



中华人民共和国国家标准

GB/T 18340.4—2001

地质样品有机地化测试 重馏分石油芳香烃族组成质谱分析方法

Organic geochemical measurements of geological samples—
Method for aromatic types analysis of gas-oils aromatic
fractions by mass spectrometry

2001-03-19 发布

2001-10-01 实施

国家质量技术监督局 发布

前 言

本标准是在地质矿产石油地质海洋地质局企业标准《重馏分油芳香烃族组成质谱分析方法》的基础上,参考石油化工科学研究院《质谱法测定重馏分油芳香烃的烃类组成》分析方法以及国内外有关资料,按照先进性、实用性与可靠性相结合的原则,并经过对比测试的实践检验后制定的。本标准确定了重馏分石油芳香烃族组成的质谱分析方法、定量计算过程和分析精密度要求。

本标准的附录 A 是标准的附录。

本标准由国土资源部提出。

本标准由全国地质矿产标准化技术委员会岩矿测试标准物质和方法技术委员会归口。

本标准起草单位:中国新星石油公司实验地质研究院、上海医药工业研究院、上海染料研究所。

本标准主要起草人:周锦南、王惠敏、刘德晨。

地质样品有机地化测试
重馏分石油芳香烃族组成质谱分析方法

GB/T 18340.4—2001

Organic geochemical measurements of geological samples—
Method for aromatic types analysis of gas-oils aromatic
fractions by mass spectrometry

1 范围

本标准规定了重馏分石油芳香烃族组成的质谱分析方法、定量计算过程和分析精密度等。

本标准适用于重馏分石油(沸程范围 300℃~540℃)芳香烃馏分中的 18 种芳香烃及 3 种芳香噻吩的烃族组成的定量分析。试样中必须不含烯烃,总硫量必须低于总重量的 1%,非芳烃含量应 $<5\%$ 。

注:在总计 21 种烃族中,只有 15 种已定名,其余 6 种为相应于各自同系物的未鉴定芳烃。

2 方法提要

被测油样不经分离直接作质谱测定,得到该样品的混合质谱图。根据质谱数据算出 I~VII 类芳烃的特征峰组强度加和,每一特征峰组包括多同位素分子离子峰系列和单同位素分子离子峰减 1 系列。用根据纯芳烃化合物导出的 7×7 逆阵计算出 7 类芳烃的相对含量。又根据基线法把每类烃分为标称型(0 型)、第一重叠型(1 型)和第二重叠型(2 型)。最后求出 7 类 3 型共计 21 种芳香烃族的相对含量,烃族含量以体积百分数计。

3 仪器及设备

3.1 质谱计:扇形磁场质谱计或磁场-静电场双聚集质谱计。

3.2 进样系统:任何能升温至 125℃~350℃、无样品损失、无污染的样品汽化导入装置。可以是储样罐,也可以是直接蒸发进样器,用后者并配合高速数据系统可做微量分析。

3.3 数据处理系统:能对谱图作数据实时采集、相加、相减、列表、作图等处理的质谱数据系统,带 FORTRAN 77、MS-FORTRAN V5.0、MS-FORTRAN POWERSTATION V4.0 或其他更高版本的 FORTRAN 程序编译器。

3.4 微量注射器:1 μL 、10 μL 和 100 μL 。

4 试剂及材料

4.1 全氟煤油(PFK)或其他已知准确质量的参考物:质量数校准用。

4.2 正十六烷:仪器调节和校准用,色谱纯。

4.3 氯仿:溶剂,样品稀释和实验器具清洗用,分析纯。

5 分析条件

5.1 质量分辨率: ≥ 800 。

- 5.2 电子轰击能量:70 eV。
- 5.3 电离室温度:250℃。
- 5.4 进样器加热温度:125℃~350℃。
- 5.5 质量扫描方式:指数扫描。
- 5.6 质量扫描范围:60u~760u。
- 5.7 电子倍增器增益: $\geq 10^5$ 。
- 5.8 离子通道真空度: $\leq 1 \times 10^{-3}$ Pa。

