

高等学校教材

计算机在分析化学中的应用

武汉水利电力大学 钟金昌 主编



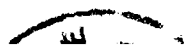
0652.9

44
7

高 等 学 校 教 材

计算机在分析化学中的应用

武汉水利电力大学 钟金昌 主编



中 国 电 力 出 版 社

内 容 提 要

本书程序设计采用 QBASIC 语言, 为便于读者迅速熟悉此语言, 在第一章及附录中介绍了 QBASIC 集成环境, QBASIC 基本语句和绘图语句, 以及程序设计和测试的一般方法。第二章介绍 QBASIC 查标准偏差, 显著性检验, 线性回归, 均值, 极差控制图等内容上的应用。第三至第五章介绍分析化学中有关计算, 作图和应用程序, 例如酸碱混合液的 pH 值, pH 分布系数, 缓冲容量, EDTA 酸效应系数等的计算, 各种滴定曲线的绘制, $\lg K_{\text{MY}}^{\text{稳}}$ 与 pH 关系图, $\lg \alpha_{\text{Y}}^{\text{H}}$ pH 图, 铜铈水杨醛磷酸盐控制图, 实验室分析质量评价 (或考核), 允许差测定等。所有程序均附有程序说明。

本书可作为应用化学专业或其他化学专业的选修教材, 也可供有关院校师生及各厂矿从事分析化学工作的人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在分析化学中的应用/钟金昌主编. —北京: 中国电力出版社, 1997
高等学校教材
ISBN 7-80125-306-X

Ⅰ. 计… Ⅱ. 钟… Ⅲ. 计算机应用—分析(化学)—高等学校—教材 X.665.2.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (97) 第 04600 号

中国电力出版社出版

(北京三里河路 6 号 邮编 100044)

(河南水利局印施工印刷)

新华书店北京发行所发行, 各地新华书店经销

*

1997 年 10 月第 1 版 1997 年 10 月北京第一次印刷
787 毫米 × 1092 毫米 16 开本 7.875 印张 171 千字
印数 0001—1100 册 定价 7.50 元

版 权 专 有 翻 印 必 究

(本书如有印装质量问题, 我社发行部负责退换)

前 言

本书是根据编者在武汉水利电力大学多年讲授“计算机在分析化学中的应用”选修课时积累的 BASIC 程序基础上改编而成的。这次改编时,我们选用了 QBASIC 语言。此语言吸收了 FORTRAN、PASCAL、C 及 Ada 等语言的优点,克服了原来 BASIC 结构化程序差和运算速度慢的缺点。它是一种功能强、易学习的程序语言。从难度上看,它和 BASIC 差不多,从完善角度看,可以和 PASCAL、FORTRAN 及 C 语言相媲美,使用起来十分方便。它与其他 BASIC 相比,其显著优点就是大大地改进了编程环境,每输入一个程序行,马上就能对其进行语法检查。如果没有语法错误,则该行程序即被翻译成可执行的代码,否则给出错误信息,进行修改后再翻译成代码。因此,在 QBASIC 环境中,不存在单独进行编译这一步。

本书对 QBASIC 语言除在第一章绪论中作简单介绍外,还在附录一中作了图形功能的补充,其余与普通 BASIC 差不多者,不再一一详述。

本书着重实际应用,对每个应用程序都作了扼要说明,以便读者能真正理解,并能自己动手修改程序及扩大其应用范围。我们相信,通过读者的实践和努力,会迅速地掌握其内容,并将其应用于自己专业的许多研究工作中。

本书可与原水利电力出版社出版的高等学校教材《分析化学》(钟金昌编)配套使用,不但可巩固分析化学所学内容,而且可加深其内容的理解,特别在提高计算技能方面是十分有益的。

本书由武汉水利电力大学钟金昌、杨万生、赵宗敏编写,钟金昌担任主编。本书承蒙中国科技大学化学物理系张懋森教授审阅全稿,提出了许多宝贵意见;在编写过程中还得到曹顺安的诸多帮助,在此一并表示感谢。

