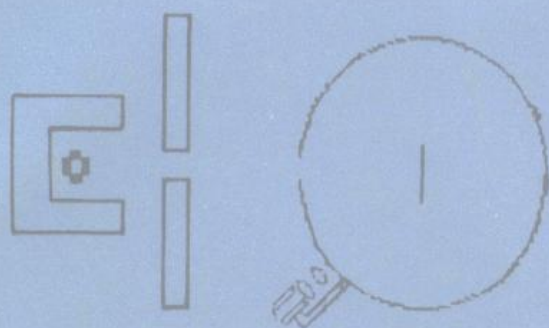




微机化学 教育指南

——美国师而丰程序集

●田安民 等 编

●四川大学出版社

微机化学教育指南

——美国师而丰程序集

田安民 等编

四川大学出版社

一九八七年·成都

内 容 简 介

美国师而丰项目(Project SERAPHIM)是从事微机辅助化学教学中心,在国际上很有影响。

“微机化学教育指南——美国师而丰程序集”一书,由六所高等院校有经验的教师编写。该书从师而丰中心已有的一百多盘程序中,选择在Apple机上运行的程序共四十四盘,经整理编辑而成。

该书可用于课堂讲授、辅导、习题、实验等教学环节,特别是程序中采用了动态图像显示和模拟实验以及化学游戏等形式,深入浅出,形象生动,颇具有启发性。适用于我国高等院校和中等学校的教师、学生和微机教学实验室使用。对研究和从事微机教学的同志也是一本很好的参考书。

微机化学教育指南

——美国师而丰程序集

田安民 卢集政 赖琼钰
刘 范 黄荣彬 刘满仓
沈开惠 姜卫民 等编

※

四川大学出版社出版(四川大学内)

四川省新华书店发行

国营新兴仪器厂印刷所印刷

※

开本: 787×1092毫米 1/32 印张: 8.31 字数: 163千
1987年9月第一版 1987年9月第一次印刷
印数: 0001—2000册

ISBN7—5614—0048—9/TB·3

统一书号: 15404·5 定价: 1.38元

前 言

由美国东密执安大学 (EASTERN MICHIGAN UNIVERSITY) 化学系 John W. Moore 教授所领导的 PROJECT SERAPHIM 是美国著名的微机辅助化学教育的研究、开发和传播中心, 在国际上很有影响。

1986年8月以来我们对国内所引进的SERAPHIM软件进行了分析, 并在此基础上译编而写成本书。我们希望它的出版将有助于SERAPHIM软件在我国的迅速传播, 促进我国利用微机进行化学教育的发展, 从而对提高我国化学教育的水平有所裨益。

考虑到我国的实际情况, 本书中选择了部分在APPLE机上运行的程序, 对程序的用途和使用方法作了简要的说明, 以使读者能尽快地掌握和应用这批程序。

SERAPHIM程序中所包括的内容十分丰富, 它涉及到无机化学、有机化学、分析化学、物理化学等各门课程的内容。它对课堂讲授、辅导、自学及实验课等各个教学环节均有辅助作用, 并且容易操作和理解。它可广泛用于我国高等院校、专科学校、师范学院以及中学等各类学校有关化学课程的辅助教学。

参加本书编写工作的有四川大学田安民、卢集政、赖琼钰、中国科技大学姜卫民、华中师范大学刘范、李永健、厦

门大学黄荣彬、兰州大学刘满仓、连云港教育学院沈开惠等。田安民主持了本书的编写工作，姜卫民对若干程序的分析和改写做了许多工作，李启兴同志负责全书的制图工作。其余的同志担负了软件使用的编写工作。

顺便提到，在四川大学化学系有大量的包括本书介绍的程序在内的师而丰软件。愿复制所需软件的单位和读者，请与该系卢集政老师联系。

在本书的编写过程中始终得到J. W. Moore教授的热情支持和大力帮助，美国东密执安大学冯皓小姐付出了辛勤的劳动，中国科技大学张懋森教授给予了很大的关心，南京大学张海燕同志提出了许多有益的建议。还要特别提到的是连云港市科委，连云港市电子计算机办公室和连云港教育学院对本书的出版给予了有力的支持，在此我们对他们深表谢意。

