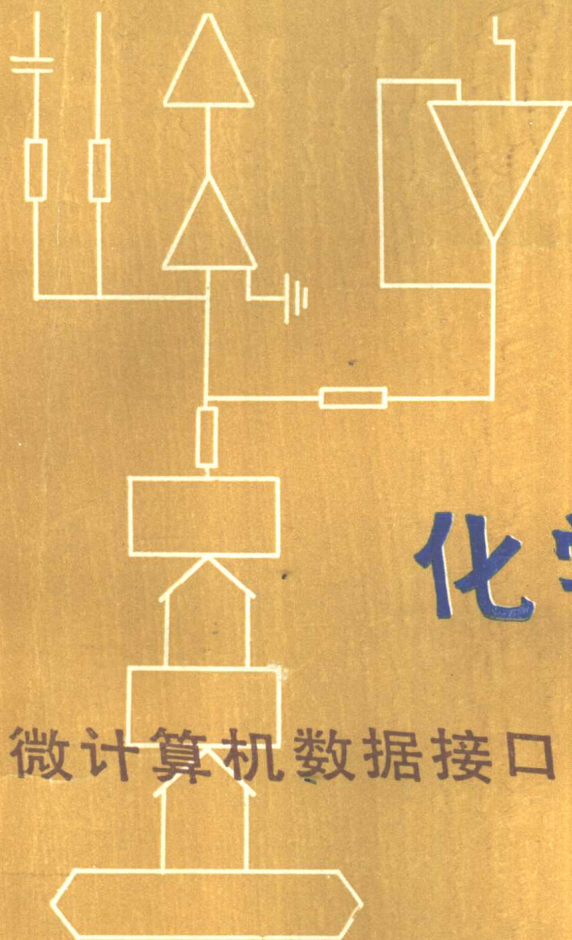


15.1010/376

吴秉亮 编著



化学中的

微计算机数据接口与数值方法

化学中的微计算机数据接口 与数值方法

吴秉亮 编著

武汉大学出版社

1987·武汉

内 容 提 要

本书阐述了微计算机数据接口与数值方法在化学中的应用。对微计算机的原理作了必要的介绍,较详细地讨论了计算机和化学仪器之间的接口技术,并以计算机控制的电化学仪器为例,阐明了当前化学仪器的发展状况。在数据处理方面,书中介绍了几种对化学工作者十分有用的数值方法:拟合、变换、数字模拟等,并提供了一些典型的计算机程序。书中所引实例多为电化学问题,其原理和方法在化学领域具有普遍意义。

本书可作为电化学、金属腐蚀、分析化学等专业高年级学生和研究生教材,也可供化学、化工有关专业的教师、学生及工程技术人员参考。

化学中的微计算机数据接口与数值方法

吴秉亮 编著

武汉大学出版社出版

(武昌 珞珈山)

新华书店湖北发行所发行 武汉大学出版社印刷总厂印刷

850×1168毫米 1/32 7.625印张 5开插页 1幅 191千字

1987年7月第1版 1987年7月第1次印刷

印数: 1—1000

统一书号: 13279·44 定价: 1.58元

ISBN 7—307—00074—1/O·4

前 言

微型计算机这一当代科学技术综合发展的产物已经在生产部门、管理部门以及科学技术领域引起了一场巨大的变革，并广泛深入社会生活各个方面，功能日臻完善。过去使用小型计算机乃至中型计算机的领域大量被微型计算机所占领；原来很复杂的控制及测量仪器也由于与微计算机联用或者仅仅采用以微处理器为基础的设计而大大简化，其功能却比以往更强，适应面更广，这就构成了所谓“灵巧仪器”的基本特征。

在化学领域，微型计算机的应用亦日益深入，远远超出了数值计算的范围，开拓了一些新的应用方向。近年来，国际上各种新型化学仪器，特别是大、中型仪器都配有微计算机或者微处理器，向着仪器智能化的方向迅速发展，经典的单元组合式电子仪器正逐步被微计算机程控系统所代替。这些系统由微型计算机通过接口电路连接相应的外围设备构成，如光谱仪、色谱仪、质谱仪、阻抗或导纳谱仪等各式各样的化学测量仪器。系统在实际应用方面虽然千差万别，但接口电路却大同小异。这些接口电路连接相应的外围设备以后，启动各自的软件，就可以进行性质迥然不同的测量研究工作。

