



2
计算机应用丛书

BASIC语言在化学中的应用

田安民 编著



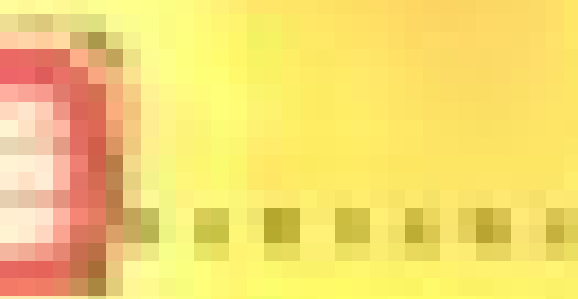
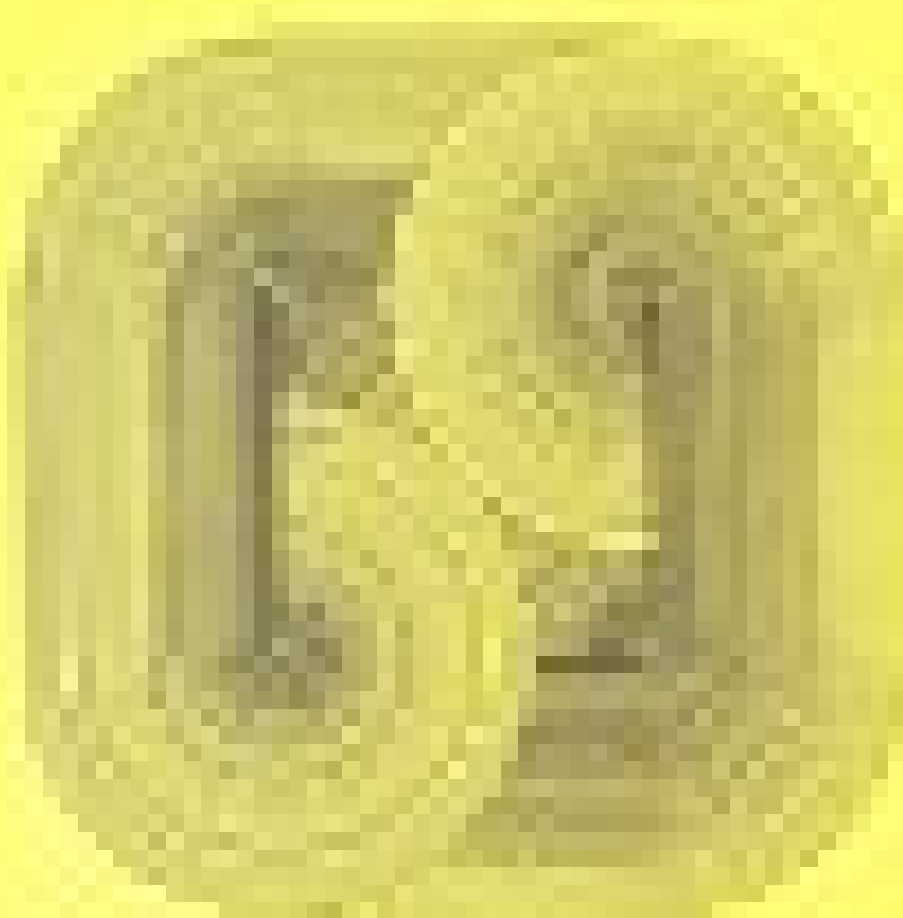
四川教育出版社