由于我们业务水平有限，编写时间仓促，因此书中的讹错在所难免。我们诚恳地欢迎读者对本书提出意见，批评和指正。

田安民

1986年11月于连云港市

序 一

师而丰项目 (Project SERAPHIM) 自1982年开始执行以来,已有了迅猛的发展。该项目已得到了美国国家基金会、美国教育部和德莱福斯 (Dreyfus) 基金会的资助。该项目的发展还部分地得力于同中国建立了良好的关系,其中包括设立了两个国际资料推广中心以及同四川大学和田安民教授所进行的合作。我们欣慰地为中国的化学家和化学教师们献上这本介绍师而丰项目工作的书。

师而丰项目主要起了三个作用:一是作为信息中心,收集、整理、改进和推广化学教学微机程序;二是为化学教师们举办讲座,使他们能在教学中有效地运用计算机;三是研究和开发化学教学新型软件。以上几项措施在美国已颇见成效,世界上很多国家的科学家们也趋而仿之,同时也提出了一些新的设想,以帮助解决在化学教学中我们所面临的共同课题。我们很乐意从事这种合作,并且通过这种合作已经从很多其他国家的化学家那里学得了不少新东西。希望我们大家的努力将有助于全世界研究化学的人们。

本书从使用的角度介绍了师而丰项目的计算机程序,对于中国的读者无疑是十分有益的。我希望阅读本书的人会发现此书和我们的软件在他们的化学教学中定会有所裨益。如果本书能激励起中国化学教师和化学家们的热情,编写出更

多的软件并寄到师而丰项目来，那就更好了。我们高兴地从世界各国的化学家那里得到程序并加以推广，并相信中国有很多创造性的工作，它们定会有益于美国和其他国家的化学家们。

我们期待着能了解到中国同事们将微机用于化学和化学教学的情况。

美国东密执安大学化学系教授

师而丰项目主任

John W. Moore (穆强)



一九八七年四月于美国密执安州

耶普舍兰蒂 (Ypsilanti)

序 二

计算机辅助教学，是计算机应用中的一个重要领域，国际上发展迅速，美国“师而丰(SERAPHIM)项目”用微机辅助化学教学，深入浅出，形象生动，在国际上起了很大影响。我国在这方面起步较晚，教学软件不足，这种面貌亟待改变。

师而丰项目的主持人J. W. Moore 教授于1985年曾来我国讲学，在计算机辅助化学教学方面起了示范作用，但由于这一套软件的屏幕输出和操作说明全部用英语显示，在面向全国各类学校的教学中，不能完全适用。为此，四川大学田安民教授组织了七所院校有关同志编写了本书，并开办培训班，提供软件，为教学方法现代化创造了条件，并为各院校自编化学教学软件提供了样板，这是一件很有意义的工作，受到了广大师生的欢迎。

在这本小册子出版之际，我予祝它在我国的社会主义四化建设中起到应有的作用。

中国科技大学教授

张懋森

1987年3月

目 录

一、AP102	(1)
二、AP105	(9)
三、AP106	(14)
四、AP149-2	(17)
五、AP201	(23)
六、AP202	(30)
七、AP204	(36)
八、AP205	(43)
九、AP301	(48)
十、AP303	(54)
十一、AP304	(57)
十二、AP305	(61)
十三、AP306	(68)
十四、AP401	(73)
十五、AP501	(80)
十六、AP502	(91)
十七、AP503	(97)
十八、AP602	(100)
十九、AP603	(104)
二十、AP604	(111)

二十一、AP605	(118)
二十二、AP606	(122)
二十三、AP701	(126)
二十四、AP703	(133)
二十五、AP704	(139)
二十六、AP705	(144)
二十七、AP706	(150)
二十八、AP707	(159)
二十九、AP708	(164)
三十、AP709	(167)
三十一、AP710	(172)
三十二、AP711	(177)
三十三、AP712	(186)
三十四、AP713、AP714	(193)
三十五、AP801	(196)
三十六、AP802	(200)
三十七、AP803	(206)
三十八、AP804	(211)
三十九、AP805	(215)
四十、AP806	(220)
四十一、AP807	(224)
四十二、AP808	(228)
四十三、AP902	(234)
附 录	(242)

