们编写了《计算思维与计算文化》一书。

本书内容全面系统、构思新颖，具有基础性、融合性、趣味性、实践性和前沿性等特点，适用面广。不仅可作为高等院校各专业，特别是作为非计算机专业学生开设《计算思维与计

算文化》等相关课程的教材或教学参考书使用，同时也可供社会各领域工作者了解和学习计算思维与计算文化等相关知识参考或使用。

本书从知识和技能、素养和能力等方面，对计算思维与计算文化涉及的基本概念、基本知识、基本技能和基本能力进行了较为详尽地梳理、介绍、讨论和分析。主要包括计算思维和计算文化的基本概念及基础知识、信息与信息处理技术、数学与数学模型、计算与计算方法、程序设计思想与算法基础、网络与网络通信、互联网与新型网络、数据分析与科学决策、人工智能与智能计算等知识和内容。不仅将计算文化贯穿于全书的各章内容之中，还在介绍计算思维各相关专业知识的时，让读者能够领略到这些专业知识中所渗透的计算文化的内容。

全书由王永全和单美静任主编，并拟定编写大纲和统稿；杨年华、陈德强和刘洋任副主编。主编在统稿和审阅过程中，还对一些章节的内容做了合理的修改和整合处理。

本书撰写人员的分工如下（以撰写章节为序）。

第1章：单美静；

第2章：刘琴、宋蕾；

第3章：陈德强；

第4章：孙华；

第5章：廖根为、程燕；

第6章：杨年华、刘洋、王弈；

第7章：王学光；

第8章：唐玲、程燕；

第9章：焦娜、刘洋、王永全；

第10章：王永全、刘洋；

第11章：陈海燕。

本书在撰写过程中，作为通识教育核心课程建设项目的成果之一，得到了华东政法大学以及各参编人员所在单位或部门领导的关心、帮助和大力支持，在此表示衷心感谢！同时，本书的撰写还参考引用了相关学者的资料或研究成果，但难免挂一漏万，在此，也一并表示衷心感谢！

由于时间紧迫以及作者水平所限，书中缺点和错误在所难免，恳请专家和广大读者不吝指正。

作者

2016年8月28日

# 目 录

第1章 计算思维概述	1
1.1 三大科学思维	1
1.2 计算思维初探	2
1.2.1 计算思维概念	2
1.2.2 计算思维特征	3
1.2.3 计算思维内涵	4
1.3 计算思维的广泛应用	4
1.3.1 自然科学中的应用	4
1.3.2 人文社会科学中的应用	7
1.3.3 计算机课程教学中的应用	9
1.3.4 公检法司等特殊领域中的应用	10
思考与练习	11
第2章 信息与信息处理技术	12
2.1 信息与信息处理技术概述	12
2.1.1 信息	12
2.1.2 信息处理技术	14
2.2 计算机硬件组成	17
2.2.1 计算机体系结构	17
2.2.2 计算机硬件组成要素	18
2.2.3 计算机硬件发展	20
2.3 计算机软件基础	22
2.3.1 进制	22
2.3.2 编码	23
2.3.3 软件分类及功能	23
2.4 信息处理技术实务	25
2.4.1 操作系统的基本操作	25

2.4.2	文字排版	28
2.4.3	电子表格	30
2.4.4	演示文稿	34
	思考与练习	37
<b>第3章</b>	<b>数学与数学模型</b>	<b>38</b>
3.1	图灵机模型	38
3.1.1	图灵贡献	38
3.1.2	图灵奖	39
3.1.3	图灵机历史	40
3.1.4	图灵机模型原理	41
3.2	逻辑符号化	43
3.2.1	数学符号化思想的含义	43
3.2.2	数学逻辑符号在人文社科中的应用	45
3.3	图论模型	49
3.3.1	图的基本概念	50
3.3.2	哥尼斯堡七桥问题	51
3.3.3	四色问题	52
3.3.4	平面图理论	53
3.3.5	比赛图论理论	53
	思考与练习	54
<b>第4章</b>	<b>计算与计算方法</b>	<b>55</b>
4.1	符号计算	55
4.1.1	符号计算概念	55
4.1.2	符号计算和数值计算的区别	55
4.1.3	符号计算示例	56
4.2	数值计算	57
4.2.1	数值计算概念及特点	57
4.2.2	常见的数值计算方法	58
4.2.3	数值计算中应注意问题	61
4.3	可计算性	61
4.4	计算的复杂性	62
4.4.1	基本概念	62
4.4.2	大O记号	63
4.4.3	时间复杂度	63



