

# 计算机在化学中的应用

周建华 13589068392

zhoujianhua4@163.com 化工食工楼C321

教材和参考资料:

1. 计算机应用基础（化学类），程光钺编，高等教育出版社，1987
2. 方利国《计算机在化学化工中的应用》，北京：化学工业出版社，2011.1第三版
3. Exploring chemistry with electronic structure methods
4. 高斯使用指南.doc

# 前言

本课程第一部分主要学习排序、方程求根、线性方程组求解、插值、拟合、定积分、微分方程数值解七部分内容。用Basic语言编程，然后上机操作调试。闭卷考试只考第一部分内容。

第二部分office、origin、ChemOffice、Gaussview 这几个软件的基本用法，不单独安排上机。

把12次课的课件考回去，计算机在化学中的应用01-08.ppt八个课件各人打印或复印一份作为教材用。我们所用教材编程为Basic，第一次课讲BASIC语言。

要求：一人买一个**作业本**，**20页的足够**，**班级姓名学号**写清楚。上课时把作业本带来，若有时间，则作业在课堂上做；上机时，带作业本去，编好的程序上机调试，随调随改，直到输出正确结果，记录于作业本上，程序后面。后边每次上课都带上作业本和打印出的前**8**个课件。

**考试前作业本交上来**（若买的作业本很厚，则只把作业撕下来钉一起），**连同平时考勤占50分。最后闭卷考试50分。**

**上课3次点名不到或3次上机不到不允许考试。**

# 第一部分 BASIC语言基础

## 一、BASIC语言程序的基本成分与结构

例1：根据方程  $V=nRT/p$  编写计算体积V的BASIC程序。以知：  $n=1\text{mol}$ ，  $T=273.15\text{K}$ ，  $p=101.325\text{kPa}$ 。

程序如下： **P06.BAS**

```
10 INPUT T, P
```

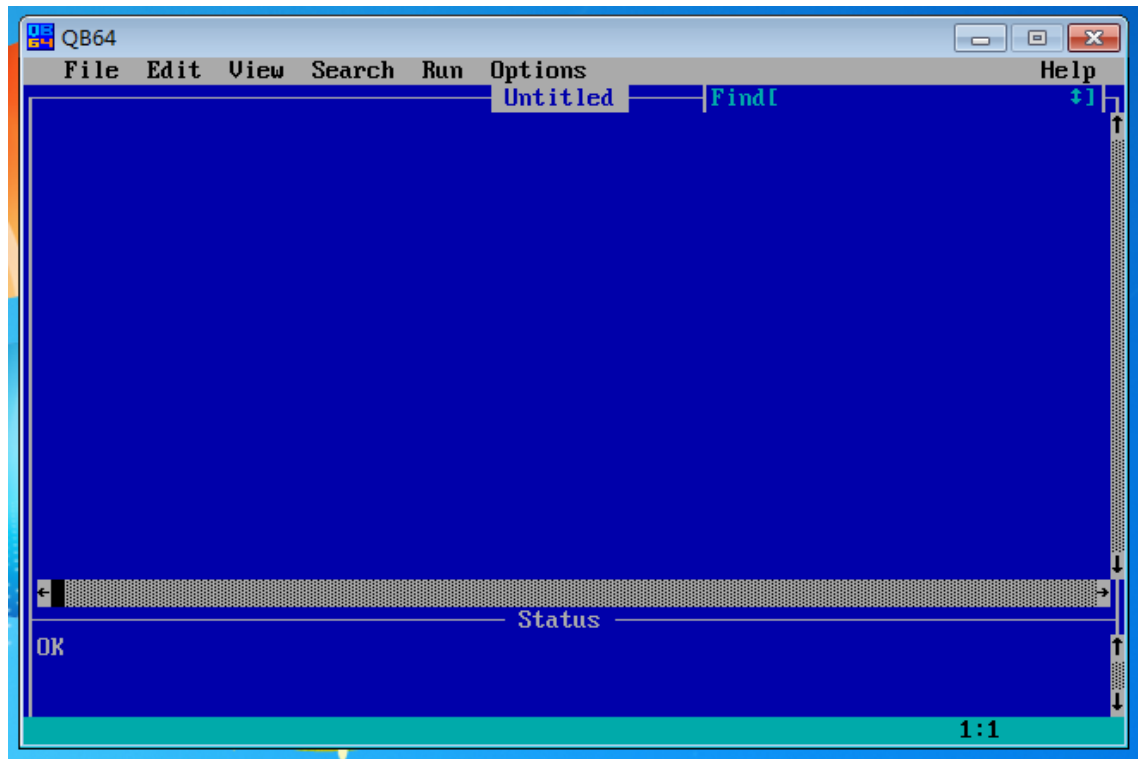
```
20 R = 8.314: N = 1: V = N * R * T / P
```

```
30 PRINT V
```