6 校准和其他准备工作

- 6.1 各种仪器校准和分析工作均应在仪器运转达到稳定时进行。
- 6.2 用 PFK(或其他已知准确质量的参考物)校准数据系统的质量标尺,使在 $m/z60u \sim 760u$ 范围内的质量偏差不超过 $\pm 0.2u$, 否则应建立新的质量校正表。
- 6.3 用正十六烷校准质谱裂解模型,使 $\Sigma 69/\Sigma 71$ 比值在 0.18 ± 0.03 之间, $m/z127$ 与 $m/z226$ 的峰高比在 1.4 ± 0.1 之间。若比值超过此范围,应重新调整离子源内离子排斥极电压等相关的工作参数。

$\Sigma 69$ 与 $\Sigma 71$ 的定义为:

$\Sigma 69 = m/z69 + m/z83 + m/z97 + m/z111 + m/z125 + m/z139$ 的总峰强;

$\Sigma 71 = m/z71 + m/z85 + m/z99 + m/z113$ 的总峰强。

上述各质谱峰强是指已作了重同位素校正的“单同位素”峰强。

- 6.4 计算芳香烃族组成用的 FORTRAN 程序载于本标准的附录 A(标准的附录),它由一个主程序(附录 A1)和四个子程序(附录 A2~A5)组成。由于质谱数据储存方式和计算机系统兼容性的缘故,允许使用者对程序中的某些语句作必要的修改。在进样分析前,要用相应的编译程序对其进行编译和链接,使之成为一个完整的可执行程序。

注:在本标准附录 A(标准的附录)所提供的程序里,质谱数据存取格式是按中国科学院科学仪器中心的软件产品 KYKY-GC/MS-DS1 质谱数据系统的数据存盘格式编写的。如果用户所使用的数据系统与此不同,则应对 RMS.FOR(附录 A4)和 SAVER.FOR(附录 A5)这两个子程序中的质谱数据输入输出语句进行相应的修改。

7 分析步骤

- 7.1 使用精馏切割法获取沸点为 300℃~540℃的重馏分石油,并用柱层析法分离得到芳香烃馏分。
- 7.2 检查质谱计各部分的工作状态,确定它们都在第 6 节规定的分析条件下运行且是稳定的。
- 7.3 样品质谱分析

对于储样罐与直接蒸发两种不同的进样方式,取用不同的分析步骤。

7.3.1 储样罐进样方式

- 7.3.1.1 启动质谱扫描,在 $m/z60u \sim 760u$ 范围内,记录下约 10 幅本底离子流质谱。
- 7.3.1.2 关闭储样罐抽气阀,用微量注射器吸取 $3 \mu L \sim 5 \mu L$ 试样注入罐内,被汽化的试样通过漏孔或漏阀导入离子源。注意控制进入离子源的样品流量,保持离子流放大器工作在线性区域。
- 7.3.1.3 在不间断地采集质谱的同时,观察总离子流的变化。当总离子流达极大后,持续采集 10 幅以上的样品质谱,然后结束样品质谱的采集。
- 7.3.1.4 打开储样罐抽气阀,用泵抽去被测试样。待残余本底质谱总离子流低于上次样品总离子流的 $1/50$ 后。可准备作下一次进样。

7.3.2 直接蒸发进样方式

- 7.3.2.1 用氯仿作溶剂,将样品稀释至 $10 \mu g/\mu L \sim 100 \mu g/\mu L$ 左右的浓度。用 $1 \mu L$ 的微量注射器吸取 $0.1 \mu L \sim 1 \mu L$ 溶液注入直接进样用专用坩埚,待溶剂自然挥发干后,样品坩埚内将留有约 $5 \mu g \sim 20 \mu g$ 量的芳香烃试样。