4.4.4	空间复杂度	64
4.4.5	性质	64
4.5	数据结构	65
4.5.1	数据的逻辑结构	65
4.5.2	数据的存储结构	66
4.5.3	数据运算	68
4.5.4	数据类型和抽象数据类型	68
	思考与练习	69
<b>第 5 章</b>	<b>计算文化</b>	<b>70</b>
5.1	计算社会背景	70
5.1.1	计算社会发展基础	70
5.1.2	计算社会现状	71
5.1.3	计算社会未来发展	71
5.2	计算文化发展历程	72
5.2.1	计算文化概念	72
5.2.2	计算文化发展与影响	73
5.3	网络文化	74
5.3.1	网络文化概述	74
5.3.2	网络文化现象	76
5.4	知识产权	80
5.4.1	知识产权含义	80
5.4.2	知识产权特征	80
5.4.3	计算机与网络领域的知识产权问题	80
5.5	隐私和自由	82
5.5.1	隐私问题	82
5.5.2	自由问题	83
5.6	信息犯罪	84
5.6.1	信息犯罪概念	84
5.6.2	信息犯罪特征	85
5.6.3	信息犯罪分类	88
5.6.4	信息犯罪内容	89
	思考与练习	91
<b>第 6 章</b>	<b>程序设计思想与算法基础</b>	<b>92</b>
6.1	初识 Python	92

6.2	系统安装	93
6.2.1	安装环境	93
6.2.2	安装步骤	93
6.3	编写第一个应用程序 Hello World	96
6.3.1	程序的执行方式	96
6.3.2	Python 语言的基本成分	98
6.4	模块化编程初步	101
6.4.1	模块化编程	101
6.4.2	Python 语言中的函数	101
6.4.3	自顶向下设计	103
6.4.4	Python 模块	104
6.5	程序设计思想与方法	106
6.5.1	函数	106
6.5.2	面向对象方法	110
6.6	算法与程序	120
6.6.1	排序算法	120
6.6.2	查找算法	122
6.6.3	递归方法	124
	思考与练习	126
<b>第 7 章</b>	<b>网络与网络通信</b>	<b>127</b>
7.1	计算机网络概述	127
7.1.1	计算机网络概念	127
7.1.2	计算机网络系统组成	127
7.1.3	计算机网络分类	131
7.1.4	计算机网络体系结构与参考模型	134
7.2	数据通信基础	136
7.2.1	信息量	136
7.2.2	编码与解码	137
7.2.3	信息加密	139
7.2.4	校验与纠错	140
7.3	网络模型与协议	141
7.3.1	网络协议概念	142
7.3.2	网络参考模型	142
7.4	无线传感器网络基础	145
7.4.1	无线传感器网络发展历史	146

7.4.2	无线传感器关键技术	146
7.4.3	无线传感器网络的网络协议栈	148
7.4.4	无线传感器网络的特征	149
7.4.5	无线传感器网络的应用	150
	思考与练习	151
<b>第8章</b>	<b>互联网与新型网络</b>	<b>152</b>
8.1	互联网	152
8.1.1	传统互联网	152
8.1.2	移动互联网	157
8.2	新型网络及相关技术	159
8.2.1	物联网	159
8.2.2	云计算	164
8.2.3	大数据	166
8.2.4	社交媒体相关技术	169
8.3	网络数据科学与工程	170
8.3.1	网络数据科学与工程产生的背景	170
8.3.2	网络数据科学与工程的主要研究内容	170
8.3.3	网络数据科学与工程的研究方法和目标	171
8.3.4	网络数据科学与工程的最新研究进展	172
	思考与练习	173
<b>第9章</b>	<b>数据分析与科学决策</b>	<b>174</b>
9.1	数据组织与管理	174
9.2	数据挖掘	177
9.2.1	数据挖掘的定义	177
9.2.2	数据挖掘的起源	179
9.2.3	一个数据挖掘的简单例子	180
9.3	分析与决策	182
9.3.1	统计分析	182
9.3.2	决策支持系统	185
9.3.3	关联规则	188
	思考与练习	190
<b>第10章</b>	<b>人工智能与智能计算</b>	<b>191</b>
10.1	图灵与人工智能	191

