金桂三 著

石油炼制图表计算机处理方法

中国石化出版社

石油炼制图表计算机处理方法

金桂三　著

中国石化出版社

内 容 提 要

本书系统地论述了数据处理、图表处理方法及其程序开发技巧。

第一章介绍了三次样条函数插值计算方法及其程序，这是“多功能炼油图表处理系统”的最基本的子程序；第二章介绍了最基本的炼油图表处理方法、曲线拟合方法及程序；第三章介绍了几种典型的复杂图表的处理方法及程序；第四章全面介绍了“多功能炼油图表处理系统”的开发技巧；第五章介绍了图表处理库程序，这是非常实用的炼油软件开发工具；第六章介绍了各种油品物性计算程序；书末附录中详细阐述了“多功能炼油图表处理系统”的使用方法。

本书可供从事炼油和石油化工专业的科技人员和软件开发人员使用，也可供有关高校的高年级学生和研究生参考。

石油炼制图表计算机处理方法
金桂三 著

中国石化出版社出版发行
（北京朝阳区太阳宫路甲1号 邮政编码：100029）
海丰印刷厂排版印刷
新华书店北京发行所经销

787×1092毫米 16开本 15印张 397千字 印1—2 000
1996年5月北京第1版 1996年5月北京第1次印刷
ISBN 7-80043-595-4/TP·016 定价：19.00元

前　言

在工程技术中，一个必要的步骤就是把原始数据转变成对于解决某个具体问题有用的信息，这种转变叫做数据处理。数据处理包括关联（求一个函数的公式）、逼近（求一个函数的近似公式或图形）、插值（求一个函数在它定义域内两点之间的值）。

工程计算是以函数，尤其是以数值函数为基础的。函数 $f(x)$ 可以用公式、图形或表格来描述。进行关联时通常采用变换坐标的方法将实验数据重新绘制成更便于插值的曲线，用图解法或用最小二乘法求解函数关系式。若用最小二乘法来拟合曲线，除非已知正确的函数形式，否则结果会因人而异，有时一条看上去相当简单的曲线，也许要用一个十分复杂的函数才能表达出来。此外，由于我们对于测量对象所牵涉到的因果关系认识不足，往往也缺乏坚实的基础来假定具体的函数表达式。在诸如此类的情况中常采用分组平均作图法作出曲线图，即图表。曲线图往往会比一个公式更能说明问题，而且一目了然，但它不能直接用于计算机计算。从曲线图上取一些数值点，进行最小二乘拟合或用插值函数才能用计算机计算。

为了使图表用于计算机计算，在图表中选取一些样点，以这些样点作为原始数据进行关联或逼近或插值的过程叫做图表处理。

由于石油本身是一种组成极为复杂的混合物，其性质千差万别，所以它的理化性质以及各种加工过程的收率和产品性质等关联数据，大都是根据经验得来的。因此，图表的应用在炼油工艺计算中有着特殊的意义。

因为我们不知道炼油图表的函数形式，求得其拟合公式非常困难，所以采用插值方法将其用于计算机计算，样条插值是对光滑函数作逼近的有效方法。样条函数与在整个区间上用一个多项式逼近函数的方法不一样，基本上它是把区间分割为若干个较小的区间，然后在这些小区间上用不同的低次多项式去逼近函数 f。三次样条函数插值是分段三次多项式插值，它要求在节点处有二阶连续导数，允许三阶导数有间断。正是这种间断性降低或切断了各区段的相互影响，使三次样条函数具有减少大幅度振荡和消去多余扭拐的可能性，从而带来了转折自如的灵活性计算的稳定性，使三次样条函数更适合计算的需要。

从曲线图上取一些样点，以这些样点为插值基点，算出其它插值点的值。应用计算机绘图技术，可以在屏幕上绘出其曲线，查看是否充分地逼近了原图表，若其逼近不能令人满意，则调整样点位置或增加样点数，使绘出的曲线充分逼近原图表。

炼油图表有各种各样的图形结构和查阅方式，要用一个通用子程序来处理所有图表是很困难的，但是只要作适当的分类，就可以用若干个较简单的子程序来处理所有的图表。

作者开发的《多功能炼油图表处理系统》能处理所有的炼油图表，它不仅是在计算机屏幕上查阅图表的“炼油图表集”，而且也是工艺计算软件的开发工具，用 CALL 语句，以统一的方式调用图表处理子程序。用户利用该系统，以简单的程序完成复杂的过程计算。本书介绍了该软件的开发技巧及基本程序。

书中的程序都是用 True BASIC 语言编写的。True BASIC 语言是清晰、易读的结构化语言体系，在原有的 BASIC 易学性基础上增添了新的色彩。它几乎在各个方面都有极强的功能，是应用最为广泛的计算机语言。

全书共分六章。第一章三次样条函数插值介绍了三次样条函数插值计算方法及其程序。三次样条函数插值计算程序是“多功能炼油图表处理系统”的最基本的子程序，后面各章介绍的图表处理程序、图表屏幕显示程序都要调用它。

第二章图表处理介绍了最基本的炼油图表——由一组曲线族所组成的图表处理方法。除此之外，还介绍了曲线拟合方法及曲线方程拟合程序。

第三章复杂图表处理，介绍了几种比较典型的复杂图表的处理方法及程序。

第四章炼油图表处理系统的开发，全面介绍了“多功能炼油图表处理系统”的开发技巧。其中包括图表数据管理系统，各类图表的屏幕显示等。

第五章图表处理库程序是为开发炼油工艺计算程序而设计的，是非常有用的炼油软件开发工具，开发炼油软件时所涉及到的图表，调用该程序即可。

第六章油品物性计算，介绍了利用图表处理库程序编制的各种油品物性计算程序。

在附录 *A* 中说明了“多功能炼油图表处理系统”的操作方法。

如果读者只想应用“多功能炼油图表处理系统”来开发其它炼油软件，则只要学习附录 A 和第六章就可以了。

目　录

第一章　三次样条函数插值

1-1　追　赶　法

在数值计算中，譬如使用样条插值时，我们会碰到下列形式的方程组：

$$\begin{cases} b_1x_1 + c_1x_2 = d_1 & (1-1)_1 \\ a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2 & (1-1)_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_kx_{k-1} + b_kx_k + c_kx_{k+1} = d_k & (1-1)_k \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n = d_{n-1} & (1-1)_{n-1} \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n = d_n & (1-1)_n \end{cases}$$

这种方程组的系数矩阵称作三对角阵：

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_k & b_k & c_k & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \qquad (1-2)$$

其特点是，所有非零元素都集中在主对角线及其相邻的两条对角线上，除了这三条对角线外，其余的元素全为0。以三对角阵（1-2）为系数阵的方程组（1-1）称作三对角型方程组。

以下针对这种方程组的特点提供一种简便有效的算法——追赶法。追赶法实际上是高斯消去法的一种简化形式。它同样分消元与回代两个过程。

我们先将式 $(1-1)_1$ 中 x_1 的系数化为1，得

$$x_1 + r_1x_2 = y_1 \qquad (1-3)_1$$

这里

$$r_1 = \frac{c_1}{b_1},\ y_1 = \frac{d_1}{b_1} \qquad (1-4)_1$$

注意到剩下的方程中，实际上只有 $(1-1)_2$ 一个方程含有变元 x_2，因此消元手续可以简化。利用 $(1-3)_1$ 又可将 $(1-1)_2$ 化为

$$x_2 + r_2x_3 = y_2$$

这样一步一步地顺序加工方程组（1-1）的每个方程，设其第 $k-1$ 个方程已经变成

$$x_{k-1} + r_{k-1}x_k = y_{k-1}$$

利用它再从 $(1-1)_k$ 中消去 x_{k-1}，得

$$(b_k - r_{k-1}a_k)x_k + c_kx_{k+1} = d_k - y_{k-1}a_k$$

于是，只要令

$$\left.\begin{aligned} r_k &= \frac{c_k}{b_k - r_{k-1}a_k} \\ y_k &= \frac{d_k - y_{k-1}a_k}{b_k - r_{k-1}a_k} \end{aligned}\right. \tag{$1-4$}_k$$

便有

$$x_k + r_kx_{k+1} = y_k \tag{$1-3$}_k$$

这样做 $n-1$ 步以后，便得到

$$x_{n-1} + r_{n-1}x_n = y_{n-1} \tag{$1-3$}_{n-1}$$

将它与 $(1-1)_n$ 联立，即可解出

$$x_n = y_n \tag{$1-3$}_n$$

这里

$$y_n = \frac{d_n - y_{n-1}a_n}{b_n - r_{n-1}a_n} \tag{$1-4$}_n$$

于是，通过消元过程，所给方程组（1－1）可归结为以下更为简单的形式：

$$\begin{cases} x_1 + r_1x_2 = y_1 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_k + r_kx_{k+1} = y_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_{n-1} + r_{n-1}x_n = y_{n-1} \\ x_n = y_n \end{cases} \tag{1 - 3}$$

这种方程组称作二对角型的，其系数矩阵中的非零元素集中分布在两条对角线上：

$$\begin{bmatrix} 1 & r_1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & 1 & r_k & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & r_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \tag{1 - 5}$$

对加工得到的方程组（1－3）自下而上逐步回代，即可依次求出 x_n，x_{n-1}，…，x_1，计算公式为：

$$\begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_k &= y_k - r_kx_{k+1}, k = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{aligned} \tag{1 - 6}$$

上述算法就是追赶法，它的消元过程与回代过程分别称作追的过程与赶的过程。概括地说，追的过程就是按算式（1－4）顺序确定系数 r_1，y_1，r_2，y_2，…，r_{n-1}，y_{n-1}与 y_n；而赶的过程则是按算式（1－6）逆序求出解 x_n，x_{n-1}，…，x_1。

在实际编制程序时，可用数据单元 c_k 和 d_k 分别存放中间结果 r_k 和 y_k，在回代过程中又

可将求得的解 x_k 再存进单元 d_k 而摒弃其中的老值 y_k。图 1－1 所示即采用了这种压缩存储方法。

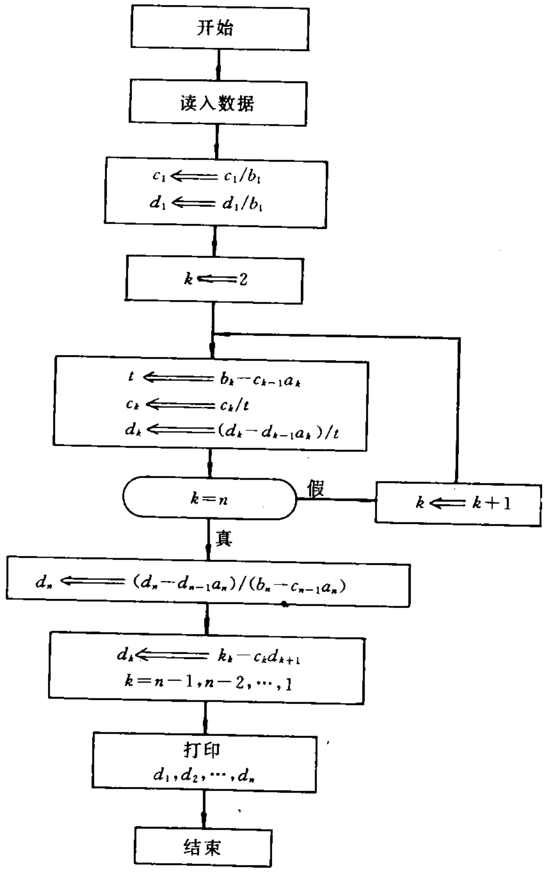

图 1－1　用追赶法求解三对角型方程组

1－2　三次样条函数插值

样条函数插值除可保证样点的函数值外，还保证样点上具有一阶和二阶连续导数。在样条函数中，三次样条函数最为常用。

对于给定样点序列：

$$(x_i, y_i), i = 0, 1, 2, \cdots, N$$

不妨假定

$$a = x_0 < x_1 \cdots < x_N = b$$

求〔a, b〕上的函数 $S(x)$ 满足下列三个条件：

(1) $S(x_i) = y_i$　　　$i=0,\ 1,\ \cdots,\ N$

(2) $S(x)$ 在〔a, b〕上有一阶和二阶连续导数。

(3) 对 $x \in$〔x_i, x_{i+1}〕, $S(x)$ 为三次多项式，则 $S(x)$ 即为 (a, b) 上的三次样条插值函数。

令 m_i 表示 $S(x)$ 在 x_i 处的导数值，即

$$S'(x_i) = m_i, i = 0, 1, \cdots, N$$

因此，对 $[a, b]$ 的每一个子区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 有：

$$S(x_i) = y_i \qquad S'(x_i) = m_i$$

$$S(x_{i+1}) = y_{i+1} \qquad S'(x_{i+1}) = m_{i+1}$$

成立。

设 $[x_i, x_{i+1}]$ 上三次多项式表示为如下形式：

$$P_3(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} y_{i+1} + \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} y_i + (ax + b)(x - x_i)(x - x_{i+1})$$

显然：

$$P_3(x_i) = y_i \qquad P_3(x_{i+1}) = y_{i+1}$$

此外：

$$P'_3(x) = \frac{y_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} + \frac{y_i}{x_i - x_{i+1}} + a(x - x_i)(x - x_{i+1}) + (ax + b)(2x - x_{i+1} - x_i)$$

则：

$$P'_3(x_i) = \frac{y_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} + \frac{y_i}{x_i - x_{i+1}} + (ax_i + b)(x_i - x_{i+1}) = m_i$$

而

$$ax_i + b = \left(m_i - \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \Big/ (x_i - x_{i+1})$$

同理：

$$ax_{i+1} + b = \left(m_{i+1} - \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \Big/ (x_{i+1} - x_i)$$

从上面二式可解出 a 和 b 来，有：

$$ax + b = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x - x_i)(x - x_{i+1})} \cdot \frac{m_i - \dfrac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}}{x_{i+1} - x_i} + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x - x_{i+1})(x_{i+1} - x_i)} \cdot \frac{m_{i+1} - \dfrac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}}{x_{i+1} - x_i}$$

将上式代入 $P_3(x)$ 中并经整理后可得出：

$$P_3(x) = \left[\frac{3}{h_i^2}(x_{i+1} - x)^2 - \frac{2}{h_i^3}(x_{i+1} - x)^3\right] \cdot y_i + \left[\frac{3}{h_i^2}(x - x_i)^2 - \frac{2}{h_i^3}(x - x_i)^3\right] \cdot y_{i+1}$$

$$+ h_i\left[\frac{1}{h_i^2}(x_{i+1}-x)^2-\frac{1}{h_i^3}(x_{i+1}-x)^3\right]\cdot m_i$$

$$- h_i\left[\frac{1}{h_i^2}(x-x_i)^2-\frac{1}{h_i^3}(x-x_i)^3\right]\cdot m_{i+1} \qquad (1-7)$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$

因此可见〔x_i, x_{i+1}〕上的 $P_3(x)$ 即为所求的满足给定条件的 $S(x)$。以下我们用 $S(x)$ 代替所有〔x_i, x_{i+1}〕上的 $P_3(x)$, $i=0, 1, \cdots, N-1$。推导出求各个插值点的一阶导数值 m_i 来。

求出 $S(x)$ 的二阶导数得:

$$\begin{aligned} S''(x) &= \left[\frac{6}{h_i^2}-\frac{12}{h_i^3}(x_{i+1}-x)\right]y_i \\ &+ \left[\frac{6}{h_i^2}-\frac{12}{h_i^3}(x-x_i)\right]y_{i+1} \\ &+ h_i\left[\frac{2}{h_i^2}-\frac{6}{h_i^3}(x_{i+1}-x)\right]m_i \\ &- h_i\left[\frac{2}{h_i^2}-\frac{6}{h_i^3}(x-x_i)\right]m_{i+1} \end{aligned}$$

于是有:

$$S''(x_i) = -\frac{6}{h_i^2}y_i+\frac{6}{h_i^2}y_{i+1}-\frac{4}{h_i}m_i-\frac{2}{h_i}m_{i+1}$$

$$S''(x_{i+1}) = \frac{6}{h_i^2}y_i-\frac{6}{h_i^2}y_{i+1}+\frac{2}{h_i}m_i+\frac{4}{h_i}m_{i+1}$$

此外, $S(x)$ 在子区间〔x_{i-1}, x_i〕右端点 x_i 的二阶导数值应为:

$$S''(x_i^-) = \frac{6}{h_{i-1}^2}y_{i-1}-\frac{6}{h_{i-1}^2}y_i+\frac{2}{h_{i-1}}m_{i-1}+\frac{4}{h_{i-1}}m_i$$

而 $S(x)$ 在子区间〔x_i, x_{i+1}〕左端点 x_i 的二阶导数值应为:

$$S''(x_i^+) = -\frac{6}{h_i^2}y_i+\frac{6}{h_i^2}y_{i+1}-\frac{4}{h_i}m_i-\frac{2}{h_i}m_{i+1}$$

由于要求 $S(x)$ 在连接点 x_i 处二阶导数连续, 应有:

$$S''(x_i^-) = S''(x_i^+)$$

取上述二式相等, 经整理后得:

$$\begin{aligned} &(1-\alpha_i)m_{i-1}+2m_i+\alpha_i m_{i+1} \\ &= 3\left[\frac{1-\alpha_i}{h_{i-1}}(y_i-y_{i-1})+\frac{\alpha_i}{h_i}(y_{i+1}-y_i)\right] \end{aligned}$$

其中 $\alpha_i = \dfrac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i}$

上式对所有连接点 x_1, x_2, $\cdots$, x_{n-1}均应成立, 可得到 $N-1$ 个含 m_i $i=0, 1, \cdots, N$ 的方程, 整理如下:

$$(1-\alpha_1)m_0+2m_1+\alpha_1 m_2 = \beta_1$$

$$(1-\alpha_2)m_1+2m_2+\alpha_2 m_3 = \beta_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$(1-\alpha_{N-1})m_{N-2}+2m_{N-1}+\alpha_{N-1}m_N=\beta_{N-1} \tag{1-8}$$

其中 $\beta_i=3\left[\frac{1-\alpha_i}{h_{i-1}}(y_i-y_{i-1})+\frac{\alpha_i}{h_i}(y_{i+1}-y_i)\right]$

$$i=1,2,\cdots,N-1$$

我们看到，方程组（1-8）是个不定方程组，为了得到唯一解，尚需再附加两个定解条件。

炼油图表是由实验数据作成的，在区间〔a,b〕内有意义，在〔a,b〕之外的情况无法知道。因此，我们假设在〔a,b〕之外，插值曲线直线延伸，即在 a，b 处满足：

$$S''(x_0)=0$$

$$S''(x_N)=0$$

由 $S''(x)$ 的表达式得到另外二个方程：

$$2m_0+m_1=\frac{3}{h_0}(y_1-y_0)$$

$$m_{N-1}+2m_N=\frac{3}{h_{N-1}}(y_N-y_{N-1})$$

与前面所得到的 $N-1$ 个方程联立，就是三对角型方程组：

$$\begin{aligned}
2m_0+m_1&=\beta_0\\
(1-\alpha_1)m_0+2m_1+\alpha_1m_2&=\beta_1\\
(1-\alpha_2)m_1+2m_2+\alpha_2m_3&=\beta_2\\
\cdots\qquad&\quad\vdots\\
(1-\alpha_{N-1})m_{N-2}+2m_{N-1}+\alpha_{N-1}m_N&=\beta_{N-1}\\
m_{N-1}+2m_N&=\beta_N
\end{aligned} \tag{1-9}$$

其中

$$\beta_0=\frac{3}{h_0}\ (y_1-y_0)$$

$$\beta_N=\frac{3}{h_{N-1}}\ (y_N-y_{N-1})$$

用追赶法解方程组（1-9），求出 m_0，m_1，…，m_N，代入式（1-7），从而求出各段的插值函数。

1-3 三次样条函数插值程序

已知 N 个样点数据为

横坐标	x_1，x_2，…，x_N
纵坐标	y_1，y_2，…，y_N

求出插值点 z_1，z_2，…，z_M 的函数值 $P_3(z_1)$，$P_3(z_2)$，…，$P_3(z_M)$。

编制一个子程序，取名为 spl，程序框图见图 1－2。其符号表见表 1－1。

表 1－1 符 号 表

问题中的符号	程序中的符号	定 义
x_i	x（ ）	样点横坐标
y_i	y（ ）	样点纵坐标
N	n	样点数
M	mk	插值点数
Z_k	zin（ ）	插值点横坐标
P_3（ ）	w（ ）	插值函数
α_i	a（ ）	参看式（1－8）
β_i，m_i	b（ ）	参看式（1－8），先为 β_i，后为 m_i
h_i	h（ ）	参看式（1－7）
	c（ ）	参看式（1－8）
	d（ ）	参看式（1－8）

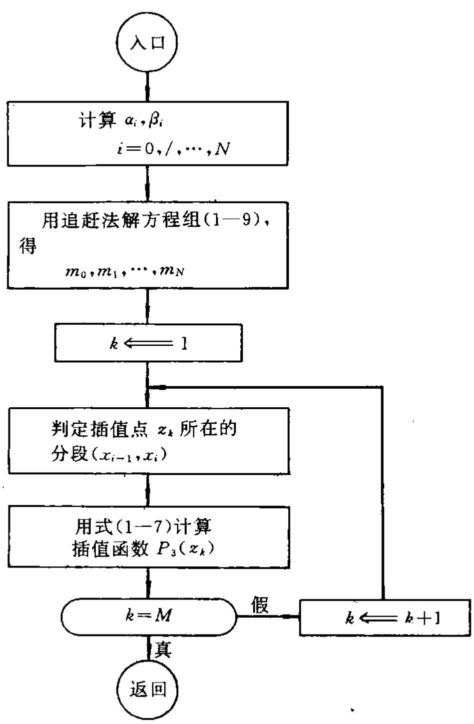

图 1－2 子程序 spl

程序

```
SUB  spl(x( ),y( ),n,mk,zin( ),w( ))
DIM  a(25),b(25),h(25),c(25),d(25)
FOR  i=2 TO n
LET  h(i-1)=x(i)-x(i-1)
NEXT  i
```

```
LET  k=n-1
FOR  i=2 TO k
LET  a(i)=h(i-1)/(h(i-1)+h(i))
LET  b(i)=3*((1-a(i))*(y(i)-y(i-1))/h(i-1)+a(i)*(y(i+1)-y(i))/h(i))
NEXT  i
LET  a(1)=1
LET  a(n)=0
LET  b(1)=3*(y(2)-y(1))/h(1)
LET  b(n)=3*(y(n)-y(n-1))/h(n-1)
FOR  i=1 TO n
LET  d(i)=2
NEXT  i
FOR  i=2 TO n
LET  c(i)=1-a(i)
NEXT  i
LET  np=n
FOR  i=2 TO np
LET  a(i-1)=a(i-1)/d(i-1)
LET  b(i-1)=b(i-1)/d(i-1)
LET  d(i)=a(i-1)*(-c(i))+d(i)
LET  b(i)=-c(i)*b(i-1)+b(i)
NEXT  i
LET  b(np)=b(np)/d(np)
FOR  i=1 TO np-1
LET  b(np-i)=b(np-i)-a(np-i)*b(np-i+1)
NEXT  i
FOR  i=1 TO mk
IF  zin(i)<x(1)THEN
LET  j=1
ELSE  if zin(i)>x(n) THEN
LET  j=n-1
ELSE
FOR  ik=2 TO n
     IF  zin(i)<=x(ik)THEN
     LET  j=ik-1
     EXIT  FOR
     END  IF
NEXT  ik
END  IF
LET  e=x(j+1)-zln(i)
```

```
LET   e1 = e * e
LET   f = zin(i) - x(j)
LET   f1 = f * f
LET   h1 = h(j) * h(j)
LET   w(i) = (3 * e1 - 2 * e1 * e/h(j)) * y(j) + (3 * f1 - 2 * f1 * f/h(j)) * y(j + 1)
LET   w(i) = w(i) + (h(j) * e1 - e1 * e) * b(j) - (h(j) * f1 - f1 * f) * b(j + 1)
LET   w(i) = w(i)/h1
NEXT  i
END   SUB
```

〔例 1－1〕　一条曲线的样点坐标为

横坐标	50	230	350	427
纵坐标	-36	-19.5	-13	-13.2

试计算插值点 200，300，400 的函数值

解：可编写如下主程序

```
DIM   x(4), y(4), z(3), w(3)
LET   mk = 3
LET   n = 4
MAT   READ x
MAT   READ y
MAT   READ z
DATA  50, 230, 350, 427
DATA  -36, -19.5, -13, -13.2
DATA  200, 300, 400
CALL  spl(x, y, n, mk, z, w)
PRINT  w(1), w(2), w(3)
END
```

主程序与前面的子程序 spl 联合，运行结果为

-21.9541，-14.7926，-12.8871

参 考 文 献

〔1〕张巨洪等编，≪BASIC 语言程序库≫，清华大学出版社，北京，1983

〔2〕华中工学院数学教研室、软件教研室编，≪算法语言·计算方法≫，人民教育出版社，北京，1978

〔3〕Ferenc Szidarovszky，Sidney Yakowitz 著≪数值分析的原理及过程≫，上海科学技术文献出版社，上海，1982