由于编者水平有限,书中如有遗漏和错误之处,敬请读者随时提出批评和指正,编者将不甚感激。

编 者

1995 年 6 月

目 录

前 言

第一章 绪论	1
第一节 计算机在分析化学中的应用	1
一、数值计算和数据处理	1
二、自动控制	1
三、数据库和计算机辅助设计	1
第二节 计算机在解题过程中的误差问题	2
一、实验误差	2
二、计算误差	2
第三节 QBASIC 集成环境	3
一、操作系统软件	3
二、QBASIC 是 BASIC 的一个独特版本	3
三、QBASIC 集成环境	4
第四节 QBASIC 程序设计初步	6
一、QBASIC 字符集	6
二、程序行	7
三、QBASIC 的数据类型	8
四、QBASIC 变量的构成	9
五、QBASIC 表达式与运算符	9
第五节 常用绘图语句	11
一、文本方式与图形方式	11
二、常用绘图语句	11
第六节 QBASIC 程序设计与调试	13
一、QBASIC 新增加的功能	13
二、QBASIC 程序设计的一般方法	14
三、QBASIC 程序调试技术	16
第二章 测量误差和数据处理	17
第一节 标准偏差和方差	17
一、计算标准偏差和方差的数学模式	17
二、求平均值、标准偏差、方差的程序	17

三、程序 (PRO 2-1-1) 说明	18
四、程序 (PRO 2-1-1) 应用举例	18
第二节 置信限或置信区间	18
一、计算置信限的数学模式	18
二、计算置信限的程序	19
三、程序 (PRO 2-2-1) 说明	19
四、程序 (PRO 2-2-1) 应用举例	19
第三节 显著性检验	19
一、 F 检验法	20
二、斯图滕 t 检验法	21
第四节 线性回归	23
一、计算线性回归方程的数学模式	23
二、求 a, b, r 的计算程序	24
三、程序 (PRO 2-4-1) 说明	25
四、程序 (PRO 2-4-1) 应用举例	25
五、分光光度法实验报告通用程序	25
第五节 误差正态分布曲线	30
一、计算误差正态分布曲线的数学模式	30
二、绘制误差正态分布曲线的程序	31
三、程序 (PRO 2-5-1) 说明	31
第六节 均值-极差控制图	32
一、有关统计量计算的数学模式	32
二、均值-极差控制图程序	33
三、程序 (PRO 2-6-1) 说明	35
第三章 酸碱平衡的计算及作图	38
第一节 pH 分布系数	38
一、计算 pH 分布系数的数学模式	38
二、计算多元酸分布系数的程序	39
三、程序 (PRO 3-1-1) 说明	39
四、程序 (PRO 3-1-1) 应用举例	40
五、磷酸 pH 分布系数曲线	40
第二节 酸碱混合液的 pH 值计算	42
一、酸碱混合液 pH 值计算的数学模式	42
二、编写计算酸碱混合液 pH 值的程序	43
三、程序 (PRO 3-2-1) 说明	43
四、程序 (PRO 3-2-1) 应用举例	44
第三节 缓冲容量的计算及作图	44

一、计算缓冲容量的数学模式	44
二、计算缓冲容量的程序	45
三、程序 (PRO 3-3-1) 说明	46
四、缓冲容量的作图	46
五、程序 (PRO 3-3-2) 说明	48
第四节 酸碱滴定曲线	49
一、强碱滴定强酸	50
二、强碱滴定一元弱酸	52
三、强碱滴定二元弱酸	55
第四章 EDTA 络合物的有关计算及作图	59
第一节 EDTA 的酸效应系数	59
一、计算酸效应系数的数学模式	59
二、 $-\lg\alpha_Y$ -pH 关系图程序编写	60
三、程序 (PRO 4-1-1) 说明	60
四、程序 (PRO 4-1-1) 应用举例	61
第二节 EDTA 络合滴定曲线	61
一、EDTA 滴定曲线的数学计算模式	62
二、M-EDTA 络合滴定曲线程序	63
三、程序 (PRO 4-2-1) 说明	64
四、络合滴定曲线的实际应用	65
第三节 $\lg K'_{MY}$ -pH 关系图	67
一、 $\lg K'_{MY}$ -pH 关系的数学模式	67
二、编制 $\lg K'_{MY}$ -pH 关系图的程序	68
三、程序 (PRO 4-3-1) 说明	71
第五章 其它应用	73
第一节 全碱度、总碳酸盐浓度与 pH 值的关系	73
一、全碱度、总碳酸盐浓度与 pH 关系的数学模式	73
二、求全碱度、总碳酸盐浓度与 pH 关系的程序	74
三、程序 (PRO 5-1-1) 说明	75
第二节 $-\lg c$ -pH 图	76
一、编程的数学模式 (以碳酸盐为例)	76
二、编写绘制碳酸盐的 $-\lg c$ -pH 图的程序	76
三、程序 (PRO 5-2-1) 说明	77
第三节 求误差正态分布曲线覆盖的面积	78
一、用 e^x 的展开式求积分值	78
二、求误差正态分布曲线覆盖面积的程序	79
三、程序 (PRO 5-3-1) 说明	79

