

7
高等学校教学用书

电子计算机 在化学中的应用

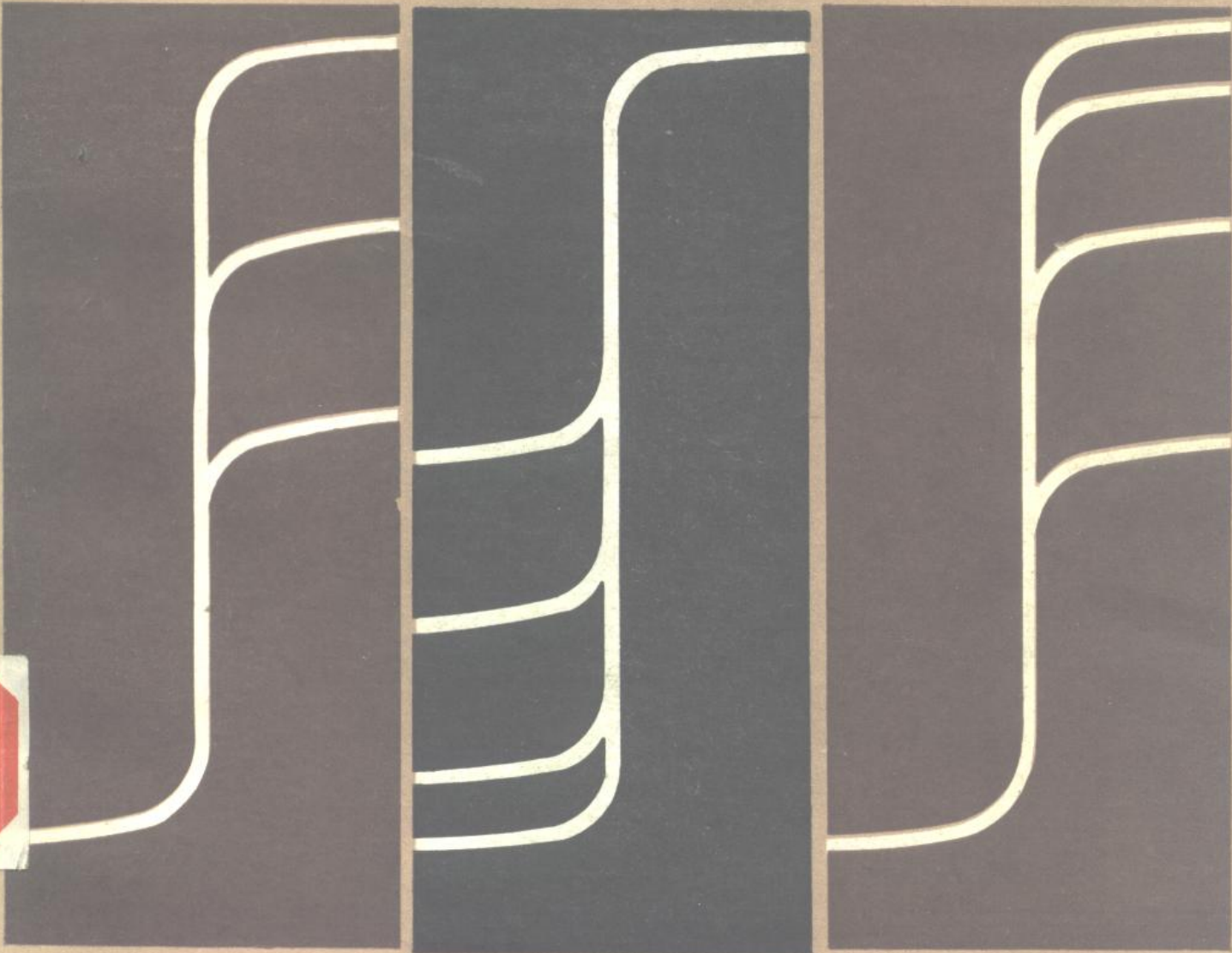
汤定华
郑世钧

于建国
郝金库

编译

刘若庄
朱文祥

审校



北京师范大学出版社

高等学校教学用书

电子计算机在化学中的应用

[美]K.J.Johnson 著

汤定华 于建国 编译

郑世钧 郝金库

刘若庄 朱文祥 审校

北京师范大学出版社

高等学校教学用书

电子计算机在化学中的应用

〔美〕K. J. Johnson 著

汤定华 于建国 编译

郑世钧 郝金库

刘若庄 朱文祥 审校

*

责任编辑 刘秀兰

北京师范大学出版社出版发行

全国新华书店经销

北京朝阳展望印刷厂印刷

*

开本: 787×1092 1/16 印张: 29 字数: 723千

1988年5月第1版 1988年5月第1次印刷

印数: 1—5 000

ISBN7-303-00047-X/O·3

定 价: 4.90 元

内 容 简 介

本书是作者为大学化学系本科生及研究生编译的教材或教学参考书。全书包括五十四个用FORTRAN语言编写的计算机程序，这些程序大部分都结合化学中各分支学科的应用和问题进行讲解，并对每个程序给出了算例，每章都附有习题。在内容安排上作者注意了循序渐进的原则，按由易到难的顺序编排章节。为了使没有算法语言基础和未使用过数字计算机处理化学问题的初学者无困难地使用这本书，作者改编了原书的算法语言部分，增加了内容；其次还结合国内微机比较普及的情况，增加了对微型机的介绍，全书给出的程序都可方便地照搬到微型机上应用。每章后所附参考文献，为读者的深入学习与使用提供了线索。因此本书既可做为高等学校化学系本科生或研究生的教学用书，也可供从事化学教学和研究工作者参考。

JS441/25

前 言

今天, 数字计算机已经变成了化学家最重要和应用最广泛的工具之一, 广大化学工作者迫切需要掌握算法语言和计算机方面的知识。尽管计算机方面的书籍很多, 但专为化学家写的这类书却很罕见。出于这种考虑, 我们编译了这本书。

本书大部分译自K. J. Johnson著的“Numerical Methods in Chemistry”(1980年, Marcel Dekker, Inc)。原书是作者Johnson在美国Pittsburghch 大学为化学系的学生和研究生授课的教材。全书包括54个用FORTRAN语言编写的计算机程序, 这些程序的大部分都结合化学中各分支学科的应用和问题进行讲解, 对于每一个程序还都给出了算例。由于是教材原书选材严谨, 结构布局合理, 每章都附有习题, 并在章末给出了大量参考文献, 以使读者能深入掌握及运用所学的知识 and 技巧。在国外, 原书被认为是适于化学系学生和研究生应用的最易于理解的计算机程序和数值分析的教科书。