11月20日 星期三

BASIC 信託學中級

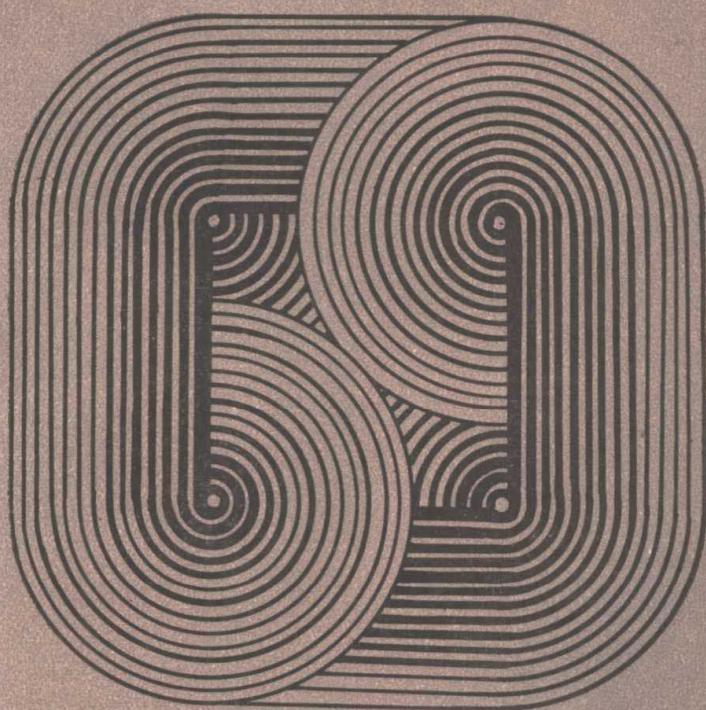
第 11 卷 第 1 期



计算机应用丛书

BASIC语言在化学中的应用

田安民 编著



四川教育出版社

责任编辑：何伍鸣

封面设计：何一兵

版面设计：顾求实

BASIC语言在化学中的应用

四川教育出版社出版

(成都盐道街三号)

四川省新华书店发行

乐山市印刷厂印刷

开本787×1092毫米 1/16 印张34.5 插页1 字数761千

1988年4月第一版

1988年4月第一次印刷

印数：1——910 册

ISBN7—5408—0026—7/G·27

定价：8.56元

前言

近年来在从事计算机用于化学的教学和研究的过程中，许多化学工作者向我表示，很希望有一本结合化学专业的算法语言用书，本书就是为满足这一需要而编写的。

编写此书时，笔者考虑了下述情况：

首先注意了本书既可以作为化学工作者学习 BASIC 语言的入门教材，也有助于读者知晓算法语言在化学各领域的广泛运用。故本书包括基础和应用两大部分，共三篇。为了理论联系实际，书中举出了不少实例，以便读者更多地获得运用算法语言解决化学问题的途径和方法。

其次，根据笔者的教学经验，对于具有一定化学专业知识的读者，尽可能多地在计算机上学习和工作，是掌握和应用好算法语言的最佳途径。所以本书将各种练习和应用程序及其运算结果均一一列出，便于读者对照自学。本书所给出的很多程序并不是“最佳化”的，这样做的目的是为了更方便初学者学习编写程序，在计算机上实践时可得到进一步的补充和修改。这对教和学的效果来说，都是十分有益的。

再次，本书中给读者介绍的语言是目前各种微型机上通用的。而对于与机型关系密切的语言和命令，如图象显示、绘图语句及磁盘操作系统等则未及叙述。读者参照计算机的使用说明书，是完全可以掌握这部分内容的。

最后，本书中所介绍的程序和算例均系经计算机运算通过的，但仍很难避免印刷中的讹错。为了弥补这一缺陷，也为了减少读者不必要的输入程序的重复劳动，在出版本书的同时，为读者提供了录有本书程序的磁盘或磁带。需用的读

FB82/38-18

者可与四川教育出版社联系。

本书在编写过程中，得到四川省高教局及四川大学各级领导的支持和鼓励。我的一些同行及听课的研究生们为本书查阅资料，提供程序和算例，输录程序，校勘文稿等，付出的辛勤劳动，给了我很大的帮助。对此作者表示深深的谢意。

作者深感业务水平不高，书中的错误和缺点在所难免，敬请读过本书的读者不吝赐教。若本书能多少给化学工作者学习和应用 BASIC 语言有所帮助，作者将感到十分欣慰。

今年是我的母校——四川大学建校八十周年，谨以此书作为给校庆的一份小礼物，聊表心意。

田安民

1985年9月30日

于四川大学华西新村

目 录

前言

第一篇 BASIC语言

第一章 概 论..... (1)

§1 电子计算机在化学中的广泛应用..... (1)

§2 BASIC 语言的初步认识..... (6)

§3 程序框图..... (7)

第二章 数及其表达式和关系式..... (10)

§1 常量和变量..... (10)

§2 数的各种表示方法..... (11)