第四节 炉水协调磷酸盐控制图	80
一、炉水协调磷酸盐控制的数学模式	80
二、绘制炉水协调磷酸盐控制图的程序	80
三、程序 (PRO 5-4-1) 说明	81
第五节 氧化还原电位滴定曲线	82
一、高锰酸钾滴定亚铁离子电位计算的数学模式	82
二、亚铁离子+高锰酸钾的滴定曲线程序编制	84
三、程序 (PRO 5-5-1) 说明	85
第六节 实验室分析质量评价	86
一、分析质量评价的数学模式	86
二、分析质量评价程序	87
三、程序 (PRO 5-6-1) 说明	89
第七节 用协同试验数据制定允许差	91
一、概述	91
二、允许差制定中所应用的数学模式	91
三、允许差制定程序	92
四、程序 (PRO 5-7-1) 说明	95
附录一 QBASIC 的图形功能简介	99
附录二 常用 QBASIC 语句和函数	106
附录三 出错信息	111
参考文献	117

第一章 绪 论

现代化学发展的主要趋势之一，就是计算机在化学的各个分支中的广泛应用。分析化学是化学中最活跃的领域之一。随着计算机的普及，计算机在分析化学中的应用日益广泛，并对分析化学的教学和研究工作起着很大的促进作用。

第一节 计算机在分析化学中的应用

计算机在分析化学中的应用领域十分广阔，大体上可以分为以下三个方面。

一、数值计算和数据处理

用计算机分析解决问题和处理数据速度快、精度高。因此，它在分析化学中的主要用途之一就是进行数值计算和数据处理。

在使用计算机以前，在分析化学的理论研究中经常使用简化处理的方法。例如，有关溶液平衡的处理，总是忽略一些较为次要的因素，根据不同情况导出不同的近似公式，再用人们习惯的方式去求解。对于稍为复杂一点的体系就束手无策了。而用计算机来处理这些问题则易如反掌。

在实验数据处理中使用计算机，除了节约时间外，还可以得到更多的信息，这对实验研究的帮助很大。计算机辅助定量分析可以克服和消除干扰，实现多组分同时测定，是分析、解决复杂问题的一条有效途径。

二、自动控制

计算机可以提高分析仪器的自动化程度，增强仪器的自诊断能力；保证仪器运行的可靠性；扩充仪器的数据处理功能；提高仪器的工作效率；降低操作人员的劳动强度。在分析化学实验仪器中，大到核磁、红外、紫外等大型分析仪器设备，小到滴定管、移液管等，都可由计算机来控制。计算机在分析仪器的自动化、智能化方面起着巨大的作用。

三、数据库和计算机辅助设计

化学是一门古老的学科，其数据量是极其庞大的，分析化学的数据在其中占有很大的比例。一个化学工作者无论如何也不可能凭人工在短期内查阅如此浩瀚的资料。但这个工作可以由计算机来完成，而且计算机还可以按照用户的意图，从它保存的资料中经过筛选比较，然后将最合用的资料检索、打印出来，或根据用户提供的数据将查得的最可能的实验方案告知用户，由此减少的工作量是无法估计的。

