

27

计算机与环境科学

白乃彬 编著

中国环境科学出版社·北京

图书在版编目(CIP)数据

计算机与环境科学 / 白乃彬编著. -北京: 中国环境科学出版社, 2001.12

ISBN 7-80163-241-9

I. 计… II. 白… III. 计算机应用-环境科学 IV. X-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 091903 号

责任编辑 朱丹琪

版式设计 郝 明

出 版 中国环境科学出版社出版发行
(100036 北京海淀区普惠南里 14 号)
网 址: <http://www.cesp.com.cn>
电子信箱: cesp@public.east.cn.net

印 刷 北京联华印刷厂

经 销 各地新华书店经售

版 次 2001 年 12 月第 1 版 2001 年 12 月第 1 次印刷

开 本 787×1092 1/16

印 张 20.25

字 数 493 千字

定 价 41.00 元

目 录

第一章 绪 论	1
第一节 本书宗旨，意义及内容简介	1
第二节 计算机硬件一般及软件支撑环境	2
第三节 操作系统	2
第四节 文件编辑系统	4
第五节 语言编译系统	5
第六节 系统开发工具	5
第七节 计算方法，算法语言和程序汇编	6
第八节 程序调试与运行	7
第九节 程序调试实例	8
第二章 环境计量学——主成分分析	11
第一节 多维数据	11
第二节 主成分分析	13
第三节 主成分分析实例	19
第四节 因子分析	19
第三章 环境计量学——聚类分析	22
第一节 “类似性”表达	22
第二节 聚类方法	22
第三节 聚类分析程序	24
第四节 模糊聚集分析	28
第五节 聚类分析应用实例	33
第四章 模式识别 (I)	35
第一节 模式识别的基本原理	35
第二节 模式识别的基本步骤	36
第三节 模式识别程序包	38
第四节 非线性映照法	38

第五章 模式识别(II)	53
第一节 两类数据超平面分离法	53
第二节 两类数据超平面分离法程序	56
第三节 SIMCA 方法	64
第四节 模式识别应用实例	67
第六章 环境污染物的定量构效关系	69
第一节 概念模式	69
第二节 数学模式	70
第三节 文献报导若干应用实例	74
第四节 80 种硝基多环芳烃分子结构与对鼠伤寒沙门氏菌的致变性能关系	75
第七章 环境问题的概念分类	99
第一节 数值分类和他们的局限性	99
第二节 概念分类一般	100
第三节 概念聚类中的变量	100
第四节 概念聚类中的样本类似性表征	101
第五节 概念聚类的特征提取	103
第六节 概念聚类的分类识别	103
第七节 概念聚类与专家系统	104
第八节 环境问题概念分类应用实例	107
第八章 人工神经网络在环境科学中的应用	111
第一节 多元非线性环境数据系统	111
第二节 反向传播方法	113
第三节 改进的反向传播算法程序	114
第四节 程序执行	126
第五节 不同模型质量比较	129
第九章 遗传神经网络算法与应用	131
第一节 遗传算法概述	131
第二节 遗传算法的发展及其应用	136
第三节 人工神经网络及其在 QSAR 中的应用	138
第四节 遗传神经网络	141
第五节 醛类化合物分子结构与对鼠急性毒性关系	146
第六节 遗传算法程序	151

第十章 大气高斯烟羽模式	165
第一节 环境模式概论	165
第二节 点排放源大气高斯烟羽模式	166
第三节 线排放源大气高斯烟羽模式	168
第四节 复杂线排放源高斯烟羽模型子程序	170
第五节 面排放源大气高斯烟羽模式	172
第六节 区域大气高斯烟羽模型	173
第七节 应用实例	173
第十一章 天然水体水化学平衡模式	175
第一节 天然水体中重金属的形态及其各类产物的分布	175
第二节 天然水体水化学平衡模式一般	175
第三节 天然水体系统化学成分的数学表达	176
第四节 以金属配体浓度表达的络合物平衡方程	177
第五节 含有固体或气体相的平衡方程	178
第六节 牛顿法求解非线性方程组	179
第七节 微机天然水体水平衡模式程序	180
第八节 应用案例	186
第十二章 流域范围的碳、氮、硫、磷生物地球化学循环模式	188
第一节 流域范围的碳、氮、硫、磷生物地球化学循环模式意义	188
第二节 建立流域模式的时间与地域尺度	188
第三节 流域模式的概念模型	190
第四节 流域水平衡的水力学模式	190
第五节 海河流域水平衡案例研究	192
第六节 流域营养物平衡模式	194
第七节 典型管理模式简介	197
第八节 作物生长模拟子程序	198
第九节 海河流域氮平衡案例研究	202
第十三章 农田土壤水平衡模式	204
第一节 农田土壤水平衡的概念模式	204
第二节 水流动方程	205
第三节 $K-\theta-h$ 经验关系	206
第四节 根水吸收项	207
第五节 坐标系统	208
第六节 有限差分法展开水流动方程	209
第七节 线性代数方程组求解	211