原书的程序都是在Dec系统——1099计算机上编写的, 但都可无困难地照搬到微型机上应用, 而微型机在国内已经较为普及。我们在本书的“引言”部分, 对微型电子计算机系统作了简略的介绍, 并结合我们的工作经验, 对微型计算机配备的考虑, 提出了些建议, 以期能对开展这些方面工作的同志有所裨益。

又考虑到大部分的算法语言书偏于求全, 而这对初学者并不是十分必要的, 徒然增加他们的困难和畏惧感, 而原书的FORTRAN语言部分介绍又太略, 所以我们重写了第一章“FORTRAN语言”, 既不是象原书那样太略, 以致读者难以掌握; 也不太繁(象专门讲算法语言的书那样), 以致消耗读者不必要的时间和精力。使初学者通过这章的学习, 能初步掌握FORTRAN语言, 无困难地继续以后章节的学习。

以上我们简单介绍了本书的内容及安排, 我们希望本书能达到我们预想的目的, 为计算机在化学中应用的课程提供一个可用的教材。但由于编译者水平有限, 疏漏甚至错误在所难免, 还望专家及读者予以指正。

编译者

87年2月3日

序

1985年,颁布了“中共中央关于教育体制改革的决定”,其中阐明了教育、人才、建设三者的依赖关系,指出关键在于人才,而人才的培养在于教育。小平同志在1983年10月1日为景山学校的题词中,提出“教育要面向现代化、面向世界、面向未来。”电子计算机在科学技术中的普及和应用,正是现代化的一个重要方面。为了能在科技事业中做到这点,就需在培养人才时,把电子计算机的原理及应用安排在教学计划中。我国各大学的化学系已初步考虑了如何为化学系学生开设电子计算机在化学中应用的课程。但现在尚缺这方面的教材。美国K.J. Johnson 所著“Numerical Methods in Chemistry”(化学中的数值方法)即是该书作者为美国Pittsburgh大学化学系本科生及研究生讲授此种课程的教材。为了满足当前我国的需要,天津师范大学汤定华、北京师范大学于建国、河北师范学院郑世钧及天津师范大学郝金库这几位具有用电子数字计算机进行教学和科研的实际经验的同志合作编译了这本书。在编译过程中,考虑到原书在算法语言部分写得过略,并将这部分改写,增添了内容;其次结合我国微机比较普及的情况,而原书又未涉及微机的讨论,故增加了微机的介绍,因此本书可能更适合我国目前的需要。我希望这本书的出版,能为我国在化学领域使用计算机水平的提高起到推动作用。也愿借此向为这本书的出版而付出辛勤劳动的北京师范大学出版社的同志们致以深深的谢意。