这类系统的一个重要特点是：它所采集的实验数据可在本系统中立即处理、显示，也可以存放(短期或长期)待日后进行再分析。它使许多高精度的数学处理手段得以充分利用，例如数据平滑、数字模拟、曲线拟合以及各种数学变换，使人们通过简单的实验方法获得大量的有用信息。如果没有计算机联用，这将是难以实现的。

微计算机在化学中的应用相当广泛，本书重点放在微计算机

现场采集数据及数据的处理方法上。为了使化学工作者比较容易了解和使用计算机数据接口，本书首先对它的基本原理作了简单的介绍，随后对数据接口进行较详细的讨论。

微计算机的数据处理总是和数值方法联系在一起的。为了使读者掌握数据处理的原理，并能编制数据处理软件，书中用了较大的篇幅讨论数值方法。由于一些基本方法已有很多书籍讨论并编有各种源程序，这里不再作系统介绍。这些方法包括：插值法、数值积分、线性方程组求解等，在叙述过程中遇到上述问题时仅作简单复习。

微计算机接口和数值方法是目前化学工作者不大熟悉的领域，然而又是很多人感到迫切需要的知识。作者根据近年来从事这方面教学和电化学研究的一些经验和体会，在武汉大学化学系研究生所使用的讲义基础上写成此书，希望能对化学工作者掌握数据接口技术和数值方法有所帮助。

本书在编写过程中，得到查全性教授的支持和鼓励；张宗稷教授对本书的修改提出了许多宝贵意见，特致以诚挚的谢意。

由于作者学识有限，书中难免有错误和不妥之处，谨请读者不吝指教。

吴 秉 亮

1986年4月

目 录

第一章 微型计算机基本原理	(1)
第一节 随机存储器 (RAM)	(2)
第二节 只读存储器 (ROM)	(9)
第三节 微处理器 (MPU)	(13)
第四节 总线 (BUS)	(18)
第五节 计算机语言	(21)
第六节 计算机怎样执行一个程序	(24)
第七节 微处理器的寻址方式	(26)
第八节 栈操作和子程序	(33)
第二章 微型计算机的输入/输出及其与实验装	
置的接口	(39)
第一节 引言	(39)
第二节 CPU与外设之间传送数据的方式	(43)
第三节 输入/输出接口元件	(49)
第四节 数字/模拟转换器及其与微型计算机	
的接口	(59)
第五节 模拟/数字转换器及其与微型计算机的	
接口	(66)
第六节 开关量的控制与状态查询	(76)
第七节 DAC和ADC接口电路要注意的问题	(78)
第八节 微型计算机的控制及采样程序	(81)
第九节 微型计算机的通用外围接口总线及	
总线命令	(85)
第十节 电化学实验研究系统	(95)

第三章 模拟及数字信号的提取和预处理	(108)
第一节 干扰的来源及抑制	(108)
第二节 奈奎斯特 (Nyquist) 采样规则	(112)
第三节 数字数据的局部平滑	(115)
第四章 实验观测数据的拟合	(121)
第一节 引言	(121)
第二节 线性参数的拟合方法	(124)
第三节 非线性拟合的高斯—牛顿法	(129)
第四节 阻尼高斯—牛顿法 (麦夸脱法)	(135)
第五节 非线性最小二乘拟合程序	(138)
第六节 单纯形加速法	(143)
第七节 曲线拟合在电化学动力学中的应用	(152)
第八节 重叠峰的分辨	(158)
第五章 线性积分变换及其在化学数据处理中的应用	(161)
第一节 引言	(161)
第二节 富氏变换的基本原理	(163)
第三节 快速富氏变换的基本原理	(166)
第四节 FFT算法的信号流程图	(170)
第五节 FFT程序流程图及FFT程序	(175)
第六节 FFT计算过程中复数运算的问题	(179)
第七节 FFT导纳测量原理及其应用	(184)
第八节 拉氏变换的基本原理和计算程序	(189)
第九节 拉氏变换在电化学中的应用	(193)
第六章 化学动力学过程的数字模拟	(201)
第一节 微分方程的离散化处理	(202)
第二节 解常微分方程的常用数值方法	(204)
第三节 解常微分方程组的龙格—库塔法	(207)
第四节 电化学动力学中的物质传输	(210)
第五节 无因次量	(212)