第八节	水平衡概算	212
第九节	高斯主元消去法子程序	213
第十节	模型所需参数的田间实验测量	215
第十一节	结果与讨论	219
第十四章	农田土壤氮平衡模式	223
第一节	模型一般	223
第二节	数学模型	224
第三节	坐标系统	227
第四节	有限差分法求解溶质迁移-弥散方程	228
第五节	程序简介	230
第六节	热流方程子程序	231
第七节	溶质迁移扩散子程序	234
第八节	田间测量	237
第九节	结果与讨论	242
第十五章	中国大陆温室气体排放估计与预测	247
第一节	全球气候变暖与温室气体排放	247
第二节	中国大陆主要温室气体排放源汇概念模式	248
第三节	计算模式	249
第四节	数据源	252
第五节	目前中国大陆温室气体排放估计及源分析	258
第六节	中国大陆近 40 年温室气体排放估计及源变化分析	259
第七节	中国大陆温室气体 CO ₂ 、CH ₄ 和 N ₂ O 1°×1° 网格排放估计	264
第八节	大气中温室气体 CO ₂ 浓度预测模式	268
第十六章	环境科学数据库	273
第一节	环境信息管理科学概论	273
第二节	有关数据和数据库的一些基本概念	273
第三节	排序	274
第四节	检索	276
第五节	数据管理系统程序示例	276
第六节	数据库	282
第七节	数据模型	284
第八节	数据源	285
第九节	数据库设计	287
第十节	环境信息系统	289
第十一节	化学物质毒性数据库	290

第十二节	化学危险品安全特性数据库	292
第十三节	化学银行	293
第十七章	环境专家系统	295
第一节	专家系统的概念模型	295
第二节	知识与知识表达	295
第三节	语境树	297
第四节	推理机	297
第五节	结论的置信度	298
第六节	专家系统工具	298
第七节	环境专家系统开发	299
第八节	国外环境专家系统	299
第九节	国内环境专家系统	302
第十节	有较长的应用背景的环境专家系统	303
第十一节	基于事实的推理型专家系统	305
第十二节	环境专家系统与神经元网络	305
第十三节	环境专家系统是环境数据库、环境信息系统的进一步补充与完善	306
第十四节	环境模式计算与环境专家系统	307
第十五节	用 LISP 语言编写规则集和反向推理机的案例研究	308

第一章 绪 论

第一节 本书宗旨，意义及内容简介

近 20 年来，随着计算机的出现、发展及其广泛应用，计算机，特别是微机，已经走进实验室，成为科学工作者的得力工具。它已深入到环境科学的各个分支学科领域之中，开始形成独立的子学科。

现代科技工作者不可不掌握外语，“语言”难以进入科学领域；同样，不掌握计算机原理与操作的“机盲”也难以工作。在应用中明白原理和熟练操纵它，乃是扫“机盲”之捷径。重在应用！在应用中求发展是作者的一贯主张。计算机本身是工具，但计算机在环境中的应用却形成一门学科。将读者引进计算机应用之门，学习若干典型模型和模式的原理、算式、算法及程序是本书选材宗旨。将来读者如何应用计算机在自己的工作中发挥效益，其“修行”工作就看你本人了。

从纯粹应用角度来看，读者的工作可分为以下三个层次：

工作以实验为主。读者需要用计算机做结果的统计分析整理，数据质量评价，简单因果关系定量表达，以及数据联机检索与加工。

工作为实验和计算参半。读者需要应用计算机进行模型和模式计算，在错综复杂的数据集合中寻找规律；或做实验条件的优化选择与控制。

工作以计算为主。读者工作包括为具体目的而使用的程序软件包之开发，数据库、专家系统和其他环境信息系统的建立、构筑及管理。最近兴起的环境科学软科学研究着力于优化决策模型设计及程序的实现。

