

21

世纪高等院校教材·化学化工类

计算机与化学化工数据处理

王洪艳 主编



科学出版社

www.sciencep.com

21 世纪高等院校教材·化学化工类

计算机与化学化工数据处理

王洪艳 主编

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是一本介绍计算机与化学化工数据处理的应用型书籍,具有系统性、实用性、可读性、互补性强的特点。本书以化学化工数学建模为主线,结合化学化工实验,介绍了最小二乘拟合、线性回归分析、方差分析、插值、数据平滑、实验设计等常用的数据处理方法及数学模型建立方法,并配有 VC++ 和 VB 两种可运行的相关程序。书中还简单介绍了 MATLAB、Origin 和 ChemDraw 等商业应用软件的操作和应用。

本书可作为高等院校化学、化工相关专业本科生和研究生的教材,也可供教师教学和化学化工类技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机与化学化工数据处理/王洪艳主编. —北京:科学出版社,2007

21 世纪高等院校教材·化学化工类

ISBN 978-7-03-018856-4

I. 计… II. 王… III. 计算机应用-化学实验-数据处理-高等学校-教材 IV. 06-39 TQ016

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 052240 号

责任编辑:赵晚霞 吴伶伶 王国华 / 责任校对:包志虹

责任印制:张克忠 / 封面设计:耕者工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2007 年 4 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2007 年 4 月第一次印刷 印张:17 1/2

印数:1—4 000 字数:326 000

定价:29.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换<路通>)

《计算机与化学化工数据处理》

编委会

主 编 王洪艳

副主编 刘建平 杜志坚 马久童 李东平

编 委(按姓氏拼音排序)

杜志坚 李东平 李志良 刘建平

马久童 盛 野 王洪艳 王英华

杨 兵 张海涛

前 言

在信息技术迅猛发展的今天,数据化信息被广泛地使用。在化学化工的生产和科学研究中,现代测试仪器和过程控制可以迅速、准确地为人们提供大量可靠的测量数据。如何对原始测量数据进行再加工,从所获得的数据中提取隐含、有用信息?如何利用计算机技术解决化学化工的问题?这是化学化工工作者面临的新课题。作为高等院校的本科教育课程,计算机在化学化工专业的应用将是不可缺少的。

在教学过程中,我们发现尽管计算机已经很普遍,但是学生对计算机在化学化工专业的应用所知甚少;有的学生虽然已经通过国家计算机等级二级考试,但对于编写程序来处理化学化工数据还是茫然。本书就是要帮助化学化工等相关专业的学生从最熟悉的实验数据出发,利用所学的数理统计知识,在已学计算机语言和专业基础知识的基础上,学会用计算机来处理数据,提取更多、更有用的信息,开辟计算机应用的广阔领域,为走向工作岗位或继续深造打下良好的计算机应用基础。

通过本书的学习,学生可运用数理统计方法,将一些毫不相关的实验数据转换成数学表达式。全书以数学建模为主线,结合化学化工实验,使学生学会数学建模、矩阵表征、方程组求解及矩阵运算等在计算机上的实践过程。本书主要有以下四个特点:①系统性好。从如何将化学问题转化为数学问题(建立数学模型)入手,到数据处理方法及实验设计,使学生建立起一个系统的计算机在化学化工中应用的方法。在此基础上再介绍一些商业软件,使学生更好地理解商业软件中“黑匣子”的内容。②实用性强。针对学生在计算机应用中的困难,紧密结合化学化工中的实例并附有 VC++ 和 VB 两种可运行的相关程序,学生可选择感兴趣的语言编程,适合多层次教学。通过程序编辑,学生可以用计算机解决化学问题,从而提高学习兴趣。③可读性好。本书系统性和实用性较强,学生易学、易懂、易操作、易掌握。④互补性强。在内容上与专业基础课和专业课形成互补,弥补了教学中知识点遗漏的缺点。如正交试验设计、均匀试验设计、实验数据的平滑等,一般教学不涉及,而这些知识在本科生毕业论文乃至今后的科学研究中都是不可缺少的。本书共分 12 章,可归为 4 大部分:数学建模——第 2 章、第 4~6 章;统计检验和实验设计——第 3 章、第 7 章和第 8 章;商业化辅助数据处理软件——第 9~11 章;应用工具——第 1 章和第 12 章。