此外，计算机还可作为分析化学的教学辅助设备，使得教学更加生动、形象，便于学生理解。

近年来，我们将计算机应用于教学和科研中，取得了一定经验，编制了一些分析化学应用程序。将这些程序大力推广，对推动计算机在分析化学中的应用研究，将起着积极的

促进作用。

第二节 计算机在解题过程中的误差问题

在解决问题的过程中,误差总是存在的,这将直接影响计算结果的准确度,有时甚至会得出错误的结论。引起误差的原因大致有以下几种。

一、实验误差

由于实验方法、实验所用的仪器、试剂等客观因素以及操作人员的主观因素不同,实验数据总会存在一定的误差。例如,分析天平称量结果的误差不小于 0.1mg;用分光光度计测量的结果常有 2%~5%的误差;一般分析化学试剂的纯度只有 99.5%;在计算中引用的酸、碱离解常数有 5%左右的误差,等等。这些都将导致计算结果产生一定的误差。

二、计算误差

在科学技术领域中,许多实际问题最终都归结为数学问题。为了获得所需的结果,必须将实际问题转化为数学模型,然后进行计算。计算必须依靠工具进行,现代化的计算工具主要是电子计算机。而不管多高精度的计算机,都只能取有限位数值进行计算。在计算过程中,由于种种因素的限制,理想的准确值往往很难得到,常用与准确值相近的近似值来代替准确值,由此而产生的差异称为计算误差。

一般情况下,计算误差与实验误差相比是可以忽略的。但当计算次数很多或使用不完善的方程运算时,计算误差就显得很重要。计算误差通常是由以下原因引起的。

1. 模型误差

由于在建立数学模型的过程中,忽略了某些次要的因素,这样,计算结果就与实际问题的存在一定的差别。例如,在计算不同酸度溶液中难溶盐 M_mA_n 的溶解度时,可用下式来计算:

$$(mS)^m(nS\alpha_A)^n = K_{sp} \quad (1-1)$$

式中 S —— M_mA_n 的溶解度 (mol/L);

α_A ——阴离子 (A) 的分布系数 (见第三章第一节)。

当酸度较高时按式 (1-1) 计算是正确的,当 OH^- 不能忽略时,由于羟基金属络离子生成,就要按下式计算才无误差:

$$(mS\alpha_M)^m(nS\alpha_A)^n = K_{sp} \quad (1-2)$$

式中 $\alpha_M = [M] / c_M$ (见第四章第三节例 1、例 2 Fe^{3+} 、 Al^{3+} 的计算)。

2. 截断误差

在用数值方法解题时,通常采用无限次数迭代逼近法求精确解。然而在实际的运算过程中,不可能做无限次数的计算,只能进行有限次数的计算,这相当于在运算的中间截止住了。由此而产生的误差称为截断误差,这种误差在用数值方法解题时总是存在的。在实际计算过程中,我们只要求计算结果达到一定的精度便满足了。

3. 舍入误差

有效数字位数的限制导致计算过程中数字的位数减少所产生的误差称为舍入误差。计

算机运算时,数值的数字位数不可能是无限的,只能取一定的有效位数,于是,就会去掉超出限度的位数。例如,单精度数为7位有效数字,双精度数为16位有效数字。可见,采用双精度运算可以减小运算时产生的舍入误差。

4. 过失

由于计算者疏忽大意,编写程序时出错,如把常数写错,把计算公式写错以及其他操作错误等,其后果是结果有时大至若干数量级,侥幸时也可能无关大局。按照分析化学的传统观点,只有严肃、认真地工作,消除一些错误之后,才谈“误差”问题。

此外,在运算过程中,应避免两个接近相等的数相减,因为这样将损失大量的有效位数。还应避免除法运算过程中分母值远小于分子值的情况,否则,商的绝对误差就会很大。

第三节 QBASIC 集成环境

计算机的型号和种类很多,目前使用最广泛的是微型计算机(微机),而IBM系列微机及其兼容机是占主导地位的微机。所以,本书介绍的程序皆是在IBM系列微机上编写调试的。

一、操作系统软件

在计算机执行任何应用程序之前,必须装入公用程序——“操作系统”,操作系统可看作是计算机的一部分,用于监视或控制应用程序所完成的各种功能。

IBM微型计算机及其兼容机上用得最多的操作系统为DOS(Disk Operating System)。MS-DOS是由Microsoft公司开发的、用于微机上的一种通用性的DOS,而PC-DOS则是Microsoft公司授权给IBM公司的DOS版本。随着计算机技术的不断发展,DOS的版本也不断地升级。所以各种版本的DOS中均带有BASIC语言。如PC-DOS盘上带有Advanced Basic,即高级BASIC,一般称作BASICA;MS-DOS 5.0以下的版本均带有GW-BASIC,而MS-DOS 5.0及其以后的版本均带有QBASIC。

