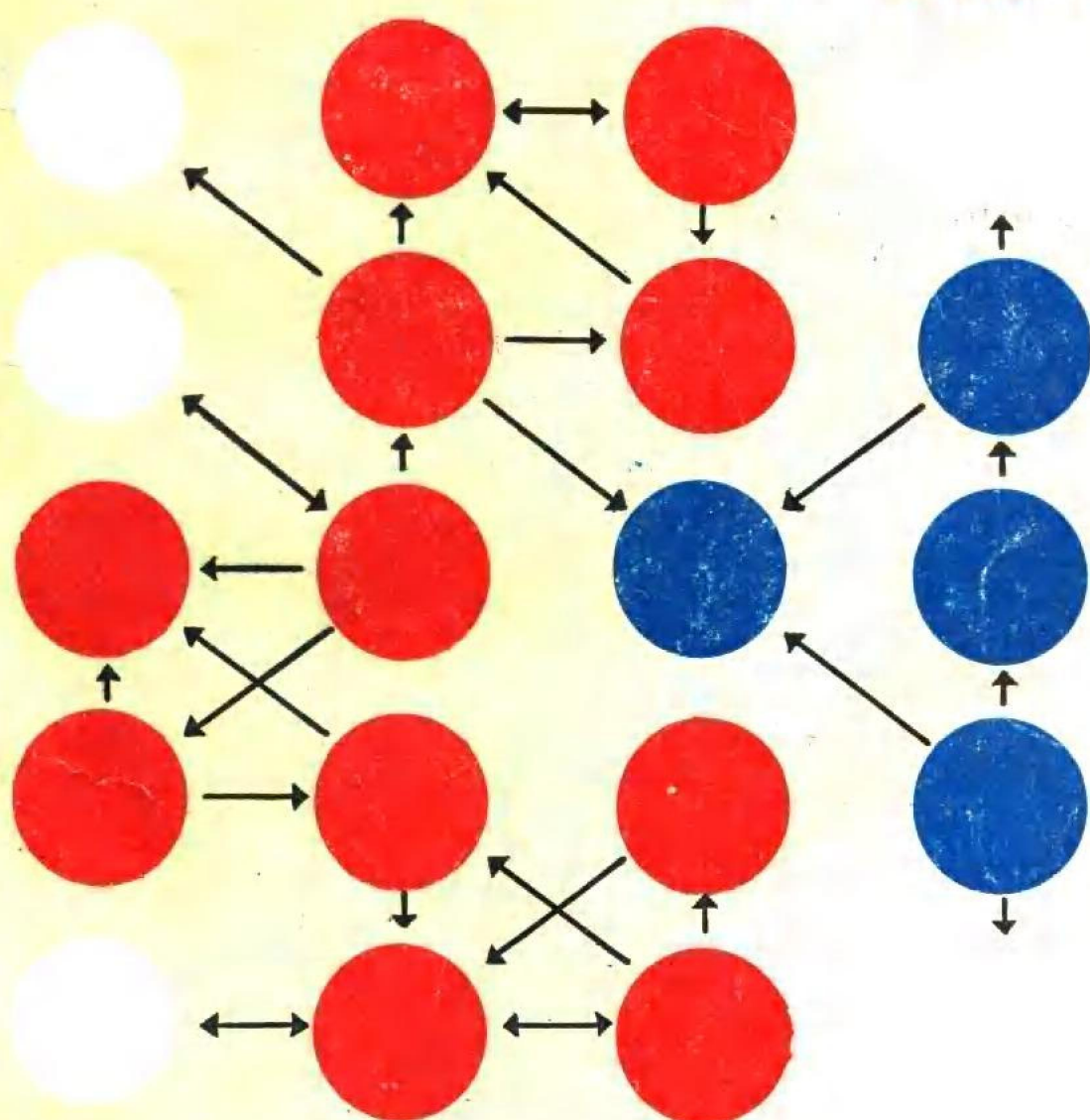


化学中的电子计算机

程序编排入门

[美] T·L·伊森豪尔 P·C·裘斯 著
刘旦初 龙英才 译 高 滋 许自省 校

复旦大学出版社



化学中的电子计算机程序编排入门

〔美〕 T.L. 伊森豪尔 P.C. 裘斯 著

刘旦初 龙英才 译

高 滋 许自省 校

复旦大学出版社

内 容 提 要

本书简明扼要地介绍了阅读、编制和使用计算机程序的必要知识,其中包括计算机构造、计算机逻辑和 Fortran 语言等内容;并由浅入深、由简及繁地介绍了 53 个常用的化学计算程序实例。这些实例多数是目前高校教学计划中安排的实验,或者是科学研究中经常遇到的计算问题。

本书可作为高等院校化学、化工及有关专业的教学参考书。也可供从事化学化工方面工作的科学技术人员参考。

Introduction to Computer Programming for Chemists: FORTRAN

T.L. Isenhour and P.C. Jurs

ALLYN AND BACON, INC.