刘若庄

1987年2月1日

于北京师大化学系

目 录

引言 微型电子计算机简介	(1)
0.1 微型电子计算机系统	(1)
0.1.1 微处理器	(1)
0.1.2 存贮器及输入、输出系统	(2)
0.2 软件及语言	(5)
0.3 配备微型计算机的考虑	(6)
第一章 FORTRAN 语言	(8)
1.1 FORTRAN 的历史和现状	(8)
1.2 FORTRAN语言基础	(8)
1.2.1 基本符号	(9)
1.2.2 常数	(9)
1.2.3 变量和说明语句	(11)
1.2.4 FORTRAN函数	(12)
1.2.5 运算符和表达式	(12)
1.3 控制语句	(15)
1.3.1 转移语句GOTO	(15)
1.3.2 条件语句 IF	(16)
1.3.3 循环语句 DO 和继续语句 CONTINUE	(17)
1.3.4 其它控制语句	(18)
1.4 输入输出语句 I/O	(19)
1.5 过程	(21)
1.5.1 语句函数	(21)
1.5.2 函数子程序 FUNCTION	(22)
1.5.3 子程序辅程序 SUBROUTINE	(23)
1.6 数据联系语句与数据初值语句	(24)
1.6.1 等价语句 EQUIVALENCE	(24)
1.6.2 公用语句 COMMON	(25)
1.6.3 数据初值语句 DATA 和数据块辅程序 BLOCK DATA	(26)
1.7 编制程序的技巧和注意事项	(27)
1.7.1 舍入误差和截断误差	(28)
1.7.2 调试程序的技巧	(30)
1.7.3 编制FORTRAN程序时易犯的错误	(30)
1.7.4 优化程序和提供文件	(31)
第二章 具有封闭形式算法的计算程序	(34)
2.1 PLOT	(34)
2.2 ABCKIN	(40)
2.3 SOL	(45)

2.4	NERNST	(53)
2.5	RADIAL	(59)
2.6	CONTOUR	(63)
2.7	EQUIL	(83)
2.8	NMR	(91)
2.9	TITR	(111)
2.10	补充习题	(120)
	参考文献	(121)
第三章	方程的根	(123)
3.1	封闭形式的解	(124)
3.1.1	EDTA	(125)
3.1.2	VDWGAS	(132)
3.2	二元对分法	(137)
3.2.1	BINBIS	(138)
3.2.2	BOX	(141)
3.3	NEWTON-RAPHSON方法	(149)
3.3.1	NEWTON	(151)
3.3.2	HNA	(154)
3.3.3	HNATRN	(162)
3.3.4	GASEQ	(174)
3.4	补充习题	(179)
	参考文献	(181)
第四章	线性联立方程组	(183)
4.1	Cramer规则	(183)
4.2	Gauss-Seidel法	(184)
4.2.1	GAUSEI	(187)
4.3	消去法	(191)
4.3.1	GAUJØR	(193)
4.3.2	矩阵求逆	(197)
4.3.3	LINSYS	(199)
4.4	非线性方程组	(205)
4.4.1	ITERAT	(206)
4.4.2	COMPLX	(211)
4.5	补充习题	(219)
	参考文献	(222)
第五章	回归分析	(224)
5.1	线性回归分析	(225)
5.1.1	LINEAR	(227)
5.2	多项式回归分析	(232)
5.2.1	POLREG	(233)

5.2.2 FORSY	(246)
5.3 曲线修匀	(254)
5.4 非线性回归分析	(257)
5.4.1 NONLIN	(260)
5.5 补充习题	(272)
参考文献	(276)
第六章 数值积分	(281)
6.1 梯形法	(281)
6.1.1 TRAP	(283)
6.2 辛普森法	(286)
6.2.1 SIMP	(286)
6.3 科茨数	(289)
6.4 高斯求积分法	(291)
6.4.1 高斯-勒让德多项式	(291)
6.4.2 GAULEG	(294)
6.4.3 高斯-拉盖尔求积分法	(297)
6.4.4 高斯-厄米求积分法	(299)
6.4.5 高斯-车贝雪夫求积分法	(300)
6.5 蒙特-卡洛法	(303)
6.5.1 MONCAR	(304)
6.6 补充习题	(306)
参考文献	(309)
第七章 微分方程	(311)
7.1 欧拉法	(312)
7.1.1 EULER	(314)
7.2 龙格-库塔法	(317)
7.2.1 RUNKUR	(319)
7.3 预测-校正法	(322)
7.3.1 PRECOR	(323)
7.4 微分方程组	(327)
7.4.1 RUNGE	(330)
7.4.2 EXCHG	(336)
7.5 高阶微分方程	(346)
7.5.1 SCHRO	(347)
7.6 蒙特-卡洛法	(355)
7.6.1 MONTE	(357)
7.7 补充习题	(362)
参考文献	(364)
第八章 本征值和本征向量	(367)
8.1 行列式求值法	(367)