§3 常用函数..... (22)

§4 表达式..... (36)

§5 数关系式..... (37)

§6 逻辑表达式..... (39)

§7 各种表达式和关系式的运算示例..... (46)

第三章 字符串 (51)

§1 字符串与代码..... (51)

§2 字符串表达式与关系式..... (52)

§3 字符串函数..... (54)

第四章 输入语句与输出语句..... (62)

§2 赋值语句..... (62)

§2 键盘输入语句..... (67)

§3 读数和置数语句..... (73)

§4 固定格式输出语句..... (81)

§5 自由格式输出语句..... (86)

第五章	转向语句与条件语句	(95)
§1	无条件转向语句.....	(95)
§2	简单条件语句.....	(97)
§3	多条件语句.....	(106)
§4	选择转向语句.....	(120)
第六章	循环语句	(123)
§1	单重循环语句.....	(124)
§2	多重循环语句.....	(129)
§3	循环语句示例.....	(136)
第七章	数 组	(144)
§1	数组的描述.....	(144)
§2	数组的输入和输出.....	(145)
§3	矩阵的基本运算.....	(153)
§4	数组运算示例.....	(170)
第八章	子程序和其他语句	(179)
§1	几种常用语句与命令.....	(179)
§2	子程序.....	(184)
§3	子程序应用示例.....	(188)

第二篇 化学中常用计算方法

第一章	非线性方程	(204)
§2	一元二次和一元三次方程.....	(204)
§2	二分法.....	(209)
§3	Newton-Raphson迭代法.....	(217)
§4	应用实例.....	(219)
第二章	线性方程组	(232)
§1	Gauss-Seidel迭代法.....	(232)
§2	消去法.....	(241)
§3	应用实例.....	(259)
第三章	回归分析	(268)
§1	直线回归分析.....	(269)
§2	多项式回归分析.....	(274)
§3	正交多项式拟合.....	(279)
§4	非线性回归分析.....	(290)
第四章	插值方法	(303)

§1	线性插值·····	(303)
§2	Lagrange 插值法 ·····	(306)
§3	样条函数法·····	(313)
§4	插值方法的比较·····	(332)
第五章	本征值和本征向量 ·····	(341)
§1	本征方程·····	(341)
§2	Jacobi方法·····	(345)
§3	QL 方法·····	(355)
§4	广义本征方程·····	(360)
§5	应用实例·····	(366)
第三篇	化学应用程序	
第一章	普通化学 ·····	(381)
§1	化学元素的性质·····	(381)
§2	用字符串运算方法配平化学反应方程式··	(399)
§3	X 射线衍射图谱解析·····	(409)
第二章	量子化学 ·····	(419)
§1	Hückel简单分子轨道法 (HMO) ·····	(419)
§2	M-P 定域化方法·····	(433)
§3	常见点群特征标的建立·····	(447)
§4	置换的基本运算·····	(463)
第三章	美国 SERAPHIM 项目序选 ·····	(484)
§1	元素和离子的名称·····	(484)
§2	酸碱滴定实验·····	(494)
§3	模拟化学平衡·····	(504)
§4	有机化学反应·····	(514)
§5	模拟合成氙氟化合物的实验·····	(529)

第一篇 BASIC 语言

第一章 概 论

§ 1 电子计算机在化学中的广泛应用

自从1946年第一台电子计算机诞生以来,它逐渐地进入化学的各个领域,尤其是微型电子计算机出现之后,便迅速地渗透到化学的各个分支学科中。现在它已成为化学工作者手中一种强有力的甚至是必不可少的工具了。

我们对世界上影响较大的美国化学文摘(C.A.)作过粗略统计,有关计算机使用的条目列于下表中

表 1 C.A. 中计算机应用于化学的条目

年 代	卷	条目数	平均每卷条目数
1947—1956	41—50	74	8
1957—1961	51—55	217	44
1962—1966	56—65	1950	195
1967—1971	66—75	5200	520
1972—1976	76—85	7680	770
1977—1980	86—93	11100	1390
1983	98		1500

按每年两卷计算则目前估计每年有近 3000~4000 条 有关计算机应用于化学中的文献。当然若与每年化学文献数为40万条相比还仅占百分之一的比例。从这一简单的统计可知,计算机用于化学中的文献正在迅速地增长。但在浩瀚的化学文献海洋中,它还是一支较小的支流,还有待于进一步的发展。

自70年代以来已逐渐创办了专门登载计算机在化学中应用的杂志。比如

Computer and Chemistry

Journal of Computational Chemistry

Journal of Chemical Information and Computer Science

Computer and Chemical Engineering

计算机与应用化学在有的化学杂志上有专门的栏目发表这方面的文章, 如 Journal of Chemical Education.