Second Edition, 1979

化学中的电子计算机程序编排入门

〔美〕T.L. 伊森豪尔 P.C. 裘斯 著

刘旦初 龙英才 译

复旦大学出版社出版

(上海国权路 579 号)

新华书店上海发行所发行 复旦大学印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张 17.5 字数 420,000

1989 年 3 月第 1 版 1989 年 3 月第 1 次印刷

印数 1—2,500

ISBN 7-309-00069-1/O · 014

定价: 3.50 元

译 者 序

随着计算机技术的迅猛发展,计算机的应用已渗入到各门学科领域之中,化学自然也不例外。尤其是最近一二十年来,在化学实验室里,计算机已成功地应用于各方面,如采集数据、数学运算、控制实验、储存和提取信息以及检索等等。现在,一个成熟的化学工作者如果对计算机技术一无所知,简直是一件不可思议的事了。

本书作者有多年从事化学与计算机技术的教学经验,在书中用简单明了的方式向读者介绍了阅读、编制和使用计算机程序的必要知识,其中包括计算机构造、计算机逻辑和 Fortran IV 语言等方面。并且还由简及繁地介绍了 53 个常用的化学计算程序实例,便于让读者边学习边进行实际练习,达到既可以提高学习兴趣,又可以通过反复实践加深理解的目的。

鉴于以上特点,本书不仅对计算机技术感兴趣的初学者是一本不可多得的自学教材,同时也可用作高等院校与化学有关专业的教学参考书,更可以作为化学实验室中的必备手册,因为书中介绍的计算实例,多数是目前高校教学计划中安排的教学实验,或者是科学研究中经常遇到的计算问题。

由于水平所限,错误和不当之处在所难免,恳请同志们批评指正。

译 者

1984.10.30

序 言

近十年期间,计算机已开始在物理科学中广泛应用。计算机早已被用来执行一系列各种各样的职能:数字计算、数据采集、实验模拟、实验最优化、过程和实验控制、信息处理和使用等等。毫无疑问,未来的十年在诸如化学之类的学科中,计算机的应用范围甚至会更迅速地扩大。在编写本书之前我们的首要任务是确定当未来计算机实际上成为不可缺少时,一个化学系学生必须掌握哪些知识。

在美国和加拿大,调查了近二百个主要的化学系,发现每个系实际上都具备处理按 Fortran IV 编写的计算机程序的能力。因此,我们认为,向化学系学生透彻地介绍 Fortran IV 比简单地介绍几种程序语言要好。而且我们发现,这些学校大多数(但不是所有的)计算中心拥有第二代或第三代的国际商业机器公司 (International Business Machines Corporation) 的 7090 型计算机或 360 型系列计算机。为此,我们选择了 IBM 的 Fortran IV 语言,并且当需要列举与计算机有关的例子时,就选择适合 IBM 计算机特点的例子。但这并不意味着,没有 IBM 机器的用户不能利用本书。事实上,本书约半数的程序是先在 Raytheon 706 机器上开发的,然后再转换为 IBM 习惯的程序。正如本书所指出的,在任一特定的计算机上执行程序时,总需阅读该机的有关说明书。尽管如此,我们仍努力使本书适用于目前普遍使用的各种计算机。

我们希望写一本教材,使化学程度不同的学生获得从化学家的观点出发编制计算机程序的技巧。为此,尽可能不把题目分成程序语言、数值分析、化学理论等标题。我们感到,在任何领域中,作为编制程序的起点,本书的前三章都是必需的基础。然后,我们就直接进入本书的主要部分,它包括解 53 个化学问题的程序例子。这些示例在化学概念、数字模型以及程序的操作方面的内容都是按难度循序渐进的。通过学习这些例子,阅读其列表、流程图,并通过个人的练习,学生会很快成为内行的程序编制者。

因此,学生必须从头至尾阅读本书前两章“数字计算机介绍”及“计算机逻辑、程序以及流程图(框图)”。然后透彻地学习第三章 Fortran IV 的主要部分。(第三章后面部份“Fortran IV 的补充功能”,可待学生对简单的程序已具有一定的基础后再学习。)进而学生应立即转到学习 53 个例子,并按需要多读有关的课文和附录。学生务必照抄这些程序,在计算机上操作它们,并将结果与课文的各个例子加以比较。接着,学生对这些程序进行改动,最好先是简单地更动,然后再是复杂一点的改动。同时对各种更动作出验证。最后,学生应着手编写简单的程序。如果能成功,则立即编写更为复杂的程序。编制程序归根到底是学习程序的唯一途径。

Thomas L. Isenhour
Chapel Hill, North Carolina

Peter C. Jurs
State College, Pennsylvania

目 录

译者序	(1)
序言	(1)