10.1.1	知识表示与推理	191
10.1.2	搜索与博弈技术	197
10.1.3	自然语言处理	200
10.1.4	机器学习与神经网络	202
10.2	模式识别与智能计算	205
10.2.1	模式识别的分类与应用	205
10.2.2	智能计算简介	207
10.2.3	Siri 智能系统介绍	209
	思考与练习	212
<b>第 11 章</b>	<b>案例与实践</b>	<b>213</b>
11.1	趣味密码学	213
11.2	同步问题	214
11.2.1	条件变量	214
11.2.2	同步队列	216
	思考与练习	222
	参考文献	223

# 第1章 计算思维概述

## 本章重点内容

首先介绍科学思维及其分类；然后详细介绍计算思维的定义和各种解释，以及计算思维的详细描述、特征和本质；最后介绍计算思维在不同学科领域的应用，特别是在法学、公安学以及司法鉴定方面的应用。通过具体实例来说明计算思维在各个领域中的渗透和应用。

## 本章学习要求

掌握计算思维的基本概念、特征和本质；了解计算思维的不同解释；了解计算思维在实践中的应用。

云计算、物联网、移动互联网、社交网络、大数据，所有的事物都开始了数字化。计算思维一词的产生，实际上是计算机学科发展和现实世界所需求的必然产物，是将多年来计算机学科所形成的解决问题的思维模式和方法渗透到各个学科。

## 1.1 三大科学思维

什么是科学？达尔文曾经将其定义：“科学就是整理事实，从中发现规律，做出结论”。科学包括自然科学、社会科学和思维科学。科学的重要性在于，它是真理，推动着人类文明进步和科技的发展。

什么是思维？思维是跟大脑有关的。思维是高级的心理活动，是认识的高级形式；思维是人脑对现实事物的概括、加工、揭露本质特征。人脑对信息的处理包括分析、抽象、综合、概括等。

什么是科学思维？从人类认识世界和改造世界的思维方式出发，科学思维可分为理论思维（Theoretical Thinking）、实验思维（Experimental Thinking）和计算思维（Computational Thinking）3种。其中，理论思维又称逻辑思维，是以推理和演绎为特征的推理思维；实验思维又称实证思维；计算思维又称构造思维。一般来说，理论思维、实验思维和计算思维分别对应于理论科学、实验科学和计算科学。理论科学、实验科学、计算科学被称为推动人类文明进步和科技发展的三大科学，或者叫三大支柱。科学思维的含义和重要性在于它反映的是

事物的本质和规律。

计算思维是人类科学思维活动固有的组成部分。人类在认识世界、改造世界过程中表现出了3种基本的思维特征：以观察和总结自然规律为特征的实证思维（以物理学科为代表）；以推理和演绎为特征的推理思维（以数学学科为代表）；以设计和构造为特征的计算思维（以计算机学科为代表）。随着计算机技术的出现及广泛应用，更进一步强化了计算思维的意义和作用。

计算思维不仅反映了计算机学科最本质的特征和最核心的方法，也映射了计算机学科的3个不同领域，包括理论、设计和实现。

实证思维、逻辑思维和计算思维各具特点，所有的思维都是这3种思维的混合，其中的比例会有所不同，但不存在纯粹的实证思维、逻辑思维和计算思维，这种分类是为了研究的方便，以及对学生思维训练的需要。

计算思维已经与理论科学、实验科学并列，共同成为推动社会文明进步和促进科技发展的三大手段。现在，几乎所有领域的重大成就无不得益于计算科学的支持。计算思维已经与逻辑思维、实证思维一样，成为现代人必须掌握的基本思维模式。

## 1.2 计算思维初探

在研究计算思维的理论之前，首先试着回答下面的问题，也就是几个计算思维的实例。

计算机科学是关于什么的科学？

计算机怎么计算？

人如何指挥计算机进行计算？

计算机解决问题有没有通用的方法？

到底是计算机出错还是人出错？

什么是计算机解题的“代价”？

对计算机而言，什么样的问题是“很难”？

计算机什么问题都能解吗？

计算的本质复杂吗？

如何让计算机同时处理多个事件？

碰运气也能算是一种解题方法吗？

怎么能不让别人“窥视”自己的隐私？

如何能解“大问题”？

计算机会比人聪明吗？

在这一节中，主要讲述计算思维一词的由来，从不同角度解读计算思维一词，以及狭义和广义的定义；然后对计算思维的本质、思想和基本内涵进行阐述。

### 1.2.1 计算思维概念

2006年3月，美国卡内基梅隆大学计算机系周以真教授在美国计算机权威杂志ACM《Communication of the ACM》上发表并定义了计算思维（Computational Thinking）。她指出，