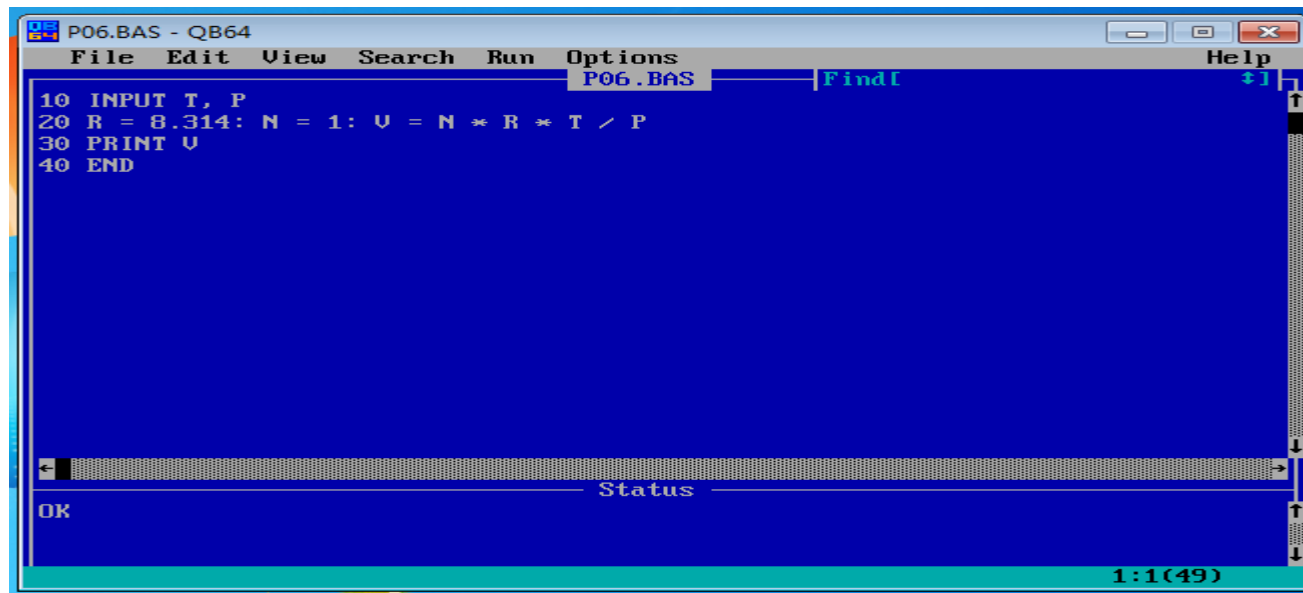
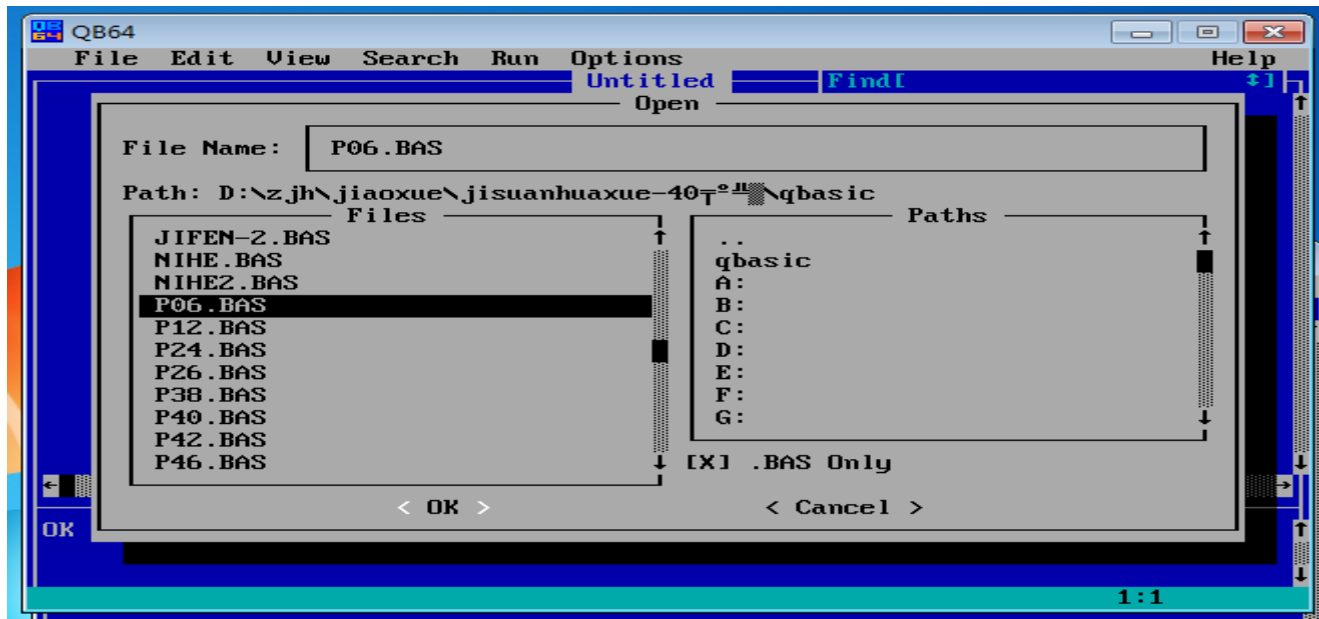
```
40 END
```