第一部分 计算机基本概念和 Fortran IV

第一章 数字计算机介绍	(3)
第二章 计算机的逻辑、程序及流程图	(10)
第三章 Fortran IV	(15)

第二部分 程序

程序 1-A 碳氢化合物的摩尔量	(45)
程序 1-B 二元化合物的摩尔量	(47)
程序 1-C 任意数目的二元化合物的摩尔量	(49)
程序 1-D 任意原子数的化合物的摩尔量	(51)
程序 2 温标转换	(53)
程序 3 理想气体定律	(55)
程序 4 广义理想气体定律	(56)
程序 5-A 理想气体或 Van Der Waals 气体的计算	(58)
程序 5-B 理想气体或 Van Der Waals 气体的通用计算程序	(60)
程序 6 溶液浓度	(61)
程序 7 依数性	(64)
程序 8 气体的扩散	(66)
程序 9 Rast 分子量测定法	(69)
程序 10-A 由元素分析而得的所有的经验式	(71)
程序 10-B 由元素分析而得的合理的经验式	(73)
程序 10-C 二元化合物的经验式	(75)
程序 11 氢离子光谱	(77)
程序 12 用逐次逼近法计算弱酸的 pH 值	(80)
程序 13 以十个数值为一组的逼近法计算弱酸的 pH 值	(83)
程序 14 用行式打印机作图	(86)
程序 15 pH 滴定	(89)
程序 16 强酸与弱碱的滴定曲线	(93)
程序 17 电位滴定曲线	(96)
程序 18-A 质谱——碎片经验式	(99)
程序 18-B 质谱——选择碎片经验式	(102)
程序 19 求 π 值的 Monte Carlo 计算	(105)
程序 20 分馏	(108)
程序 21 相图——分馏	(111)
程序 22 线性最小二乘法拟合	(115)

程序 23	分光光度法	(119)
程序 24	二次式的最小二乘法拟合	(122)
程序 25	理论 NMR 图谱	(127)
程序 26	热力学参数	(129)
程序 27	X 射线衍射计算	(132)
程序 28	滴定曲线求解	(135)
程序 29	α 粒子散射	(138)
程序 30	统计的数据估价	(140)
程序 31	查表计算 ΔH	(144)
程序 32	指数函数拟合	(148)
程序 33	放射性衰变系	(152)
程序 34	无机定性分析步骤	(161)
程序 35	核结合能和核半径	(165)
程序 36	回旋加速器方程式	(168)
程序 37	化学动力学	(170)
程序 38	求根二分法	(173)
程序 39	有机合成	(175)
程序 40	矩阵求逆	(178)
程序 41	混合物的质谱定量分析	(182)
程序 42	红外光谱	(186)
程序 43	数值积分——Simpson 法	(191)
程序 44	由 C_p 计算 ΔS	(193)
程序 45	微分方程数值解	(196)
程序 46	理想气体定律训练	(199)
程序 47	结合能——裂变还是聚变?	(202)
程序 48	质谱检索系统	(205)
程序 49	体系模型	(208)
程序 50	Monte Carlo 法一级反应模拟	(216)
程序 51	学习机器	(221)
程序 52	特征多项式生成	(227)
程序 53	Fourier 变换	(230)

第三部分 附录

附录 A	二进制算术	(239)
附录 B	作业处理	(242)
附录 C	Fortran II 和 Fortran IV	(244)
附录 D	Fortran IV 的常用库存函数	(245)
附录 E	计算机术语汇编	(246)
附录 F	Fortran IV 程序的优化	(252)
附录 G	故障寻找	(254)
附录 H	随手操作	(257)
附录 I	卡片穿孔	(259)
参考书目		(269)

第 一 部 分

计 算 机 基 本 概 念 和 Fortran IV

第 一 章

数 字 计 算 机 介 绍

计算机正在急剧地改变着我们的生活。在现代世界,其应用已进入了并实际上影响着个人活动的各个方面。汽车备件和卖肉商围裙的订货、选举的预测及天气预报、棒球赛编排及长途汽车调度、甚至政治区域的划分,所有这些问题,都已习惯用计算机的分析来解决。对一般人来说,教堂捐献以及人寿保险是用计算机来记帐的;孩子在学校的课程表和电视机是用计算机设计的,支票和讣告是用计算机来书写的。

遗憾的是,应用计算机时,不希望见到的结果往往和好的结果同样出现。例如可以见到这样的话:“由于计算机出了差错,您的支票将晚三周”;“163 级公事备忘录今年必须提前三天送来,因为大学档案室有一台新的计算机提高了效率”。

如果把计算机看成是一种智能放大器,也许就可找出在应用计算机时产生的这种表面上不协调的原因。如若愚蠢是聪明的反面,那么可以预期,用电子计算机计算任何过程的结果是程序员不用计算机时成功程度与失败程度的放大。