本书编写的具体分工:第 1 章、第 9 章由张海涛和盛野执笔,第 2 章、第 5 章、第 6 章由王洪艳执笔,第 3 章由王英华和李志良执笔,第 4 章、第 7 章由马久童和

李东平执笔,第8章由杨兵执笔,第10章、第11章由刘建平执笔,第12章由杜志坚执笔。全书由王洪艳统稿、定稿。

本书是编者多年教学经验的积累,由于编者水平和专业知识所限,书中难免会有错误之处,恳请专家学者和广大读者批评指正。

编者

2006年12月

目 录

前言

第 1 章 计算机语言基础知识简介	1
1.1 开发环境简介	1
1.2 Visual C++	1
1.2.1 Visual C++的特点	2
1.2.2 Visual C++代码书写规则	2
1.2.3 建立一个 VC 程序	2
1.3 Visual Basic	7
1.3.1 Visual Basic 的特点	7
1.3.2 Visual Basic 代码书写规则	8
1.3.3 建立一个 VB 程序	8
参考文献	12
第 2 章 化学化工问题数学模型的建立	13
2.1 概述	13
2.2 由理论推导数学模型	13
2.3 由实验数据建立数学模型	16
2.3.1 典型曲线法	16
2.3.2 多项式拟合	19
2.3.3 多元回归分析法	19
2.4 数学模型的选择	19
2.4.1 直线化检验	19
2.4.2 差分检验	21
2.4.3 误差检验	22
2.5 数学模型中系数的确定	23
2.5.1 差分法	23
2.5.2 图解法	25
2.5.3 平均值法	26
2.5.4 解线性方程组	27
2.6 计算机实现数学模型的建立	27
2.6.1 C 语言实现差分法数学模型的建立	27

2.6.2 VB实现差分法数学模型的建立	29
参考文献	31
习题	31
第3章 概率论与数理统计基本知识	33
3.1 概率论基础	33
3.1.1 随机事件	33
3.1.2 频率	33
3.1.3 概率	33
3.1.4 随机变量	34
3.1.5 数学期望	34
3.2 数理统计基本概念及应用	35
3.2.1 数理统计基本概念	35
3.2.2 χ^2 分布	36
3.2.3 t 分布	38
3.2.4 F 分布	39
3.3 实验数据统计检验	40
3.3.1 参数估计与假设检验	41
3.3.2 假设检验	42
3.3.3 统计检验的判断错误	42
3.4 统计检验的应用	43
3.4.1 离群值的检验	43
3.4.2 比较 s 与 σ 之间是否有显著性差异	45
3.4.3 总体平均值 μ 的检验	46
3.4.4 两组平均值检验	46
3.4.5 两样本方差之间的检验	47
3.5 计算机实现统计检验	48
3.5.1 C语言实现 Dixon 检验	48
3.5.2 VB实现 Dixon 检验	49
3.5.3 C语言实现 Grubbs 检验	50
3.5.4 VB实现线性 Grubbs 检验	52
3.5.5 C语言实现平均值检验	53
3.5.6 VB实现平均值检验	55
参考文献	56
习题	56