计算思维是每个人的基本技能，不仅属于计算科学家，要把计算机这一从工具到思维的发展提炼到与“3R（读、写、算）”同等的高度和重要性，成为适合与每一个人的“一种普遍的认识和一类普适的技能”。这在一定程度上，意味着计算机科学从前沿高端到基础普及的转型。近年来，计算思维这一概念得到国内外计算机界、社会学界以及哲学界学者和教育者的广泛关注，并进行了深入的研究和探讨。

目前，国际上广泛使用的计算思维概念是运用计算机科学的基础概念去求解问题、设计系统和理解人类行为的一种方法，是一类解析思维。它合用了数学思维（求解问题的方法）、工程思维（设计、评价大型复杂系统）和科学思维（理解可计算性、智能、心理和人类行为），涵盖了计算机科学之广度的一系列思维活动。

当人们必须求解一个特定的问题时，首先会问：解决这个问题有多么困难？怎样才是最佳的解决方法？计算机科学根据坚实的理论基础来准确地回答这些问题。表述问题的难度就是工具的基本能力，必须考虑的因素包括机器的指令系统、资源约束和操作环境。

计算思维的详细描述还包括如下内容。

(1) 计算思维是通过约简、嵌入、转化和仿真等方法，把一个看似困难的问题重新阐释成已知其解决方案的问题。

(2) 计算思维是一种递归思维，是一种并行处理，是一种把代码译成数据又能把数据译成代码，是一种多维分析推广的类型检查方法。

(3) 计算思维是一种采用抽象和分解来控制庞杂的任务或进行巨大复杂系统设计的方法，是基于关注点分离的方法（SoC方法）。

(4) 计算思维是一种选择合适的方式去陈述一个问题，或对一个问题的相关方面建模使其易于处理的思维方法。

(5) 计算思维是按照预防、保护及通过冗余、容错、纠错的方式，从最坏情况进行系统恢复的一种思维方法。

(6) 计算思维是利用启发式推理寻求解答，即在不确定情况下规划、学习和调度的思维方法。

(7) 计算思维是利用海量数据来加快计算，在时间和空间之间、在处理能力和存储容量之间进行折衷的思维方法。

## 1.2.2 计算思维特征

周以真教授认为计算思维的内容，本质是抽象和自动化，特点是形式化、程序化和机械化。周教授同时给出了计算思维的6个特征。

(1) 概念化，不是程序化。

计算机科学不是计算机编程；像计算机科学家那样去思维意味着远不止于计算机编程，还要求能够在抽象的多个层次上思维。

(2) 根本的，不是刻板的技能。

根本技能是每一个人为了在现代社会中发挥职能所必须掌握的；刻板技能意味着机械地重复。

(3) 是人的，不是计算机的思维方式。

计算思维是人类求解问题的一条途径，并不是要使人类像计算机那样去思考。计算机枯

燥且沉闷，人类聪颖且富有想象力，是人类赋予了计算机激情。

(4) 数学和工程思维的互补和融合。

计算机科学在本质上源自数学思维，因为像所有的科学一样，其形式化基础建于数学之上。计算机科学又从本质上源自工程思维，基本计算设备的限制迫使计算机科学家必须计算性地思考，不能只是数学性地思考。

(5) 是思想，不是人造物。

不只是软件、硬件等人造物以物理形式到处呈现并时时刻刻触及人们的生活，更重要的是接近和求解问题、管理日常生活、与他人交流和互动，计算的概念无处不在。

(6) 面向所有的人，所有地方。

当计算思维真正融入人类活动，以至于不再表现为一种显式哲学时，它将成为一种现实。

### 1.2.3 计算思维内涵

对于计算思维的内涵解读有很多。创新这些观点包括 ACM/IEEE 提出的计算作为一门学科所具有的 30 个核心技术；周以真教授提出计算思维就是自动化抽象的过程；De Souza 等认为计算思维是从自然语言描述开始，不断对其进行精化，最后得到可计算模型或代码；Kuster 等理解的计算思维内涵是数据分析、算法设计与实现以及数学建模等技术的一个综合体。Engelbart 认为计算思维的内涵分为 3 个层次：使用计算机的基本能力、理解计算机系统的熟练能力和计算思维能力。Peter Denning 提出了计算的几大原则，从知识体系的角度对计算思维的内涵进行了解释。

