

NN31545.1913



nota

PC-GEbruik OP HET WATERKWALITEITS LABORATORIUM

Marcel Pennings

— instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding . wageningen —

Nota's van het Instituut zijn in principe interne communicatie-
middelen, dus geen officiële publikaties.

Hun inhoud varieert sterk en kan zowel betrekking hebben op een
eenvoudige weergave van cijferreeksen, als op een concluderende
discussie van onderzoeksresultaten. In de meeste gevallen zullen
de conclusies echter van voorlopige aard zijn omdat het onderzoek
nog niet is afgesloten.

Bepaalde nota's komen niet voor verspreiding buiten het Instituut
in aanmerking

15 DEC. 1988

JSN 200067 *

INHOUD

| | pag. |
|-----------------------------------------|------|
| 1. INLEIDING | 1 |
| 2. DE P.C. EN HUN RANDAPPARATUUR | 2 |
| 3. DIRECTORIES VAN P.C. A | 4 |
| 3.1 de c-schijf | 4 |
| 3.2 de d-schijf | 6 |
| 4. ENKELE WERKWIJZEN | 8 |
| 4.1 batch files | 8 |
| 4.2 uitzetten van de p.c. | 9 |
| 4.3 "vastlopen" | 10 |
| 4.4 de printer | 10 |
| 4.5 de plotter | 11 |
| 4.6 back up's | 13 |
| 4.7 floppy disks | 13 |
| 5. HERINTEGREREN VAN CHROMATOGRAMMEN | 15 |
| 5.1 herintegreren m.b.v. muis en cursor | 15 |
| 5.2 van chromatogram naar lotus grafiek | 17 |
| BIJLAGE 1 | 18 |

1. INLEIDING

Steeds vaker wordt er in een laboratorium gebruik gemaakt van de personal computer (p.c.). Daarom is het belangrijk dat een ieder die op het laboratorium werkt makkelijk met de p.c. om kan gaan om niet te vervreemden van een aantal werkwijzen. Om wat duidelijkheid te scheppen in een aantal handelingen en de bijbehorende apparatuur is deze nota geschreven.

Verder wordt in deze nota het herintegreren van chromatogrammen en het omzetten van een chromatogram in een LOTUS grafiek behandeld.

Wijzigingen aanbrengen in het systeem is alleen voorbehouden aan de p.c. beheerder.

N.B.1 Alle namen van programma's zijn in hoofdletters geschreven

Alle opdrachten die ingetypt moeten worden staan tussen []

Alle teksten die op het scherm verschijnen staan tussen { }

N.B.2 Deze nota is een momentopname. Er kunnen dus wijzigingen plaatsvinden van hetgeen in deze nota beschreven staat.

2. P.C.'S EN HUN RANDAPPARATUUR

Op het moment van uitgave van deze nota staan op het waterkwaliteitslaboratorium drie p.c.'s (A,B en D).

p.c. A is een Olivetti M28 met kleuren monitor

p.c. B is een Olivetti M240

p.c. D is een Olivetti M24

Op p.c. A zijn 4 Nelson analytical intelligent interfaces aangesloten. Deze interfaces zijn aangesloten op meetapparatuur zoals hplc en gc.

v.b. De hplc is bezig chloride, nitraat en sulfaat te bepalen. De chromatogrammen (het meetsignaal) worden doorgegeven aan interface 2, deze slaat de chromatogrammen op (bufferen). Wanneer de optie verzamelen gegevens (acquire data) uit het menu wordt gekozen zal de interface 2 zijn gegevens verzenden naar p.c. A. De p.c. slaat deze gegevens op de harde schijf op.

De p.c.'s zijn aangesloten op een printer (Mannesmann Tally 86). Vanaf elke p.c. kan er geprint worden door middel van een schakelaar over te zetten (zie voor meer informatie printer par. 4.4).

Voor de plotter (HP 7550a-paper) geldt hetzelfde verhaal als voor de printer (zie voor meer informatie plotter par. 4.5).