8.2 JACOBI法	(388)
8.2.1 JACOBI	(373)
8.2.2 ENTROPY	(380)
8.3 NMR 图谱的模拟	(388)
8.3.1 ABC	(388)
8.4 HÜCKEL分子轨道理论	(396)
8.4.1 HMO	(401)
8.5 补充习题	(407)
参考文献	(408)
第九章 杂论	(410)
9.1 绘图术	(410)
9.1.1 CPLOT	(410)
9.2 电子计算机辅助教学(CAI)	(421)
9.2.1 人机对话(CAI)	(422)
9.2.2 模拟和数据简化程序	(423)
9.3 计算机辅助考试(CATC)	(425)
9.4 计算机管理教学(CMI)	(427)
9.4.1 GRADER	(427)
9.5 实验室中的计算机	(438)
9.6 人工智能和信息检索	(438)
参考文献	(439)

引言 微型电子计算机简介

微型电子计算机 (micro-computer) 价格低廉和操作便利, 而且随着性能的不断改进, 功能也日益接近大型计算机, 因此微型机目前在各个领域都得到迅速推广和普及。虽然本书介绍的程序都是基于 DEC 系统-10 计算机编写的, 但从所需计算机内存和运算速度来看, 无例外地也可方便地在微型电子计算机上得到实现。这里我们先简要地介绍一些有关微型电子计算机系统的基本概念和基础知识, 以便读者能更好地了解 and 运行本书介绍的各种程序。

0.1 微型电子计算机系统

对于微型电子计算机系统和微处理机的概念, 往往易被混淆。通常所说的微型计算机是指一个完整的系统而言的, 它与大、中型计算机系统一样, 包括中央处理器和输入输出设备、内、外存贮器等外围设备。所谓微处理机是指一套完整的微型计算系统的核心, 即中央处理器 (CPU)。

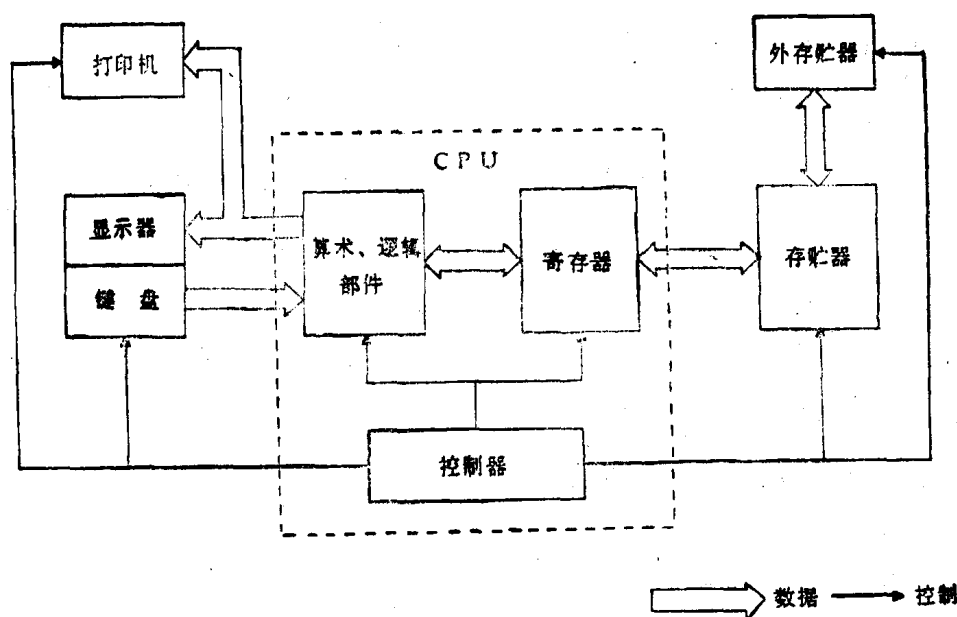


图0.1 微型电子计算机系统的基本构件

0.1.1 微处理器

中央处理器由算术逻辑部件, 寄存器和控制器构成, 这些部件往往制做在一块或几块大规模集成电路芯片上。控制器由指令计数器和指令寄存器组成, 它们可以按照由人们预先设计的指令控制其它部件的操作、运算。算术逻辑部件由累加器和加法器构成, 它采用模拟的方式, 相当于一个具有“电键”的超级加法机, 而其“电键”由指令译码器控制。算术逻辑部件

处理的是二进制数码。寄存器分为指令寄存器和地址寄存器。在计算机中每一个数，每一个指令，都存放在一个具有确定地址的单元。这样的每一个单元，都由一个地址码和8个（或16个）二进制“存贮基元”构成，一般以这8个“存贮基元”构成一个“字节”(byte)*。地址寄存器存放每个存贮单元的地址。在运行过程中，控制部分首先从其中搜索到指令或数据的地址，然后按该地址再从指令寄存器索取指令，从寄存器中索取数据。

从事科学计算工作时，对微处理器的选择，主要考虑以下几点：

(1)字长，它直接影响到某些公用软件的微观效率，一般说来，字长越长的处理器，其程序设计的简易性越强，使得计算机的功能越强。而字长较短的微处理器，会造成运算的精度不足。