我们对 Journal of Chemical Education 的1976~1981年进行统计共有154个课题, 其中

1. 分析化学12篇, 它包括: 酸碱滴定曲线, 电位滴定曲线, 酸碱化学平衡, 定量分析的模拟, 定性化学分析。

2. 无机化学12篇, 它包括: 无机物的命名及其分子式, 简单分子的路易斯结构, 平衡化学反应方程式。

3. 有机化学12篇, 它包括: 有机定性分析, 有机合成设计, 有机物的命名, 有机分子的显示, 有机分子立体化学构型, 有机合成的计算机辅助教学。

4. 化学动力学14篇, 它包括: 酶动力学数据分析, 酯的氢化催化动力学, 二级反应动力学数据分析, 动力学实验数据绘图程序, 一级反应动力学机理的模拟, 模拟动力学的通用程序。

5. 波谱学24篇, 它包括: X射线, 红外光谱, 电子光谱, 质谱分析, 核磁共振等,

6. 计算机绘图 8 篇, 它包括: 画分子和晶体结构图形, 三维投影图绘图程序, 电导曲线, 电子云密度图等。

7. 化学热力学 8 篇, 它包括: 化学平衡和热力学函数计算。

8. 其它还有实验模拟12篇, 量子化学 8 篇, 计算方法 7 篇, 色谱学 5 篇, 化学情报 4 篇, 计算机辅助教学28篇。

在 Computer and Chemistry 杂志上自1976~1982 共 124个课题, 它包括以下九个方面, 量子化学46篇, 分析化学 4 篇, 物理化学38篇, 有机化学 4 篇, 无机化学 5 篇, 高分子化学 4 篇, 光谱学 4 篇, 绘图19篇。

由上述粗略统计可知, 计算机应用于化学教育和研究中是多方面的, 它已涉及到化学的各个领域。

近年来已开始出版计算机用于化学方面的教材或专著, 读者如有兴趣可参阅文献 [1]~[7]。

由于计算机用于化学的深入发展, 已逐渐形成一个新兴的边缘学科, 人们通常称为计算机化学 (Computer Chemistry) 或计算化学 (Computational Chemistry)。

一般所说计算化学的任务是以电子计算机为工具, 解决有关化学中的理论计算及实验测试课题。

就电子计算机在化学中的应用说来, 有一个很大范围的部门是将计算机或微处理机与实验测试装置相联结 (即所谓在线操作或实时控制), 并加上必要的技术措施而实现实验过程的自动化和最优化。在我们这儿所说的计算化学不包括这类问题。

按照计算化学研究的内容, 大致可以分为以下几个方面:

1. 实验数据的处理

利用电子计算机可以对已经获得的大量实验数据进行存储与加工。它包括有：误差分析，曲线拟合，图象显示及绘图技巧等。波谱学实验中目前正广泛地研究这类课题。

2. 电子计算机应用于化学各领域中

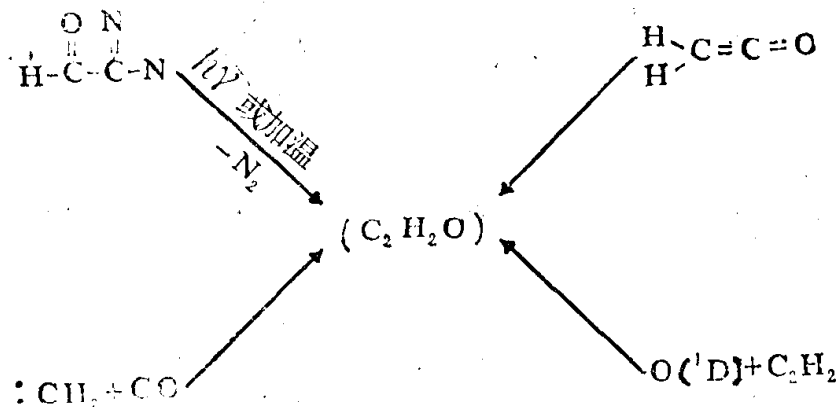
电子计算机对于化学中的每一个分支领域都是很有用处的。前面所列举的文献已经可以清楚地看到这一点。在此简要地说明两个事例。

