

# C-R6A 机上最小二乘法曲线拟合绘图程序

陈 辅

(广州市粮食科学研究所, 510055)

近年来, 岛津 C-R6A 色谱处理机在我国的用户越来越多。它集 A/D 接口、计算机、打印机于一身<sup>[1]</sup>, 用于色谱的数据处理非常方便。它的另一个重要的应用领域是作为一台计算机使用 (CPU 为 8088)。但它有特定的操作系统、命令集和内存分配<sup>[2]</sup>, 不能与目前流行的 PC 机兼容, 这给本机的应用带来了不少麻烦。本文在研究了这个特定的环境后, 编写了最小二乘法线性和非线性多项式拟合绘图程序<sup>[3]</sup>。它可对线性、非线性数据进行拟合, 打印图形, 给工作提供不少方便 (不用另找计算机处理数据), 同时也对开发专用机有一定的帮助。

## 一、功 能

(一) 人机对话方式, 可同时作四条直线, 分别以不同的符号和线型表示各数据点和直线, 打印相关系数和方程。

(二) 最小二乘法拟合多项式曲线, 可以是 2、3、4……次多项式, 绘出图形, 打印各系数 (多项式为  $y = a_1x^n + a_2x^{n-1} + \dots + a_nx + a_{n+1}$ )。

## 二、操作方法

(一) 重新分配内存, 这是关键的一步 (也是开发本专用机的关键一步)。一般的色谱谱图操作和 “INI” 指令后, 内存分配只有 1.8K 字节供 BASIC 用, 这对一个长的程序是不够用的。打入 “MAP” 指令, 把其它项设为零, BASIC 项设为 47460, 这样操作后, 就可为程序的运行预留了约 47K 的内存空间。

(二) 在 DATA 行按  $x_i, y_i$  顺序输入数据对。

(三) 打入 “RUN” 指令 1) 当程序出现 “How many lines” 时, 输入作图曲线数目。2) 出现 “How many data pairs” 时, 输入作图数据对数目。3) 出现 “How many orders of the eq.” 时, 输入曲线类型, 直线是 1, 非直线是 2、3、4 等。若是直线, 还会出现 “Would you like listing the lines”, 这时输入 1 或 0 指示是否打印直线方程和相关系数。4) 接着出现  $x_0, x_1, y_0, y_1$ , 分别输入  $x, y$  轴始终点坐标。而后计

算机进入计算和绘图操作。5) 程序运行后, 可用 COPY n 命令打印屏幕。6) 图 1 是本程序非线性拟合打印的图形。7) 本程序可以在 C-R3A 机上运行\*。

### BASIC PROGRAM

```

10 H%(1)=0FFFFH:H%(2)=5555H:H%(3)=
   0F0FH:H%(4)=33FFH:H%(5)=333FH
15 PRINT "HOW MANY LINES=";:INPUT J
20 PRINT "HOW MANY DATA PALRS=";:INPUT
   M
25 PRINT " HOW MANY ORDERS OF THE EQ.":
   INPUT N:IF N<>1 THEN 35
30 PRINT "WOULD YOU LIKE LIST THE LINES";:
   INPUT Q
35 PRINT "X0=";:INPUT X4:PRINT "X1=";:
   INPUT X5
40 PRINT "Y0=";:INPUT Y4:PRINT "Y1=";:
   INPUT Y5
45 CWINDOW-(X5-2*X4),-Y5,X5,Y5-2*Y4
50 CLS
55 LINE X4,-Y4,X5,-Y4:LINE X4,-Y4,X4,-
   Y5
60 C=(X5-X4)/5:D=-(Y5-Y4)/5
65 FOR I=1 TO 5:LINE X4+C*I,-Y4,X4+C*I,
   -Y4+D/4
70 LINE X4,-Y4+D*I,X4+C/4,-Y4+D*I
75 NEXT I
80 C2$=STR$(X5):D1$=STR$(Y4):D2$=
   STR$(Y5)
85 C3=LEN(C2$):D3=LEN(D1$):D4=LEN(D2
   $)
90 LOCATE 31-D3,10:PRINT D1$:LOCATE 31
   -D4,0:PRINT D2$
95 LOCATE 30,12:PRINT X4:LOCATE 64-C3,12
   :PRINT C2$
100 IF N<>1 THEN GOTO 1000
105 N=M:DIM X(J,N),Y(J,N)
110 FOR I=1 TO J

```

\* C-R6A 运行的是 C-R3A 操作系统和 BASIC 语言。

```
115 FOR P=1 TO N : READ X(I,P),Y(I,P) : NEXT
    P
```

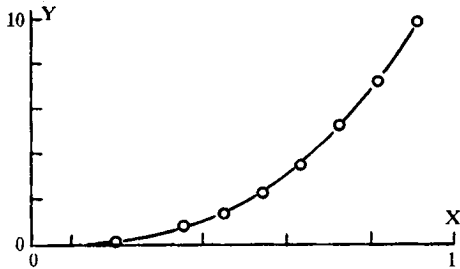


图 1 本程序非线性拟合打印图形

```
120 NEXT I
125 FOR I=1 TO J
130 X1=0 : X2=0 : Y1=0 : Y2=0 : XY=0
135 FOR P=1 TO N
140 X1=X1+X(I,P) : X2=X2+X(I,P)^2 : Y1=Y1
    +Y(I,P) : Y2=Y2+Y(I,P)^2 : XY=XY+X(I,
    P) * Y(I,P)
145 NEXT P
150 XN=X1/N : YN=Y1/N
155 LX=X2-XN * XN * N : LY=Y2-YN^2 * N :
    LZ=XY-N * XN * YN
160 A1(I)=LZ/LX : A0(I)=YN-A1(I) * XN : R(I)
    =LZ/SQR(LX * LY)
165 NEXT I
170 E=C/8 : F=-D/8
175 FOR I=1 TO J
180 IF I<>1 THEN GOSUB 300+I * 100 : GOTO 205
185 FOR P=1 TO N
190 K(I)=-Y(I,P)
195 LINE X(I,P)+E,K(I),X(I,P)-E,K(I) : LINE X
    (I,P),K(I)+F,X(I,P),K(I)-F
200 NEXT P
205 A=X5-C/100
210 L(I)=A0(I)+A1(I) * A : L1(I)=A0(I)+A1(I)
    * X4
215 IF L1(I)<Y4 THEN 295
220 LINE X4,-L1(I),A,-L(I),,,H%(I)
225 NEXT I
230 IF Q<>1 THEN 1360
235 Z1=12
240 FOR P=1 TO J
245 LOCATE 0,Z1
250 PRINT "R(",P;")=",R(P)
255 PRINT "L(",p;")=",A0(P);"+",A1(P);" * X"
260 Z1=Z1+2
265 NEXT P
290 GOTO 1360
295 Z=A : A=(Y4-A0(I))/A1(I)
```

```
300 LINE A,-Y4,Z,-L(I),,,H%(I) : A=Z
305 GOTO 225
500 R1=C/8 : R2=-D/10
510 FOR P=1 TO N
520 X3=X(I,P) : Y3=Y(I,P)
530 Z1=R1 * COS(PI/6) : Z2=-R2 * SIN(PI/6)
540 LINE X3,-(Y3+R2),X3+Z1,-(Y3+Z2)
550 LINE X3,-(Y3+R2),X3-Z1,-(Y3+Z2)
560 LINE X3+Z1,-(Y3+Z2),X3-Z1,-(Y3+Z2)
570 NEXT P
580 RETURN
600 Z1=C/12 : Z2=-D/10
610 FOR P=1 TO N
620 X3=X(I,P) : Y3=Y(I,P)
630 LINE X3-Z1,-(Y3+Z2),X3+Z1,-(Y3+Z2)
640 LINE X3+Z1,-(Y3+Z2),X3+Z1,-(Y3-Z2)
650 LINE X3+Z1,-(Y3-Z2),X3-Z1,-(Y3-Z2)
660 LINE X3-Z1,-(Y3-Z2),X3-Z1,-(Y3+Z2)
670 NEXT P
680 RETURN
700 Z1=C/14 : Z2=-D/10
710 FOR P=1 TO N : X3=X(I,P) : Y3=Y(I,P)
720 LINE X3-Z1,-(Y3+Z2),X3+Z1,-(Y3-Z2)
730 LINE X3-Z1,-(Y3-Z2),X3+Z1,-(Y3+Z2)
740 NEXT P
750 RETURN
1000 N1=N+1 : N2=N+2 : DIM P(N1,N2),X(M),
    Y(M),W(2 * N)
1020 FOR I=1 TO M : READ X(I),Y(I) : NEXT I
1030 DX=(X5-X4)/500
1040 YY=0
1050 FOR K=1 TO M : YY=YY+Y(K) : NEXT K
1060 P(1,N2)=YY
1070 FOR I=2 TO N1 : YY=0
1080 FOR K=1 TO M : YY=YY+X(K)^(I-1) * Y
    (K) : NEXT K
1090 P(I,N2)=YY
1100 NEXT I
1110 NN=2 * N
1120 FOR I=1 TO NN : YY=0
1130 FOR K=1 TO M : YY=YY+X(K)^I : NEXT
    K
1140 W(I)=YY
1160 NEXT I
1170 P(1,N1)=M
1180 FOR I=1 TO N1
1190 FOR J=1 TO N1 : IF I=1 THEN GOSUB 1600
1200 P(I,J)=W(N+I-J)
1210 NEXT J : NEXT I
```

```

1240 GOSUB 1370
1250 E=(X5-X4)/40 : F=-D/8
1260 FOR I=1 TO M : KK=-Y(I)
1270 LINE X(I)+E, KK, X(I)-E, KK : LINE X(I),
      KK+F, X(I), KK-F
1280 NEXT I
1290 XX=X(I)
1295 YY=P(N1, N2)
1300 FOR I=1 TO N
1310 YY=YY+XX^(N1-I) * P(I, N2) : NEXT I
1312 PSET XX, -YY
1314 XX=XX+DX
1316 IF XX>X5 THEN 1322
1320 GOTO 1295
1322 FOR I=1 TO N1 : PRINT I; P(I, N2), : NEXT I
1324 GOTO 1360
1350 DATA
1360 END
1370 REM SOLV THE EQ.
1380 FOR T=1 TO N1 : K1=K+1 : G=0 : J1=0
1390 FOR J=K TO N1 : IF ABS(P(J, K))<=ABS(G)
      THEN 1410
1400 G=P(J, K) : J1=J
1410 NEXT J
1420 IF J1=K THEN 1460
1430 FOR J=K TO N2
1440 T=P(K, J) : P(K, J)=P(J1, J) : P(J1, J)=T
1450 NEXT J
1460 C=P(K, K)
1470 FOR J=K TO N2 : P(K, J)=P(K, J)/C : NEXT J
1480 IF K=N1 THEN 1520
1490 FOR I=K1 TO N1 : C=P(I, K)
1500 FOR J=K TO N2 : P(I, J)=P(I, J)-P(K, J) * C
      : NEXT J
1510 NEXT I : NEXT K
1520 FOR L=2 TO N1 : I=N2-L : FOR J=I TO N1
      - 1 : P(I, N2)=P(I, N2)-P(I, J+1) * P(J+1,
      N2)
1530 NEXT J : NEXT L
1540 RETURN
1600 IF J=N1 THEN GOTO 1210
1610 RETURN
    
```

参 考 文 献

- [1] Shimadzu Corporation, "Chromatopac C-R6A Instruction Manual", Japan.
- [2] 岛津公司,《磁盘信息库 C-R3A 使用说明书》,日本.
- [3] 陆润民等编,《计算机绘图》,清华大学出版社, P. 120, 1988.

(收稿日期:1992 年 4 月 8 日)

**A Fitting Calculation and Plotting Diagram Program with Least-Square Method on C-R6A Processor** *Chen Fu, Guangzhou Cereal Science Institute, 510055*

A linear and nonlinear least-square program is compiled on C-R6A chromatographic data processor. The program can perform fitting calculation for given data and plot diagrams for the fitting functions.

## 欢迎订阅 1994 年《国外分析仪器技术与应用》

本刊是国外分析技术书刊、资料与读者之间的桥梁,各学科都聘有专家选题与审稿,报导方式灵活、多样。它可节约您的查询时间。本刊力争同步报导国内外分析仪器与技术的重要信息,给读者以导向作用。

本刊辟有:“综述”、“新技术新应用新进展”、“新型商品仪器”、“仪器选型指南”、“仪器使用与维护”、“仪器改造”、“国外来华技术讲座”、“国际学术会议论文”、“技术进展与市场动态”、“国外厂商及产品介绍”、“计算机应用”、“科技讯息”等,在分析方法栏中分:“生化与临床”、“流程”、“环保”、“化工”等栏目。是您交流经验、相互借鉴的园地,知识更新、开阔视野、提高业务水平之良友。

本刊适于冶金、石油、化工、煤炭、地质、轻工、农林牧渔、医药卫生、环境保护及仪器仪表等行业涉及分析仪器及仪器分析业务的科研人员、管理干部、工人、各有关大专院校师生参考使用。

订阅办法:报刊代号 18-120(请在全国报刊目录河北省部分查找),全国各地邮局均可订阅。

有欲补订过刊或错过邮局订购时间需补订者,请信汇款至:《国外分析仪器技术与应用》编辑部(地址:北京海淀区温泉,邮编:100095)转李秀荣收,留言处写明欲订份数及年份。