一、AP102

I. 磁盘简介

程序1. L I N G E N, 作者: Chrislain 和 Tucker, 内容是通用加权最小二乘法。

程序2. C R A P H, 作者: Diemente, 内容是绘图。

程序3. S I C N I F I C A N T F I G U R E D R I L L, 作者: Croves, 内容是有效数字练习。

程序4. M A R Q U A R D T, 作者: Trindle, 内容是非线性最小二乘法拟合。

I. 程序1. L I N G E N

1. 简介。

该程序用于拟合一条直线:

$$Y = A + B \times X$$

式中X为自变量, Y为因变量, X和Y均包含测量误差, 在使用该程序前, 需估计测量数据的标准偏差。任一或全部数据的标准偏差可输入为零, 但若一对X, Y的标准偏差输入值皆为零, 则机器自动将Y的标准偏差改为1, 以免使除数为零。程序允许用数据语句或键盘输入方式输入数据。数据语句应写在6010行之后, 7000行之前。

使用的方法为最小二乘法和加权最小二乘法。权重由下式确定：

$$W1 = 1 / (SY + B \times SX)$$

由上式可见，偏差越大，权重越小，可以改变B值的精度，其空缺值为0.01%，欲详细了解算法，可参阅屏幕上所列的文献。

2. 示例。

机器问是否要读说明，回答否（若答是则显示一段说明及参考文献），机器又问是否改变B的精度，回答否。

机器又问几组数据，答6（6010后可提供10组数据）。

机器问是否用数据语句输入，回答是，如欲处理自己的数据，可中断程序，写数据语句，然后重新运行，每组数据的顺序是：Y(1)，X(1)，SY(1)，SX(1)，其中SY(1)为Y(1)的标准偏差，SX(1)为X(1)的标准偏差，标准偏差为绝对数值，机器很快给出非加权的A(截距)和B(斜率)值，比如：

$$A = 0.321, B = .697$$

然后经过迭代计算，机器给出A，B及误差平方和的值（每迭代一次，该值即自动更新一次）：

$$A = .265, B = .724, S = 2.35$$

机器问是否需要硬拷贝，回答是，则在屏幕和打印机上同时给出以下结果：

$$A = .265, B = .724, S = 2.36,$$

$$SA = .165, SB = .107,$$

$$\text{相关性} = -0.854, \text{相关系数} = .955$$

然后机器又问要否硬拷贝，回答否，则仅在屏幕上显示各组实测X值及计算Y值（所列数据从略）。机器问是否要重复显示，回答否，即退回清单。

若一开始斜率的精确度给得太多（数值太小），可能迭代十次后仍达不到要的精度，这时机器停下来请你提供一个新的迭代初值，输入当时得到的值即可。

I. 程序2.GRAPH

1. 简介。

该程序用于一组有序的X，Y数据的绘图，列表及构造函数。可构成如下函数形式以及它们的组合。

$$\log Z, \ln Z, \exp Z, 10^Z, Z^n,$$

$$Z + n, \sin Z, \cos Z.$$

该程序可以进行一元线性回归及可化成线性回归的一元线性拟合。该程序还可为一阶导数图提供数据表，并进行最小二乘法分析。可以在屏幕上显示数据点，直观地发现可疑点并将其舍弃。

2. 示例。

选入程序后，首先显示一段文字说明，然后机器要求输入横轴变量名和纵轴变量名，各以不超过五个字符为限，本例输入XT和YT。

确认以上输入后显示一段如何输入数据的说明，要求按横轴变量递增的顺序输入，输完数据后打^C。如果数据较多，则每组显示和修改一次。本例输入以下数据：

No	XT	YT
1	1	2
2	2	4
3	3	6 3
4	4	8
5	5	10
6	6	12

确认全部输入数据后，机器列出可供选择的九种函数形式，对横轴变量和纵轴变量都可以多次使用这些形式，以构成所要求的函数形式。本例欲构成XT的对数平方，可首先选形式1 ($\log Z$)，则屏幕显示：你现在的函数形式是：