7.3.2.2 将坩埚装到直接进样杆上,再把进样杆装到离子源的直接进样口上。打开前级真空抽气阀,将进样杆预抽至 10 Pa 量级的前级真空。

7.3.2.3 启动质谱扫描,在 $m/z60u\sim760u$ 范围内,记录下约 10 幅本底离子流质谱。

7.3.2.4 关闭前级真空抽气阀,打开离子源高真空隔离阀,把进样杆推入离子源,位于进样杆顶端的盛样坩埚则进入电离室。加热坩埚使样品均衡地蒸发,直至样品全部蒸发完。在此期间质谱采集不间断地进行,记录下全部样品质谱。采集的样品谱总数以 30~100 幅为最佳。

注:若质谱计带有直接蒸发进样总离子流控制装置,则使用该装置完成样品蒸发过程。总离子流控制装置可保证样品均衡地蒸发,并保持离子流放大器工作在线性区域。

7.3.2.5 将进样杆拉出离子源,关闭高真空隔离阀,让高真空泵不断地抽去被测试样品在离子源内的残余物。待本底质谱总离子流低于上次样品总离子流的 1/50 后,可准备下一次进样。

8 计算

8.1 选择样品质谱范围

烃族组成计算用的样品质谱范围是从总离子流图上来选择的。对于储样罐与直接蒸发两种不同的进样方式,使用不同的选择方法。

8.1.1 储样罐进样方式

选择总离子流强度较高而且较稳定的 8~20 幅样品质谱,但不要选用质谱采集时间过长、甚至总离子流已明显下跌的那些谱。

注:不选用质谱采集时间过长的那些谱,是因为在进样系统中为控制样品流量使用了分子漏孔,这将导致产生质量歧视效应和同位素分馏效应,造成谱图的变形。这二种效应对计算结果的不利影响将随时间的增加而逐渐加剧。

8.1.2 直接蒸发进样方式

选择样品受热蒸发总离子流开始上升的谱作为样品起始谱,选择总离子流下降到接近本底的谱作为样品终了谱。

8.2 选择进样前的仪器本底离子流质谱,总数 5~8 幅即可。

8.3 用计算机计算芳香烃族组成

调用由附录 A(标准的附录)所产生的计算机可执行程序计算芳香烃族组成,该程序对储样罐与直接蒸发两种进样方式均适用。按程序的提示依次输入相关信息并加载样品质谱数据,计算机即开始进行下列各项计算。

8.3.1 对选定范围的样品谱与本底谱分别进行平均计算。

8.3.2 将样品平均谱与本底平均谱相减,求得扣除了本底的真实的样品谱。

8.3.3 开始计算芳香烃样品中 21 种烃族的体积百分含量。这 21 种烃族的类别、类型、名称以及分子通式见表 1。

有关芳香烃族组成计算步骤的详细说明,参见附录 A(标准的附录)中的多条程序注释。

9 精密度

同一样品两次平行分析,其测定结果的允许双差 D 见表 2。

注:双差 D 的定义为:

$$D = A - B$$

式中: A ——第一次(基本分析)测量值;

B ——第二次(检查分析)测量值。

表 1 重馏分石油芳香烃的类别、类型、名称以及分子通式

类别	类型	名 称	分 子 式
I	0	烷基苯	C_nH_{2n-6}
	1	苯并噻吩	$C_nH_{2n-10}S$
	2	环烷菲	C_nH_{2n-20}
II	0	环烷苯	C_nH_{2n-8}
	1	茈类	C_nH_{2n-22}
	2	未鉴定	—
III	0	二环烷苯	C_nH_{2n-10}
	1	类	C_nH_{2n-24}
	2	未鉴定	—
IV	0	萘类	C_nH_{2n-12}
	1	二苯并噻吩	$C_nH_{2n-16}S$
	2	未鉴定	—
V	0	茈及二苯并呋喃	C_nH_{2n-14} 及 $C_nH_{2n-16}O$
	1	类	C_nH_{2n-28}
	2	未鉴定	—
VI	0	茈类	C_nH_{2n-16}
	1	二苯并蒽	C_nH_{2n-30}
	2	未鉴定	—
VII	0	菲类	C_nH_{2n-18}
	1	萘苯并噻吩	$C_nH_{2n-22}S$
	2	未鉴定	—