计算机正在改变着许多科学的面貌,对正在进行的这一场革命,化学也不例外。作为一个现代化学家,高速数字计算机各种性能的用户须知正在迅速地成为必不可少的一种知识。计算机应用的方式极为广泛,但其在科学上的主要应用可归纳如下:

1. 计算机能有效而方便地进行数字计算,它比手算要快而且精确(第二代 IBM 7090 计算机每两小时的计算量相当于一个人一生的计算量)。
2. 一些问题如果用手算,所花的时间会使算出的答案毫无用处。然而计算机却能迅速算出结果。(例如,航天器轨道校正所需的计算必须在有限的时间内完成。待用手算得到解答时,已仅是纸上谈兵。)
3. 用计算机计算某些实验的最优化,或对实验实施模拟。(例如:知道了所包含的可复合的函数关系,计算机往往能模拟一个工厂的生产过程。根据该模拟,模型可最优化,无须经过昂贵的逐次逼近的发展过程便可建造最佳工厂。)
4. 计算机通常用于信息储存、使用、处理、管理以及大的数据库集显示。(例如,可找出数千条光谱线并与一条未知线比较,把最接近的十条依可能性为序排列并显示出来。这样的操作,在计算机中,可借助于不同的记忆装置,在数秒或数分钟内实现。这种记忆装置所起的作用,犹如一切库集数据的永久储存器。)
5. 实验过程中,可用计算机随时(在有效的时间内)采集数据,且常常能与实验仪器组装在一起,以便指导实验进行。例如,计算机化的 X 射线衍射仪能自动化程度相当高地收集数据,工作许多小时而无须人照看。
6. 能够编制程序使计算机随其自身经验的增加,不断提高成功率,并学会解决问题而显示出智能。(机器智能化的某些保护者甚至走得更远地说,计算机实质上是具有无限可能性的一种新的生命。)

以上所述表明：在广阔的科学活动中，计算机能大显身手。本书强调的是第一种，即数字方法。这是由于计算机用于计算是编制程序的主要应用。况且，在许多场合中，由于数学公式的简明性，它们是最容易议论的程序类型。当然，强调数字计算问题和举例并不意味着计算机的应用仅限于此。

近代的通用数字计算机是一种令人生畏的电子-机械组合体。看到过一台大型电子计算机的人，得到的最初印象（至少是初次遇见时），必然与许多复杂的机械动作联系起来。这些包括各种正在闪动着的灯、旋转着的磁带、嘈杂的高速打印机，噼啪作响的卡片阅读器，以及数千甚至数百万个藏在机器内的迅速地进行着各种复杂操作的电子线路。

所幸的是，一个人要很好地应用计算机，并不需要懂得机器内进行的操作。计算机可以像我们每天接触的各种机械的或电子的装置一样，当作“黑匣子”来处理。例如，一种被人们完全视为“黑匣子”的极其复杂的装置就是普通的电视机。虽然只有少数使用者或修理者，能明确地懂得调制失真或图像投影的概念。但一般年仅 8 岁的孩子就能正常地使用电视机。

很明显，许多属于装置内部的工作知识，对于适当地或者甚至是高效地使用该装置来说，并非必需。真正需要的是该装置输入和输出结果之间的联系。

进行本项讨论的同时，我们急需指出，众多的计算机程序编制员，其中很多人可算是专家，仅有有限的，或根本没有计算机的内部工作知识。本书在讨论程序编制时，将假定我们的读者所具有的关于计算机的知识不超过它是一个“黑匣子”的概念。因此，我们主要涉及的是获得所需应答的方法，例如获得欲得到的计算答案的方法。本书下面将把计算机的内部构造大体上简明地介绍给有兴趣的读者。必须指出，理解这部分内容，对成功地学习本书的其余部份不是必要的。

计算机的内部构造

数字计算机最根本的性质，实际上也就是数字这个名称的来源，在于它是从某一离散的状态变为另一状态来实现其运算的。我们可以把这种性质比作电灯泡，它最简单的两种状态就是开（OFF）和关（ON）。如果我们规定 OFF 表示数字 0，ON 表示数字 1，那么电灯泡就变成了计算机，能够把 1 与 0 相加，或从 1 减去 1。电灯的输入是双向开关的形式，它记忆的是开关的位置。其输出是发光（或无光）。因此，如果灯泡处于 OFF 状态用 0 表示，将开关往前推一步，即可实现 1 加 0。另一方面，如灯泡处于 ON 状态，表示数字 1。将开关拨动一个位置，即可从 1 减去 1。（开关的后一步将灯泡回复至 OFF，即 0 位；因而实现了减法作用。）这样一个单一的二态装置，构成了最简单的数字计算机。