(2)频率，这里指处理器的存取频率，显然这一频率越高，运算速度会越快。此外，寻址方式，加法时间也会影响运算速度。

(3)兼容性，显然一个微处理器与更多的其它类型处理器兼容性越强，就能给使用者在软件开发，提高效率方面带来更多的便利。

当然，进一步考查一个微处理器性能的优劣，还要包括如主时钟、寻址能力、寄存器组等多方面的因素。

微处理器是随半导体技术、大规模集成电路工艺的飞速发展而发展起来的。1958年美国德克萨斯仪器公司研制出第一个集成电路的样品，随后出现了平面工艺技术。1961年在美国开始大批量生产集成电路，到1971年，在大规模集成电路技术取得了显著成效之后，第一片微处理器4004由(美)英特尔公司研制成功。不过当时仅用于军事技术及台式计算器上，第二年英特尔公司生产了第一个通用8位8008微处理器，这被称之为第一代微处理器。1973年英特尔公司又研制生产了8080微处理器使之成为一个通用性及功能很强的微处理器，随后一些其它半导体器件公司如莫托洛拉公司的6800，洛克威尔公司的PPS-8，西格奈蒂克斯公司的2650相继问世，成为第二代微处理器产品。近年来蔡洛公司的Z-80，英特尔公司的8086，8088，仙童公司的F8等具有更高性能的微处理器成为第三代产品。最近，80186,80286,80287...等微处理器已经问世，它是采用一块芯片代替整块的电路板，使之不只是一个微处理器，而成为一个较完整的系统。这样不仅提高了整机的可靠性，稳定性，提高了各项性能指标，而且将带来整机价格的下降，因此它将成为新一代产品。

0 1.2 存贮器及输入、输出系统

一个微机系统都包括有内存贮器（简称内存）和外存贮器（简称外存）。内存贮器也是由一块或数块大规模集成电路板构成。一般在书本一半大的板上，可以存贮16 000字节(16KB)或32 000字节(32KB)。

内存贮器分为只读存贮器(ROM)，它只能存放微程即控制软件和随机存贮器(RAM)，它用来存放程序及数据。ROM空间的大小，决定了计算机控制软件是否丰富及功能优劣。RAM空间的大小，将决定程序及数据的存贮量。一个微型机的RAM是可以扩充的，一般增加一

* 二进制“存贮单元”，亦即二进制位(bit)，一字节(byte)为八位，一个字(Word)为16位，一个长字(Long Word)为32位。本书原作者所用的DEC系统-10计算机系列是美国数字设备公司(DEC)于1971年开始宣布的计算机系列，字长36位。本书各章所提及的“字”均指字长为36位的字，请读者注意。——译者注

块RAM扩充板,可扩大内存16~32KB,较大容量的微型机,增加多块RAM扩充板,存贮容量可达到256KB~1M(兆)B以上,一般把微处理器连同内存贮器一起称为微型机的主机。

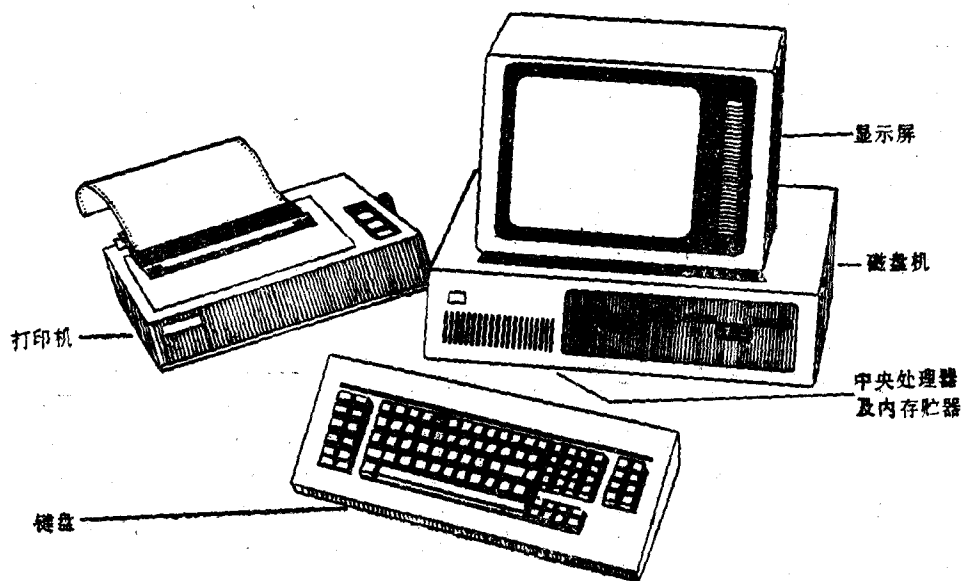


图0.2 一套微型机系统

微型机的外存贮器一般采用磁软盘、硬盘系统。软盘系统包括一至多个磁盘驱动器。磁软盘分为5 $\frac{1}{4}$ 吋及8吋两种,而且每种尺寸的磁软盘又分为单面单密度,单面双密度,双面双密度