第六节	解扩散方程的显式差分格式·····	(215)
第七节	扩散方程的隐式解法·····	(219)
第八节	不等距格式数值解法·····	(225)
第九节	有其他传输因素时偏微分方程的解·····	(229)
第十节	电化学平衡分布及稳态过程分析 ——Laplace方程和Poisson方程的 数值解法·····	(230)

第一章 微型计算机基本原理

在讨论微型机基本原理之前我们首先要区分一下微处理器和微计算机。微处理器本身不是计算机，它只是微计算机的控制和处理单元；微计算机则是具有完整运算和处理功能的计算机，它包括微处理器（作为中央处理单元）、存储器、输入/输出装置以及其他配套电路。

最基本的微计算机示意如图1.1，在微处理器和其他部件之间有数据总线，地址总线和控制总线相连。微处理器通过总线控制系统中进行的过程。

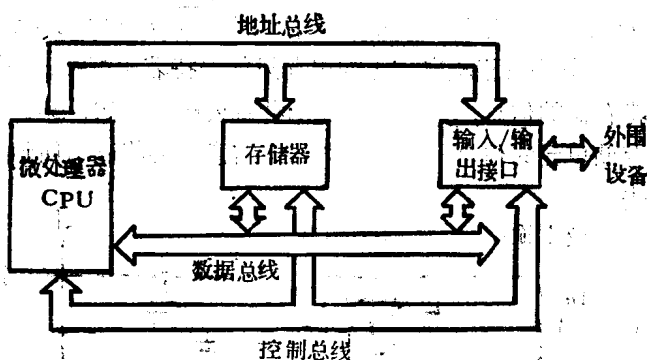


图1.1 微计算机示意图

下面分别讨论微计算机的几个主要的组成部分。了解了这些部件的工作原理之后，就可对微计算机的基本原理有初步的理解。

第一节 随机存储器 (RAM)

数字计算机是一个执行逻辑运算的电路装置，它的核心部分——微处理器仅仅认识它自己的机器代码。而且，所有的代码、操作数、数据和地址都是用二进制数表示的。计算机的存储器就是用来存放操作码、数据和地址的电路。就是说，这个电路应能存放信息，在存放过程中保持这个信息，它还有自己专用的地址使其不会与其他单元混淆；另外，它能在必要的时候存放信息（写）或者提取（读）这个信息。

微计算机中的存储器有两种，即只读存储器 (ROM) 和随机存储器 (RAM)。这里，首先讨论随机存储器，这种存储器可以存放（写）二进制码，也可以从存储器中读出二进制码，所以又叫做读写存储器。

随机存储器又有动态和静态两种。动态RAM的存储单元有的采用三个晶体管（如图1.2a）有的是单晶体管，其数字信息是靠MOS管的栅极电容上的电荷来存储的。由于任何电容都会漏电，一般MOS管栅极电容上的电荷只能保持若干毫秒，因此为了维持存储的信息，每隔1~2毫秒就要刷新一次，其过程是先读出存储单元的信息，然后根据这个信息，再将它写回该存储单元中去。