倘若我们把灯泡增加一只，机器的容量就会增加，可能有四种不同的状态：二个 OFF，00（二进制的零）；一个 OFF，另一是 ON，01（二进制的 1）；一个 ON，另一个 OFF，10（二进制的 2）；二个 ON，11（二进制的 3）。这样就能进行范围较大的计算，处理较大的数目。由此可以推导出，二进制系统可表示 2^n 个离散的状态。 n 是二进制元的位数。

二进制系统的加法过程总是向二进制器件 a 一次加一个二进制位。而器件 a 与其它器件连结起来，使得器件 a 从 ON 变成 OFF 时，它向器件 b 加 1。当器件 a 从 OFF 变成 ON 时，它对器件 b 无作用。计数的进程如下：

	器件 <i>a</i>	器件 <i>b</i>	二进制数值	十进制数值
	OFF	OFF	00	0
加 1	OFF	ON	01	1
加 1	ON	OFF	10	2
加 1	ON	ON	11	3

本系统与汽车计程表的转盘类似。转盘是以十进制数为基础的，但转盘间的连接方式与上面所说的简单的二进制系统相同。

数字计算机的工作部份大多是电子器件，它们处理的是在物理上可获得的电压、电流和磁场。许多这类操作易于二进制或双稳态器件。因为这些操作本身是以这些物理现象为根据的。因此，实际上所有现代计算机内部都是二进制的。(电流、磁场等具有强度，可在几种不同水平上操作，但这无关紧要，因为在一般情况下，检测电流存在与否及磁场的方向，比检测其强度大小要容易且快速。因此，可以认为这种方式具有很高的可靠性。)附录 A 将讨论二进制算术。

用很多二进制态元件组合起来的计算机容有大量的离散状态。这些离散状态实际上是数千个电路或磁性元件物理状态的结合。人们通常并不了解某一特定时间计算机内详细的离散状态。但原则上完全可以描述它。相比之下，在连续量关系中，这种性质不能量子化，并且具有无穷多的状态。(但必须看到，任何真正的计算机系统都受噪声、传输、通道、灵敏度的制约，这就限制了可分辨状态的数目。)

数字计算机元件设定的离散状态代表二进制的代码信息。它既能描述数字符号，又能表示操作指令。计算机从内部控制这些符号以进行所需要的计算。数字计算机以它的高速度将各种可能的操作结合起来，实现复杂的运算。

数字计算机的离散性质合乎逻辑地产生若干有趣而重要的结果。计算机是算术化机器的说法并不意味着它仅仅是快速加法机器。它实际上是通用的信息处理机。任何一台计算机都能模拟其它的计算机，就证明了这种通用性。也就是说，任一特定的计算机就是一台抽象的通用信息处理机的表现形式。它与其它计算机的区别不在于抽象的能力，而在于实际的方式。很多人工智能的研究就是依赖于计算机的抽象信息处理能力。

数字计算机的部件

数字计算机的主要部件有主存储器、中心运算器(它包括算术-逻辑单元、控制单元和寄存器)，输入与输出单元。这些部件示于图 1-1，并讨论如下：

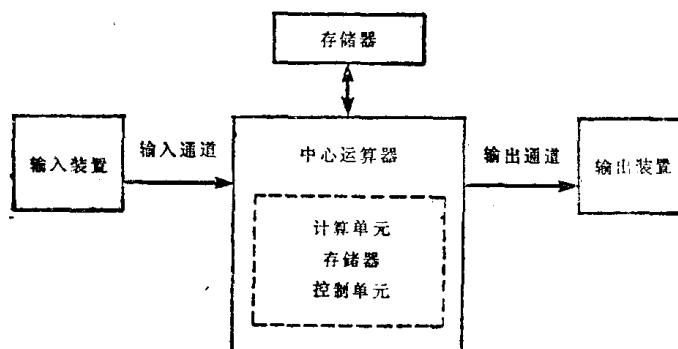


图 1-1 计算机系统示意图

主存储器

计算机的主存储器(记忆器,磁芯)的工作与中心运算器(CPU)密切相连。它根据指令存储信息或将信息输回给 CPU。存储器有别于磁带、磁盘,以及其它有较长保存期的存储装置。

存储器分成各部分(或单元)。每一部分(或单元)存放一条以二进制表示的字。理论上,一个字由若干位(二进制数字)构成。但是依不同的计算机设计,通常包含的二进制位在12与64个单元之间。用“字”这一词,是因为存储器的量可以是以二进制表示的数字、字母、字母串、字母和数字的组合,或者是指令的代码符号。主存储器不仅存放数字信息;如数据或计算机运算的中间结果,而且与存放构成计算机执行程序的指令序列。因此,CPU反复访问磁芯存储器,以便执行下一步指令。