首先，电子计算机用于化学中最广泛和最有成效的部门是量子化学，且量子化学的发展与计算机有十分密切的关系。

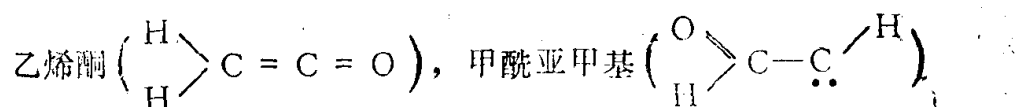
因为量子化学的计算过程较为复杂，计算工作量十分繁重，比如在计算复杂的多电子体系时需计算大量的积分，求解广义本征方程的本征值和本征函数，如果没有电子计算机就很难甚至是不可能完成的。以往只能得到较为定性的或半定量的结果。但目前高速的，大型电子计算机迅速发展已为量子化学发展提供了良好的物质基础，使量子化学不仅有可能从理论上对实验作出定量的，较为精确的解释。而且具有一定的预测性，还可能获得实验上不易测得的性质。

最著名的事例为1978年 Wetmore 和 Schaefer III [8] 在量子化学从头计算法中采用了一些精湛的计算方法，计算了乙炔的两种最低三重态，从理论上预测乙炔的顺式三重态的 3A_u 到 3B_2 的跃迁是允许的。可以看到其跃迁的振动和转动光谱。H. E. Hunziker 等 [9] 用红外光谱实验测得其跃迁能级为 0.92eV ，与理论计算相差 0.15eV 。实验与理论预测十分符合。因此有人称它们为量子化学开创了第三个时代 [10]。

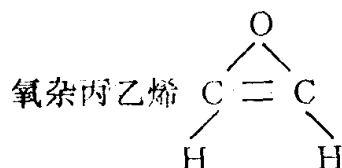
第二，在有机合成领域中近年来在利用电子计算机来选择有机合成路线及研究有机反应机理方面已取得了显著的成效。例如 [4]，计算了 Wolff 重排。



所生成的异构体有四种



羰基乙炔 $H-C \equiv C-H$ ，及



更引人注目的是 I. Ugi 及 Wipke 等〔4〕经过长期的工作，已经建立了一系列的计算程序，它能确定好几百个有机合成的路线选择及其机理，例如他们研究了由组胺酸经十七步转化成甲酰异谷氨酰胺（formyl isoglutamine）的历程。其反应途径可表示如下：



无疑地随着第五代电子计算机的出现,利用电子计算机的人工智能作用,研究有机合成设计以及相类似的如反应机理,催化剂选择等,将是一个十分诱人的课题。

3. 电子计算机辅助教育

由于微型电子计算机不仅有数字计算功能,而且有很强的文字处理手段,以及图象显示和绘图技巧。因此将它利用在教学各环节中,对于直观化,形象化及启发式的教育,培养学生思维和判断能力方面无疑均是十分有效的。

目前,国外有人提到将计算机用于教育有三种方式〔1〕:

(1) CAI (Computer Assisted Instruction), 即计算机辅助教学。它是利用计算机通过会话形式来实现教学的功能。计算机在终端将存贮的文字或图象的教学资料供给学生,学生通过键盘命令进行学习。可用于给学生授课,答疑,辅导,自学,进行实验模拟等。

(2) CMI (Computer Managed Instruction), 即计算机管理教学。系利用计算机管理和指导教学过程,例如学生成绩存档,分析学生学习情况,测验与考试评分等。

(3) CAugi (Computer Augmented Instruction), 即计算机扩大教学。它是在CAI的基础上给学生一些更复杂,更高级的训练。例如较为复杂的计算过程,学生自编程序的检查,修改,运算等环节。

