

TURBO PASCAL 在

化学化工中的应用

● 乌兰 / 赵颖 著

民族出版社

TURBO PASCAL
ZAI HUAXUE HUAGONG
YONG DE



YONG DE

AGONG ZHONG DE YINGYONG

TURBO PASCAL

在化工生产中的应用

江苏工业学院图书馆

藏书章 兰 赵颖 著

民族出版社

图书在版编目(CIP)数据

TURBO PASCAL 在化学化工中的应用/乌兰,赵颖著.
-北京:民族出版社,2004.3

ISBN 7-105-06110-3

I.T… II.①乌…②赵… III.①PASCAL 语言-应用-化学
②PASCAL 语言-应用-化学工业 IV.①06-39②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 020134 号

民族出版社出版发行

<http://www.e56.com.cn>

北京市和平里北街 14 号 邮编 100013

若龙文化工作室微机照排 迪鑫印刷厂印刷

各地新华书店经销

2004 年 3 月第 1 版 2004 年 3 月北京第 1 次印刷

开本:850mm×1168mm 1/32 印张:10.5 字数:260 千字

印数:0001-1000 册 定价:20.00 元

该书如有印装质量问题,请与本社发行部联系退换
(总编室电话:010-64212794;发行部电话:010-64211734)

前 言

根据教育部 1998 年颁布的专业目录及拓宽专业的原则，在分析研究化工类各专业的教学基本要求和当今化学工业中计算机技术发展趋势的基础上，我们从 2000 年 10 月开始编写这本《TURBO PASCAL 在化学化工中的应用》。由于《TURBO PASCAL 在化学化工中的应用》涉及的内容相当广泛，因此我们在内容选择上注重学科理论和方法的完整性和系统性，根据教学的要求，以基础为主，重点介绍比较成熟的理论、方法及其应用，也适当介绍了近年来发展较快、相对比较成熟的新理论和新方法。

本书在内容上力求体现加强基础、面向实际、便于自学、引导思维、启发创新的原则，以高级语言（TURBO PASCAL）、程序设计和计算方法的基本知识和技能用于解决化学工业中的常见问题。主要内容是高级语言、程序设计和化学工业中的常用计算方法。包括初步的矩阵运算、非线性方程和线性方程组求根、插值、拟合积分等；力求将高级语言、程序设计和计算方法的基本知识和技能用于解决化学工业中的精馏理论级数和吸收理论级数的求解，分子连通性指数的计算，分析化学中的溶液平衡计算，萃取、薄层色谱等领域的有关计算，物质的物理化学性质的计算等。同时作为一本供化学工作者学习和参考的化工计算机教材，我们认为没有必要对各种算法的数学原理做过于详尽的介绍。特别是随着计算机技术的发展，已经逐步由过去的全部算法程序必须自己编写过渡到以使用大量出现的各种功能强大的应用软件包为主。因此我们在编写方式上，尽可能深入浅出，循序渐进地重

点介绍各种最基本算法的原理、应用特点和方法,对某些常用但数学原理较复杂的技术只介绍基本方法,不详细介绍算法,以使具有一般化学和数学基础的人员能够比较轻松的学习本教程。

在书稿的写作中得到同事和同行的鼓励和支持,也参阅了国内外部分作者的有关著作,西北民族大学教务处马德山教授提出的宝贵意见和大力支持使本书顺利出版。在此一并致以衷心感谢。

本书写作的分工是,乌兰:第1章,第2章,第3章,第4章,第5章,第6章,第12章,第13章;赵颖:第7章,第8章,第9章,第10章,第11章。

最后由乌兰通读定稿。

由于作者水平有限及资料掌握的局限性,书中错误和缺点不可避免,恳请读者批评指正,我们不胜感激。

作者

2003年12月

目 录

第一章 绪 论	(1)
1.1 计算机领域中的化学	(1)
1.2 化学领域中的计算机	(2)
1.3 计算机技术在化工中应用的现状	(4)
1.3.1 计算机在计算化学中的应用	(4)
1.3.2 计算机在实验室中的应用	(4)
1.3.3 计算机图形化技术在 化学化工中的应用	(5)
1.3.4 计算机网络在化学化工中的应用	(5)
1.3.5 计算机智能化技术在 化学化工中的应用	(6)
1.4 本书的主要内容和特点	(7)
思考题	(8)
第二章 Turbo Pascal 初阶	(9)
2.1 关于 Turbo Pascal	(9)
2.2 Turbo Pascal 的特点	(10)
2.2.1 编译和运行过程	(10)
2.2.2 Turbo Pascal 的特点	(11)
2.3 Turbo Pascal 集成开发环境	(12)
2.4 Turbo Pascal 源程序结构	(13)
2.4.1 程序首部	(14)
2.4.2 程序说明部分	(14)