每一字的每一个位存储于微小环形铁氧体元件中。这些磁环在电线上捆扎成三维阵列。有三根电线穿过磁环,其中两根电线送入电流,就可以使该磁环置于两种稳定状态的一种(以磁场的两个方向之一来表示)。在磁环磁化的方向以及二进制符号0和1之间建立起相应的关系。因而二进制的数字,或以二进制表示的其它符号便可存入存储器,贮存于此,以备检索应用。

实际的计算机存储器是由捆扎在电线上的铁氧体环存储单元构成,并划分为存储元。存储器通常以所含存储单元的数目分类。大型计算机系统可能有多达百万计的存储单元,也就是有多达数百万个二进制数的位。为了便于为计算机所用,每一字都有一个独立的地址,用它可检索特定的存储单元的内容。由于任一存储单元的内容皆独立可访,因此,主存储器是一个随意存取的装置。相比之下,磁带是新序的或串行的存取装置。计算机的CPU检索寄存于存储器的任何字的速度,是衡量该计算机速度及先进性的指标。这就是所谓存取时间。早期的慢速计算机,存取时间为毫秒级。现今较快的第三代计算机,存取时间小于微秒。显然,计算机的存取时间直接影响其施行运算的总速度。

必须指出,生产计算机的技术,正以无法想像的速度进步着。正在研究并实现各种构造主存储器的较新的和较好的方法。毫无疑问,在今后几年内,无需内部接线的固态存储器将商品化。

中心运算器——CPU

CPU指挥和调度计算机总的运行,并且包含真正执行程序指令的电路。CPU有以下子单元:

1. 算术逻辑单元,它进行数据的算术或逻辑运算;
2. 许多寄存器,用于短期寄存算术指令的中间结果;
3. 控制单元,它可向主存储器寻址,以便寄存或取出信息,并按所需次序编排。

计算机的这部份功能实际上是进行算术和逻辑运算,可称之为算术-逻辑单元。它包含的电路能进行二进制的加或减运算,或者能进行逻辑运算。较大型的计算机另外还附有能进行乘法或除法运算的电路。而小型计算机是用执行简单的重复加法或减法的程序来进行乘除运算的。实际上,可把算术或逻辑运算简化成两种简单的逻辑运算:(a)否定(非)及(b)逻辑乘法。二者皆可方便地用电路来进行。

CPU包含的数个寄存器,是易于存取的临时存储器,能用于寄存(a)被计算机算术电路处理的数字,或(b)将要执行的下一指令的地址。累加寄存器(常称之为AC)用于存入加法或减法运算的和或差。积-商寄存器(常称之为MQ)与AC一起用于乘法或除法。当乘或除时,MQ含有乘数或商,而AC寄存积或被除数。大型计算机有很多寄存器。例如IBM/360

有 20 个,其中一些可被程序员调用,而另一些则不能。

CPU 也包含控制单元,它指挥着计算机按顺序执行运算。计算机各单元间用传输电线连接,使信息能从一个单元送向另一单元。控制单元通过导线来感应库存的基本指令,通知其它单元执行所需动作。典型指令如下:把 AC 的内容寄存于确定的存储位置,以其中一个寄存器的内容施行某种运算,取出某一存储器的内容,等等。在控制单元中,用电子逻辑电路,以正确的次序触发传输线以执行这些指令。因此,控制单元就是计算机的执行机构。

输入

与现代数字计算机对话的方法很多。输入装置包括穿孔卡片、磁带、穿孔纸带、磁盘、磁鼓、电动打字机、电传打字机及其它工具。它们各有优缺点,可按不同情况选用。表 1-1 列出最普通的输入/输出装置及其典型特征。

表 1-1 输入/输出设备表

设 备	传 输 速 度	存 储 容 量	时序(S)或 随机(R)存取	物 理 现 象
磁芯存储器	10^6 字符/秒	$\sim 10^8$ 二进制位	R	铁氧体的磁化
磁带	10^4 — 10^5 字符/秒	每盘 2400 英尺存 15×10^6 二进制位	S	片基膜的磁化
磁盘	$\sim 10^5$ 字节/秒*	$\sim 10^8$ 二进制位	R, S	片基膜的磁化
磁鼓	10^6 字节/秒*	4×10^6 二进制位	R, S	同 上
打字机	~ 25 字符/秒	—	S	—
电传打字机	10 字符/秒	—	S	—
穿孔卡片	800 字符/分 10^3 字符/秒	80 字符/卡	S	纸上穿孔
穿孔纸带	300 字符/秒	—	S	纸上穿孔
行式打印机	1000 行/分 200 字符/秒	120 字符/卡	S	—

