

昆明理工大学

《程序设计基础》课程

综合设计实践教学课题报告

课程名称： C 程序设计

课题名称： 常用有机溶剂的检索

设计报告

1. 系统概述

有机合成实验中常用溶剂的筛选程序

2. 数据结构设计

由于在有机合成实验中存在很多溶剂, 在实验过程中需要对溶剂进行筛选, 因为溶剂类型比较多难以查找, 用 C 语言程序实现其对需求溶剂的快速查找。

(1) 选择结构

A; 用于条件判断和输入合理性的判断

B; 采用多路选择结构, 用于制作菜单。同时因为本程序在运行过程中需要多次退出菜单, 用 if 制作思路清晰。

(2) switch 结构

A; 用于选择菜单的主函数

(3) for 循环

A; 使用循环与 if 进行结合, 对菜单这任意位置设定一个固定的值, 使用 if, 进行条件判断, 可以方便的控制每级菜单的选择和跳出, 到达菜单的任意位置, for 循环保证了在非特定值的情况下,

界面停留在某一级的菜单上。

(4) 其他循环 while

A;用于完成和 for 循环相似功能

(5) 指针结构

A;用于读取文件放入结构体数组中

3、模块设计

程序的大致框架

有三级菜单选择，从一级菜单的选择进入程序

二级功能菜单通过对溶剂的名称和沸点进行检索

二级功能菜单对溶剂表的显示

三级功能菜单对固定范围内的溶剂进行检索查找

三级功能菜单对程序的重复运行

(1) 界面函数

对本程序的主要功能内容进行介绍

(2) 控制函数

通过键盘输入数字对选项和菜单功能进行选择

通过键盘输入指令进行程序的前进和后退

(3) 功能函数

使用各种类型函数完成对溶剂的沸点和名称

4. 调试运行及操作说明

按照程序主界面输入相应数字得到以下界面

```
正在载入文件!请稍等...
文件载入成功!
*****程序主界面*****
          常见有机溶剂检索程序
开始检索请输入1
查看溶剂列表请输入2
退出程序请输入0
1.0
*****
1
    请选择检索方式:
    1. 溶剂名
    2. 沸点范围检索.
1
    请输入溶剂名称(目前仅支持中文搜索):
乙酸乙酯
    已搜索到的溶剂:
    溶剂名称      溶剂沸点      溶剂分子扩散速率
    乙酸乙酯      77            615
```

输入 2 按照溶剂沸点检索

```

      请选择检索方式:
      1. 溶剂名.
      2. 沸点范围检索.

      请输入检索的沸点范围格式:x, n (范围:x-n~x+n)
8
      已找到的5种溶剂有(不足5个会输出重复):
      溶剂沸点      溶剂分子扩散速率      溶剂名称
      35            3875            乙醚
      35            3875            乙醚
      35            3875            乙醚
      35            3875            乙醚
      35            3875            乙醚
  
```

输入数据 1 按照溶剂名称检索

(2) 测试数据：包括正确的输入及其输出结果和含有错误的输入及其输出结果。输出

```

*****
      溶剂沸点      溶剂分子扩散速率      溶剂名称
      35            3875            乙醚
      40            2750            二氯甲烷
      77            1280            四氯化碳
      57            1180            醋酸甲酯
      56            1120            丙酮
      69            1000            正己烷
      84            750            二氯乙烷
      81            720            环己烷
      77            615            乙酸乙酯
      80            572            丁酮
      80            500            苯
      98            386            正庚烷
      65            370            甲醇
      111           240            甲苯
      82            205            异丙醇
      78            203            乙醇
      156           25            环己酮
      126           100            乙酸丁酯
      117           45            丁醇
  
```

程序代码:

```

#include<stdio.h>

#include<stdlib.h>

#include<string.h>

#define N 10

#define M 19

char a[N]; //定义全局变量: 药剂名

struct Member1
  
```

```

    {
        char name[N];

        int fei_dian;

        int kuo_sang;
    }ku[M]; //定义存储溶剂相关数据的结构体数组
struct Member2
{
    char Name[N];

    int F_D;

    int K_S;
}Ku; //定义搜索结果的存储结构体

int jian_suo() //定义函数：检索溶剂名输入，完成
{
    int i, j, k, n=0;

    printf("\t 请输入溶剂名称(目前仅支持中文搜索):\n");

    scanf("%s", &a);

    for(i=0; i<M; i++)
    {
        if(strcmp(a, ku[i].name)==0)
        {
            for(j=0; j<N; j++)
                Ku.Name[j]=ku[i].name[j];

            n=1;

            Ku.F_D=ku[i].fei_dian;

            Ku.K_S=ku[i].kuo_sang;
        }
        else continue;
    }

    if(n==1)

        printf("\t 已搜索到的溶剂:\n\t 溶剂名称\t 溶剂沸点\t 溶剂分子扩散速率\n\t %s\t %d\t %d\n", Ku.Name, Ku.F_D, Ku.K_S);

    if(n==0)