第4章 插值法模拟空缺实验点	58
4.1 概述	58
4.2 线性插值	58
4.2.1 线性插值原理	58
4.2.2 C语言实现线性插值计算	59
4.2.3 VB实现线性插值计算	61
4.3 Lagrange 插值多项式	62
4.3.1 Lagrange 插值原理	62
4.3.2 分段抛物线插值	64
4.3.3 二元 Lagrange 插值	65
4.3.4 C语言实现一元三点 Lagrange 插值计算	67
4.3.5 VB实现一元三点 Lagrange 插值计算	69
4.4 Hermite 插值	70
4.5 三次样条函数插值	73
参考文献	75
习题	75
第5章 实验数据的最小二乘拟合及平滑	77
5.1 概述	77
5.2 最小二乘原理	77
5.3 最小二乘实验数据拟合	79
5.4 计算机上实现最小二乘建模	82
5.4.1 正规方程组的建立	82
5.4.2 Gramer 法则	84
5.4.3 Gauss-Seidel 迭代法	88
5.4.4 LU 分解法原理	94
5.4.5 矩阵法	95
5.5 实验数据的平滑技术	95
5.5.1 多项式平滑原理	96
5.5.2 五点数据的平滑	98
5.5.3 N 点数据的平滑	100
5.5.4 C语言实现五点三次平滑	102
5.5.5 VB实现五点三次平滑	104
习题	106
第6章 实验数据的回归分析	108
6.1 概述	108

6.2 一元线性回归分析	108
6.2.1 方法原理	108
6.2.2 回归方程的检验	111
6.2.3 C语言实现相关性检验	115
6.2.4 VB实现相关性检验	117
6.3 二元线性回归分析	120
6.3.1 二元线性回归分析的应用	121
6.3.2 C语言实现二元线性回归分析	123
6.3.3 VB实现二元线性回归分析	125
6.4 多元线性回归分析	126
6.4.1 方法原理	127
6.4.2 多元线性回归方程的相关性检验	130
6.4.3 多元线性回归的应用	131
6.5 非线性回归	132
参考文献	133
习题	133
第7章 实验数据的方差分析	134
7.1 概述	134
7.2 方差分析原理	134
7.2.1 变差平方和的分解	134
7.2.2 方差分析	136
7.3 单因素方差分析	137
7.3.1 将单因素多水平试验安排写成矩阵列式	137
7.3.2 计算变差平方和	138
7.3.3 列方差分析表	139
7.4 多因素方差分析	141
7.4.1 两因素方差分析	141
7.4.2 三因素方差分析	144
7.4.3 C语言实现两因素方差分析	146
7.4.4 VB实现两因素方差分析	148
参考文献	150
习题	150
第8章 实验设计与优化	152
8.1 概述	152
8.2 正交实验设计	153

8.2.1 正交实验设计特点	153
8.2.2 正交表	155
8.2.3 正交实验结果分析	157
8.2.4 C 语言实现正交设计	160
8.3 均匀实验设计	161
8.3.1 均匀设计表	161
8.3.2 均匀设计步骤	163
参考文献	166
习题	166
第 9 章 MATLAB 及应用	168
9.1 MATLAB 简介	168
9.1.1 MATLAB 的基本使用方法	168
9.1.2 向量及其运算	170
9.1.3 矩阵及其运算	172
9.2 MATLAB 基本绘图	173
9.3 MATLAB 的程序设计	175
9.3.1 命令式文件	175
9.3.2 函数式文件	176
9.4 用 MATLAB 计算函数的数值积分	177
9.5 用 MATLAB 实现多项式曲线拟合	177
9.6 用 MATLAB 实现曲线插值	178
9.6.1 Lagrange 插值	178
9.6.2 Hermite 插值	179
9.6.3 三次样条插值	180
9.7 用 MATLAB 实现线性方程组的求解	182
9.7.1 直接法	182
9.7.2 Jacobi 迭代法	183
9.7.3 Gauss-Seidel 迭代法	184
参考文献	184
习题	185
第 10 章 Origin 软件及其应用	186
10.1 概述	186
10.2 Origin7.5 基本操作	186
10.2.1 工作环境	186
10.2.2 Origin 数据窗口基本操作	189