* 一字节相当于连贯的 8 个二进制位。

计算机用户使用得最广泛的输入手段是穿孔卡片。穿孔卡片用键式穿孔器制作。该穿孔器有键盘,类似于标准打字机。操纵卡片穿孔机很方便,卡片易于放入和取出,并能用高速卡片阅读器迅速处理。磁带常用于重复地输入大量信息,而这是卡片不及的。与卡片不同,一般磁带并不由使用者直接制作,而是计算机某些预先运算的结果。一卷长 2460 英尺、宽半英寸的标准磁带可包含极大量的信息,约等于 1500 万个英语单词(大约是全部英语词汇的 30 倍)。纸带常用来与小型计算机连接。纸带阅读装置价格低廉,足以补偿其相对低的运算速度。纸带明显的缺点是,如要从预制的纸带中改正、插入或取消信息,必须重新制作整个纸带。穿孔卡片、磁带、纸带都是时序信息源的实例,因其所含的信息依严格的次序排列,处理时,也必须按规定的固定次序进行。

另一方面,磁盘和磁鼓是随机存取设备的实例。用它们存取任何信息时,必须首先处理排在前面的信息。它们广泛地用于储存需要重复使用的信息。多数大型计算机系统都有磁盘或磁鼓,可以把它们看成是磁芯存储器的扩展。计算机工作时需要重复存取的资料——如有关计算机用户的记帐资料——存储在它上面。与磁带相同,磁盘和磁鼓存储信息的方式是使涂

在载体材料上的氧化铁选择性磁化。磁盘像是一叠用垫片隔开的唱片。磁鼓是圆柱形的，表面有涂层。

在几种特殊情况下，用电动打字机输入信息，一般即电动打字机放在计算机控制台上。机器运行时，计算机操作者用它与计算机对话。电动打字机也广泛地用于分时系统。在该系统中，一台计算机同时从许多使用者处接受信息。同时共用系统也常备有电传打字机作为输入设备。用电传打字机与小型计算机相接的理由与用穿孔纸带相同——低廉的价格胜过了相对低的运行速度。一些特殊的计算机系统可以用大屏幕阴极射线示波管作为信息输入器。使用者用一个称作光笔的小的闪光束在荧光屏上指划，以输入信息。

输出

用于信息输出的设备包括上面列出的所有输入设备，再加上一些重要的附件。用得最广泛的输出设备是行式打印机，它能在纸上一次打出一行信息，速度可达 2000 行/分。所有大型计算机设施都有一台或多台行式打印机用于输出。如果信息量相对较小，且准备用作后一程序的输入，也可用穿孔卡片作为输出。磁带用于输出大量的信息。虽然某些大型计算机上备有磁盘和磁鼓的位置，但大多数用户并不用它们作为输出。

特殊用途的输出设备还有各种绘图器(与必要的辅助程序相配)，它们能直接产生表示输出的图形，其中包括阴极射线示波器。计算机程序可使示波器荧光屏绘出可见的输出，供程序员拍照或观察，使他能判断程序编得是否好。如果需要，还可进行调整。

数字计算机的应用特点

数字计算机有几个重要的特点，使它具有灵活性和通用性。下面要讨论的四个特点是：精度高，极高的运行速度，失误率低，有执行所存储指令的能力。

数字计算机有着规定任一数目的二进制位作为字长的能力，这使它具有几乎不受限制的存储与检索数的精确度。然而，通常需取出一定量的存储器用于使计算机整个机构有效。这种调节有利于固定字长*。使用 FORTRAN IV 的 IBM/360 机器，通常字长是 32 位二进制位，也就是有 2^{32} 或 4, 294, 967, 296 个可能的离散状态用于任一给定的字。用 32 位二进制位表示的一个整数可以是 0 直至 $2^{32}-1$ 的任何正数。如果要同时表示正与负数，其范围变成 -2^{31} 至 $2^{31}-1$ ，因必须用一个二进制位表示符号。

遗憾的是，整数表示法用于表示大小不同的数字时，有效位数不同。在任何用 32 位二进制位表示的数中，必须考虑第 33 位二进制位的不确定数。因而数 1 可表达为 000000000000000000000000000001。精确度仅为 1 ± 0.5 。而数 64 应表达为 00。精度是 64 ± 0.5 。为克服这一缺点，使数的容许范围加宽，并且方便于某些算术运算，常用“浮点”表示法表示数字。在这种方法中组成该字的一些位则用于储存有效数位(尾数)，而其余的二进制位表示适当的底(阶)的指数。IBM/360 用 24 位表示尾数(以二进制数形式)，一位表示符号，其余 7 位表示阶(以 16 为底)及其符号。因此，表示数的精度为 $1/2^{24}$ ，或 7 位

* 有一些计算机，字长可由程序员规定。另外，某些计算机字长可在一定范围内改变。这将在以后再讨论。本节假定字长是固定的。

十进制有效数($2^{24} \approx 10^7$)。数的范围从 10^{-75} 至 10^{+75} 。第 25 位总是不确定的。由此可见,“浮点法”表示的每一数字的精度相同。