表 2 重馏分石油芳香烃族组成质谱平行测定的允许双差 D

%

质量分数范围	允许双差
<5	≤ 2
5~20	≤ 3
>20	≤ 5

附录 A

(标准的附录)

计算重馏分石油芳香烃族组成用的 FORTRAN 源程序

A1 主程序 ATA

PROGRAM ATA

C

C 本程序是计算重馏分石油芳香烃族组成用的主程序

C 程序中的 H(M)代表质量 M 的多同位素峰高

C 程序中的 HDI(M)代表质量 M 的单同位素峰高

C

DIMENSION MS(8),HT(8)

CHARACTER * 32 FIL,TIT * 64,CDAT * 11,CTIM * 8

COMMON H(1000),HDI(1000)

C 质谱的读入、平均、相减和储存

CALL RMS(FIL,TIT,CDAT,CTIM)

C 校正重同位素影响

CALL DEISO

C 计算和报告芳香烃族组成

CALL AROMTC(FIL,TIT,CDAT,CTIM)

STOP

END

A2 子程序 DEISO

SUBROUTINE DEISO

C

C 本子程序计算单同位素峰强,假设所有离子的 Z 值在 +2 至 -11 之间

C 分子通式为 $C(N)H(2N+Z)$.

C COMMON H(1000),HDI(1000)

DIMENSION NCARB(1000),NHVD(1000)

DO 10 I=12,758

NCARB(I)=0

10 NHVD(I)=0

DO 20 K=12,758

NCARB(K)=(K+11)/14

NHVD(K)=K-12 * NCARB(K)

IF(NHVD(K).LT.0) NHVD(K)=0

20 CONTINUE

DO 30 K=14,758

HDI(K)=H(K)-HDI(K-1) * (.010811 * FLOAT(NCARB(K-1))+.00015 *

* FLOAT(NHVD(K-1)))

```

HDI(K)=HDI(K)+HDI(K-2)*( .00005844 * FLOAT(NCARB(K-2) *
* (1-NCARB(K-2))) + .1125E-7 * FLOAT(NHYD(K-2) * (1-NHYD(K-
* 2)))
* -.162165E-5 * FLOAT(NCARB(K-2) * NHYD(K-2)))
IF(HDI(K).LT.0.0) HDI(K)=0.0
30 CONTINUE
RETURN
END

```

A3 子程序 AROMTC

SUBROUTINE AROMTC(W,TITLE,CDAT1,CTIM1)

C

C 本子程序给出了石油重芳烃馏分计算过程

C 详细的计算过程描述见 Anal Chem 41,1548-54(1969).

C

```

COMMON H(1000),HDI(1000)
DIMENSION AIN(7,7),BA(7),BB(7),SR(1000)
CHARACTER ANS * 1,W * 32,DEV * 32,F2501 * 8,TITLE * 64,CDAT1 * 11,
CTIM1 * 8
DATA AIN/+1.8094,-.1952,+ .0124,-.0027,-.0015,-.0011,-.0028,
* -.1601,+2.0479,-.2806,-.0401,+ .0082,+ .0012,+ .0000,
* -.0943,-.2287,+2.3024,-.4936,-.0601,-.0155,-.0089,
* -.0292,+ .0033,-.0580,+1.9404,-.1337,-.0117,-.0043,
* -.0022,-.0033,-.0026,-.0195,+1.9773,-.1823,+ .0123,
* -.0420,+ .0026,-.0018,-.0151,-.0584,+2.0616,-.4193,
* -.2346,-.1069,-.0267,-.0019,-.0057,-.0904,+1.9904/
NC1=LEN _ TRIM(W)
NC2=LEN _ TRIM(TITLE)

```

C

C “开方”数组初始化

C

```

DO 2132 I=12,750
2132 SR(I)=0.0

```

C

C 加和芳烃馏分相关谱峰以用于 7×7 矩阵处理

C A6,A7,A8..... 的值先是代表 Z 值为 6,7,8..... 的峰强加和

C 然后在 A6,A7,A8..... 中又加入了相应于分子离子峰-1 系列的奇数 Z 值峰强

C A6=A6+A7,A8=A8+A9.....