相应于上述三层次，本书共分十七章：

第一章讲解学习本书的读者所应必备的若干预备知识；第二至第九章讲环境计量学，着力于实验所得的多维数据统计处理；第十至十四章讲目前环境科学中较为典型的几类模型或模式的原理和计算方法；最后三章涉及环境数据库，环境专家系统和环境信息系统，它们的设计、实现与管理。

人工智能(模式识别，专家系统，神经元网络等)近年来发展很快，应用渗透到环境科学的各个领域，因此它做为解决问题的有效手段，贯穿于以上诸部分之中，也表明了本书的特色。

每一章多多少少带有程序习题，可以上机实习。用于教育目的的程序与解决实际环境科学问题的实用程序尚有较大区别，仅起“抛砖引玉”的作用；但力求做到基本结构近似，

公式尽量详尽，以资借鉴。有些实用程序较长，尽量摘其主要部分，以飨读者。

本书面对的读者是环境专业的研究生，兼及有一定实际工作经验的中青年环境科学工作者，因此，选材的原则是：注重基础，选择算法和模式注意典型性，易于由此及彼，由浅入深，而特别新，尚未为大量应用的算法和模式未加录入；注意新颖，特别注意选取近十余年国内外大量涌现和应用较广的算法和模式；避免重复，诸如一般环境数据的统计处理应用较广，但读者在大学课程里想必业已洞悉，不再赘述。当然，如同其它专业书籍一样，作者所熟悉的内容可能选取的较多，因此，它既可能形成特色，也可能挂一漏万，成为失误。

第二节 计算机硬件一般及软件支撑环境

计算机一般分为主机、输入和输出三大部分。主机又分控制器、运算器和内存等三部分，各部分之间有通道接通。在内存内，程序被翻译成指令，控制器把内容置入内存，运算时取出送到运算器，完成运算后将结果返回内存。简图示于图 1-1。

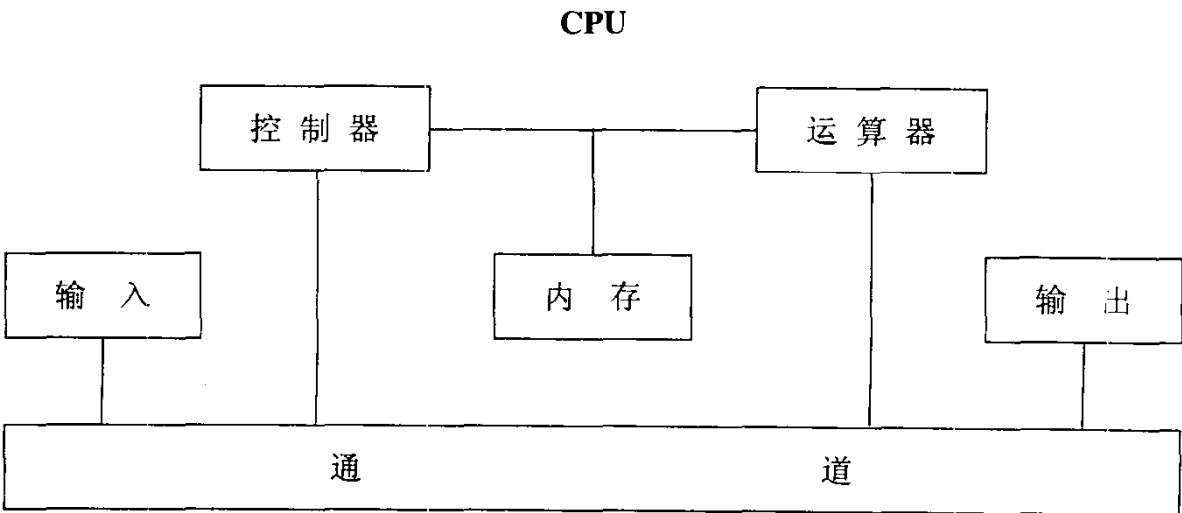


图 1-1 计算机硬件系统简图

一个能为用户使用得以开发专用软件，达到科学计算目的计算机，必需有常用软件支撑环境。软硬件环境层次示于图 1-2。

如图 1-2 所示，核心是裸机，即硬件部分；然后是操作系统、文件编辑系统和高级语言编译系统，为常用软件部分；再外层是高级语言写成的专用程序软件部分。如果读者尚想建立数据库、专家系统及环境信息系统，还得有各类开发工具，“壳(Shell)”等，为专用软件部分。具备这些基本软件支撑环境，计算机就丰满了。