在普通应用中,如此高的精度似乎是不必要的,但是根据下述理由,还是有相当的必要性。并非所有因子都能精确地从十进制制转化为二进制制。并且计算机是算术化的,仅能施行基本的算术运算,如加法或减法。因而三角函数、对数或其它函数的值都必须用逼近法,通过一系列计算才能得到。需要算出最终结果的运算次数称为算术运算深度。舍入误差随运算深度的增加而会迅速累积。因而为使最后结果精确,高精度是必须的。

数字计算机第二个重要特点是执行计算的速度极高。运算速度可高达每秒作十万次浮点乘法。如前所述,就所有类型的计算而言,高速度都是有用的,因为计算速度是衡量机器总体性能的一种指标,或许是最好的最直接的一种指标。计算机速度加倍可使计算机效率接近加倍。(这一说法是否确切取决于输入/输出是否为运算的限制步骤。当计算速度不是限制因素,增加计算速度并不能改善机器的能力。大多数场合是介于这两种极端情况之间)。对某些标题,高的计算速度是绝对必须的。有时,如果计算不是在一定的时间内完成,其结果是无用的。因计算机能用高速施行计算,使许多领域的实验成为可能。太空探测计划是一个极好的例子。该计划完全依赖于计算机快速而精确的功能。

计算机的第三个特点是失误率低,也就是机器处理信息过程中产生失误的比率低。与此相反,用人工进行运算深度很大的函数运算时,失误率相当高。据估计,手工数据运算者最小失误率约为每 1000 次运算中有一次失误。对于普通的计算,大多数人承认失误率会更大一些。然而,高速计算机的未被检测的失误率——冗余和素偶检验,可以指出计算机中发生的许多类型的失误——小到几乎等于零。如果不是这样,大多数计算结果便变得无用了。

高速计算机的第四个、也许是最重要的特点是它能执行指令序列。要进行不同的计算,并不需要去制造不同的机器或改造计算机,仅需输入一组新的指令。因此,执行任何一个程序只是依程序所含的一套指令去进行,而与以前的过程无关。指令依次执行(虽然指令本身也有可能规定次序),并完成所希望的一系列程序段。计算机必须有用于储存指令以及中间结果的存储器。一旦有了这样的存储器,每种基本运算只需要一种电路,而以电子的速度进行全部的运算,并不需要由慢吞吞的人来指导。此外,或许更为重要的一点就是,所存指令的执行次序可在执行过程中更动。因而,可根据中间结果的情况继续进行计算。这一特点可以使计算机在执行一组存储的指令时,自己作出抉择。关于这方面的能力,后面将作更多的介绍。

第 二 章

计算机的逻辑、程序及流程图

为编写有效的计算机程序,必须把问题分成一系列相互关连的步骤 (Step)。这些步骤必须依次被分割成计算机能接受的明确的动作描述。即程序必须以计算机能识别的代码写出。因而在程序员所陈述的问题与计算机所接受的指令之间有着若干种抽象方法。本章将讨论计算机程序的逻辑处理,描述怎样借助流程图设计程序,以及讨论计算机使用者可采纳的几种不同水平的程序语言。

计算机的逻辑

如前所述,由于电路的基本特性,现代计算机使用二进制数系统。因为机器是在两态的选择中进行其基本运算的,所以机器的基本逻辑可以理解为两态的,也就是说,计算机的逻辑由二者之一作抉择或分支转向。

把最基本的两态逻辑运算结合起来,便可得到基本的算术运算。算术运算的结合构成了一系列专门的详细机器指令。而指令作为整体又构成了机器的基本功能。这些指令又以不同的方式结合组成特定的指令组,称之为算法。算法这一词在本书中始终用以描述有限的一组规则,它是为了求解一个特定类型问题而明确地规定的运算序列。

因此,为了完成某一计算,必须首先了解该问题的数学算法,然后把这一算法写成与所用计算机相适应的由指令组成的算法程序。再把计算程序寄存在机器的存储器中,让计算机按必要的步骤执行,直至得到欲得出的结果。很明显,为编写程序简便起见,必须尽可能使计算机指令接近正常的数学表达式。本章下面将详细讨论这一点。

例 A. 计算圆的面积。圆面积的数学公式为

$$A = \pi r^2$$

式中 A 是面积, r 是半径。

由公式可知,计算面积的一种算法是测定半径的值,给以平方,然后乘以 π 。

这种计算的一种算法是:

- 步骤 1. 找出 r
- 步骤 2. 找出 π
- 步骤 3. 计算 $A = \pi r^2$
- 步骤 4. 输出 A

下一步就是把逻辑算法转化成计算机能接受的语句。这将是第三章的内容。

要得到解任何问题的计算机算法,最重要的一点是该算法必须是完全肯定的,并能完全正确地表示出要施行的运算步骤。但这并不是说程序不能设计成可选择的,而是这种选择必须明确予以说明,并在执行时,规定每种选择只产生一种可能的途径(以后我们可以看到,编程序