二、QBASIC是BASIC的一个独特版本

QBASIC吸取了FORTRAN、PASCAL、C及Ada等语言的优点,克服了原来BASIC语言的结构化性能差和运算速度慢等缺点,是一种功能强大,又易学易懂的程序设计语言。从难度上来看,它与一般的BASIC语言差不多,而其功能则大为扩充,其完善程度完全可以和PASCAL、FORTRAN及C语言相媲美。

QBASIC的特色主要表现在两个方面。一是采用了集成开发环境,用下拉式菜单、对话方式操作,集程序编辑、调试、运行等功能于一体,使用方便;二是对BASIC语言的功能进行了扩充。

在集成开发环境方面,QBASIC具有以下特点。

1. 交互编辑

QBASIC集成开发环境的核心部分是一个性能优越的编辑器。输入一行程序后,马上就能对其进行语法检查,如果没有语法错误,则该程序行即被翻译成可执行代码;否则光标会指到出错的位置,同时给出有关错误的类型。该编辑器还能自动将QBASIC的关键字转换为大写,校正遗漏和错误,并可显示程序的逻辑结构。

2. 交互式调试

在调试程序时, 可以将一个运行着的程序在任何一处暂停, 对它进行编辑, 然后从暂停处继续执行。用户可以利用屏幕底部的“直接”窗口测试程序的语句, 甚至可以修改正在运行着的程序中的数据, 以便观察修改后的效果, 而不必重新启动程序。

3. 灵活的联机求助功能

QBASIC 提供了灵活的求助功能, 它既可为每个语句提供语法检查, 同时也为菜单操作命令等提供帮助信息, 对每个语句都有详细的使用说明及丰富的应用实例。因此, 即使不看使用说明书, 也能很好地使用。

4. 完全图形支持

QBASIC 支持 VGA、MCGA、CGA、EGA、HGC 及 PS/2 等显示设备, 图形分辨率高。

在语言功能方面, QBASIC 与一般的 BASIC 系统兼容。也就是说, 一般 BASIC 开发的程序几乎不用任何修改就可在 QBASIC 环境下使用。同时, QBASIC 还增加了一些新的功能。

(1) QBASIC 把微机内存看作是一张大的空白程序纸, 在这张纸的每一行可含有一个或多个 BASIC 语句 (各语句间用 “:” 隔开), 程序按物理行的顺序执行, 因而源程序可以不写行号。原来的 BASIC 中的行号在 QBASIC 中作为标号来处理, 标号既可以是数字, 也可用字符串表示。若标号用数字, 程序执行的顺序也与标号的大小无关, 例如:

```
REM PRO1-3-1, 演示: Qbasic 程序中行标号的使用
INPUT I
100 IF I>=0 GOTO YYY
10 PRINT " I<0" : GOTO XYZ
YYY: PRINT " I≥0"
XYZ: END
```

不会因为第四行的标号小于第三行而先执行第四行, 这一点与一般的 BASIC 语言有所不同。

(2) QBASIC 程序由模块组成。这样, 就可以把一个程序分解成若干个逻辑上不同的部分, 从而实现结构化程序设计。此外, QBASIC 具有 FUNCTION 和 SUB 过程。

(3) 具有 SELECT CASE 之类的开关语句和十分灵活的 DO...LOOP 循环, 并有像 FORTRAN77 那样的 IF...THEN...ELSE 条件转移块, 这样可以使程序的逻辑结构清晰, 且易于修改和调试。

(4) QBASIC 增加了新的数据类型, 如长整型等。还具有与 C 语言中的“结构”类似的用户定义类型语句 TYPE...END TYPE 等。

三、QBASIC 集成环境

与一般的 BASIC 语言不同, 介绍 QBASIC 不是从程序设计开始, 而是要首先介绍其集成环境。这是因为集成环境是 QBASIC 的重要组成部分, 也是区别于其他 BASIC 的一大特

色，只有在初步熟悉了集成环境之后，才能进行程序设计。但即使我们对 QBASIC 程序设计一无所知，在介绍集成环境时也不会受到任何影响。

1. 启动 QBASIC

启动 QBASIC 的方法非常简单。打开计算机电源，等 DOS 启动后，首先进入装有 QBASIC 系统的子目录，然后从键盘上敲入：

QBASIC ↵ (↵表示键盘上的回车键)