第三节 操作系统

光有硬件，只是裸机，什么事也干不了。操作系统是第一层衣服，是管理和控制计算

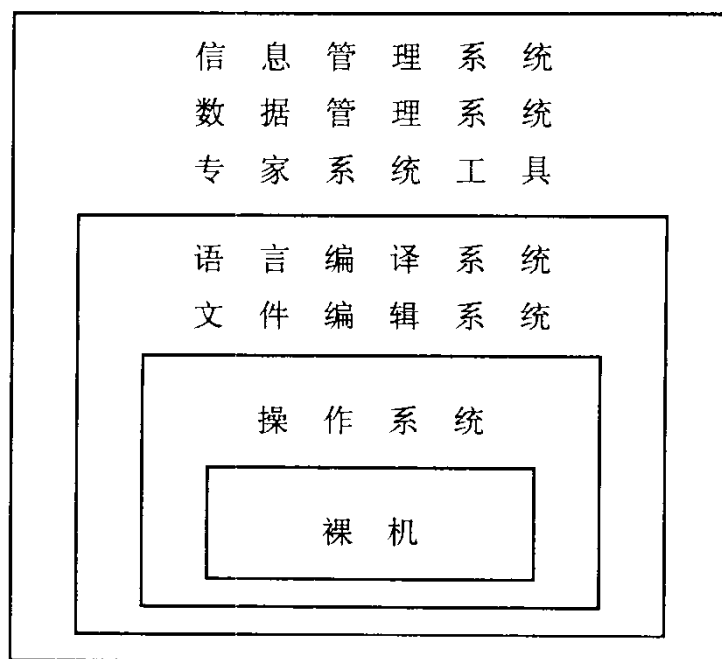


图 1-2 计算机软件支撑环境层次图

机的最基本的指令程序。微机操作系统通称 DOS。DOS 共有三个模块和一个程序，分别用于基本输入输出，文件管理，命令处理及引导。

引导程序。又叫自举记录。将 DOS 盘插入驱动器起动，引导程序开始工作，将其它三个模块读入内存。

IBMBIO.COM 为基本输入输出设备管理程序。用于对内存进行读写，是一个隐含文件。

IBMDOS.COM 为文件管理程序。在 DOS 控制下运行的程序要用到这些功能。它也是隐含文件。

COMMAND.COM 为命令分析处理文件。靠它来对键盘命令进行分析，然后付诸执行。

基本命令语言为目录管理、文件管理、初始化和格式化等。目录管理包括建立子目录，进入和退出子目录，显示目录及删除子目录等项命令。文件管理包括复制文件，更名文件，删除文件，显示文件等项命令。外部程序 FORMAT、CHKDSK、DISKCOPY 用于磁盘格式化，磁盘检查等。

常用 DOS 命令汇总如下：

CD	更改目录
CHKDSK	提供磁盘及内存信息
CLS	清屏幕
COMP	比较文件
COPY	复制和连接文件
DATA	输入或更改日期
DIR	显示目录

DISKCOMP	比较磁盘
DISKCOPY	复制磁盘
DEL	删除磁盘文件
FORMAT	磁盘格式化
MD	建立目录
RD	删除目录
RENAME	文件更名
TIME	输入或更改时间
TREE	显示目录树
TYPE	显示文件内容

WINDOS 也是一种操作系统。如果你在 DOS 环境中已经编译了 FORTRAN 程序，有可能在 WINDOS 环境中运行不了，这反映了某种不兼容性。因此必须退到 DOS 系统才能完好运行。最好在未进入 WINDOS 系统前就应退到 DOS 系统。

