

<<化学专业计算机基础>>

图书基本信息

书名：<<化学专业计算机基础>>

13位ISBN编号：9787502200312

10位ISBN编号：7502200312

出版时间：1988-02

出版时间：原子能出版社

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<化学专业计算机基础>>

### 内容概要

#### 内容简介

本书结合一般化学及应用化学中常遇到的数学问题讲解计算机语言和算法并给出有关程序和例题。

其内容包括计算机基本硬件知识、FORTRAN语言、化学中常用数值分析方法基础、BASIC语言及其应用等。附录中收入了Z80微型计算机指令表、FORTRAN 及FORTRAN77语句表和基本BAS - SIC语句表等。

本书为高等学校应用化学和其他化学专业本科学生学习计算机与算法语言的教科书，也可供上述领域中从事科研工作的人员参考。

## &lt;&lt;化学专业计算机基础&gt;&gt;

## 书籍目录

目录

前言

## 第一章 微型计算机基本原理及汇编语言简介

一、微型计算机的发展及在化学中的应用

二、微型计算机系统、微型计算机和微处理器

三、数据的表示和逻辑运算

(一) 数制及其转换

(二) 二进制数的定点与浮点表示

(三) 二进制数的原码 反码、补码

(四) 逻辑运算

四、Z80微处理器

(一) Z80微处理器的主要指标

(二) Z80微处理器的内部结构

\*五、Z80指令系统

(一) Z80指令系统简介

(二) Z80指令的寻址方式

\*六、模/数、数/模转换接口

(一) 模/数、数/模转换概念

(二) D+7A模/数、数/模转换接口

七、汇编语言简介

(一) 简介

(二) 语句结构

(三) 汇编程序举例

## 第二章 FORTRAN语言

一、FORTRAN语言概述

二、FORTRAN语言的基本知识

(一) FORTRAN程序的块状结构

(二) FORTRAN源程序的书写格式

(三) 常数

(四) 变量

(五) 算术运算符与表达式

(六) 库函数

(七) 举例

三、输入、输出语句

(一) 带格式的写语句

(二) 格式语句

(三) 带格式的读语句

(四) FORTRAN77文本的表控输入 输出及名表输入 输出

四、算术赋值语句、停语句、暂停语句、结束行

(一) 算术赋值语句

(二) 停语句与暂停语句

(三) 结束行

(四) 举例

五、转移语句

(一) 无条件转移语句

## &lt;&lt;化学专业计算机基础&gt;&gt;

- (二) 条件转移语句
  - (三) 计算转移语句
  - (四) 赋标号语句和赋标号转移语句
  - (五) FORTRAN77文本的分块语句
  - 六、循环与数组
    - (一) 循环语句与继续语句
    - (二) 数组
    - (三) 例题 直线拟合
  - 七、双精度型、逻辑型常数与变量
    - (一) 双精度型常数和双精度型变量
    - (二) 逻辑型常数和逻辑型变量
    - (三) 例题 用全主元高斯消去法解联立方程
  - 八、等价语句、公用语句、数据初值语句
    - (一) 等价语句
    - (二) 公用语句
    - (三) 数据初值语句
  - 九、语句函数、函数子程序、子例程子程序与外部语句
    - (一) 语句函数
    - (二) 函数子程序
    - (三) 子例程子程序
  - 十、文件的输入、输出
    - (一) 有格式读写语句
    - (二) 无格式读写语句
    - (三) 调用打开文件语句
    - (四) 文件结束语句及反绕语句
  - 十一、FORTRAN77的字符型数据
    - (一) 字符型变量
    - (二) 字符子串
    - (三) 字符表达式
    - (四) 字符型量的输入、输出
    - (五) 字符函数
  - 十二、FORTRAN语言与汇编语言的连接
- ### 第三章 化学中常用的数值方法基础
- 一、用行式打印机绘图
    - (一) 绘图子程序GRAPH
    - (二) 电子云的空间分布的描绘——CONTOUR程序
  - 二、非线性方程和非线性方程组的求解
    - (一) 对分区间套法(子程序BB)
    - (二) Newton - Raphson迭代法(子程序NR)
    - (三) 改进的Gauss - Newton法解非线性方程组(子程序DAMPGN)
  - 三、线性方程组的求解
    - (一) 列主元Gauss消去法(子程序GS)
    - (二) 逆矩阵法解线性方程组(子程序GJ)
  - 四、插值法
    - (一) 一元n点Lagrange插值法(子程序GLAG)
    - (二) 二元三点Lagrange插值法(子程序BTLAG)
    - (三) Hermite插值法

## <<化学专业计算机基础>>

(四) 三次样条函数插值法 (子程序SPLINE)

### 五、数值积分

(一) Simpson法求积 (子程序SMP)

(二) Romberg法求积 (子程序ROMB)

(三) 样条函数法求积 (子程序SPLINE)

(四) Monte - Carlo法求积 (子程序MTCI)

### 六、常微分方程的数值解法

(一) Euler方法 (子程序EULER)

(二) Runge - Kutta方法

(三) Runge - Kutta方法解一阶常微分方程 (子程序RK1)

(四) Runge - Kutta法解一阶常微分方程组 (子程序RK2)

(五) 高阶常微分方程的数值解法

(六) 预报 - 校正方法

### 第四章 BASIC语言及应用

#### 一、BASIC语言简介及语句的组成

(一) BASIC语言简介

(二) BASIC语句的组成

#### 二、BASIC语句

(一) 注释语句

(二) 赋值语句

(三) 数据输入 输出语句

(四) 控制语句

(五) 初始化语句

(六) 程序调试语句

(七) 与计算机有关的指令

#### 三、BASIC语言中的函数

(一) 算数函数

(二) 三角函数

(三) 程序员自定义函数

#### 四、应用举例

(一) 画图

(二) 直线拟合

(三) 用Newton - Raphson迭代法解高次方程

(四) 用全主元高斯消去法解联立方程

(五) 曲线拟合

(六) BASIC语言与汇编语言的连接

### 附录

一、Z80微型计算机指令表

二、Z80微型计算机常用伪操作码表

三、ASCII字符表

四、FORTRAN 与FORTRAN77语句表

五、基本BASIC语句表

参考文献

<<化学专业计算机基础>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>