**ALT+ENTER**，全屏，循环  
**执行程序。** **CTRL+BREAK**，打断死循环

解压：[qb64.qbasic.xp.win7.32和64都可用版本].qb64v0954-win.zip 文件，解压后的文件夹中找到 qb64.exe ，双击运行：



键盘输入上面程序，若已经编好保存过，直接 **File---Open** 找到调出：

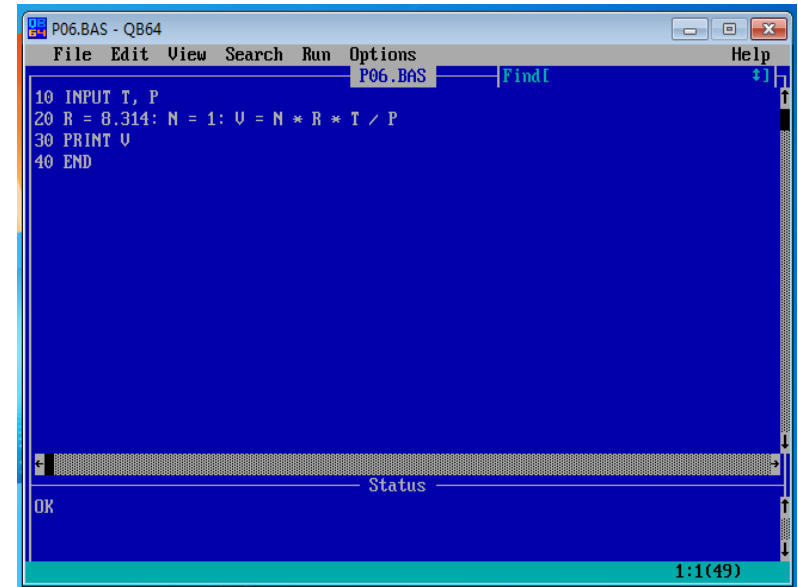
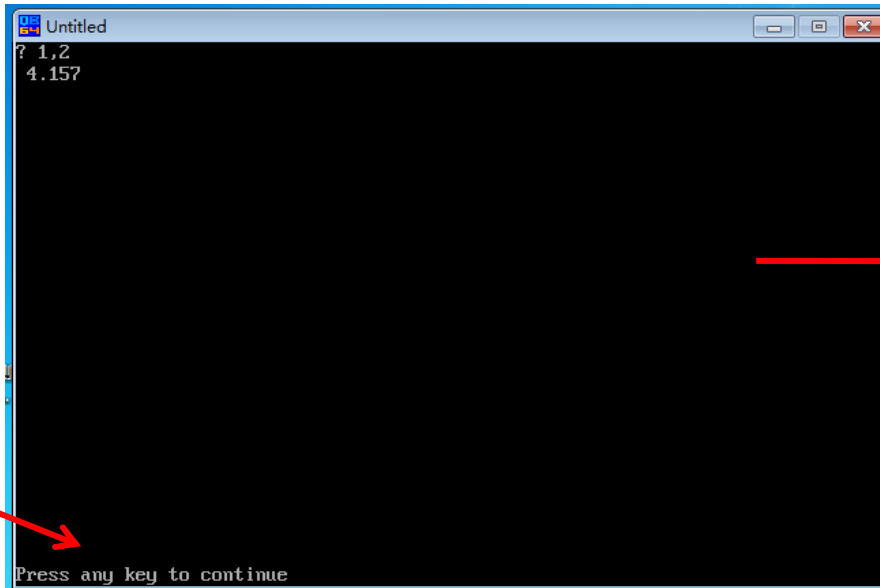