如美国匹兹堡(Pittsburgh)大学有关化学教学的CAI程序,包括有以下二十多种程序:溶液平衡的概念;比尔定律的计算;玻尔原子概念和计算;周期数、量子数和磁性质;浓度单位,中和反应,溶液的化学计量问题;冰点下降、沸点升高与分子量测定;电化学,电解计算,当量电功转换,电池电动势及平衡常数的计算;模拟确定铜和硫化物经验式的化学计量实验;模拟确定亚佛加德罗常数的实验;理想气体定律的计算;气体

平衡问题;反应速度与活化能(模拟动力学体系 $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B$); 吕·查德里原理练习,无

机离子和酸的命名;核反应的能量变化; $PH-H^+$ 和 $POH-OH^-$ 的计算练习;平衡酸碱溶液中氧化—还原半反应;分子量测定,经验式,同位素原子量的测定,平衡方程式;化学反应中热焓,熵,自由能的变化;模拟强酸—强碱,弱酸—强碱及强酸—弱碱的滴定;单位换算,密度,比热。

4. 化学信息的存储与处理

由于化学物质数目及其性质,合成方法等的研究,以及化学文献的迅速增长,靠人工来了解和分析各种资料已经十分困难。而计算机用于存储与处理化学中的各种信息是十分方便与有力的手段。因此化学数据库的建立与使用已经成为专门的学问。利用电子计算机查找化学文献,已经在我国开展起来,对教学和科研起了很大的作用。

5. 化学中的数值方法

它是将数学的计算方法具体地应用于化学过程中,通常是研究化学中一些常用的,共通的,较为复杂的计算方法,是计算化学的核心。比如实验数据的内插,函数拟合,

线性方程组求解, 高阶方程组求解, 解微分方程组, 求本征根与本征函数等, 他们均与化学中量子化学, 分析化学, 化学平衡, 化学动力学, 实验数据处理等密切相关。但由于此问题较为专门, 故拟于本书的第二篇对这方面作一些必要的介绍, 以利于读者进一步学习之用。

§2 BASIC 语言的初步认识

化学工作者要学习和掌握电子计算机在化学中的应用, 至少要学会一种“语言”并能编制一些自己所需要的计算程序。

要使用计算机, 要使得计算机按照人的意图办事, 必须给计算机发出一系列的指令和信息, 并和它进行交换, 这就需要采用某种“语言”。电子计算机所能接受的语言有三类。第一类是由一系列二进制数字所组成的语言叫做机器语言。第二类是由字母, 数字或符号组成的汇编语言。编制这两种语言十分繁杂, 由于它们和我们习惯用语差别较大, 所以较为难学, 难记, 而且随不同的机器又有不同的规定。对于以进行计算为主的使用者, 可以不必学习它。但若要想研究电子计算机的实时操作与控制过程的人, 学习和掌握它则是十分必要的。它特别是实验过程中使用微处理机的基础。第三类语言, 即电子计算机的高级语言。这类语言仍然是由字母, 数字或符号组成, 但它们的书写形式和表达方式更接近于人们习惯的语言和数学式子。因此对使用者更易于学习和掌握。

目前已经有近百种这类高级语言。它们是随着应用的范围和目的不同而设计的。对于科技工作者通常以 BASIC 和 Fortran 两种为最普遍。对于初学者或以使用微型电子计算机为主的人, 首先掌握 BASIC 语言是必要的。

BASIC 语言的特点是语言结构比较简单, 所使用的命令, 语句中的词汇, 运算符号以及数学式子与通常的表达方式都很接近。而且普通 BASIC 语言是所谓解释性的语言, 即电子计算机按照程序逐条运算, 因此便于使用者查错, 修改, 并可与机器会话。这对于计算不太复杂的题目, 以及利用计算机进行显示, 辅助教学等是十分可取的。

当然 BASIC 语言也有其局限性, 正是由于它的语句简单, 因此要计算较复杂的题目是十分困难的。也正是由于解释性的, 所以运算速度较慢。

应当指出, 包括 BASIC 在内的任何一种高级语言, 虽然都具有通用性, 即其基本的语句在不同的机器上均可使用。然而在不同的机器上均可能会有各种不同的规定, 特别是有关机器的系统操作指令, 比如磁盘操作系统, 输入输出指令以及与各种硬件相联的操作系统都是会有差异的。