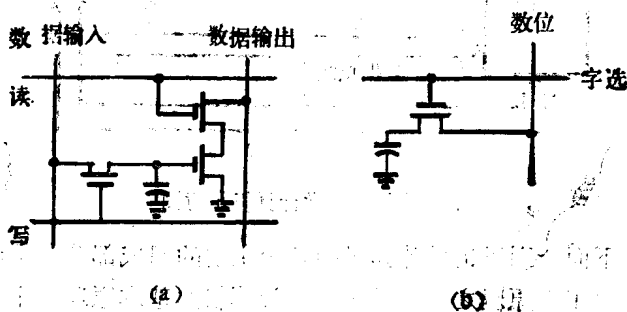


图1.2 动态RAM存储单元

动态RAM比较便宜，集成度高，适合于中等容量和大容量的存储器。但是，它的刷新电路会带来很多麻烦，小容量存储器的设计中，采用静态RAM比较合适。

如果说动态RAM是靠电容的充电状态代表0或1的话，静态RAM则是双稳态电路，它的一个稳态代表0，另一稳态代表1。图1.3是一个静态RAM单元的电路图，现在比较大的半导体集成电路都是MOS或CMOS电路。一个单元可以存放一个数位（bit）的数据，这里用的N-沟道增强型场效应管MOSFET。一个增强型MOSFET通常是断开的，但是当栅极为正电压时，源极（S）和漏极（D）之间就导通了，相反，当栅极为近似地电位时，源漏极间有很高的阻抗，我们就认为它是断开的。

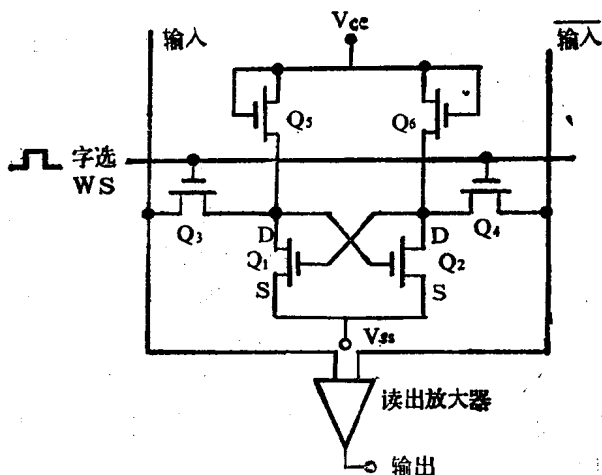


图1.3 静态RAM单元

晶体管 Q_1 、 Q_2 交叉偶合形成一个双稳态锁存器（latch），一个数位的信息锁存在其中， Q_5 和 Q_6 起负载电阻的作用，用晶体管代替电阻是因为这样作只占有极小的芯片空间。 Q_3 和 Q_4 作为开关。我们先假定 Q_2 导通， Q_1 断开的状态为二进制的“1”，相反， Q_1 导通 Q_2 断开应为“0”。为了在这个单元中存放一个

数位的数据 1，我们把逻辑“1”放在输入线上， $\overline{\text{输入}}$ 线的电平总是和输入线相反，此时应是逻辑“0”。如果这时候一个逻辑 1 的选通脉冲加到字选(WS)线上， Q_3 、 Q_4 由于栅级的高电平而导通，数据就进入了由 Q_1 、 Q_2 组成的双稳态电路；输入端的高电平通过 Q_3 而到达 Q_2 的栅极，迫使 Q_2 导通， Q_2 导通使它的管压降降低到低值， Q_1 的栅极电压为低电平，使 Q_1 开路， Q_1 的管压降为高值，其漏极为高电平，这个电压作用在 Q_2 的栅极上，保持了 Q_2 原来的导通状态，这显然是一种稳态。当选择线回到低电平后， Q_1 、 Q_2 仍然保持其原有的状态。这样，只要电源不断开或者没有另一个选通脉冲写入另一个数位的信息，这种 Q_2 导通、 Q_1 断开的状态，即“1”的状态可以一直保持不变，就是说这个数位的信息“1”已经写入这个存储单元并存放下来，完成了这个数位的写操作。写入一个“0”的情况与此相似，只是存储单元的状态为 Q_2 断开、 Q_1 导通。