菜单栏中 Run--Start



## 10 INPUT T, P

? 号后面输入两个数，中间“，”号隔开，如“1,2”，回车：



注意： **INPUT** 后有几个变量，则必须同时 ? 号后面输两个数，中间“，”号隔开，回车。

```
10 INPUT T, P
```

```
20 R = 8.314: N = 1: V = N * R * T / P
```

```
30 PRINT V
```

```
40 END
```

## BASIC程序的主要特点:

1. 一个程序由**行的序列**组成，用**行号**编序。一般情况下，程序从第一行开始按序列顺序执行。
2. 每行以一个行号开始，行号为大于0的整数，行号一般不连续，便于中间增补。
3. 语句包括**关键词**和**语句体**两部分。



## (1) BASIC语言基本字符:

**字母:** A-Z共26个字母组成。其他字母如  $\pi$ 、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$  等不能作为BASIC字母。若遇到  $\pi=3.14159$ ，我们可以在程序中写成  $\text{PAI}=3.14159$ 。

区分大小写，用大写字母

**数字:** 0-9。

**串字符:** 如+、-、\*、/、^、>、=、<、”、;、:、?、空格等。（普通键盘上能直接输入的符号都可以用）

## (2) BASIC语言常数

**数值常数:** BASIC不用指定数值常数类型（整型，实型）， $N=4$ ， $X=5.12$ ，可直接计算 $Y=X+N$ 。科学计数法： $3.8 \times 10^3$   $3.8E3$ ， $10^{-3}$   $1E-3$ 。  
 $10^{-3}$

**(字符) 串常数**：用双引号括起的字符序列。如：

“KOH”、“KMNO4”。串常数值是字符串，它以双引号之间所有字符（包括空格）作为其值。

### **(3) BASIC语言的变量**

**数值变量**：变量值为数值，由字母或字母加数字组成。如：A、AAA、A5、A(5)等。5Y、X-5等不能作为变量名。

**串变量**：其值为字符串，命名规则为数变量加货币符号\$：A\$、AAA\$、A5\$...。本课程基本不用。

## (4) BASIC语言的函数：

标准函数：✓

- $\text{ABS}(X) = X$ 绝对值。  $\text{ABS}(-5) = 5$ 。
- $\text{EXP}(X) = e^X$  。  $\text{EXP}(5) = e^5$
- $\text{LOG}(X) = \ln(X)$      $\text{LOG}(X) / \text{LOG}(10) = \lg(X)$
- $\text{SQR}(X) = \sqrt{X}$
- $\text{INT}(X)$     不大于 $X$ 的最大整数。     $\text{INT}(10.6) = 10$   
 $\text{INT}(-10.6) = -11$

$$\text{SIN}(X) = \text{Sin}X \quad \text{COS}(X) = \text{Cos}X$$

$$\text{TAN}(X) = \text{tg}X \rightarrow X: \text{弧度表示。}$$

$$\left[ X \frac{\pi}{180} \right]$$

若X是以度表示的，则要化成弧度：

自定义函数：DEF FNA=表达式

或 DEF FNB(参数)=表达式

例如：DEF FNC=A+B\*B

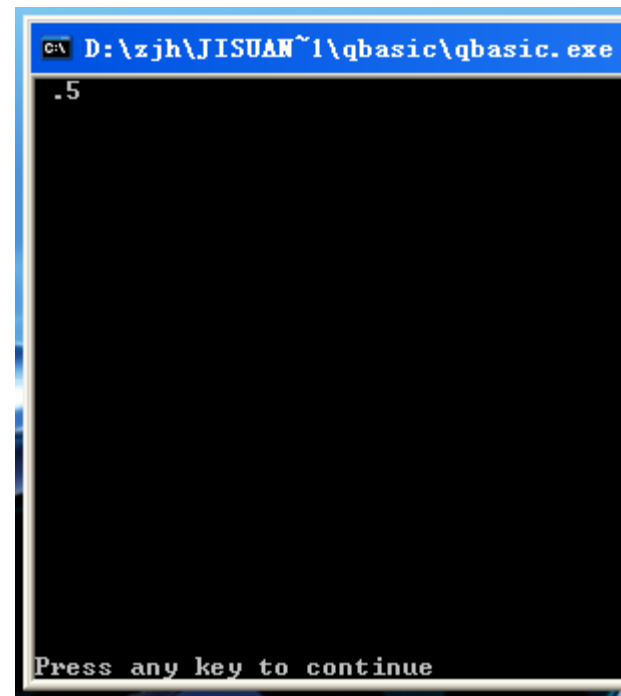
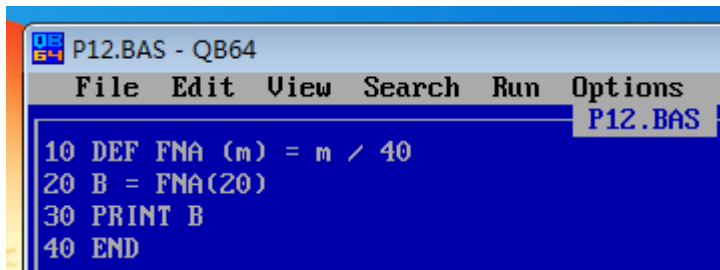
DEF FNP(m)=m/40