C

```

A6=0.0
DO 2106 M=78,750,14
2106 A6=A6+H(M)
A7=0.0

```

DO 2107 M=91,750,14
2107 A7=A7+HDI(M)
A6=A6+A7
IF(A6.LT.1.0) A6=1.0
A8=0.0
DO 2108 M=104,750,14
2108 A8=A8+H(M)
A9=0.0
DO 2109 M=117,750,14
2109 A9=A9+HDI(M)
A8=A8+A9
IF(A8.LT.1.0) A8=1.0
A10=0.0
DO 2110 M=130,750,14
2110 A10=A10+H(M)
A11=0.0
DO 2111 M=129,750,14
2111 A11=A11+HDI(M)
A10=A10+A11
IF(A10.LT.1.0) A10=1.0
A12=0.0
DO 2112 M=128,750,14
2112 A12=A12+H(M)
A13=0.0
DO 2113 M=141,750,14
2113 A13=A13+HDI(M)
A12=A12+A13
IF(A12.LT.1.0) A12=1.0
A14=0.0
DO 2114 M=154,750,14
2114 A14=A14+H(M)
A15=0.0
DO 2115 M=167,750,14
2115 A15=A15+HDI(M)
A14=A14+A15
IF(A14.LT.1.0) A14=1.0
A16=0.0
DO 2116 M=166,750,14
2116 A16=A16+H(M)
A17=0.0
DO 2117 M=179,750,14
2117 A17=A17+HDI(M)
A16=A16+A17

IF(A16.LT.1.0) A16=1.0

A18=0.0

DO 2118 M=178,750,14

2118 A18=A18+H(M)

A19=0.0

DO 2119 M=191,750,14

2119 A19=A19+HDI(M)

A18=A18+A19

IF(A18.LT.1.0) A18=1.0

C

C 对质量数 175,176,189,190,200,213 处的不恰当的离子峰强作校正

C

C 校正 HDI(175)

C

CDI175=HDI(161) - (HDI(161) - HDI(203))/3.0

IF(HDI(175).GE.CDI175) GO TO 1046

CDI175=HDI(175)

C

C 校正 H(176)

C

1046 CH176=H(162) - (H(162) - H(204))/3.0

IF(H(176).GE.CH176) GO TO 1048

CH176=H(176)

C

C 校正 HDI(189)

C

1048 CDI189=CDI175 - (CDI175 - HDI(203))/2.0

IF(HDI(189).GE.CDI189) GO TO 1049

CDI189=HDI(189)

C

C 校正 H(190)

C

1049 CH190=CH176 - (CH176 - H(204))/2.0

IF(H(190).GE.CH190) GO TO 2101

CH190=H(190)

C

C 校正 H(200)

C

2101 CH200=(H(186)+H(214))/2.0

IF(H(200).GE.CH200) GO TO 2102

CH200=H(200)

C

C 校正 HDI(213)

C

2102 $CDI213 = (HDI(199) + HDI(227)) / 2.0$
 $IF(HDI(213).GE.CDI213) GO TO 2103$
 $CDI213 = HDI(213)$

C

C 下述语句校正 A6, A10 加和

2103 $A6 = A6 - (HDI(175)) + HDI(189) + H(176) + H(190))$
 $* \quad + CDI175 + CDI189 + CH176 + CH190$
 $A10 = A10 - (H(200) + HDI(213)) + CH200 + CDI213$