10.3 Origin 科技绘图	191
10.3.1 二维 Graph 绘制	191
10.3.2 函数绘图	197
10.3.3 三维 Graph 绘制	198
10.3.4 多图层 Graph 绘制	199
10.4 Origin 曲线拟合和数据分析	201
10.4.1 Origin 曲线拟合	201
10.4.2 Origin 数据分析	203
参考文献	208
第 11 章 ChemDraw 的应用	209
11.1 ChemDraw 基础	209
11.1.1 工作环境	209
11.1.2 全局设置	210
11.2 绘制化学结构	212
11.2.1 基本绘制工具	212
11.2.2 高级绘制工具	216
11.2.3 结构名称转换	220
11.3 绘制对象	221
11.3.1 轨道工具面板	221
11.3.2 化学符号工具面板	222
11.3.3 箭头工具	223
11.3.4 括号工具面板	224
11.3.5 自选图形工具面板	225
参考文献	225
第 12 章 网上化学化工资源	226
12.1 概述	226
12.2 Internet 上化学化工文献资料查询	226
12.2.1 中文文献资料的查询方法	226
12.2.2 外文文献资料的查询方法	229
12.3 Internet 网上化学化工信息查询方法	232
12.3.1 搜索引擎查找化学化工信息	233
12.3.2 化学化工宏站点查询	237
12.3.3 Internet 上的软件	240
附录	243
附表 1 正态分布表	243

附表 2	χ^2 分布表	244
附表 3	t 分布表	246
附表 4	F 分布表	247
附表 5	相关系数临界值 $\gamma_{\alpha, f}$ 表	255
附表 6	随机数表	256
附表 7	正交表	257
附表 8	均匀设计表	264

第 1 章 计算机语言基础知识简介

1.1 开发环境简介

本书将重点介绍如何用计算机编制程序来解决化学化工中复杂数据的处理问题,在此之前,先介绍编程所使用的软件——Microsoft Visual Studio 6.0。

Microsoft Visual Studio 6.0 包含了目前世界上比较常用的两种程序开发软件,即 Visual C++ 6.0 和 Visual Basic 6.0,分别用于编写 C 语言和 Basic 语言程序。这两种软件各有特点,为了满足不同学校对语言的需求,本章将对这两种软件及其程序应用加以介绍。通过学习可以发现,这两种语言在做基本的数学运算时有很多相似之处。

1.2 Visual C++

Visual C++ 是微软公司推出的基于 Windows 平台的可视化、面向对象的软件开发环境。它以 ANSI C++ 为基础,并在此基础上进行了大量扩展,以适应开发各种 Windows 应用程序的需要。Visual C++ 自诞生以来,一直是 Windows 环境下最主要的应用开发系统之一。Visual C++ 不仅是 C++ 语言的集成开发环境,而且与 Win32 紧密相联,所以,利用 Visual C++ 可以完成各种应用程序的开发,从底层软件到上层直接面向用户的软件。而且,Visual C++ 强大的调试功能也为大型复杂软件的开发提供了有效的排错手段。Visual C++ 不但具有程序框架自动生成、灵活方便的类管理、代码编写和界面设计集成的功能、可开发多种程序(应用程序、动态链接库、组件开发)等优点,而且通过简单的设置就可使其生成的程序框架支持数据库接口、组件、Winsock 网络等。目前它已成为开发 Win32 程序的主要工具。

进入 20 世纪 90 年代以来,随着多媒体技术和图形图像技术的不断发展,可视化(visual)技术得到了广泛的重视,越来越多的计算机专业人员和非专业人员都开始研究并应用可视化技术。Visual C++ 是一个很好的可视化编程工具,使用 Visual C++ 环境来开发 Windows 应用程序可大大缩短开发时间,而且它的界面更友好,便于程序员操作。

开发环境是程序员同 Visual C++ 的交互界面,通过它程序员可以访问 C++ 源代码编辑器、资源编辑器,使用内部调试器,并且可以创建工程文件。本节将介绍 Visual C++ 6.0 的用户界面,并对各种常用的窗口、菜单、按钮的意义和功能作较