就可启动 QBASIC 的集成环境。这时屏幕显示见图 1-1。

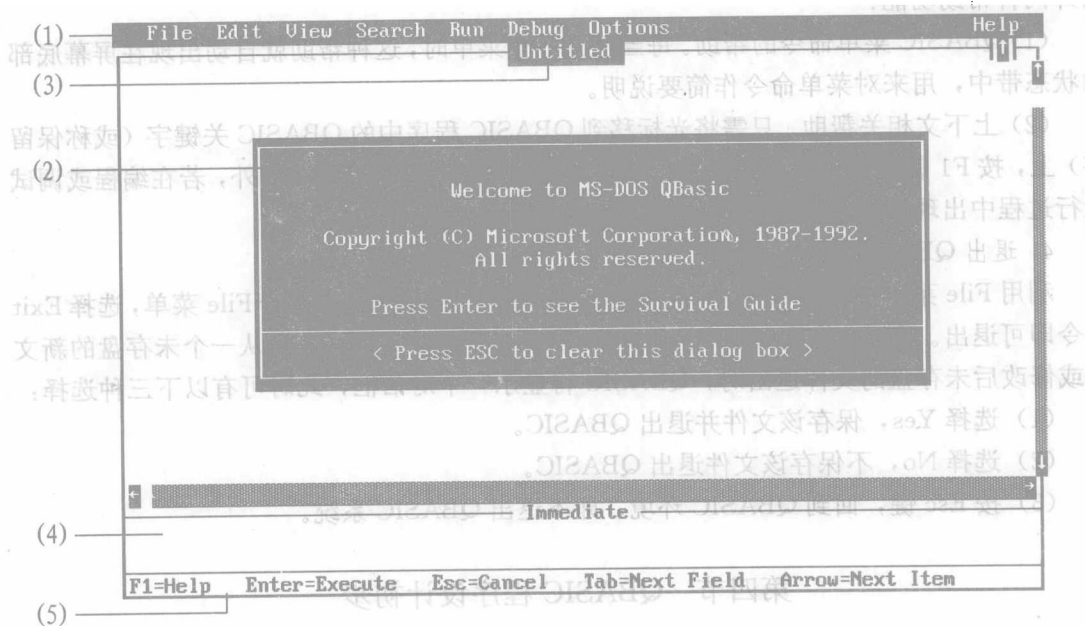


图 1-1 QBASIC 屏幕

2. QBASIC 屏幕布局介绍

图 1-1 中用数字标出了 QBASIC 屏幕的各个部分，简要说明如下：

- (1) 菜单带。显示 QBASIC 各种菜单的名字。
- (2) 观察窗口。在此窗口中编辑程序并进行调试、运行。
- (3) 标题带。显示当前窗口中文件的名字，如果没有命名，则显示 Untitled。
- (4) 立即窗口。在此窗口内，可以立即执行打入的命令或语句，其效果与 BASIC 中的立即方式相同。利用立即窗口，可以方便地修改源程序。在立即窗口中最多可输入 10 个独立行，为了执行某一行，只需把光标移到该行的任何位置，再按回车键即可。
- (5) 状态带。实时显示光标所在行列的位置、键盘状态及一些功能键的用途。

3. 菜单及菜单命令选择

QBASIC 编程环境的核心是菜单操作。在 QBASIC 集成环境中，几乎每种操作都要通过选择菜单及其相应的命令来实现。

打开菜单的操作非常简单,按一下 Alt 键,屏幕顶部的菜单带上就会出现一个大光标,这时只要用方向键移动光标到所需要的菜单上,然后按回车键即可下拉出菜单。再用相同的方法选择所需要的菜单命令,即可完成相应的操作。如果打开了不适当的菜单,只要按 Esc 键即可关闭该菜单。

QBASIC 提供了丰富的联机帮助功能,只要按 F1 键即可得到“总帮助”,它可以提供诸如编辑过程及功能键等的用法, QBASIC 系统介绍及各语句、命令、函数的语法说明及应用举例等,这些帮助信息均可按目录或索引查阅,非常方便。除此之外, QBASIC 还提供了另外两种帮助功能:

(1) QBASIC 菜单命令的帮助。每当打开一个菜单时,这种帮助就自动出现在屏幕底部的状态带中,用来对菜单命令作简要说明。

(2) 上下文相关帮助。只需将光标移到 QBASIC 程序中的 QBASIC 关键字(或称保留字)上,按 F1 键即可得到此关键字的用法及实用举例等帮助信息。另外,若在编程或调试运行过程中出现错误,也可选择 Help 进入帮助。

4. 退出 QBASIC

利用 File 菜单中的 Exit 命令,可以退出 QBASIC。方法是,先打开 File 菜单,选择 Exit 命令即可退出。这时,将从内存中清除 QBASIC 并立即返回 DOS。当从一个未存盘的新文件或修改后未存盘的文件退出时, QBASIC 将显示一个对话框,此时可有以下三种选择:

- (1) 选择 Yes, 保存该文件并退出 QBASIC。
- (2) 选择 No, 不保存该文件退出 QBASIC。
- (3) 按 Esc 键, 回到 QBASIC 环境, 即不退出 QBASIC 系统。

第四节 QBASIC 程序设计初步

一、QBASIC 字符集

QBASIC 所使用的字符集与其他语言大致相同,共有 90 个,分为字母、数字和专用字符三类:

- (1) 字母,大写英文字母 A~Z,小写英文字母 a~z。
- (2) 数字,0~9,字母 A~F 和 a~f 也可以作为十六进制数字的一部分。
- (3) 专用字符,共 28 个,包括

<CR>	回车键
	空格
!	叹号(单精度类型数据说明符)
#	井号(双精度类型数据说明符)
\$	美元符(字符串类型数据)
%	百分号(整型数据类型说明符)
&	和号(长整型数据类型说明符)
'	单引号(撇号)

(	左(圆)括号
)	右(圆)括号
*	星号(乘号)
+	加号
,	逗号
-	减号
?	问号
.	句号(小数点)
/	斜杠(除号)
:	冒号
;	分号
<	小于号
=	等于号
>	大于号
[	左方括号
]	右方括号
\	反斜杠(整除号)
^	向上箭头(乘方)
@	at 号
_	下划线(续行号)

二、程序行

QBASIC 程序行的一般格式为：

〔行标识符〕 〔语句〕 〔: 语句〕…〔注释〕

1. 行标识符

QBASIC 的行标识符分为两种类型：

(1) 行号。QBASIC 的行号是 0~65529 之间的整数。尽管 0 可以作行号，但在有些情况下可能会产生错误，所以最好不要用。

(2) 行标号(标号)。标号由字母和数字组成。最多不超过 40 个字符，且必须以字母(无论大小写)开头并以冒号结束，不能使用 QBASIC 的保留字作为标号。保留字又称作关键字，是指已被 QBASIC 语句和函数等使用的一些专用定义符号(常用的 QBASIC 保留字见附录二第一列中的符号)。一行只能有一个标号，在一个程序中，行号和标号可以混用。应特别注意的是，在 QBASIC 中，行号的大小并不决定语句执行的先后顺序，这一点与其他 BASIC 版本是不同的。例如：

```

5          REM PRO1-4-1, 演示: Qbasic 程序的执行顺序与行标号大小无关
100        PRINT " Hello! 这是标号为 100 的程序行之打印结果。"
50         PRINT " Hello, Hello! 这是标号为 50 的程序行之打印结果。"
10         PRINT "Hello,Hello,Hello! 这是标号为 10 的程序行之打印结果。"

```

在 QBASIC 中执行的顺序是 5、100、50、10，而在 BASICA 中执行的顺序则为 5、10、50、100。

另外，QBASIC 并不是每一行都必须有行标号。

2. 语句

QBASIC 的语句分为两大类：执行语句和非执行语句。

执行语句可以完成某种指定的操作，如读、写、计算、赋值、打开文件、转移控制等，它把程序的逻辑流程向前推进。而非执行语句只是执行诸如为变量分配存储单元、说明和定义变量类型、注释等任务，如 DATA、DIM、REM（或单引号'）等。

