

气相色谱资料程序算法

杨传忠

(石油工业部贵州石油地质科学研究所)

作者运用BASIC语言编制了色谱资料计算程序,并利用PC-1500可编程序袖珍计算机对色谱参数进行计算。该程序算法可自动计算和打印出每个样品的8个色谱参数,计算快速准确,为科研和生产提供了方便。

对于饱和烃气相色谱各参数的计算,作者运用BASIC语言编制了色谱资料计算程序,在PC-1500可编程序袖珍计算机进行计算。该程序算法只要输入有关色谱资料,即可自动计算和打印出每个样品的正烷烃各分子的百分含量、OEP值、 $\Sigma C_{21}^- / \Sigma C_{22}^+$ 、 C_{21+22} / C_{28+29} 、 P_r / P_h 、 P_r / nC_{17} 、 P_h / nC_{18} 和主峰碳等8项参数。

1. 计算公式

(1) 正烷烃各分子的百分含量

$$C_i(\%) = \frac{C_i}{C_N + C_{N+1} + C_{N+2} + \dots + C_M} \times 100$$

式中: C_N 为样品中最低碳数的正烷烃分子峰高; C_M 为样品中最高碳数的正烷烃分子峰高; $C_i(\%)$ 为样品中某碳数正烷烃分子相对重量百分含量, i 范围为 $N-M$ 。

(2) OEP值

$$OEP = \left[\frac{C_{(K-2)} + 6C_K + C_{(K+2)}}{4C_{(K-1)} + C_{(K+1)}} \right]^{(-1)(K+1)}$$

式中: K 为主峰碳数; $C_{(K-i)}$ 为碳数 $(K-i)$ 的正烷烃相对重量百分含量。

(3) $\Sigma C_{21}^- / \Sigma C_{22}^+$

$$(\Sigma C_{21}^- / \Sigma C_{22}^+) = \frac{C_{21} + C_{20} + C_{19} + \dots + C_N}{C_{22} + C_{23} + C_{24} + \dots + C_M}$$

式中: ΣC_{21}^- 为正二十一烷及以前各碳数正烷烃的重量百分含量之和; ΣC_{22}^+ 为正二十二烷烃及以后各碳数正烷烃的重量百分含量之和。

(4) C_{21+22} / C_{28+29}

$$(C_{21+22} / C_{28+29}) = \frac{C_{21} + C_{22}}{C_{28} + C_{29}}$$

式中 C_i 为碳数 i 正烷烃的重量百分含量。

(5) P_r/P_h

$$(P_r/P_h) = \frac{P_r}{P_h} \quad \text{式中: } P_r \text{ 为姥鲛烷峰高, } P_h \text{ 为植烷峰高。}$$

(6) P_r/nC_{17}

$$(P_r/nC_{17}) = \frac{P_r}{nC_{17}} \quad \text{式中 } nC_{17} \text{ 为正十七烷峰高。}$$

(7) P_h/nC_{18}

$$(P_h/nC_{18}) = \frac{P_h}{nC_{18}} \quad \text{式中 } nC_{18} \text{ 为正十八烷峰高。}$$

2. 程序

```

10: CLEAR
20: INPUT "N=" ; N, "M=" ; M, "P_r=" ; R, "P_h=" ; PH
30: DIM C(M)
40: FOR I=N TO M
50: WAIT 10
60: PRINT C( " , I, " ) = " ;
70: INPUT C(I)
80: PRINT
90: IF I>21 THEN 110
100: A = A + C(I) : GOTO 120
110: B = B + C(I)
120: NEXT I
130: LPRINT "C_n C_max C%"
140: FOR I=N TO M
150: LPRINT USING, "C" ; TAB 5, USING "###.##" ; C(I) ; TAB
    11, USING "###.##" ; 100 * C(I) / (A + B)
160: NEXT I
170: LPRINT
180: FOR K=N TO M
190: FOR I=N TO M
200: IF C(I) > C(K) THEN 225
210: NEXT I
220: LPRINT USING, "C_max....." ; "C" ;
    K ; GOTO 230
225: NEXT K
230: O = ( C(K-2) + 6 * C(K) + C(K+2) ) / ( 4 * ( C(K-1) + C(K+1) ) )
240: P = (-1) ^ (K-1)
250: OP = O \ P
260: LPRINT USING "###.##" ; "OEP..I." ; OP

```

```

270: LPRINT "Pr/Ph……" ; PR/PH
280: LPRINT "Pr/nC17……" ; PR/C(17)
290: LPRINT "Ph/nC18……" ; PH/C(18)
300: LPRINT "C21-/C22+……" ; A/B
310: LPRINT "C21+C22/C28+C29……" ; (C(21)+C(22))/(C(28)+C(29))
320: END

```

3. 程序说明

程序10—80句为数据输入, 一次输入一个样品的数据。

程序90—170句为计算打印各碳数正烷烃的峰值和百分含量。

程序180—320句为计算和打印出样品的主峰碳、OEP值、 P_r/P_h 、 P_r/nC_{17} 、 P_h/nC_{18} 、 C_{21-}/C_{22+} 、 $(C_{21}+C_{22})/(C_{28}+C_{29})$ 等计算结果。

(1) 存储器内容: N为样品最低碳数、M为样品最高碳数、PR为姥鲛烷峰高、PH为植烷峰高、 $C_{(I)}$ 为样品某碳数正烷烃分子峰高、 $C_{(K)}$ 为主峰碳 $C_{m \pm k}$ 分子峰高、K为主峰碳数、A为 ΣC_{21} 前、B为 ΣC_{22} 后、OP为OEP值。

(2) 程序运行: 选择RUN状态, 以RUN启动程序, INPUT手动方式输入每个样品的N、M、 P_r 、 P_h 和各碳数分子峰后, 打印机即可打印出各参数的计算结果。新样品的数据未输入以前, 各存储器保存内容若需重新打印计算结果, 只要采用GOTO130启动即可。

(收稿日期: 1986年5月16日)

PROGRAMMED COMPUTATION OF GC DATA

Yang Chuanzhong

(Guizhou Scientific Research Institute of Petroleum

Geology, Ministry of Petroleum Industry)

Abstract

Using BASIC language, programmed computation of GC data were made. Chromatographic parameters were calculated with PC - 1500 programmable mini - computer. The programmed computation can be used to calculate and plot eight chromatographic parameters for each sample. This method is quick and accurate, providing a useful tool for scientific work and produc-