```

```

        printf("\tNo Found!\n");
    return 1;
}

int f_d()//沸点搜索. 完成
{
    int i, a1, a2, a3[5]={0, 0, 0, 0, 0}, s1, s2, n=0;
    printf("\t 请输入检索的沸点范围格式:x, n(范围:x~x+n)\n");
    scanf("%d, %d", &a1, &a2);
    s1=a1-a2;
    s2=a1+a2;
    for(i=0; i<M; i++)
        if((ku[i].fei_dian>=s1)&&(ku[i].fei_dian<=s2))
        {
            a3[n]=i;
            n++;
            if(n>=5)
                break;
        }
    printf("\t 已找到的 5 种溶剂有(不足 5 个会输出重复):\n\t 溶剂沸点\t 溶剂分子扩散速率\t 溶剂名称\n");
    for(i=0; i<5; i++)

        printf("\t%d\t\t%d\t\t\t%s\n", ku[a3[i]].fei_dian, ku[a3[i]].kuo_sang, ku[a3[i]].name);
    return 0;
}

int yao_ji_ku()//输出药剂库. 完成
{
    int i;
    printf("\t 溶剂沸点\t 溶剂分子扩散速率\t 溶剂名称\n");

```

```

        for(i=0;i<M;i++)

        printf("\t%d\t\t%d\t\t\t%s\n",ku[i].fei_dian,ku[i].kuo_sang,ku[i].name
    );
    return 0;
}

```

int menu()//主程序界面及功能选择. 完成

```

{   char c;int n;

    printf("\n*****程序主界面*****\n");
    printf("\t\t 常见有机溶剂检索程序\n");
    printf("\t 开始检索请输入 1\n");
    printf("\t 查看溶剂列表请输入 2\n");
    printf("\t 退出程序请输入 0\n");
    printf("v1.0\n");

    printf("*****\n");

    c=getchar();
    if(c=='\n')
        c=getchar();

    n=c-48;
    return(n);
}

```

int du_qu()//读取文件数据放入结构体数组中. 完成

```

{
    int i;
    FILE *fp;
    fp=fopen("4T.txt","r");
    if(fp==NULL)
        {   printf("Can't open this file!\n");

```

```

        exit(0);

    } //检查文件打开是否成功 4T.txt 281 位.
    printf("\t 正在载入文件!请稍等...\n");
    for(i=0;i<19;i++)
    {
        fscanf(fp, "%s", &ku[i].name);
        fscanf(fp, "%d", &ku[i].fei_dian);
        fscanf(fp, "%d", &ku[i].kuo_sang);
    }
    fclose(fp); //关闭文件 4T.txt
    printf("\t 文件载入成功!\n");
    return 0;
}

int J() //检索方式选择. 完成
{
    int x, e;

    printf("\t 请选择检索方式:\n\t1. 溶剂名. \n\t2. 沸点范围检索. \n");
    scanf("%d", &e);
    if(e==1)
        x=jian_suo();
    else if(e==2)
        x=f_d();
    else
        printf("\t 输入错误!\n");
    return 0;
}

void main() //主函数. 完成
{
    int k, x, i;

    i=du_qu();
    do { k=menu();

```

```

switch(k)
{
    case 1: x=J();break;
    case 2: x=yao_ji_ku();break;
    case 3: printf("3\n");break;
    case 0: printf("\tgodbye!\n");break;
}
}while(k!=0);
}

```

数据文件: 4I.txt

乙醚 35 3875
 二氯甲烷 40 2750
 四氯化碳 77 1280
 醋酸甲酯 57 1180
 丙酮 56 1120
 正己烷 69 1000
 二氯乙烷 84 750
 环己烷 81 720
 乙酸乙酯 77 615
 丁酮 80 572
 苯 80 500
 正庚烷 98 386
 甲醇 65 370
 甲苯 111 240
 异丙醇 82 205
 乙醇 78 203
 环己酮 156 25
 乙酸丁酯 126 100
 丁醇 117 45