## 1.3 计算思维的广泛应用

计算思维具有广泛的应用领域，创新人才应该学会用计算思维的基本方法处理问题，将专业问题转化为计算机可以处理的形式，将计算思维的基本原则和手段用于面临的工作，将计算思维的基本准则用于理想和品格的塑造。

### 1.3.1 自然科学中的应用

#### 1.3.1.1 计算机科学

随着以计算机科学为基础的信息技术迅猛发展，计算思维对各个学科的影响尤其是对计算机学科的作用日益凸显。二者之间有着密不可分的联系，计算思维促进计算机科学的发展和创新，计算机科学推动计算思维的研究和应用。计算思维的本质是抽象和自动化，核心是基于计算模型和约束的问题求解；而计算机科学恰恰是利用抽象思维建立求解模型并将实际问题转化为符号语言，再利用计算机自动执行。其中，抽象是计算机学科的最基本原理，而自动计算则是计算机学科的最显著特征。计算思维反映的是计算机学科最本质的特征和最核心的方法。计算思维虽不是计算机科学的特有产物，甚至它的出现要先于计算机科学，但是计算机的发明却给计算思维的研究和发展带来根本性变化。计算机在数学计算和信息处理中无可比拟的优势，使原本只有在理论层面可以构造的事物变成了现实世界实现的实物，拓展了人类认知世界和解决问题的能力，推进了计算思维在形式、内容和表述等方面的探



索。计算思维示意如图 1-1 所示。



图 1-1 计算思维示意

因此, 计算机学科是最能反映计算思维能力的学科, 将计算思维引入计算机学科教学也是十分有必要的。计算思维能力是计算机专业人才所应具备的最基本和最重要的能力之一。

### 1.3.1.2 化学与物理

#### 1. 计算化学

作为近年来快速发展的一门学科, 计算化学是理论化学的一个分支, 计算机科学与化学的交叉学科, 主要目标是利用有效的数学近似以及电脑程序计算分子的性质(如总能量、偶极矩、四极矩、振动频率、反动活性等), 用以解释一些具体的化学问题。利用计算机程序做分子动力学模拟, 试图为合成实验预测起始条件, 研究化学反应机理、解释反应现象等。

计算机科学与化学结合通常有以下几个研究方向。

#### (1) 计算化学中的数值计算。

利用计算数学方法, 对化学各专业学科的数学模型进行数值计算或方程求解。例如, 量子化学和结构化学中的演绎计算、分析化学中的条件预测、化学过程中的各种应用计算等。

#### (2) 化学模拟。

化学模拟包括: 数值模拟, 如用曲线拟合法模拟实测工作曲线; 过程模拟, 根据某一复杂过程的测试数据, 建立数学模型, 预测反应效果; 实验模拟, 通过数学模型研究各种参数(如反应物浓度、温度、压力)对产量的影响, 在屏幕上显示反应设备和反应现象的实体图形, 或反应条件与反应结果的坐标图形。

#### (3) 模式识别应用。

最常用的方法是统计模式识别法, 这是一种统计处理数据、按专业要求进行分类判别的方法, 适于处理多因素的综合影响, 如根据二元化合物的键参数(离子半径、元素电负性、原子的价径比等)对化合物进行分类, 预报化合物的性质。模式识别广泛用于最优化设计, 根据物性数据设计新的功能材料。

#### (4) 数据库及检索。

化学数据库中存储数据、常数、谱图、文摘、操作规程、有机合成路线、应用程序等。数据库不但能存储大量信息, 还可根据不同需要进行检索。根据谱图数据库进行谱图检索, 已成为有机化学分析的重要手段, 首先将大量的谱图(如红外、核磁、质谱等)存入数据库, 作为标准谱图, 然后由实验测出未知物的各种谱图, 把它们和标准谱图进行比照, 就可求得