输入和 $\overline{\text{输入}}$ 线都是三态线(三态线的性质参见后文)，它由 $R/\overline{W}$ 线(读/写线，是控制总线之一)控制。当 $R/\overline{W}$ 为高电平，即读状态时，输入和 $\overline{\text{输入}}$ 线都与外界断开而不起作用。假设单元中存放了信息“1”，即 Q_2 导通、 Q_1 断开状态。当WS为高电平时， Q_3 、 Q_4 导通， Q_1 、 Q_2 的漏极电压分别进入读放大器的输入线，读放大器将这种电平排列解释为逻辑 1，相反的状态则解释为逻辑 0。显然读的过程并没有改变存储单元的状态，所以是非破坏性读出。而写的过程则不管单元原先是什么状态，都被新写的信息所冲掉。

一个存储单元只存放一个数位(bit)的信息，一般八个数位叫做一个字节(byte)。存储器的容量是计算机的主要指标之一。目前的微计算机少的有1K即 $2^{10} = 1024$ 个字节，多的有512K字节，也就是说至少有 $1024 \times 8 = 8192$ 个存储单元。在这一节里我们举一个比较小的存储器阵列的例子来说明读写存储器是怎样工作的。

图1.4表示一个由1024个单元(数位)构成的128字节的RAM(8个单元为一组,组成一个字节),图中每个方框代表由6个晶体管组成的存储单元。字选线(WS)由左边进入,应该有128个,每一线都连到一组中的每个单元,每一个字节占有一个地址,即字选线的标号。输入线(INPUT)在图的顶部,有数据输入线INPUT和反向数据输入线 $\overline{\text{INPUT}}$ 加到相应的单元中去,这些线都是三态线,只有在写操作时才导通,其他时间都是断开的。输出线在图的底部,这些线只有在读操作时赋能,其他时间是禁止的。

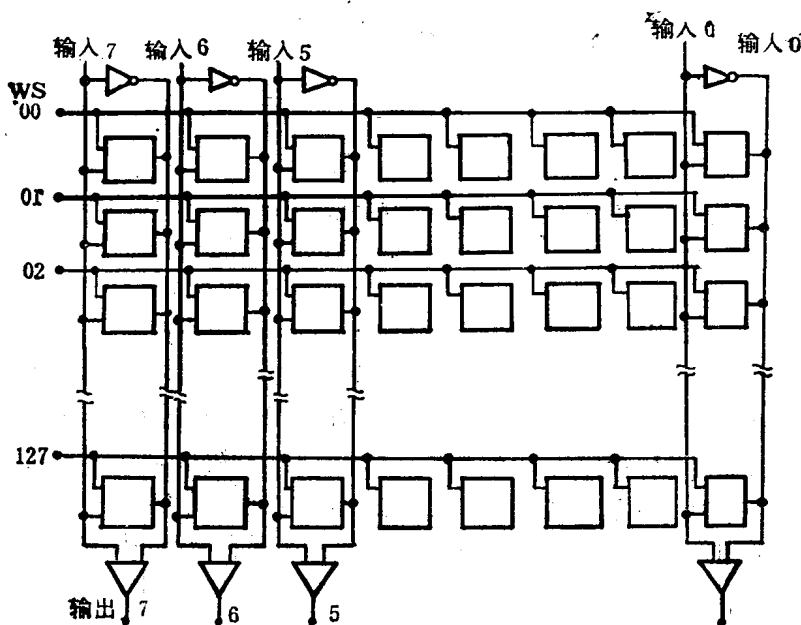


图1.4 1024单元组成的128×8RAM

为了使这组RAM变成可以工作的RAM,还需要一些附加电路,主要是地址译码器。在这里,地址译码器应该可以根据MPU来的指令选择128个字节中的任何一个,而且每次选择应该