2.4.3 语句部分	(15)
2.5 程序基本结构及 N—S 流程图	(15)
2.5.1 程序的三种基本结构	(15)
2.5.2 N—S 结构流程图	(18)
思考题	(21)
第三章 TURBO PASCAL 的基本元素	(22)
(1) 3.1 基本字符集与标识符	(22)
(1) 3.1.1 基本字符	(22)
(2) 3.1.2 保留字	(23)
(4) 3.1.3 标识符	(23)
(4) 3.2 数据类型	(24)
(1) 3.3 常量与变量	(25)
3.3.1 常量	(25)
(2) 3.3.2 变量	(25)
(2) 3.4 标准数据类型	(26)
3.4.1 整型	(26)
(6) 3.4.2 实型	(27)
(7) 3.4.3 字符型	(28)
(8) 3.4.4 布尔型	(28)
(9) 3.5 表达式	(29)
(9) 3.5.1 标准函数	(29)
(01) 3.5.2 运算符与优先级	(31)
(01) 3.5.3 表达式	(33)
(11) 3.6 简单输入、输出及赋值语句	(34)
(21) 3.6.1 输入过程	(34)
(21) 3.6.2 输出过程	(34)
(41) 3.6.3 标准标量类型数据的输出格式	(34)
(41) 3.6.4 赋值语句	(36)

思考题	(38)
第四章 控制语句和用户自定义类型	(39)
4.1 IF 语句	(39)
4.1.1 简单 IF 语句	(39)
4.1.2 IF 语句嵌套	(41)
4.2 CASE 语句	(44)
4.3 WHILE 语句	(46)
4.4 REPEAT 语句	(48)
4.5 FOR 语句	(50)
4.6 多重循环	(51)
4.7 GOTO 语句	(55)
4.8 枚举类型	(57)
4.8.1 枚举类型的定义	(58)
4.8.2 枚举类型的运算规则	(58)
4.8.3 枚举类型的输入、输出	(59)
4.9 子域类型	(60)
4.9.1 子域类型的定义	(61)
4.9.2 宿主类型	(61)
4.9.3 子域类型的运算	(61)
4.9.4 输入、输出	(63)
思考题	(65)
第五章 函数与过程	(68)
5.1 过程	(68)
5.1.1 无参过程	(68)
5.1.2 带参过程	(70)
5.1.3 参数传递	(73)
5.2 函数	(75)
5.2.1 函数说明的形式	(75)

5.2.2	函数与过程的区别	(78)
5.2.3	全程变量和局部变量	(78)
5.3	过程和函数的嵌套	(80)
5.4	过程或函数的递归调用	(84)
5.4.1	递归的概念	(84)
5.4.2	递归的分类	(85)
5.4.3	间接递归	(86)
5.5	类型相容和赋值相容	(88)
5.5.1	类型一致	(88)
5.5.2	类型相容	(88)
5.5.3	赋值相容	(89)
	思考题	(90)
第六章	构造类型	(96)
6.1	数组类型	(96)
6.1.1	一维数组	(97)
6.1.2	多维数组	(102)
6.2	字符串类型	(106)
6.2.1	字符串的类型定义	(106)
6.2.2	字符串函数	(107)
6.2.3	应用示例	(109)
6.3	集合类型	(113)
6.3.1	集合类型的定义	(113)
6.3.2	集合类型的运算规则	(114)
6.3.3	应用示例	(116)
6.4	记录类型	(119)
6.4.1	记录类型的定义和变量说明	(119)
6.4.2	记录的赋值	(121)
6.4.3	WITH 语句和记录的嵌套	(123)

6.4.4	记录的变体	(127)
6.5	文件类型	(130)
6.5.1	文件的类型定义和变量说明	(130)
6.5.2	文件标准过程和函数	(132)
6.5.3	类型文件	(134)
6.5.4	正文文件	(137)
6.5.5	无类型文件	(139)
	思考题	(141)
第七章	指 针	(146)
7.1	动态数据结构	(146)
7.2	指针类型定义和变量说明	(148)
7.2.1	指针类型定义	(148)
7.2.2	指针变量说明	(148)
7.3	指针变量的建立和撤销	(150)
7.4	指针变量的赋值操作	(152)
7.5	链表	(156)
7.5.1	线性链表的概念	(156)
7.5.2	建立链表	(156)
7.5.3	删除一个结点	(162)
7.5.4	插入一个结点	(165)
	思考题	(168)
第八章	单 元	(169)
8.1	单元的基本结构	(169)
8.2	使用单元	(172)
8.3	标准单元及其功能	(175)
8.4	SYSTEM 单元	(176)
8.5	DOS 单元	(176)
8.6	CRT 单元	(179)