第四节 文件编辑系统

文件编辑系统是第二层，它需要在操作系统的支持下才能运行。该系统用于建立和修改文件。文件可以是文字的，诸如一篇文章；可以是程序，诸如一张源程序表；也可以是一批数据，诸如程序计算应输入的数据文件；还可以是个杂有文字和数据的表格。读者欲想开发一个新程序，首先要建立源程序，调试过程要反复修改源程序，还要打印输出过程及最终可运行的源程序，都需要借助文件编辑系统得以实现，使用频率极高，实在应该熟悉到“老朋友”的程度。

目前在微机上常用的文件编辑系统有 EDIT(在 DOS 命令中)等，新的功能更加齐全的文件编辑系统还在出现。该系统通常包括建立文件和编辑文件两个部分。建立文件部分包括建立文件，进入文件，记盘退出与不记盘退出等命令。编辑文件部分包括增加，插入，更改，移动，搜索，删除，显示，复制和替换等命令。

在菜单的引导下，EDIT 得以编辑文件，菜单命令如下：

# 文件菜单(FILE)	建立、打开、存储、打印文件和退出系统
# 编辑菜单(EDIT)	切割、复制、粘贴和删除文件
# 搜索菜单(SEARCH)	寻找、替代文件中若干字符
# 浏览菜单(VIEW)	分割窗口、缩放窗口和关闭窗口
# 选择菜单(OPTIONS)	打印机选择和颜色选择
# 帮助菜单(HELP)	命令说明和系统说明

此外，WORD(WINDOWS 系统)和 WPS(DOS 系统)功能更为完善，请阅专著。

一般情况下，C 语言编译系统本身就带有文字编辑系统。先在其文字编辑系统内生成源文件，再在其编译系统内生成目标文件和执行文件，非常得心应手。

第五节 语言编译系统

语言编译系统是第三层，由高级语言书写的源程序通过语言编辑系统变为计算机能懂的代码：ASCII 码或 EBCDIC 码，产生目标文件，然后经 LINK 将各目标文件与 FORTRAN 库连接起来，产生执行程序。

FORTRAN 语言编译系统目前已达 6.0 版本，高版本能容纳较大程序，所含文件亦较多，可达数十个。

对于课堂教学，可使用简单的低级版本，以减少内存，其最基本的文件应包括以下，缺一不可：

FOR1.EXE	编译文件
FOR2.EXE	编译文件
LINK.EXE	连接文件
FORTRAN.LIB	FORTRAN 库
MATH.LIB	函数库

FOR1 是编译的第一步，它检查源程序的句法，并产生 XXX.SYM 中间文件(符号表)和 XXX.BIN 中间文件(中间二进制码)。FOR2 读入 XXX.BIN，进行加工优化处理，最终生成 XXX.OBJ 和 XXX.COD 文件。FOR2 完成前，XXX.SYM，XXX.BIN 和由其产生的 XXX.TMP 文件自动删除。然后，LINK 命令将诸目标文件和 FORTRAN 库连接形成可执行的 XXX.EXE 执行文件。XXX.EXE 可直接在 DOS 下运行。

在编译过程中，计算机会自动显示出错信息，有助于用户查找和修改。当不再出现出错信息时，编译工作即完成，用户可以试算了。执行文件由代码组成，不能阅读。有的用户企图破译或逆转回源文件，目前尚难做到。

第六节 系统开发工具

系统工具是外层，用于用户的特殊目的。诸如：

AUTO CAD	图形辅助设计
GRAPHIC	简单图形绘图
PCMODEL	简单分子图形
DBASE	数据库
ARC/INFO	地理信息系统
EXSYS	专家系统
DENAMO	动态规划

系统开发工具一般都有详尽的说明书，用户手册，还有典型例子。只要用户依照指令，向“框架”中填充自己的数据，图形，图相，规则和方程，反复调试，可以达到自己的特殊应用目的。当然，这些系统工具也可以用户自己开发实现，甚至成为独立的科研项目。

第七节 计算方法，算法语言和程序汇编

用户欲想会在环境科学中应用计算机，除了上述必备软件及硬件之外，主观上尚需掌握一些基本知识，手头最好有一些常用的工具书。大致包括计算方法、算法语言和程序汇编等三项内容。

现在分析一下用户应用计算机解决环境科学问题的一般过程。选题，明确社会需求；从课题中抽提概念，总结规律，表达为数学语言，形成系列数学方程式；计算机的应用在于实现系列数学方程式的数值求解。数值求解大致分为三步：设计计算方法，谱写所有求解过程的一步一步数学式；应用算法语言依这些算式和输入输出项目内容编写程序；在计算机上调试程序和实现运算。最后，作计算值与实验值的有益比较，推演结论。现在先讲设计算法和编写程序。