FNA1、FNAA等都是合法的自定义函数名，  
FN1 不行。FN+变量名

例子：（P12.BAS）：

```
10 DEF FNA (m) = m / 40
20 B = FNA(20)
30 PRINT B
40 END
```

执行。



菜单栏中 Run--Start

## (5) BASIC语言的表达式:

数值表达式:  $+, -, *, /, ^, :$   $8^5$ ,  $10^{(1/3)}$

$$\begin{aligned} & 59r(10) \\ & = \sqrt[3]{10} \\ & = 10^{(1/3)} \end{aligned}$$

逻辑表达式:  $>, =, <, >=, <=, <>, \text{OR}, \text{AND}, \text{NOT}$

数关系式:  $X+3<4$ ,

逻辑表达式:  $X+3<4 \text{ OR } (\text{AND}, \text{NOT}) Y+3<4$

**OR**, 或; **AND**, 和; **NOT**, 非。

以上为**BASIC**语言的基本成分与结构,  
下面介绍本课程用的着的关键词及用法。

## 二、常用Basic命令（关键词）

- （1） 输入语句 **INPUT**:
- 一般语法形式:
- **INPUT 变量表**。例如例一程序中:
- 10 INPUT T, P
- 给T、P 赋值。程序中不给数据，程序运行过程中给。

读语句和数据语句 READ DATA 。

一般语法形式：

**READ** 变量表

**DATA** 数据表

必须连用，输入数据。 例如：

10 READ N, X

20 DATA 5, 10, 23, 35

**DATA**放在**READ**后任何地方都可。数据个数可以多于变量个数。



## (2) 打印（输出）语句 PRINT

一般语法形式： PRINT 打印表

打印于显示屏上。常用于进行如下输出：

1. 显示或打印字符串。这时表达式是带引号的字符串。
2. 显示或打印表达式的值。
3. 空行或换行。PRINT

例如 (P24.BAS) :

```
5 PRINT "Carbon atomic weight is 12"
```

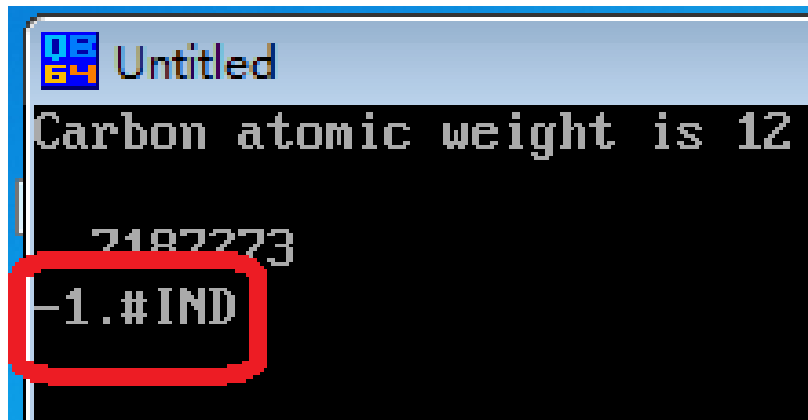
```
7 PRINT: PRINT 空行
```

```
10 PRINT 79.06/ (2*23+2*32)
```

```
30 PRINT G/ (2*N+2*S)
```

```
40 END
```

执行。

A screenshot of a BASIC interpreter window titled 'Untitled'. The output shows 'Carbon atomic weight is 12' on the first line, followed by a blank line, then '79.06/ (2\*23+2\*32)' on the third line. On the fourth line, there is an error message: '-1.#IND'. The error message is highlighted with a red rectangle.

```
Carbon atomic weight is 12  
  
79.06/ (2*23+2*32)  
-1.#IND
```

```
30 PRINT G/ (2*N+2*S)
```

/ 是除号，变量 (N S)

如果没有赋值，则程序自动认为此变量的值是 0。

此错误分母为 0 造成，只要把分母改成不等于 0，就可以了。

再举个例子说明打印格式： **(P26.BAS)**：

```
10 Y1 = 12: Y2 = 30
20 PRINT "Y1="; Y1, "Y2="; Y2,
30 PRINT "Y1-Y2="; Y1 - Y2
40 END
```