C

C 把 A6, A8, 加和值重定义为数组元素变量, 然后以芳烃逆矩阵 AIN(I, J) 乘之

C

$BA(1) = A6$
 $BA(2) = A8$
 $BA(3) = A10$
 $BA(4) = A12$
 $BA(5) = A14$
 $BA(6) = A16$
 $BA(7) = A18$
 $DO 2125 J = 1, 7$
 $BB(J) = 0.0$
 $DO 2124 I = 1, 7$
2124 $BB(J) = BB(J) + BA(I) * AIN(J, I)$
2125 CONTINUE
 $DO 2127 J = 1, 7$
 $IF(BB(J)) 2126, 2127, 2127$
2126 $BB(J) = 0.0$
2127 CONTINUE
 $AA6 = BB(1)$
 $AA8 = BB(2)$
 $AA10 = BB(3)$
 $AA12 = BB(4)$
 $AA14 = BB(5)$
 $AA16 = BB(6)$
 $AA18 = BB(7)$
 $SUMAA = 0.0$
 $DO 2128 J = 1, 7$
2128 $SUMAA = SUMAA + BB(J)$

C

C 计算出的 AA6, AA8, 即相应于 Z = -6, -8, 等类芳烃的分量大小

C SUMAA 是 AA 值的加和, 它代表所计算芳烃的总量

C 下面用基线法求解 Z = -6 重叠型

C

此为试读, 需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com

A7=A7-HDI(175)-HDI(189)+CDI175+CDI189

HDI(175)=CDI175

HDI(189)=CDI189

DO 2130 M=105,750,14

IF(HDI(M)) 2130,2131,2130

2130 CONTINUE

2131 MM=M-14

SLOPE=((((0.72 * HDI(105)) * * 0.5) - (HDI(MM)) * * 0.5)/

* (90.71 - (1000.0/FLOAT(MM)) * * 2)

B=(0.72 * HDI(105)) * * 0.5 - 90.71 * SLOPE

DO 2133 M=147,MM,14

REALM=M

2133 SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B

C

C 以上是 Z=-6 重叠型,烷基苯峰强的开方储存于数组 SR(I)中

C 以下是解 Z=-8 重叠型

C

DO 2134 M=215,750,14

IF(HDI(M)) 2134,2135,2134

2134 CONTINUE

2135 MN=M-14

SLOPE=((((0.66 * HDI(173)) * * 0.5) - (HDI(MN)) * * 0.5)/

* (34.12 - (1000.0/FLOAT(MN)) * * 2)

B=(0.66 * HDI(173)) * * 0.5 - 34.12 * SLOPE

DO 2136 M=215,MN,14

REALM=M

2136 SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B

C

C 以下是解 Z=-10 重叠型

C

A11=A11-HDI(213)+CDI213

HDI(213)=CDI213

DO 2137 M=241,750,14

IF(HDI(M)) 2137,2138,2137

2137 CONTINUE

2138 MO=M-14

SLOPE=((HDI(185)) * * 0.5 - (HDI(MO)) * * 0.5)/

* (29.22 - (1000.0/FLOAT(MO)) * * 2)

B=HDI(185) * * 0.5 - 29.22 * SLOPE

DO 2139 M=241,MO,14

REALM=M

2139 SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2+B

C

C 以下是解 $Z = -12$ 重叠型

C
 DO 2140 M=197,750,14
 IF(HDI(M)) 2140,2141,2140
 2140 CONTINUE
 2141 MP=M-14
 SLOPE=(((0.25 * HDI(183)) * * 0.5) - (HDI(MP)) * * 0.5) /
 * (29.86 - (1000.0 / FLOAT(MP)) * * 2)
 B=(0.25 * HDI(183) * * 0.5 - 29.86 * SLOPE
 DO 2142 M=197,MP,14
 REALM=M
 2142 SR(M)=SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B

C

C 以下是解 $Z = -14$ 重叠型

C
 DO 2143 M=265,750,14
 IF(HDI(M)) 2143,2144,2143
 2143 CONTINUE
 2144 MQ=M-14
 SLOPE=(((0.64 * HDI(251)) * * 0.5) - (HDI(MQ)) * * 0.5) /
 * (15.87 - (1000.0 / FLOAT(MQ)) * * 2)
 B=(0.64 * HDI(251) * * 0.5 - 15.87 * SLOPE
 DO 2145 M=265,MQ,14
 REALM=M
 2145 SR(M)=SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B

C

C 以下是解 $Z = -16$ 重叠型

C
 DO 2146 M=291,750,14
 IF(HDI(M)) 2146,2147,2146
 2146 CONTINUE
 2147 MR=M-14
 SLOPE=(((0.7 * HDI(277)) * * 0.5) - (HDI(MR)) * * 0.5) /
 * (13.03 - (1000.0 / FLOAT(MR)) * * 2)
 B=(0.7 * HDI(277) * * 0.5 - 13.03 * SLOPE
 DO 2148 M=291,MR,14
 REALM=M
 2148 SR(M)=SLOPE * (1000.0 / REALM) * * 2 + B

C

C 以下是解 $Z = -18$ 重叠型

C
 DO 2149 M=247,750,14
 IF(HDI(M)) 2149,2150,2149

```

2149 CONTINUE
2150 MS=M-14
      SLOPE=((((0.58 * HDI(233)) * * 0.5) - (HDI(MS)) * * 0.5) /
*          (18.42 - (1000.0/FLOAT(MS)) * * 2)
      B=(0.58 * HDI(233)) * * 0.5 - 18.42 * SLOPE
      DO 2151 M=247,MS,14
      REALM=M
2151 SR(M)=SLOPE * (1000.0/REALM) * * 2 + B

```

C

C 至此已计算了开方数组

C 对某些谱在零峰高区仍得到斜率和截距。如发生这一情况,将会把错误带入 SR 数组

C 以下语句使 HDI=0.0 时 SR 也为零

C

```

      DO 2153 I=12,750
      IF(HDI(I)) 2152,2152,2153
2152 SR(I)=0.0
2153 CONTINUE

```

C

C SR 数组平方,得到各个 Z 值的未校准标称型峰高

C

```

      DO 2154 I=12,750
2154 SR(I)=SR(I) * * 2

```

C

C 对某些非线性开方关系的 SR(I)值进行校准

C

```

SR(147)=SR(147) * 1.44
SR(197)=SR(197) * 3.10
SR(211)=SR(211) * 2.52
SR(225)=SR(225) * 2.07
SR(239)=SR(239) * 1.83
SR(253)=SR(253) * 1.59
SR(267)=SR(267) * 1.39
SR(281)=SR(281) * 1.28
SR(295)=SR(295) * 1.26
SR(309)=SR(309) * 1.14
SR(323)=SR(323) * 1.06
SR(265)=SR(265) * 1.42
SR(279)=SR(279) * 1.24
SR(293)=SR(293) * 1.12
SR(307)=SR(307) * 1.06
SR(291)=SR(291) * 1.24
SR(305)=SR(305) * 1.15
SR(319)=SR(319) * 1.07

```

$$SR(333) = SR(333) * 1.06$$

$$SR(347) = SR(347) * 1.05$$

$$SR(361) = SR(361) * 1.03$$

$$SR(247) = SR(247) * 1.61$$

$$SR(261) = SR(261) * 1.50$$

$$SR(275) = SR(275) * 1.44$$

$$SR(289) = SR(289) * 1.37$$

$$SR(303) = SR(303) * 1.28$$

$$SR(317) = SR(317) * 1.28$$

$$SR(331) = SR(331) * 1.21$$

$$SR(345) = SR(345) * 1.10$$

$$SR(359) = SR(359) * 1.09$$

$$SR(373) = SR(373) * 1.07$$

$$SR(387) = SR(387) * 1.05$$

C

C 如发现有 SR(M) 值超过对应的 HDI(M) 则进行校正

C

$$DO\ 2156\ M=12,750$$

$$IF(SR(M) - HDI(M))\ 2156,2156,2155$$

$$2155\ SR(M) = HDI(M)$$

$$2156\ CONTINUE$$

C

C 计算 A7 的各个部分即 A6A, A10S, A20A 各个类型

C

$$A6A = 0.0$$

$$DO\ 2157\ M=91,133,14$$

$$2157\ A6A = A6A + HDI(M)$$

$$DO\ 2158\ M=147,MM,14$$

$$2158\ A6A = A6A + SR(M)$$

$$A10S = 0.0$$

$$DO\ 2159\ M=147,189,14$$

$$2159\ A10S = A10S + HDI(M) - SR(M)$$

$$A10S = A10S / 0.75$$

$$A20A = A7 - A6A - A10S$$

$$IF(A20A)\ 2160,2161,2161$$

$$2160\ A20A = 0.0$$

$$A10S = A7 - A6A$$

$$2161\ CONTINUE$$

C

C 计算分量 A6A, A10S 和 A20A

C

$$TRASH = (A6 - AA6 * 0.5579) * (A7 / A6)$$

$$IF(TRASH.LT.0.0)\ TRASH = 0.0$$

```

A7=A7-TRASH
A6A=A6A-TRASH
IF(A6A.LT.0.0) A6A=0.0
IF(A6A.EQ.0.0) A7=A10S+A20A
IF(A7.EQ.0.0) THEN
  A6A=0.0
  A10S=0.0
  A20A=0.0
ELSE
  A6A=(A6A/A7)*AA6
  A10S=(A10S/A7)*AA6
  A20A=(A20A/A7)*AA6
END IF

```

C

C 计算 A9 的各个部分即 A8A, A22A 和 A36A

C

```

  A8A=0.0
  DO 2162 M=117,201,14
2162  A8A=A8A+HDI(M)
  DO 2163 M=215,MN,14
2163  A8A=A8A+SR(M)
  A22A=0.0
  DO 2164 M=215,257,14
2164  A22A=A22A+HDI(M)-SR(M)
  A22A=A22A/0.75
  A36A=A9-A8A-A22A
  IF(A36A) 2165,2166,2166
2165  A36A=0.0
  A22A=A9-A8A
2166  CONTINUE

```

C

C 计算分量 A8A, A22A 和 A36A

C

```

  TRASH=(A8-AA8*0.4997)*(A9/A8)
  IF(TRASH.LT.0.0) TRASH=0.0
  A9=A9-TRASH
  A8A=A8A-TRASH
  IF(A8A.LT.0.0) A8A=0.0
  IF(A8A.EQ.0.0) A9=A22A+A36A
  IF(A9.EQ.0.0) THEN
    A8A=0.0
    A22A=0.0
    A36A=0.0

```

```

ELSE
A8A=(A8A/A9)*AA8
A22A=(A22A/A9)*AA8
A36A=(A36A/A9)*AA8
END IF

```

C

C 计算 A11 的各个部分即 A10A, A24A 和 A38A

C

```

A10A=0.0
DO 2167 M=129,227,14
2167 A10A=A10A+HDI(M)
DO 2168 M=241,MO,14
2168 A10A=A10A+SR(M)
A24A=0.0
DO 2169 M=241,283,14
2169 A24A=A24A+HDI(M)-SR(M)
A24A=A24A/0.75
A38A=A11-A10A-A24A
IF(A38A) 2170,2171,2171
2170 A38A=0.0
A24A=A11-A10A
2171 CONTINUE

```

C

C 计算分量 A10A, A24A 和 A38A

C

```

TRASH=(A10-AA10*0.4435)*(A11/A10)
IF(TRASH.LT.0.0) TRASH=0.0
A11=A11-TRASH
A10A=A10A-TRASH
IF(A10A.LT.0.0) A10A=0.0
IF(A10A.EQ.0.0) A11=A24A+A38A
IF(A11.EQ.0.0) THEN
A10A=0.0
A24A=0.0
A38A=0.0
ELSE
A10A=(A10A/A11)*AA10
A24A=(A24A/A11)*AA10
A38A=(A38A/A11)*AA10
END IF

```

C

C 计算 A13 的各个部分即 A12A, A16S 和 A26A

C

此为试读, 需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com