设计某一具体领域的课题算法，除了极个别例外，总是参照前人有成效的算法实例，修改补充。使之适合于解决自己的领域问题。于是有两条途径，一个是查具体领域文献，一个是查算法汇编专著。有幸的是，近几十年来已经积累了大量不同类型的算法，特别是求解常见课题的算法已经分门别类，汇编成书，其内容往往遍及数学各个分支，力求齐全。两条途径各有所长：前者利于构筑总的框图，基本程序流；后者利于求解具体方程或方程组。例如，常见算法包括数值逼近，求最小二乘解，解线性代数方程组，解矩阵的特征值和特征函数，解非线性方程组，解超越方程，解常微分方程组，优化与规划及概率计算等等。

市场上均有由 FORTRAN 语言或 C 语言程序汇编专著出售，有时还附有程序汇编的源程序磁盘，用起来非常方便。

有了合适的算法，接下来的工作就是编写程序。目前已有若干种算法语言：

LOTO	儿童教育
BASIC	学生教育
FORTRAN	科学计算
PASCAL	数据管理
COBOL	商业管理
LISP	智能语言
PROLOG	智能语言
C	面向过程智能语言
C++	面向对象智能语言

其中 FORTRAN-77 语言适合于科学计算，搞数据处理、模型和模式的读者不可不会 FORTRAN-77 语言。FORTRAN-77 语言的最大优点是易于将大的程序分为若干小的子程序，通过主程序调用，分块管理，易于查错，并减少重复计算章节。常用子程序，尚可汇编成库，随时调用，效率极高。本书内容立足于该语言。但是学习 FORTRAN-77 语言是另外一门大学或研究生课程，在此假设，读者业已谙练，不再赘述。

C 语言则是一种适用于界面设计和表达人工智能的算法语言。本书在讨论遗传算法、

神经网络和专家系统在环境科学中应用时用到 C 语言。

实际上各类语言大同小异，必先熟悉其中一门，则可易于旁及其它。决不可门门浅尝辄止，最后哪门也不会。常常是通过编写和调试程序才能真正掌握好 FORTRAN-77 语言。依据初学者的常见毛病，谱写程序应注意的几点是：

掌握好列的概念，列要写对，规整；

注意嵌套概念，块结构是该语言编写程序最大优点，块与块要分清；

注意循环和转移；

注意变量的类型，整实分开；

哑实结合是该语言编程的关键，哑实结合清楚了，程序流就通了；

注意输入输出格式的正确书写。

实际上，由于可以借鉴和编辑某些现成的子程序形成自己的程序，故而，输入输出及循环转移的正确使用就显得十分重要。读者可先形成自己的程序流的“框架”，再经过哑实结合，调用自编的和现成的子程序，就编出了带有你自己特色的，解决你的领域特殊问题的程序了。

第八节 程序调试与运行

当编译源程序时，程序语句若有错误，则屏幕上当示出错误诊断信息，一般不能产生目标文件。错误诊断信息的具体内容请查阅手册。它将指出错误代码，级别和解释，甚至给出改错方案。有错不改不行，必需改到不再出现错误信息时为止。否则一算就错，白白耽误功夫。用户应利用错误诊断信息，但不能完全依赖它的提示，死搬硬套。出错的位置和出错原因往往不一致，显得答非所问，但肯定有错，如何判断，要独立思考和具体分析。还有连锁反应，实际仅错一行，但一批执行语句无效，出来一连串错误信息。少一个 END 语句，则整个子程序段无效。所以，有时改好一处，可消除数个，以至数十个错误信息。编译时，用户容易常犯的错误有：

混淆字形，0 和 O 混淆；I 和 1 混淆；

拼写不对，如 DIMENSION 写为 DIMENTION；CONTINUE 写为 CONTINEU；

下标漏写，如 A(I,J)写为 A(I)，并与 DIMENSION 语句不符；

串行，如：因看错，某行前半和下一行后半拼在一起，使人啼笑皆非；

少标号，如：有 GO TO 60，但程序段中却无 60 标号；

主程序或子程序段漏写 END 语句结束；

嵌套循环中，语句标号有误；

等等。

连接目标文件时，也可出错。如：有 CALL ABC(X,Y,Z)，但却无相应的子程序 SUBROUTINE ABC(X,Y,Z)或错写为 SUBROUTINE ASC(X,Y,Z)。