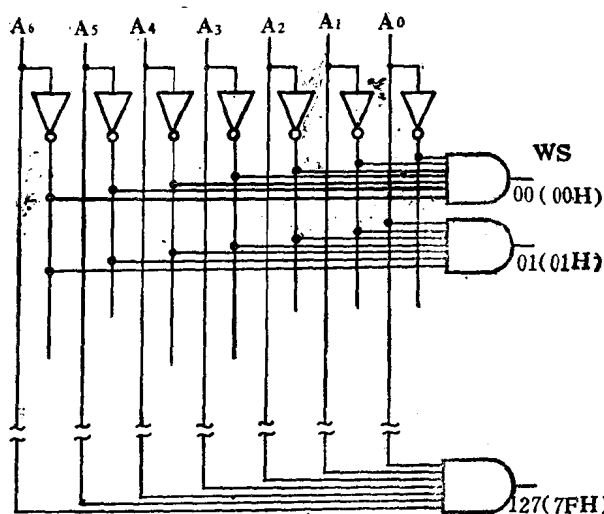


图1.5 地址译码器

是确定的（即每一个字节都有自己的地址）。图1.5示出了128选1的译码器逻辑图。译码器的输入是由MPU来的七个低位地址线，当 $A_0 \sim A_6$ 都是低电平即MPU要选定0000000B这个地址时， $\overline{A_0} \sim \overline{A_6}$ 都是高电平（经反向器反向），触通了而且只能触通00H这一根WS线，使它为高电平，其余127根WS线都是低电平。这样，数据线的数只和地址为00H的单元发生作用，进行读或写操作，其他127个单元都与数据总线隔离。当MPU把另一个地址放在地址总线上时，就选中给定地址的字节，其余字节则与数据总线隔离。因此，地址译码器是存储器寻址并保证唯一性的主要手段。顺便说明一下，计算机术语中常常在数字后面加一个字母表示数制，通常以B表示二进制数，H表示十六进制数，十进制数则不加字母，本书中也沿用这种表示。

实际上，大多数RAM都没有分立的输入线和输出线，只有一组数据线，叫做数据总线，因为MPU的读操作和写操作总是在不同时间进行的。图1.6示出了一个由存储单元、地址译码器

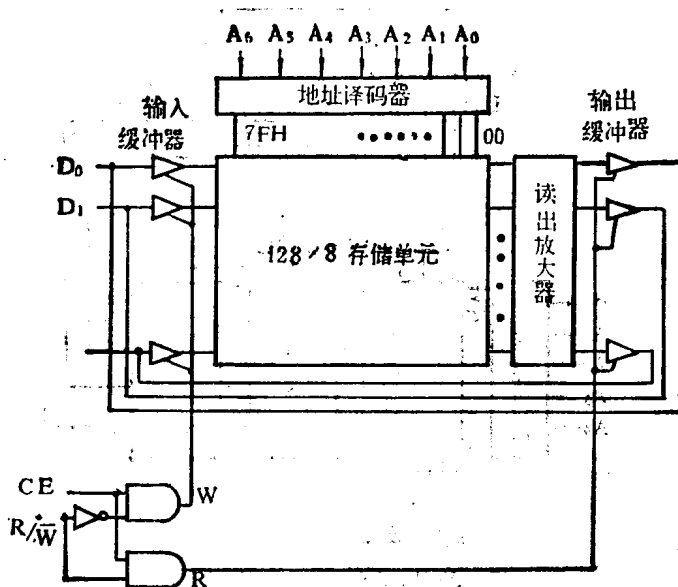


图1.6 128×8 RAM芯片原理图

读/写控制和芯片赋能 (CE) 组成的实用的128×8 RAM。图中的数据线在左边 ($D_0 \sim D_7$)，由于读/写线上的低电平和 CE 的高电平赋能输入三态缓冲器，使数据能写到选中的地址中去，此时输出缓冲器由于 R 线处于低电平而被禁止；当读操作时 $R/\bar{W}$ 为高电平，使 R 线为高电平，W 线为低电平，输出缓冲器赋能而输入缓冲器禁止，从数据线上可以读到选定地址的数据。当然，当芯片赋能线为低电平时，输入、输出缓冲器都被禁止，数据总线将不与这一组 RAM 单元发生作用。有的 RAM 芯片有几个芯片赋能线，这主要是为了使寻址更方便。