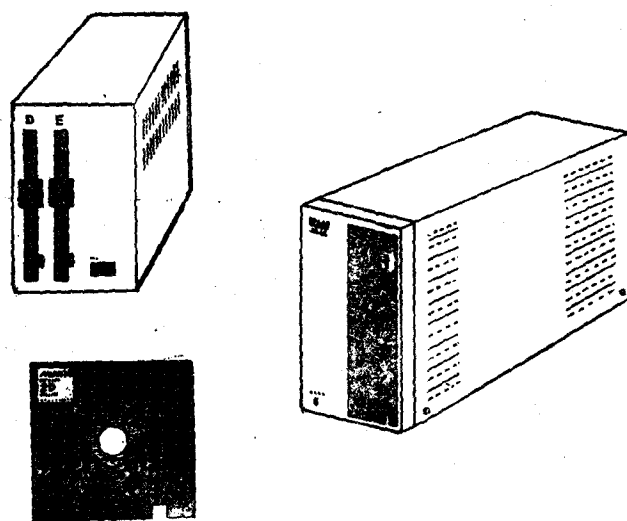


图0.3 磁软盘和磁软盘驱动器

等多种规格。一般每片磁软盘可存贮124KB~256KB,较高档的微型机还带有硬盘系统。目前最常见的是温彻斯特硬盘系统,它包括一个5 $\frac{1}{4}$ 吋或8吋的硬磁盘及温彻斯特硬盘驱动器,一个硬盘系统的存贮容量可达几十到几百兆(byte)。硬盘系统比软盘系统存取速度要快,操作便利,但它要求较高的工作条件(温度、湿度)。

微型机一般采用键盘输入。不同厂家生产的键盘形式略有差异,一般键盘都具有60~90个键,其中有0~9十个数字键,A~Z二十六个字母键,其排列方式与一般英文打字机相同,此外还有若干符号键及特殊功能键。

显示器(CRT)可以显示输入输出信息,显示运算过程及结果。不过一般把显示器包括在输出系统中,现较多见的是单色(黑、绿、)显示器及彩色显示器,也有用普通电视机代用的。一般显示器的屏幕上可显示20~25行,每行60~80个字符。

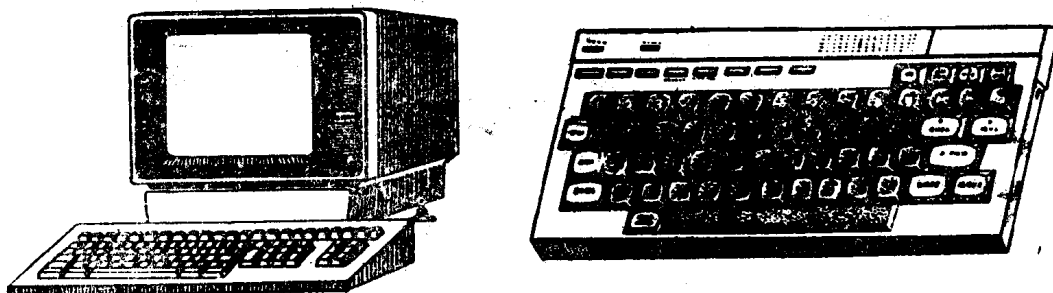


图0.4 键盘和显示器

输出系统还包括打印机、绘图仪、磁带机等。一般微型机系统配有网点式(点矩阵式)打印机,每个字符采用 9×9 矩阵,每行可打印80~132个字符,高档微型机可配有快速宽行打印机,一般微型机配有盒式磁带机(高档录音机)。

上面所介绍的微处理器,存贮器及输入输出系统均称为计算机“硬件”。

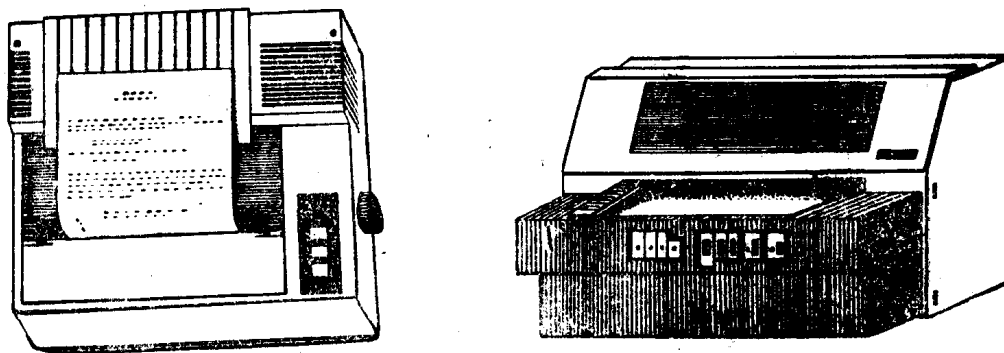


图0.5 打印机(左: 网点式、右: 宽行机)