在本书中我们不拟以介绍某种计算机的使用及其语言为目标。而是介绍共通的、基本的语法内容。读者按照本书的内容, 对于不同的计算机, 根据其使用说明书或操作手册进行学习, 是不难达到学习和掌握 BASIC 语言及其在化学中的应用这一目标的。

§3 程序框图

在掌握 BASIC 语言的基础上, 要学习, 使用或分析计算程序, 学会编写程序框图是十分必要的。编制一份程序的目的是要解决我们所需要运算的一个课题。因此在编制程序之前必需将我们解题的详细步骤和方法一一依次列出。框图就是用文字、图形和线条来表示解题的流程。

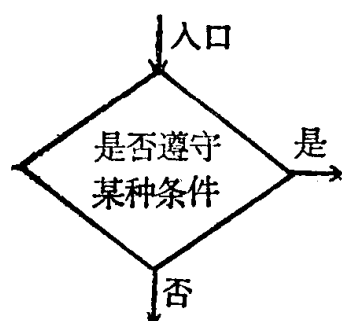
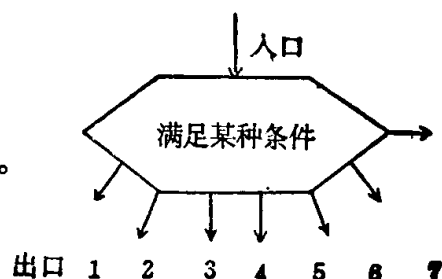
这里首先介绍编制框图的一些常用图形。