由于 QBASIC 的语句及函数与其他 BASIC 基本兼容，故不作过多介绍。

三、QBASIC 的数据类型

QBASIC 的数据类型分为字符串型数据和数值型数据。

（一）字符串

字符串的长度为 0~32767 个字符。组成字符串的字符为代码在 0~255 之间的 ASCII 字符。

（二）数值

QBASIC 的数值型数据分为整型数和浮点数两类。其中整型数分为整数和长整数；浮点数分为单精度和双精度。

1. 整型数

QBASIC 中的整型数是不带小数点和指数符号的数。可以有十进制、十六进制（以 &H 开头）、八进制（以 &O 开头）等表示形式。整数表示范围为 -32768~+32767；长整数表示范围为 -2147483648~+2147483647。

2. 浮点数

浮点数由尾数、指数符号和指数三部分组成。其中尾数是实数，指数符号为 E（单精度）或 D（双精度），指数是整数。

（1）单精度浮点数。可以精确到 7 位十进制数，其表达负数的范围是 -3.402823E+38~-1.401298E-45，表达正数的范围是 1.401298E-45~3.402823E+38。单精度数是任意的数值常数，具有下述特征之一：

- 1) 以 E 表示的指数形式。如：-1.25E-8。
- 2) 以叹号 (!) 结尾。如：354!。
- 3) 带有小数点，不用 D 表示指数，不以 # 号结尾，少于 15 位（十进制）的数，如 3456.23。
- 4) 不带小数点的、少于 15 位但不能表示为长整数的数。如：8725。

（2）双精度浮点数。可以精确到 15 或 16 位十进制数。其负数范围为 -1.797693134862316D+308~-4.94065D-324，正数范围为 4.94065D-324~1.797693134862316D

+308。凡具有以下特征之一的数，均为双精度数：

- 1) 以 D 表示的指数形式。如：1.035D105
- 2) 以 # 号结尾。如：3456.0#
- 3) 带有小数点，不以 E 表示指数，不以叹号 (!) 结尾，并且多于 15 位的数。

除了上面介绍的数据类型外，QBASIC 中还有逻辑型数据以及由用户自定义的数据类型等。

四、QBASIC 变量的构成

1. 变量名

QBASIC 的变量名由字母、数字和小数点组成，必须以字母开头，最后一个字符可以是变量类型说明符。但只有前 40 个字符有效。

变量名不能是保留字，但可以是嵌入保留字的字符串；同时，变量名也不能是末尾带有类型说明符的保留字，例如：变量 DATA 或 DATA \$ 是非法的，而变量 DATAONE 是合法的。

2. 变量的类型

变量的类型一般用类型说明符来标识。把类型说明符放在变量的尾部，可以标识不同的变量类型，其中 % 表示整型，! 表示单精度型，# 表示双精度型，& 表示长整型，\$ 表示字符串型。

在定义变量类型时应该注意：

(1) 变量名相同但类型说明符不同时，所表示的是不同的变量。例如：SMALL%、SMALL& 和 SMALL# 是三个不同的变量。

(2) 当一个变量没有类型说明符时，将被默认为单精度变量。

(3) 在实际应用中，应根据需要设置变量的类型。比如，当所要求的精度不高时，通常使用单精度变量，这样不仅节约内存空间，而且可以提高处理速度。

在 QBASIC 中，也可用其他方法来定义变量，在此不作讨论，可参见有关书籍。

3. 数组变量

习惯上把前面讲过的变量叫做简单变量，而把数组元素叫做带下标的变量，简称下标变量。

数组可以分为数值数组和字符串数组。数组中的元素用数组名和下标来命名，而数组名的命名规则与简单变量相同，其类型也和简单变量一样。数组的下标可以是整型数和整型表达式，若使用非整型数，则自动舍入为整型数。

数组的最大下标值和维数由 DIM 语句来定义。在 QBASIC 中，数组的最大维数是 60，每一维的最大元素个数为 32768。和其他 BASIC 一样，QBASIC 中的数组也可不用 DIM 语句定义而直接使用，但此时下标的最大值是 10。

五、QBASIC 表达式与运算符

QBASIC 的表达式分为两类，即数值表达式和字符串表达式。

在一个数值表达式中，除了变量、常量之外，主要是各种运算符，这些运算符大致可分为五类：算术运算符、关系运算符、函数运算符、字符串运算符、逻辑运算符等。