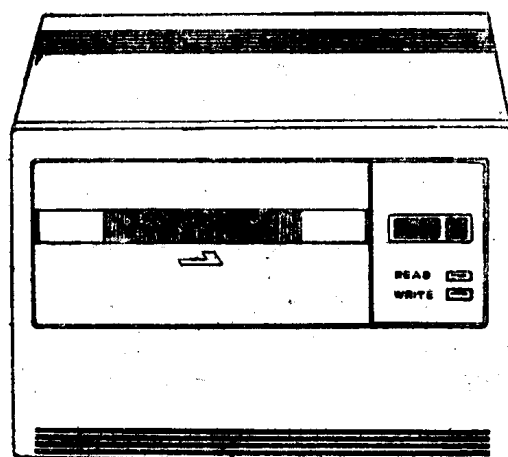


图0.6 盒式磁带机

0.2 软件及语言

对于电子计算机来说,所谓软件是指人们给机器规定、安排运算(操作)步骤的一系列指令。这些指令,一类是由生产厂家所设计、安排存贮在计算机内部的,譬如微处理器中的微程序,或者存贮在磁盘中,随启动机器后而调入主机中的,譬如各种语言的编辑、解释程序。另一类是运算者按照自己的目的,按照一定语言规则编写的程序。不过对于一些常用的运算程序、实用管理程序等,往往由厂家或其它部门编制之后存贮在磁盘或者某个可与主机联接的模块中,俗称为“程序包”或程序库。一个微型机的软件支援是否丰富,是指能够与之配合的功能软件的多寡及程序库的大小。一般软件支援较丰富的微型机均配有操作系统软件、语言软件、通讯软件、文字软件(在我国,目前许多微机配有汉字软件),及科学计算、事务管理程序库。

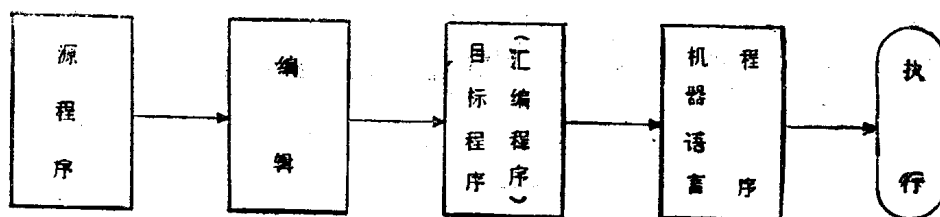
电子计算机语言是把人们所要进行运算的指令传递给计算机的媒介。它分为机器语言、符号语言和程序设计语言。

机器语言是用二进制数0和1编写的指令串,这是最早使用的机器语言。它的编写过程是十分困难的,而且极易出错,符号语言则是采取一些符号来代替二进制数码,它比机器语言进了一步,但也存在难编、难读、易错等缺点。程序设计语言(或称算法语言),它是在前两种语言基础上发展产生的。用这种语言编写程序是很方便的,同时易于检查,易于阅读,通用性强。但是这种语言中的各种语言都有一定的针对性。使用这种语言编写的程序其运行速度要低于机器语言或符号语言。

所谓程序是指人们为了一定的运算目的,用一定的语言,按一定的规则编写的一系列指令串。用程序设计语言编写的程序叫源程序,我们一般所说的程序就是这种源程序。一个源程序输入计算机后要经过编辑和解释的过程,形成机器可以执行的指令。

目前在一般微型机上所配备的高级语言系统软件有: COBOL、BASIC、FORTRAN、PASCAL等。

COBOL (Common Business Oriented Language)语言是专用于事务管理的一种通用语言,通常用于报表统计,事务管理等方面。



BASIC (Beginner's All-purpose Symbolic Instruction Code) 语言, 可翻译为“初学者通用符号指令代码”。这种语言功能较强, 简单易学。目前在微型机上使用得比较普遍。但是这种语言是一种解释性语言, 计算机在执行中要按源程序逐句解释执行, 因此运算速度很慢。对于一些较大的, 计算较复杂的源程序, 不宜采用这种语言编程。

FORTRAN (Formula Translator) 语言, 意为“公式翻译”语言。这是目前在从事科学计算中, 无论在大中型电子计算机还是微型机中普遍采用的语言。这种语言通用性强、编写方便、语法严格, 整个程序是块状结构, 便于检查和编辑, 目前以这种语言为基础的软件十分丰富。比较流行的 FORTRAN 语言有 FORTRAN-IV, FORTRAN77, FORTRAN10 等等。本书所介绍的程序均是以 FORTRAN10 语言编写的。有关 FORTRAN 语言, 将在第一章中作进一步介绍。