8.7 PRINTER 单元	(182)
8.8 TURBO3 单元	(184)
8.9 GRAPH3 单元	(184)
思考题	(184)
第九章 图形及其应用	(185)
9.1 图形方式	(185)
9.2 图形子程序分类和数据结构	(186)
9.2.1 图形子程序分类	(186)
9.2.2 图形系统初始化	(189)
9.3 视口与坐标	(193)
9.4 GRAPH 单元中常用的过程和函数	(199)
9.4.1 画点和读点	(199)
9.4.2 画直线和改变当前点 CP	(200)
9.4.3 矩形、直方图和多边形	(203)
9.4.4 圆、椭圆和圆弧	(208)
9.4.5 位映象	(215)
9.5 动画设计原理	(218)
9.6 程序示例	(220)
思考题	(233)
第十章 方程求根	(236)
10.1 二分法求根	(236)
10.1.1 原理介绍	(236)
10.1.2 二分法计算步骤	(238)
10.2 迭代法求方程的根	(240)
10.2.1 原理介绍	(240)
10.2.2 迭代法的步骤和程序	(242)
10.3 牛顿迭代法求方程的根	(243)
10.3.1 原理介绍	(243)

10.3.2 牛顿迭代法的步骤和程序	(245)
思考题	(248)
第十一章 解线性方程组的直接方法	(250)
11.1 引 言	(250)
11.2 高斯消去法	(251)
11.2.1 原理简介	(251)
11.2.2 一般的解 n 阶方程组 的高斯消去法	(252)
11.2.3 简单高斯消去法的参考程序	(254)
11.3 高斯主元素消去法	(256)
11.3.1 行交换	(256)
11.3.2 选主元	(258)
思考题	(262)
第十二章 插值和积分	(264)
12.1 插 值	(264)
12.1.1 插值法的定义	(265)
12.1.2 线性插值	(267)
12.1.3 抛物线插值	(269)
12.1.4 拉格朗日一元全节点插值	(272)
12.2 数值积分	(274)
12.2.1 梯形积分法	(275)
12.2.2 辛普生积分法	(277)
思考题	(280)
第十三章 拟 合	(282)
13.1 最小二乘法	(282)
13.2 一元线性拟合	(283)
13.2.1 拟合直线的确定	(283)
13.2.2 拟合方程的检验	(284)

13.2.3	应用示例	(285)
13.3	多元线性拟合	(290)
13.3.1	拟合方程的确定	(290)
13.3.2	拟合方程的检验	(291)
13.3.3	应用示例	(292)
13.4	图形化线性拟合方程	(296)
13.5	多项式拟合	(302)
	思考题	(310)
	附录一 ASCII 码表	(312)
	附录二 编译与运行出错信息	(315)
	参考文献	(322)

第一章 绪 论

1.1 计算机领域中的化学

新技术革命的浪潮已把人类推入了信息社会,而作为信息社会支柱的计算机技术,在存储、加工处理信息方面所起的作用是其任何其他技术不能替代的。一谈到“计算机”人们就很自然地与“电子”相联系。的确,由于得益于微电子技术的支持,今天的电子计算机体积、功耗大大减小,芯片集成度可达每平方厘米几十万个元件,运算功能及精度也大大提高,速度已突破每秒亿次大关。所有这些为人类探索自然奥秘提供了有力工具,也节省了大量劳力。但是科学技术进步是无止境的,当其向更纵深发展时,现有的电子计算机在某些场合下更显得有些不足:

1. 在处理更复杂的课题时(如染色体)要求计算机每秒运算 10 亿次以上,而目前尚有较大差距。

2. 大量元件的高度集成,散热已成为难以克服的障碍。

3. 目前集成电路内元件间距达 1 微米,已接近极限距离,在间距极小的情况下电流的通断状态产生的感应将形成干扰,影响其使用速度的进一步提高。

因此如何发展新技术、寻找新途径,在分子水平上生产电子器件就成为当今分子电子学领域的重大课题。目前世界上许多发达国家竞相投资,加紧开发和研制“分子元件”和“生物芯片”。