圆形○表示开始和结束。

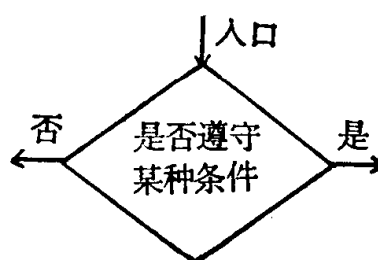
矩形□表示一个或一系列的赋值语句。

菱形<>或六边形⬡表示进行一种条件判断。

有一个入口和两个以上可能的出口。



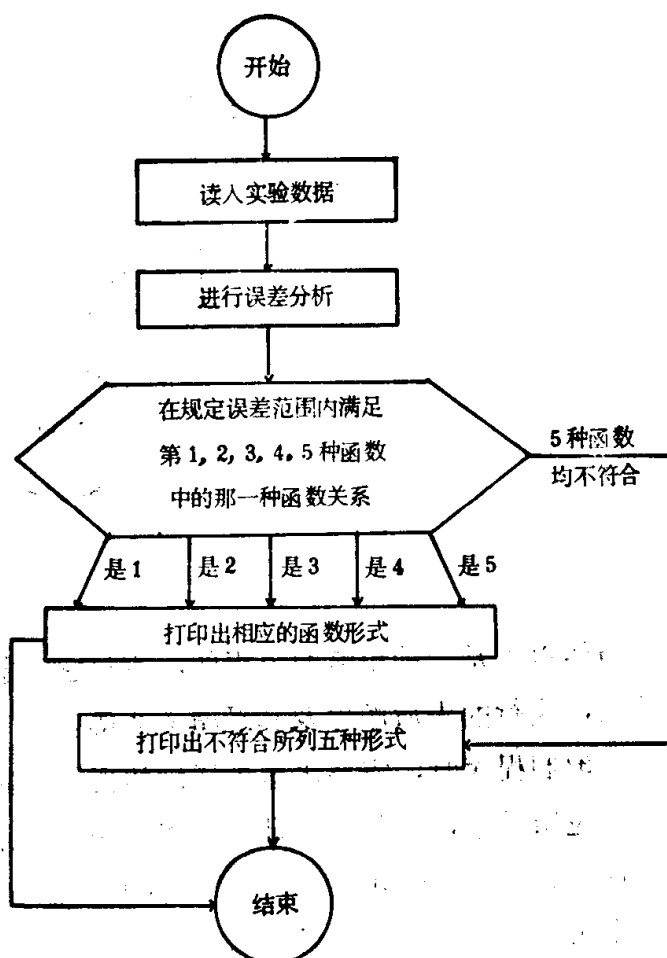
或



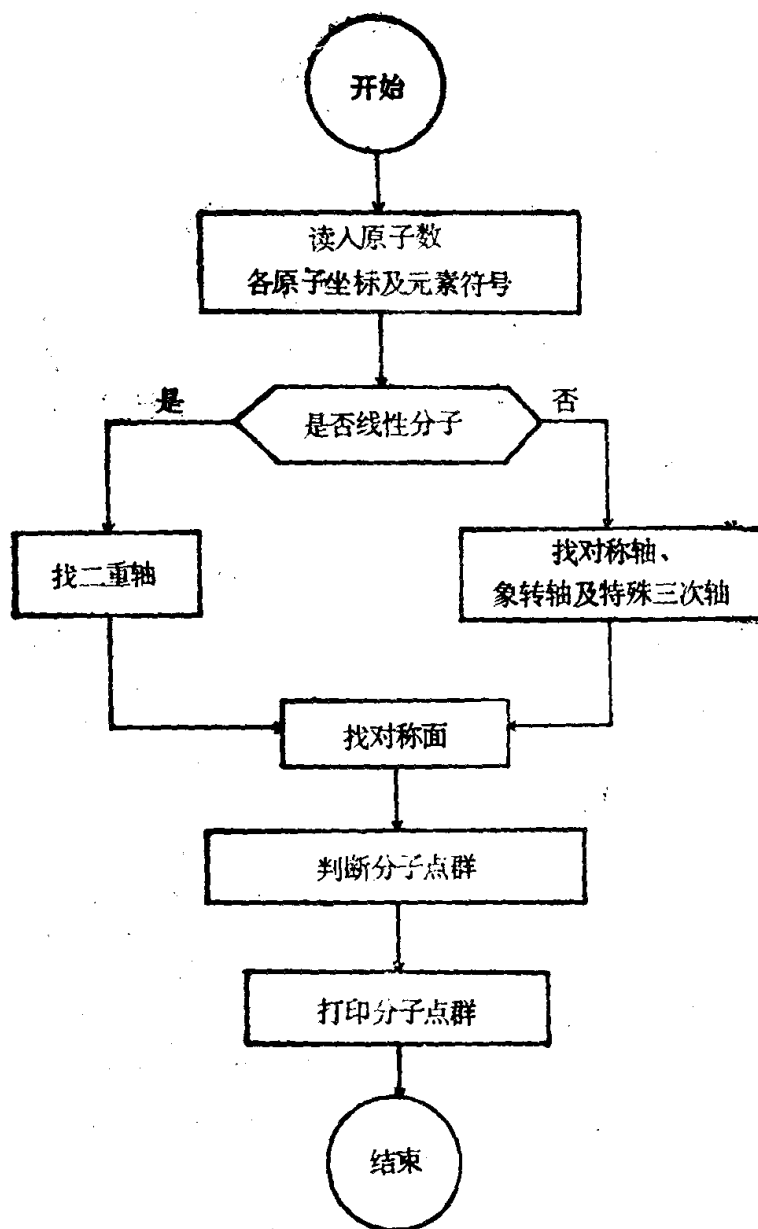
流向线——→, 箭头的指向表示程序执行的前进方向。

以下举两个实例说明框图的写法。

例 1 若需将得到的一组实验数据, 进行误差分析, 并检验是否具有可能的五种函数关系。其框图如右所示。



例 2 判断一个化合物分子点群时的框图。



当然以上是一种粗略的流程图，不过它已能反映出在解决以上两个课题时将采用什么公式，执行的先后顺序及其逻辑关系等。

在编制程序时，需要比这更详细的框图。其中需要标明程序中所用各种符号，计算式子，逻辑关系，以及各种计算过程的相互调用等。

这里有必要罗唆几句，有的初学者不十分明确学习编写框图的重要性，因而认为这样做是多余的。恰恰与此相反，编写框图会使你思路清晰，符号不乱，有条理，有逻辑地解决问题。对于编制程序会起到是事半功倍的作用。若要阅读一种程序，用框图的办法去解剖它也是很有好处的。所以建议读者千万不要忽视它。