为详细的介绍。

1.2.1 Visual C++的特点

- (1) 有一整套工具用于 Win32 应用程序的开发。
- (2) 具有功能强大的编程向导工具。
- (3) 编译速度和执行速度更快。
- (4) 可以非常方便地结合和扩展已有的控件,减少开发费用,节省开发时间。
- (5) 对网络编程及数据库访问具有更强有力的支持。

1.2.2 Visual C++代码书写规则

1. 命名规则

- (1) 较短的单词可用缩写表示。
- (2) 较长的单词可用前几个字母表示。

2. 语句书写规则

- (1) 一条语句占一行。
- (2) 每条语句及数据定义的后面要写上分号“;”以表示该语句结束。
- (3) 用“{ }”括起来的部分,通常表示程序的某一层结构,“{ }”一般与该结构语句的第一个字母对齐,单独占一行并应在同一列。低一层次的语句可比高一层次的语句缩进若干空格后书写,使程序看起来更加清晰,增加程序的可读性。

3. 注释方法

- (1) 单行注释以“//”开头。
- (2) 注释块“/*”开头,以“*/”结束。

1.2.3 建立一个 VC 程序

1. Visual C++的启动

用鼠标单击【开始】→【程序】→【Microsoft Visual Studio 6.0】→【Microsoft Visual C++ 6.0】,就会进入 Visual C++的工作环境窗口,如图 1-1 所示。

2. 建立一个简单的 C 语言工程

用 C 语言编写一个程序时,首先应建立一个 C 语言工程。启动 C++ 窗口以后,选择菜单命令【文件(F)】→【新建(N)】,选择“工程”选项卡,选择项目类型为“Win32 Console Application”,创建 Win32 控制台应用程序。在“工程名称(N)”