根据美国公布的未来计算机构想,其核心便是用分子元件来

取代电子元件, 以实现电子计算机的逻辑——算术运算、中央控制、数据存储、传输等功能。其信息存储与传递的基本“元件”就是由核酸构成的。与集成电路相比“分子元件”只有几百埃(1 埃 = 10^{-8} 厘米), 比现行电路元件小 3~5 个数量级, 因此可以大幅度提高集成度, 1997 年 4 月世界各国 200 多名数学家、分子生物学家、化学家及计算机专家汇集美国普林斯顿大学开展讨论, 总结成果、制定进一步研究“分子元件”计算机的实验计划, 科学家们预计这种新型计算机将在 5~8 年内取得实质性进展, 20 年后将以“生物芯片”供计算机使用。这类计算机几天的运算量便相当于电脑问世以来运算量的总和, 它比电子计算机更接近于人脑, 能真正实现模糊推理及神经网络运算功能。这将是人类献给 21 世纪的一份厚礼。

1.2 化学领域中的计算机

计算机渗入到各行各业及各门学科, 化学当然也不例外。计算机与化学结合产生了一个新的领域——计算机化学, 或更具体地说是计算机在化学中的应用。这是一门边缘学科。

计算机与化学结合是化学发展的必然趋势, 并且正在化学学科中产生重大影响, 主要表现在以下几个方面:

1. 促进了理论化学的发展

理论化学的发展一直比较缓慢, 因为理论化学的计算量庞大, 非人力所能胜任, 只有在计算机迅速发展的基础上才有可能。如量子力学、复杂体系的化学反应动力学、多组分体系的化学平衡等都需要应用计算机才能解决。

2. 化学测试仪器的计算机化

分析测试仪器的计算机化极大提高了测试仪器提供信息的功能, 使测试仪器进入过去传统分析测试技术无法涉足的许多领

域。

(1) 各种计算机化的现代测试技术如红外光谱、色谱、质谱及电化学分析仪器。新的过程光二极管阵列分析器可做多组气体或流动液体的在线分析,在1秒钟内可提供1800种气体、液体或蒸汽的分析结果,其速度是手工操作无法比拟的。

(2) 广泛应用于试剂、塑料、药物及食品工业过程中产品质量控制分析。

分析测试仪器的计算机化,让它由单纯的数据提供者上升到从分析数据中获取有用信息、提出处理方案的实际问题解决者。

3. 导致了化学计量的诞生

现代分析仪器具有在相对短的时间内提供大量原始分析数据的能力,如何处理这些连续、快速提供的具有很高时间、空间分辨率的多维分析数据,以最优方式从中提取有用信息就成为矛盾的主要方面。化学计量学就是在这一背景下诞生与发展的。化学计量学应用统计学、数学与计算机科学,发展了新的采样理论,校正理论及其他各种理论与方法。化学模式识别与专家系统能协助分析工作者将原始分析数据转化为有用的信息与知识,为进行判别决策及解决实际生产科研课题提供依据。

4. 促使化学情报检索系统与数据库的建立

情报信息是现代社会的的重要组成部分,与化学直接有关的科技情报包括文献资料、数据和图形等。计算机网络所拥有的科技情报包括文献资料、数据和图形等。计算机网络所拥有的巨大信息存储能力和高速传输功能,使从事化学工作的人能全面了解他所关心化学问题的进展情况,迅速查到工作中所需数据及资料,这将大大推动化学研究和化工生产的发展。

1.3 计算机技术在化工中应用的现状

计算机在化学中的应用开发已经有四十多年的历史,经过多年的发展开拓,目前无论是在应用规模上,还是在应用的广度、深度上都得到了相当大的拓展。

1.3.1 计算机在计算化学中的应用

计算化学 (computational chemistry) 是化学科学中的重要内容,除了量子化学和结构化学需要以计算化学作为基础之外,物理化学、分析化学、化工原理和化学工程等学科中都存在大量的计算化学问题。因此,计算机在化学中的应用首先应用于计算化学也就不足为怪。对于化学工作者来说,完成计算化学方面的问题需要掌握一门高级语言,学习基本的程序编程技术,掌握利用计算机技术解决基本计算化学问题的技巧和技能。如计算化学数值计算、方程求解、参数运算、拟合、插值等。应该说计算机的软件技术是计算机应用技术的基石,虽然当前各种专业化的应用软件已经逐步商业化,越来越多的化学问题可以通过使用商业软件来解决,但是掌握必要的软件知识对于在化学领域应用计算机技术来说仍是十分必要的。

1.3.2 计算机在实验室中的应用

计算机目前已经深入到生产和科研的各个领域,各种化学实验室也不例外,它们正逐步采用大量的计算机最新技术。计算机的介入程度已经成为各种化学实验室现代化程度高低的标志之一。大量计算机硬件和计算机技术的介入使化学实验室的自动化、集成化和网络化程度越来越高,大大提高了实验室工作效率和水平。计算机在各种化学实验室中的应用除了常规的文字处理、网络信息传递和化学实验数据计算等应用之外,主要包括以下 3 个方面: