

# DJS-130 计算机同时实现对两台质谱计的实时控制

王 洪 王长海 李惠洁

(西北核技术研究所)

**【摘要】**本文介绍了使用一台 DJS-130 计算机同时对两台质谱计进行 实时 控制和数据处理的原理和功能，并分别叙述了硬件和软件方面的工作。

## 一、前 言

使用一台小型计算机来建立多台同位素质谱计的数据系统，国外已有一些报导<sup>(1-2)</sup>。这对充分发挥计算机效率，降低数据系统造价很有意义。近年来我们采用一台 DJS-130 计算机对 CH4 和改进的 ZHT-1301 质谱计同时进行两台仪器的实时控制和数据处理。两台 质谱计均能同时独立地进行质谱测量和数据处理。操作者可通过各自的控制面板选择不同的控制和处理功能。采用 BASIC 语言编制实时处理程序，较方便地进行人机对话、程序修改 和交流。

本系统的方案原则上适用于多台质谱计的数据系统。

## 二、原 理 和 功 能

为了使一机多控结构简单易行，本数据系统采用了模块化结构，每台质谱计与计算机联用的接口线路以及控制线路都是相同的标准结构；计算机对每台质谱计的实时控制和数据处理也都采用同一程序模块，只是通过在硬件和软件上设置的一些相应选择开关和各自独立的信息区来实现对不同质谱计的控制和处理。这样，每台质谱计具有相同的控制和处理功能，但信息区是独立的，所以在宏观上各质谱计可以同时进行互不相关的质谱测量和数据处理。

### 1. 基本原理框图

本系统基本原理图如图 1 所示。

为了实现一机多控，研制了有关接口控制线路。

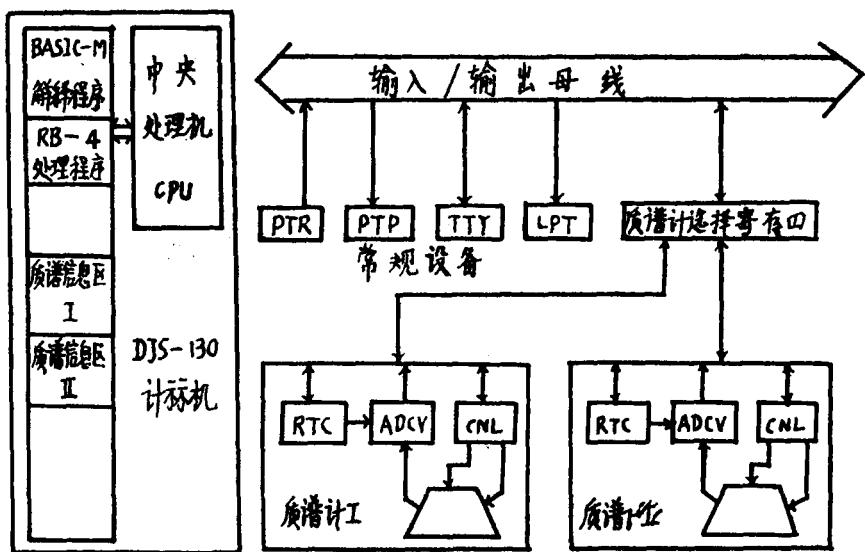


图 1 基本原理框图

## 2. 质谱扫描

本数据系统的质谱扫描的基本方式是由计算机选择不同的预先固定的磁场值来实现质量峰的切换和在离子源高压上叠加阶梯电位来实现对单个质量峰的扫描。

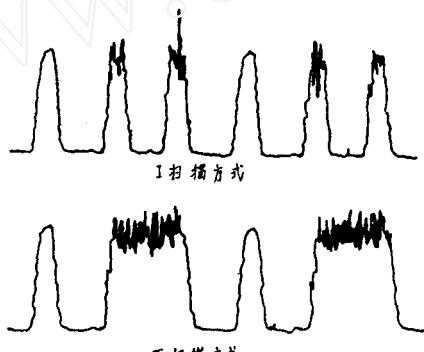


图 2 质谱扫描示意图

目前本系统提供两种扫描方式：(1) *I* 方式。该方式以每 0.1 秒一个阶梯的速率扫描，在每个扫描周期中，大峰(同位素丰度较高的)扫描一次，小峰(同位素丰度较低)扫描 1 次；(2) *T* 方式。对每个质量峰扫描时，前沿和后沿都以 0.1 秒一个阶梯的速率进行，而对峰顶的 21 个阶梯，每个阶梯是以面板预置的时间 *T* (可供选择的预置时间为 0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、1、1.5[秒]) 的速率进行扫描，大峰小峰依次测量。

## 3. 数据获取

根据对测量精度和灵敏度的不同要求，提供了两种离子流测量系统：离子计数系统和直流放大系统（图 3）。

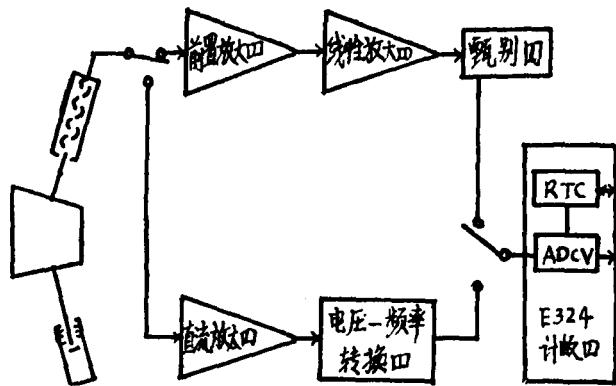


图 3 离子流测量系统方框图

**离子计数系统：**单个离子在电子倍增器上产生的电子脉冲经前置放大器、线性放大器、甄别器到计数器。

**直流放大系统：**离子流经直流放大后再经电压—频率转换成相应频率脉冲到计数器。

计数器按计算机规定的时钟频率进行计数，并向计算机申请中断。计算机对计数器的数据进行校验、量程变换后送入内存相应信息区。

#### 4. 数据处理

对每个质量峰的原始数据进行单峰处理。先将不同时钟频率的计数都归一化到 1 秒的计数。对离子计数系统的数据进行死时间校正。根据要求决定是否进行平滑。平滑处理有两种算法可选择：五点三次平滑或移动平均值法平滑。然后对单峰用半峰宽求中心，再扣除本底求出峰值和时序。

根据离子流随时间变化关系计算大峰对小峰的时间插值。有两种算法可以选择：正交多项式曲线插值<sup>[3]</sup>或直线插值。然后计算并打印出各相应时刻的峰高、同位素丰度比以及平均丰度比、标准误差、相对误差。对上述结果进行 t 检验（罗马诺夫斯基判据）和 D 检验（狄克逊判据）<sup>[4]</sup>剔除明显错误值，重新计算并打印结果表格。直流放大系统的结果可进行质量歧视校正。

所有处理方法的选择都由控制面板上相应按键决定。

#### 5. 其它功能

根据控制面板相应按键的要求，可在宽行打印机上分别输出原始数据、平滑后数据、每个峰的中心位置、峰高、本底、峰值、时序、拟合数据。并可按操作者要求，打印出所需若干组测量结果的加权平均结果。

离子计算数系统的死时间，可根据天然铀样品的测量结果进行计算。在直流放大系统中可控制产生标准矩形峰以校正仪器系统。

### 三、硬件

每个质谱计与计算机相联结的接口和控制线路都采用模块化标准结构。质谱计的专用接

口有质谱时钟、质谱数据部件和质谱功能控制部件，它们占据了计算机的三个外部设备。

### 1. 质谱时钟 (RTC) 设备码: 14

线路见附图 1。中断源由 E324 计数器的存贮脉冲 CT 给出。时钟频率的选择由计算机通过“DOA 0 RTC”指令实现。为了实现由计算机选择不同时钟频率，我们重新研制了一块计数器的控制线路板代替了 E324 计数器中原来的控制器。

### 2. 质谱数据部件 (ADCV) 设备码: 24

无论离子计数系统还是直流放大系统，最后都是通过计数器把质谱数据送入计算机的。计数器的后七位二/十进制数分别对应该部件输入寄存器 B 和 C 的相应各位。利用E324计数器的复原脉冲 CV 作为中断源。线路见附图 2。

计数器的各种不同频率的时钟，都是用其中 4 毫秒作为关门时间。关门后 1 毫秒发计数存贮脉冲 CT，关门后 3 毫秒发计数器复原脉冲 CV。其余时间作为开门计数时间。因此 计数器的存贮脉冲 CT 和复原脉冲 CV 是同步的，只是从控制和数据获取的安全可靠性考虑，才用来分别作为质谱时钟和质谱数据部件的中断源。

### 3. 质谱控制功能部件 (CNL) 设备码: 25

这是质谱计功能控制的关键部件，包括一个控制面板、三个输出寄存器，三个数模转换器，二个输入寄存器和接口线路。

控制面板右面按键提供各种功能要求，对应输入寄存器 A 各位。左面是四组测量参数选择开关，对应输入寄存器 B 各位。

该部件的三个输出寄存器分别对应控制叠加在质谱计的离子源高压上的阶梯电位的数模转换器、磁场选择转换器和控制笔记录器的数模转换器。磁场选择转换器是输出寄存器 B 编码选择。非测量时可通过控制面板上的步进按键来改变选择。测量时只能由计算机通过“DOB 0 25”指令来改变选择。步进按键被封住，以免干扰。接口线路见附图 3。

上述各接口线路的详细工作原理可参阅文献 [5]。

### 4. 质谱计选择寄存器

为实现同时对多台质谱计的分别控制和数据处理，在硬件上设置了一个质谱计选择寄存器（见附图 1）。它的不同状态控制了各模块中的设备码选中线路。计算机通过“DOA 0 24”指令来控制这个寄存器的选择。

## 四、软 件

目前采用的软件系统是经过作者修改的实时 BASIC-MZ 解释程序和用 BASIC 语言编制的质谱数据处理程序 RB-4。本软件的主要特点是：(1) 采用了中断堆栈，允许多重中断。(2) 采用前后台处理技术。(3) 使用 BASIC 语言编制质谱数据处理程序。(4) 可简便地调用各种外部设备输出质谱数据和其它信息。(5) 对各质谱计的控制和处理采用同一模块程序

处理。

本软件系统采用前后台技术是为了充分发挥计算机实时处理的功能，前后台同时运行，使系统更加方便灵活，既可以及时地有条不紊地进行质谱测量，又可以运用 BASIC 语言编制的程序，进行各种数据处理。

### 1. 前台操作

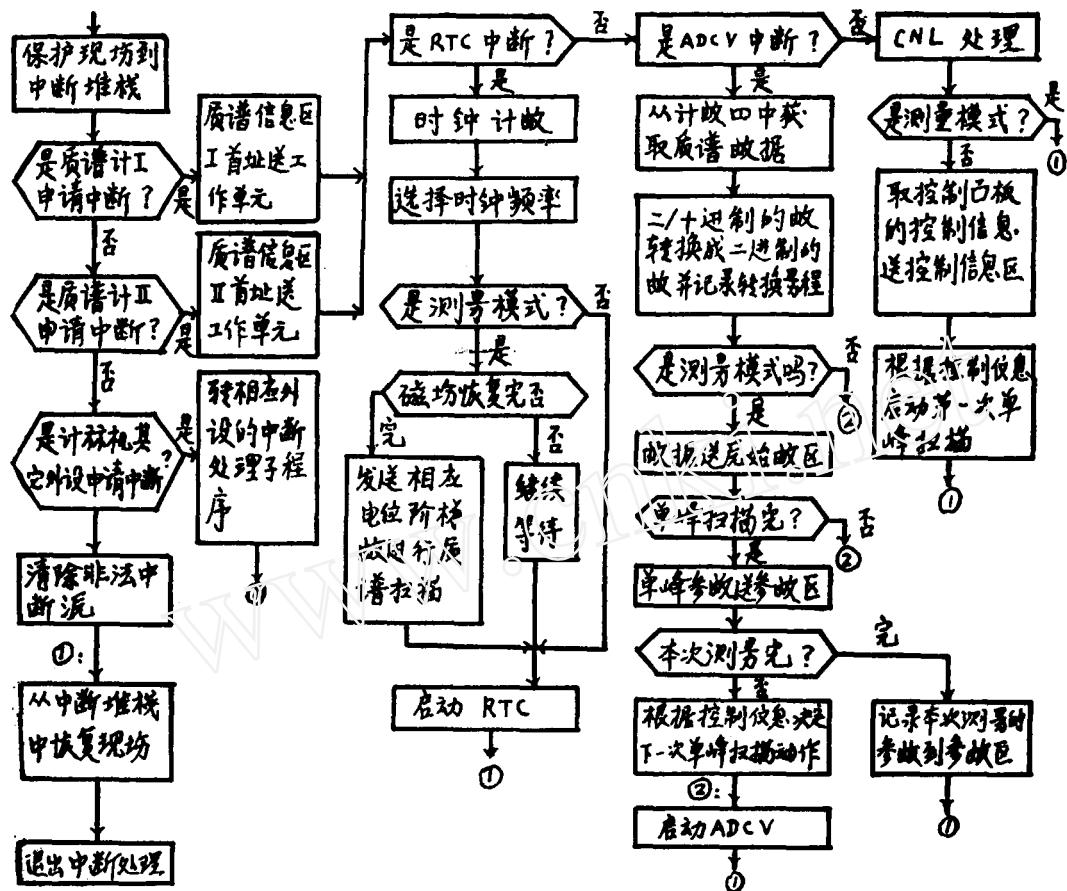


图 4 前台操作原理框图

前台操作的示意框图见图 4。前台操作主要是进行实时性较强的质谱测量的控制和数据获取。这部分程序是用汇编程序编在中断处理程序中并成为 BASIC-M2 解释程序的一部分，是优先处理的程序。实现对多台质谱计控制和数据获取的关键是在软件上为每台质谱计各开辟了一个独立的信息区，其中包括控制信息区、原始数据区和参数区。在控制和处理某一质谱计时，只要先将相应的信息区首址存放到工作单元中即可，即所谓含参调用。以后的处理程序就是同一程序了。

前台操作由控制面板上相应按键控制，后台操作由电传打字机控制。这样就可以做到运行后台程序、修改程序或进行其它处理而不影响前台的质谱测量。

## 2. 后台处理

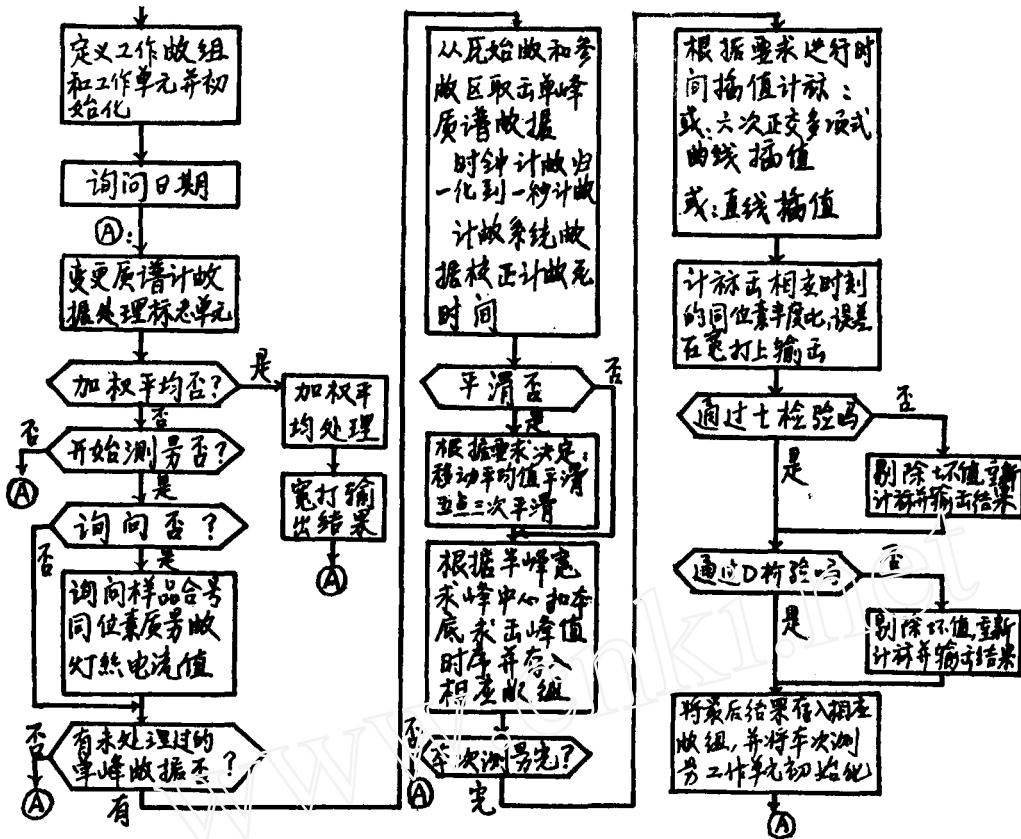


图 5 后台处理原理框图

后台处理的流程示意图见图 5。在后台可以运行任何用 BASIC 语言编制的程序，我们目前使用的 RB-4 程序是可以实时处理两台质谱计数据的程序。因为是用 BASIC 语言编制的，所以修改方便，而且可以人机对话，交流也方便。对于不同质谱计的数据是采用同一程序来处理的。区别各个不同质谱计的数据是在程序中设置了一个标志单元，根据这个单元的不同数值标志，程序从不同的信息区中取数，而把计算结果存放到相同数组的不同单元中。

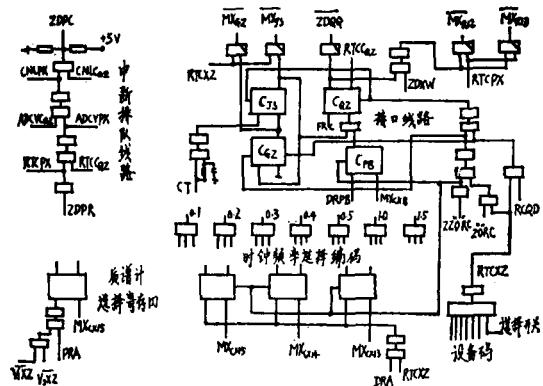
## 五、讨 论

本系统应用于离子计数系统时，对 8 毫微克天然铀样品的同位素丰度比测定准确度可达  $\pm 1\%$ ，对于不同丰度的样品测量的外精确度好于 0.2%。

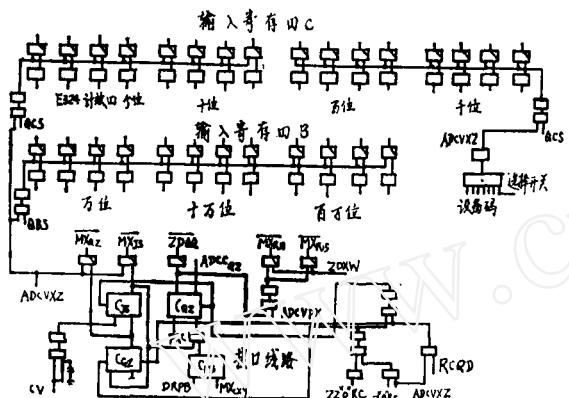
目前本数据系统的缺点是缺少大容量的外部存储设备，无法保留质谱的原始数据，故都采用实时处理的方法。由于测量时间有限，实时处理程序不能太复杂，限制了某些数据处理算法的选用。

系统采用 BASIC 语言的优点是便于人机对话和修改，缺点是执行速度慢。如改用实时 FORTRAN V 语言可望提高计算机的效率。

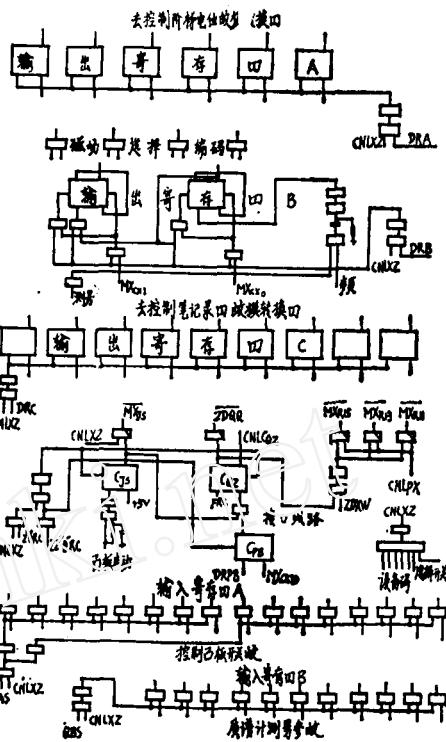
在本工作进行过程中张子斌同志给予许多帮助，左北华同志参加了制板等实验工作，作者一并表示感谢。



附图 1 RTC 接口和质谱计选择寄存器



附图 2 ADC V 接口和输入寄存器



附图 3 CNL 接口和输入输出寄存器

## 参考文献

- [1] R. D. Russell et al., Mass Spectroscopy, 19, 19(1971).
- [2] R. D. Friesen, R. J. Dupzyk, UCRL-78347(1976).
- [3] 清华大学等编, 计算方法上册, 科学出版社, 63页(1974年).
- [4] 肖明耀编著, 实验误差估计与数据处理, 科学出版社, 142页(1980年).
- [5] DJS-130 计算机联合设计组, DJS-130 电子计算机技术说明书, 江苏无线电厂印, 101页(1976年).