执行。

若**PRINT**语句以**逗号**做分隔符，则按**标准格式**打印，各打印项分别打印在不同的标准段内；

以**分号**做分隔符，则**紧凑格式**打印，紧接前面表达式的值打印，不留空格。有空格为**+**号位置。

### (3) (无条件) 转移语句 GOTO

语法形式: **GOTO** 行号

这里的行号是源程序已有的行号。转移到指定行号的行上继续执行。例如: **(P38.BAS)**

10 READ MN, MH

20 READ W1

30  $M1 = 1000 * W1 / (100 - W1) / MN$

35  $M2 = 1000 / MH$

40  $X1 = M1 / (M1 + M2)$ ;  $X2 = 1 - X1$

50 PRINT M1, M2, X1, X2

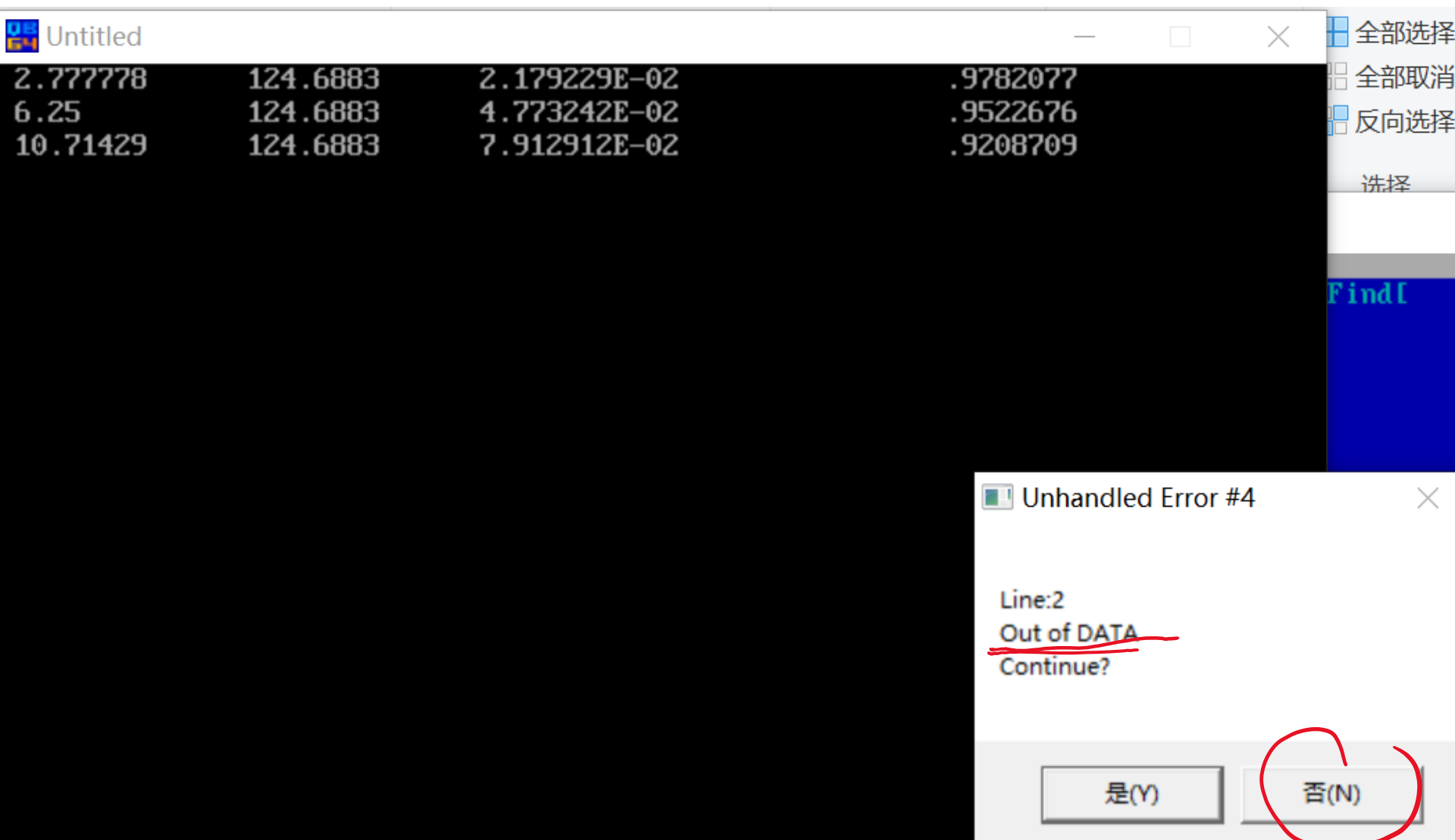
60 GOTO 20

70 DATA 40,08.02,10,20,30

80 END

执行。

输入少了



选“否”，此程序知道问题出在哪就行，不用改了。

(4) 条件转移语句 **IF.....THEN**。条件成立转到 THEN 后, 不成立, 按顺序往下运行。语法形式:

IF 逻辑表达式 THEN 语句

条件语句由3部分组成: 1. 关键词 **IF** 和 **THEN**。2. 逻辑表达式。3. **THEN** 后语句。

**THEN** 后可跟不同语句, 介绍几种:

a. IF 逻辑表达式 THEN GOTO 行号

这种条件语句可省略 THEN 或 GOTO。如

40 IF VC < B1 THEN 70 或

40 IF VC < B1 GOTO 70

**b. THEN** 后跟非**GOTO**语句（一个或多个）。如

**30 IF D > 0 THEN END**

**40 IF K > I\*5 THEN PRINT 5/K**

**50 IF I < N THEN PRINT “\*”: GOTO 90**

具体例子（**P40.BAS**）

**10 READ A, B, C**

**30 T = 0: L = 1**

**40 P = EXP(A - B / (T + C))**

**50 PRINT P**

**60 IF I >= 11 THEN END**

**70 T = T + 10: I = I + 1: GOTO 40**

**80 DATA 18.23,3769.1,224.92**

执行。

再举个例子来说明逻辑运算符的使用：

这是求解 $Ax^2+Bx+C=0$ 的程序。 **(P42.BAS)**

```
10 INPUT A, B, C
```

```
20 IF A = 0 AND B = 0 THEN PRINT "NONE" : GOTO 100
```

```
30 IF A = 0 AND B <> 0 THEN PRINT "X="; -C / B : GOTO 100
```

```
40 D = B * B - 4 * A * C
```

```
50 IF D = 0 THEN PRINT "X1=X2="; -B / 2 / A: GOTO 100
```

```
60 IF D < 0 THEN PRINT "2 CONJUGATE ROOTS": GOTO 100
```

```
70 X1 = (-B + SQR(D)) / 2 / A: X2 = (-B - SQR(D)) / 2 / A
```

```
80 PRINT "X1="; X1, "X2="; X2
```

```
100 END
```

运行。



(5) 子程序 **GOSUB RETURN**。语法：

GOSUB 行号

调用子程序，

RETURN

回到主程序。

把程序**P42.BAS**稍做修改，**20-100**变为子程序。

**(P46.BAS)**

**10 INPUT A, B, C**

**15 GOSUB 20**

**17 END**

**20 IF A = 0 AND B = 0 THEN PRINT "NONE"**

**30 IF A = 0 AND B <> 0 THEN PRINT "X=";**

**-C / B: GOTO 100**

**40 D = B \* B - 4 \* A \* C**

**50 IF D = 0 THEN PRINT "X1=X2=";**

**-B / 2 / A: GOTO 100**

**60 IF D < 0 THEN PRINT "2 CONJUGATE  
ROOTS": GOTO 100**

**70 X1 = (-B + SQR(D)) / 2 / A: X2 = (-B  
- SQR(D)) / 2 / A**

**80 PRINT "X1="; X1, "X2="; X2**

**100 RETURN**

## (6) 定义数组 **DIM**:

2个数组

```
10 DIM A (N) , B (N, N) .....
```

Basic中数组必须由DIM定义后才能用，否则程序认为A (N) 等为一个变量。变量0---N。

## (7) 循环语句 **FOR NEXT**。

```
FOR I=N1 TO N2 step N3
```

```
.....
```

```
NEXT I
```

N1、N2、N3：整数。 N3=1时可以省略step N3 。如：

```
30 FOR I=2 TO 10 STEP 2
```

```
30 FOR I=2 TO 10
```

例子: (P55.BAS)

10 DIM A(10)

20 A = 0

30 FOR I = 1 TO 10

40 A(I) = I ^ (I - 1): A = A + A(I)

50 PRINT A, A(I)

60 NEXT I

70 END

$$A = \sum_{i=1}^{10} i^{i-1}$$

运行。

The screenshot shows a QBASIC window titled 'P55.BAS - QB64 (未响应)' and an 'Untitled' window. The QBASIC window displays the following code:

```
10 DIM A(10)
20 A = 0
30 FOR I = 1 TO 10
40 A(I) = I ^ (I - 1): A = A + A(I)
50 PRINT A, A(I)
60 NEXT I
70 END
```