为了简化地址译码器，一个1024数位的 RAM 可以排列成 32×32 的阵列，每一行中进一步分成 8 组 4 数位单元。这样，这

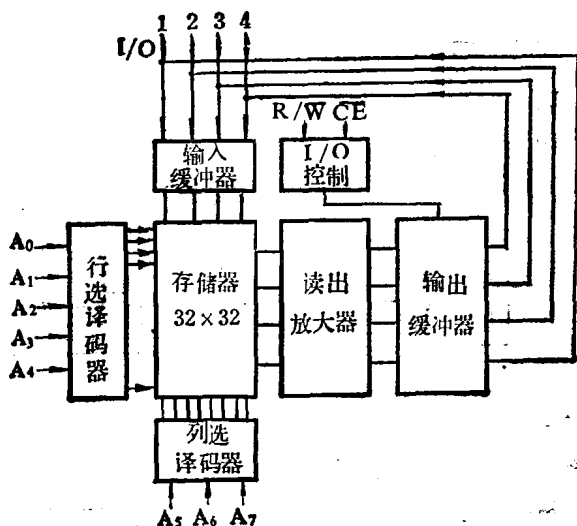


图1.7 256×4RAM的组合电路原理图

个阵列中包含了 32×8 个4数位单元。为了选择这些单元需要两个地址译码器，一个32选1的行译码器，一个是八选1的列译码器，前者用5根地址线（ $A_0 \sim A_4$ ），后者用三根地址线（ $A_5 \sim A_7$ ），选中的字在行和列的交叉点上，见图1.7。这里有两个地址译码器，但是，实际上它的电路比只用一个地址译码器简单得多。当然，这里只有四数位数据线，显然，在一个八数位的系统中，要组成一个256字节的RAM，需要两个这样的模块并联到完全相同的地址译码电路中，其中一块连到高位数据线，另一块连到低位数据线，这种情况经常遇到。图1.8示出了由两块2112RAM（4位）组成的八位RAM，在这两块电路中相应单元的数据是同时输入和输出的。

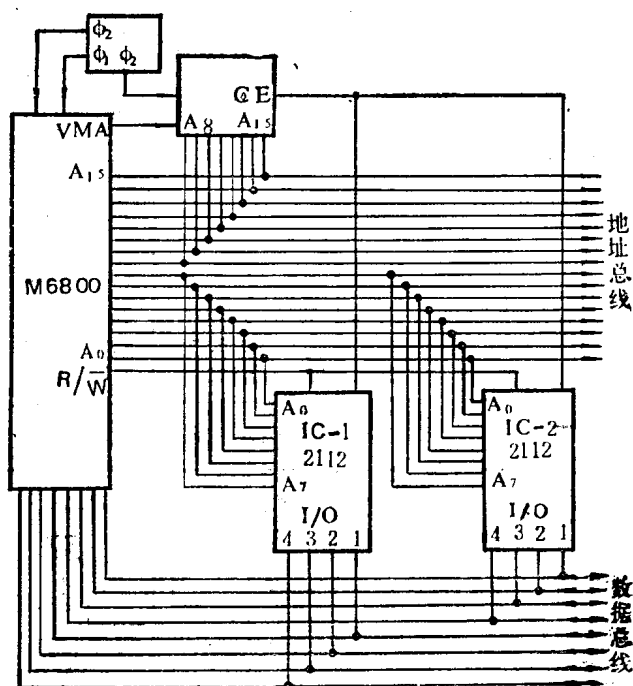


图1.8 由两块2112组成的RAM

第二节 只读存储器 (ROM)

与随机存储器不同,只读存储器在正常操作过程中只能读出不能写入。而且电源断开之后它仍能保留原有的信息。因此,在计算机中,ROM用来存放需要长期保留的信息,如计算机的监控程序、仪器的例行操作软件以及其他一些重要信息,这些信息不能由通常的键盘输入或其他设备输入,而是由ROM的生产厂家制造时装入的,或者用专门的写PROM方法写入的。

只读存储器 (ROM) 实质上是一个单向导通的选择开关的阵列,图1.9表示一个16位的阵列。4位地址码中2位(A_0 , A_1)