程序运行时，也因程序有毛病，常算不下去。屏幕此时也给出运行诊断错误信息。常见错误有：

除法分母为零；

库函数变元非法;
 上溢;
 下溢;
 输入格式不对;
 输入数据类型与变量类型不符, 整实不分;
 等等。

究其原因, 除了程序本身语句有毛病之外, 模型不对, 算式不对, 输入数据不对, 皆有可能。可据运行诊断信息提供的线索, 仔细查找。最可怕的是不出错误信息, 但算得的数值不对。就应该按程序流, 步步查找。核对数据文件中的数据数值和单位; 核对算式; 一段一段, 设置打印结果, 与手算结果核对, 直到正确无误为止。调试程序是个艰苦而细致的工作。

第九节 程序调试实例

为了克服量纲的影响, 在做多元统计分析之前, 必先作多维数据的标准化。若有样本矩阵 X_{ij} , $i=1, 2, \dots, N$; $j=1, 2, \dots, M$ 。则标准化后, 形成新的矩阵

$$X_{ij} = \frac{X_{ij} - \bar{X}_j}{S_j} \quad (i=1, 2, \dots, N; j=1, 2, \dots, M) \quad [1-1]$$

式中, $\bar{X}_j$ 为均值; S_j 为标准差。

$$\bar{X}_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_{ij} \quad (j=1, 2, \dots, M) \quad [1-2]$$

$$S_j = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_{ij} - \bar{X}_j)^2} \quad (j=1, 2, \dots, M) \quad [1-3]$$

先用文件编辑系统建立源程序 A.FOR(注: 程序中作了一些埋伏!)

```
PROGRAM NORM
DIMENSION X(100,10)
OPEN (UNIT=5,FILE='A.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (UNIT=6,FILE='A.RES',STATUS='NEW')
READ (5,10) N,M
10 FOREMAT (2I3)
DO 20 I=1,N
20 READ (5,30) (X(I,J),J=1,M)
30 FORMAT (10F5.2)
WRITE (6,40)
40 FORMAT (1X,'***** DATA INPUT *****')
```

```

WRITE (6,50) N,M
50 FORMAT (1X,'N=',I3,2X,'M=',I2)
DO 60 I=1,N
60 WRITE (6,70) I,(X(I,J),J=1,M)
70 FORMAT (1X,'X(',I3,' J)=' ,10F7.2)
CALL NORM(N,M,X)
WRITE (6,80)
80 FORMAT (1X,'***** DATA OUTPUT *****')
DO 90 I=1,N
90 WRITE (6,100) I,(X(I,J),J=1,M)
100 FORMAT (1X,'X(',I3,' J)=' ,10F7.2)
STOP
END

```

```

SUBROUTINE NORM(N,M,X)
DIMENSION X(100,10),DK(10),XK(10)
DO 40 J=1,M
XK(J)=0.
DK(J)=0.
DO 10 I=1,N
10 XK(J)=XK(J)+X(I,J)
XK(J)=XK(J)/N
DO 20 I=1,N
20 DK(J)=DK(J)+(X(I,J)-XK(J))**2
DK(J)=SQRT(DK(J)/(N-1))
DO 30 I=1,N
30 X(I,J)=(X(I,J)-XK(J))/DK(J)
40 CONTINUE
RETURN
END

```

然后，进行编译，形成目标文件 A.OBJ。实施连结，形成执行文件 A.EXE。建立数据文件 A.DAT。在 DOS 情况下运行文件 A.EXE，运算结束，产生结果文件 A.RES，打印输出。

参考文献

- 1 詹前树等. 1989. 常用软件上机操作与实践. 广州: 中山大学出版社.
- 2 刘德贵等. 1983. FORTRAN 算法汇编. 北京: 国防工业出版社.
- 3 尹彦芝. 1994. C 语言高级实用教程. 北京: 清华大学出版社.
- 4 白乃彬. 1987. 环境化学, 6(1): 78~84
- 5 石永丰. 1997. 轻松学习 Office for Windows 95 中文版. 北京: 清华大学出版社.