The 'Untitled' window shows the output of the program, which is a table of values for A and A(I) for I from 1 to 10:

I	A	A(I)
1	1	1
3	2	2
12	9	9
76	64	64
701	625	625
8477	7776	7776
126126	117649	117649
2223278	2097152	2097152
4.527E+07	4.304672E+07	4.304672E+07
1.04527E+09	1E+09	1E+09

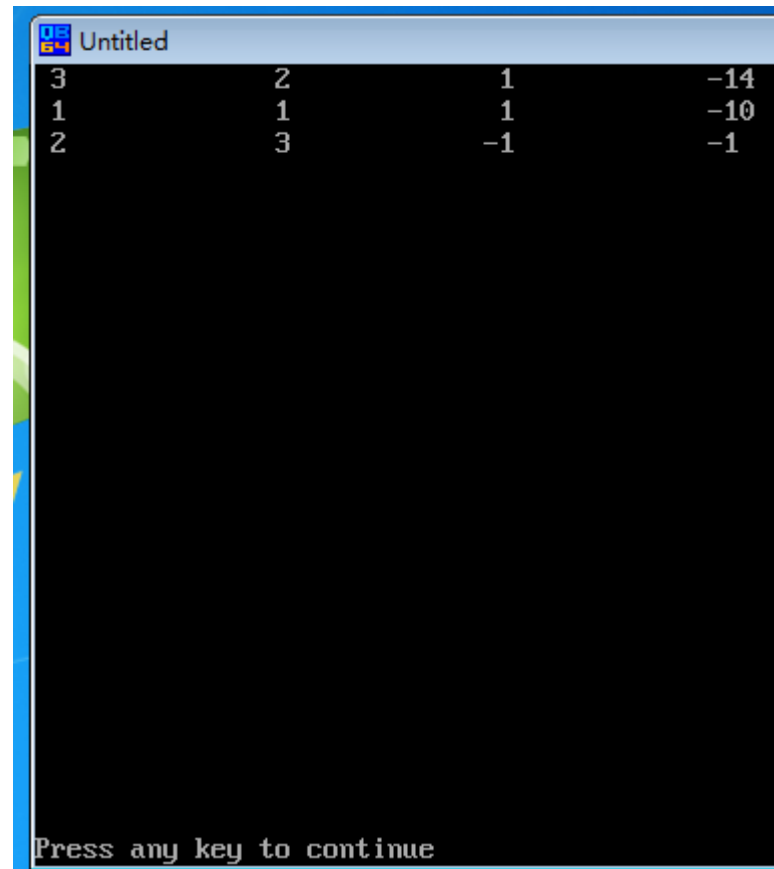
The status bar at the bottom of the QBASIC window says 'Starting program...'. The 'Untitled' window has a status bar that says 'Press any key to continue'.

## 多重循环。例子 (P61.BAS)

```
5 DIM A(3, 4)
10 FOR I = 1 TO 3
20 FOR J = 1 TO 4
30 READ A(I, J)
40 PRINT A(I, J),
50 NEXT J
60 PRINT
70 NEXT I

80 DATA 3,2,1,-14,1,1,1,-10,2,3,-1,-1
90 END
```

运行。



3	2	1	-14
1	1	1	-10
2	3	-1	-1

Press any key to continue

# BASIC与QBASIC区别： 行号问题。

10 READ N

20 DIM A(N)

30 FOR I = 1 TO N: READ A(I): NEXT I

40 FOR I = 1 TO N - 1

60 FOR J = I + 1 TO N

70 IF A(J) >= M THEN 90

80 M = A(I): A(I) = A(J): A(J) = M

90 NEXT J: NEXT I

130 FOR I = 1 TO N: PRINT A(I); " "; : NEXT I

140 END

150 DATA <n>, <a1>, <a2>, . . . . . <an>

READ N

DIM A(N)

FOR I = 1 TO N: READ A(I): NEXT I

FOR I = 1 TO N - 1

FOR J = I + 1 TO N

IF A(J) >= M THEN 90

M = A(I): A(I) = A(J): A(J) = M

90 NEXT J: NEXT I

FOR I = 1 TO N: PRINT A(I); " "; : NEXT I

END

DATA <n>, <a1>, <a2>, . . . . . <an>

# 上机练习：

1. 本节讲的各 \*.BAS程序。
2. 编程计算  $A=\sin 25^\circ$  ,  $B=\cos 25^\circ$  ,  
 $C=\operatorname{tg} 25^\circ$  ,  $D=\operatorname{arctg} 3.5$ ,  $E=e^{3.9}$ ,  $F=\lg 25.9$ 。

本练习不用写作业本上。