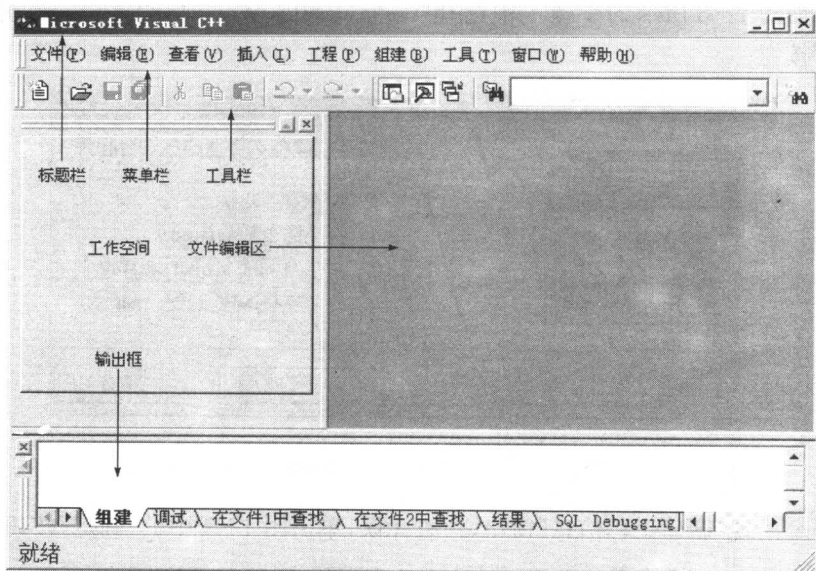


图 1-1 Microsoft Visual C++主窗口

中输入工程名称,选择工程存放的位置,并单击“确定”,按下“确定”会弹出如图 1-2 所示的对话框。

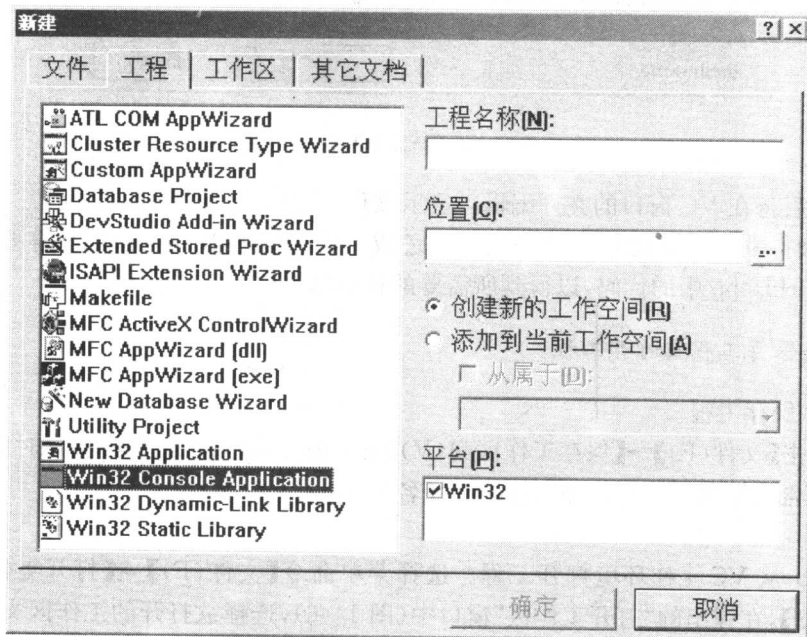


图 1-2 建立新的工程

在如图 1-3 所示的步骤 1 中选择“一个‘Hello, World!’程序(W)”,并单击“完成”按钮。

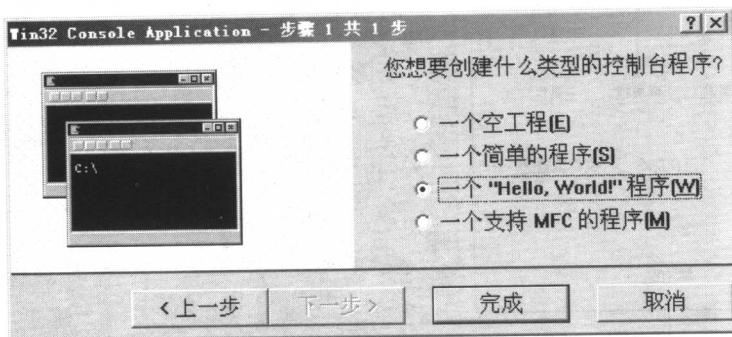


图 1-3 Win32 Console Application

屏幕出现“新建工程信息”窗口,检查无误,单击图 1-4 中的“确定”按钮。

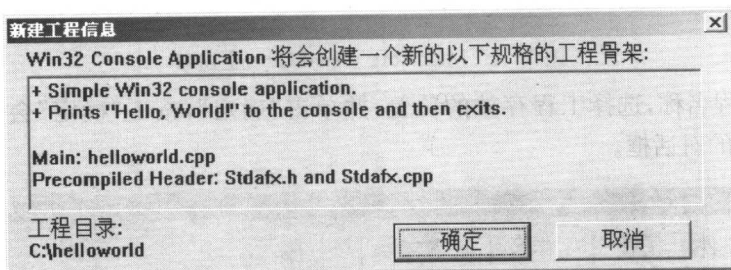


图 1-4 新建工程信息

之后将在 VC 窗口的文件编辑区显示该程序的代码,如图 1-5 所示。

此时一个简单的 C++ 工程建立完成,可根据各任务的具体需要修改 helloworld.cpp 中的代码,以得到所需要的计算结果。

3. 保存工程及打开工程

1) 保存工程

单击【文件(F)】→【保存工作区间(V)】菜单命令,即可将工程按建立时所输入的工程名称保存。C++工程文件的扩展名为.dsw。

2) 打开工程

(1) 从 VC 工作环境打开工程。选择菜单命令【文件(F)】→【打开工作区间(W)...】,在弹出的“打开工作区”窗口中(图 1-6),选择欲打开的工作区文件,选择“打开”。