$$Z = \log(XT)$$

请你进行下一次选择，这时选形式5 (Z^n)，机器又请你输入幂指数N，输入2，则显示现在一函数形式是：

$$Z = (\log(XT))^2$$

这就构成了所需的函数，以选择0结束函数构成，对纵轴变量可以同法处理。

确认函数形成后机器问是否进行最小二乘法处理，视需要作答，机器又问是否要求导数，亦酌情回答，此后屏幕显示出五种选择：

T. 列表和计算；G. 绘图和删除点；F. 构造新函数；D. 进行最小二乘法分析和计算导数；Q. 退出。

选择T，则机器进一步询问列表内容，如欲在屏幕上列

表, 应选择 1, 2, 3 或 4, 欲在打印机上列表, 就选择 5, 6, 7 或 8 (这时屏幕提示你打开印机),

选择 G, 在屏幕上显示图形, 如欲删除某个点, 就打 ^R 并回车, 再给出欲删除点的号码, 该点即被删除, 每次只能删一个点。

选择 D, 屏幕又给出一个子清单: 1. 列出斜率和截距; 2. 列出 XT, YT 值; 3. 列出所构造的函数值; 4. 列出一阶导数的计算值。其中 3, 4 两项与前面回答“导数计算”及“最小二乘法分析”的情况有关。

5, 6, 7, 8 在打印机上给出以上内容。

IV. 程序 3. SIGNIFICANT FIGURE DRILL

这个程序比较简单, 选入后列出四种选择: 1. 有效数字规则; 2. 小测验; 3. 练习; 4. 退出。

有效数字规则勿需赘述。小测验是由用户键入一个数据 (不超过 7 位), 机器能立即回答该数据含有几位有效数字。练习是由机器随机给出一个数据, 由用户回答该数据含有几位有效数字, 若答错, 机器将予纠正。

V. 程序 4. MARQUARDT

该程序用于无法化成直线的曲线的最小二乘法拟合, 所拟合的方程为 $Y = F(X)$, 该方程的形式自 8000 行开始以子程写入。程序可以方便地输入, 存取和修改数据。

可以采用三种不同的加权方法: 等权重, 仪器式和统计式。仪器式加权的原理是权重与噪音的平方成反比。统计式加权是使偏离较远的数据点具有较小的权重。

该程序有三个文件，第一是导引，第二是用于单参数拟合 (MARQUARDT FOR ONE PAR)，第三用于多参数拟合 (MARQUARDT)。

以下通过实例说明该程序的用法。

调入 (LOAD) 程序 MARQUARDT，从 8000 行开始写子程序：

```
8000 REM FUNCTION SUBROUTINE
```

```
8010 YP = Q(1) + Z(1)^2 + Q(2) × EXP(Z(1))
```

```
8020 RETURN
```

子程序中 Q(1) 和 Q(2) 为参数，Z(1) 为自变量。程序开始运行，首先问：欲求几个参数！根据上述子程序，回答：2。

然后机器问：数据是否在磁盘上？初次使用该程序时，磁盘上没有相应的数据文件，应回答：No。则机器要求用户输入数据。首先问数据的误差是常数（绝对数值），一定的比例，或者二者都不是？根据情况回答。字母 A，F 或 N，例如回答 F，即各组数据的相对偏差一定，接着问该值是多少，按实际情况回答。接着开始键入 X，Y 的数据，若上一项选择 N 则偏差也要逐一输入。以 0，0 结束输入。数据输入后屏幕再显示一遍输入的所有数据并给出以下选择：

- | | |
|----------|------------|
| 1. 修改数据； | 2. 增加数据； |
| 3. 删除数据； | 4. 离开该程序段； |
| 5. 修改偏差。 | |

如需修改，则根据进一步信息进行修改。不需要修改则选择4。此例输入的数据如下：

No.	X	Y
1	0.2	2.56
2	0.4	3.46
3	0.6	4.72
4	0.8	6.37
5	1.0	8.43
6	1.2	10.96

修改数据时，必须将一组数据，包括X，Y，偏差S三个数在一行内写完，数字之间用逗号隔开。

确认数据后，机器问数据是否存盘，如需存盘，则应给出文件名。存盘的数据可供下次使用。

然后机器问加权方式：1.仪器式；2.等权；3.统计式。本例选2。

机器自动给出欲求参加的迭代初值，此值一般无须改变，机器开始迭代，出现一组当前值时，应按车键使之继续，中间可能会问是否需要修改MARQUARDT参数值，一般无需修改此值。最后给出各参数计算的结果及误差，若用户需要，还可以列出实测值和计算值的比较。

若结果尚不满意，在机器问是否需要进行下一轮迭代时回答：是。机器问是否修改参数，回答否，又问是否修改数