近年来发展起来了一种高级语言 PASCAL 语言。这种语言的功能很强, 它不仅可以用于科学计算, 也可用于事务管理。据有关专家分析, 这是一种很有发展前途的语言。

0.3 配备微型计算机的考虑

随“计算化学”(Computational Chemistry)或“计算机化学”(Computer Chemistry)的发展, 大学化学系对微型计算机的需求越来越迫切。目前在化学系, 微型机的应用包括以下几个方面: (1) 学生学习计算机语言及程序设计的实习, (2) 配合“计算化学”或“计算机化学”教学的计算实验课, (3) 配合各种精密仪器的数据处理, (4) 计算机辅助教学 (CAI) 以及计算机管理教学 (CMI), (5) 计算化学方面的科研工作, (6) 仪器设备、试剂、器材的管理。目前各院校的化学系也都正在配备微型机, 下面提供一些参考的意见, 以供在配备微型机过程中加以考虑。

目前国内作为商品的微型机可以分为三个档次: 低档微型机, 价格约在 1 万元 (人民币) 左右, 8 位机, 内存在 32KB, 带有磁软盘系统, 譬如目前在国内销售较多的苹果-I 型、TRS-80 型微型机系统; 中档微型机, 价格约在 5 万元左右, 8 位机或准 16 位机, 带有软、硬盘系统, 内存可扩充到 256KB~512KB, 譬如 IBM-PC、IBM-PCXT、长城 520, Victor 9000 等; 高档微型机, 价格在 10 万元以上, 准 32 位机、32 位机, 内存可扩充到 1~2 MB, 带有软、硬盘系统, 多用户系统, 接近小型电子计算机 (Minicomputer) 的功能, 譬如 BCM-S68000 等。从目前情况出发, 作为学生学习算法语言及程序设计以及“计算化学实验”用, 宜采用多部低档微型机。对于计算化学的研究工作宜采用中档或高档微型机。当然, 有条件的也可以考虑采用小型计算机, 如, PDP 系列, VAX 系列等。

在选则微型机时, 从化学系的需要出发, 主要考虑以下几项指标:

(1) 内存 一般指 RAM 空间。一般本书所介绍的程序所占内存都不大, 低档微型机就足

够了。但是有些程序需要较大的内存，譬如计算量化方面，一个较完整的半经验自洽场分子轨道法程序（包括形成目标程序之后）要占内存64KB以上。因此对于这方面的工作，低档微型机就受到了限制。

(2)外存 主要指软、硬盘系统。前面已介绍了一张磁盘具有较大的存贮容量，借助它们可以大大提高计算机的存贮能力。因此那些需要较大信息量存贮的工作，譬如，谱图、数据的存贮、检索，要考虑计算机的外存能力。

(3)性能价格比 微型机技术发展很快，平均两三年就会有新一代的产品。因此选择那些性能好而价格低的微型机也是一个必须考虑的方面。微型机的功能优劣主要表现在其中央处理器（CPU）的优劣，而且还决定于整机的兼容性。兼容性好的微型机有利于使用者之间的软件交流、软件开发，而且为进一步系统联机奠定基础。

(4)软件支援 一个好的微型机系统应当具有丰富的软件，语言系统软件最少应配有BASIC、FORTRAN、COBOL及PASICAL系统。同时还要有丰富的数学程序库。

表0.1 IBMPC型（长城520型）微型机的性能指标

PC-1	PCXT	
· 存储器容量： 64KB可扩充至 640KB · 外周存储器： 可选置一至二个5$\frac{1}{4}$吋单面双密度 (160/180KB)或双面 双密度(320/360KB) 磁软盘驱动器。 扩展插座 5个。	· 存储器容量 128KB可扩充至 640KB · 外周存储器： 一个5$\frac{1}{4}$吋双面双 密度磁软盘驱动 器，一个5$\frac{1}{4}$吋 硬盘驱动器。 · 扩展插座： 8个。	· 只读存储器(ROM) 40KB · 微处理器： 16—BIT(8088)，高速。 · 键盘： 83键，183厘米的电缆连接到主体电脑，10 个功能键，10个数字键盘。 · 单色显示器： 高清晰度，高分辨率(720h×350V)25行，每 行80字，可显示256个字母及符号，防眩目 绿磷体屏幕，字符矩阵7×9。 · 图形打印机 双向打印，每秒80字，12字款，每行可排达 132字母，9×9矩阵，可图形方式打印。 · 检测系统： 开机自检，奇偶校验。 · 操作系统： DOS，UCSD—PSYSTEM，CP/M—86 · 语言： BASIC，COBOL，ASSEMBLER，FOR- TRAN，PASCAL，APL，LOGO

目前，我国引进的微型机生产流水线所生产的微型机，在软件配备上考虑了我国的国情，一般都具有丰富的软件支援，同时还会向用户继续提供更多的软件。特别是我国生产的微型机大都配有汉字系统软件，这对于事务管理等方面的工作是很有利的。