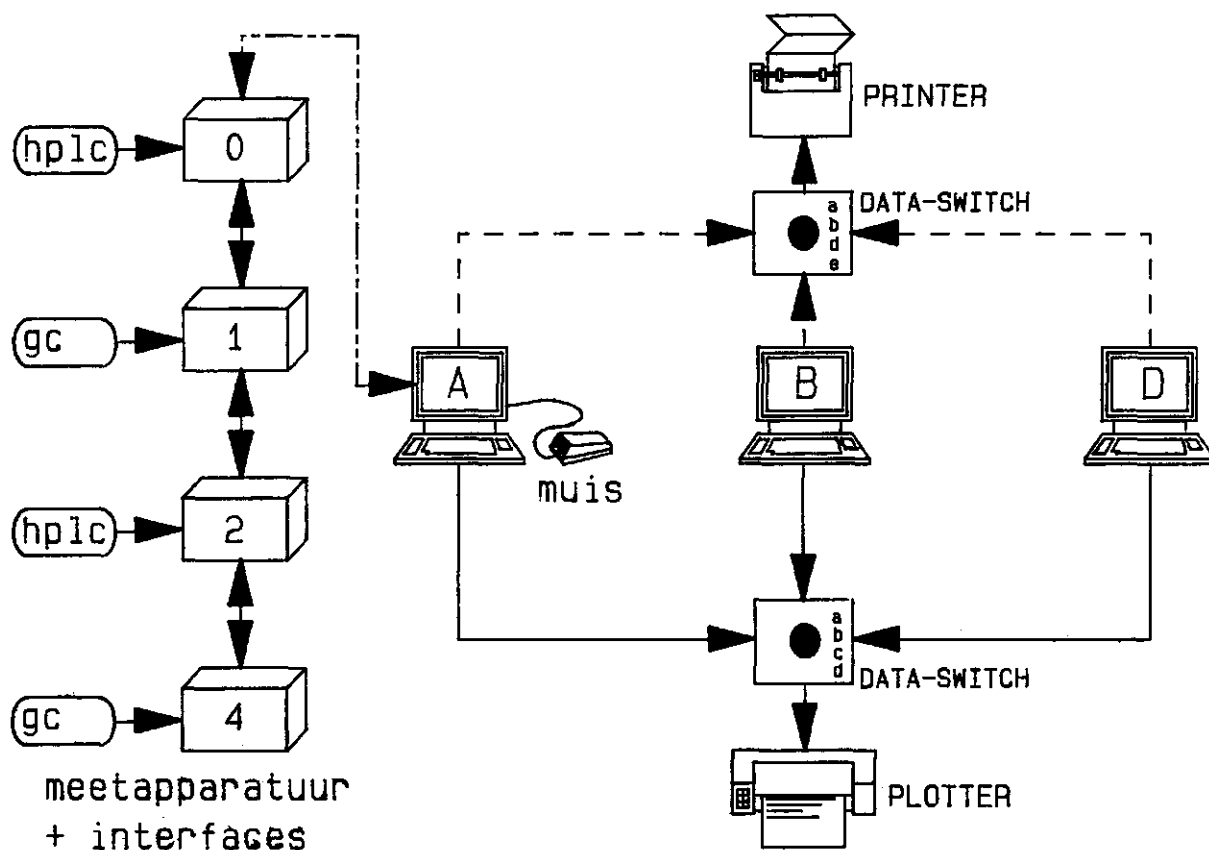


Fig. 1. Overzicht van de 3 p.c.'s en de manier waarop hun randapparatuur is aangesloten

3. DE DIRECTORIES VAN P.C. A

3.1. DE C-SCHIJF

De c-schijf van de p.c. is volgens het volgende schema opgebouwd:

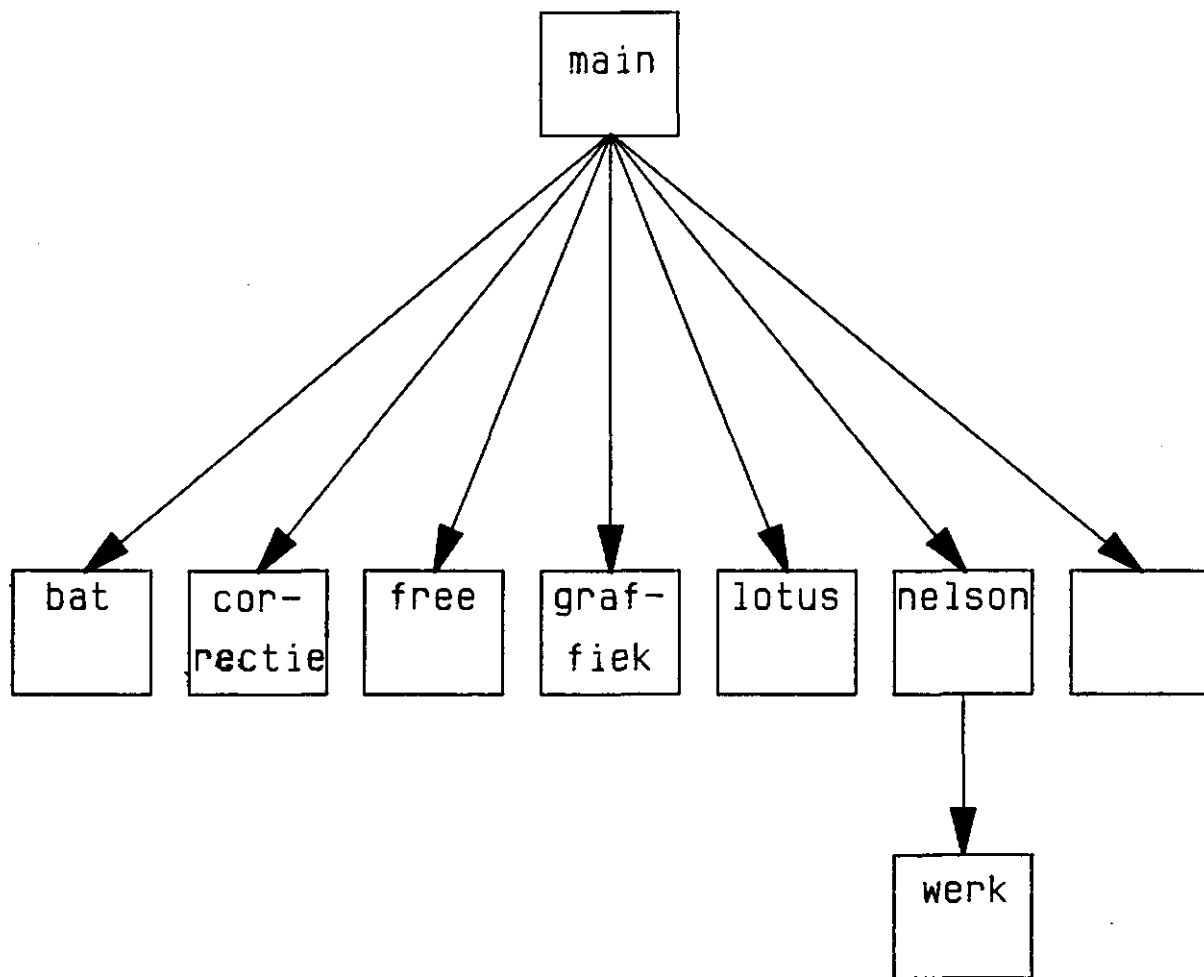


Fig. 2. Directory verdeling van de c-schijf van p.c. A.

In de main-directory staan de programma's van MS-DOS en het programma XTREE. MS-DOS zorgt voor de sturing van de p.c. en XTREE is een programma dat een overzicht geeft van de harde schijf met zijn directories en files. Met dit programma kan men files kopiëren en uitwissen op een gebruikersvriendelijke manier.

In de sub-directory bat staan de verschillende batch-files (zie batch-files par. 4.1).

In de sub-directory correctie staat een verkorte versie van de NELSON software.

In de sub-directory free staat het programma LOTUS FREELANCE +. Dit tekenprogramma kan LOTUS grafieken verwerken.

In de sub-directory grafiek staat het programma RRGRAPH. Hiermee kunnen grafieken worden getekend en regressies berekend en getekend.

In de sub-directory lotus staat het programma LOTUS 1-2-3. Dit is een spread-sheet programma (gegevens verwerking).

In de sub-directory nelson staat de NELSON software. Dit chromatografische software pakket is aangesloten op de verschillende interfaces en met dit pakket worden de chromatogrammen verwerkt.

De sub-sub-directory werk is bedoeld voor kleine werkzaamheden zodat deze niet in een directory met programmatuur gedaan worden. Om ongelukken te voorkomen is hiervoor een speciale directory ingericht.

3.2. DE D-SCHIJF

De d-schijf van de p.c. is volgens het volgende schema opgebouwd:

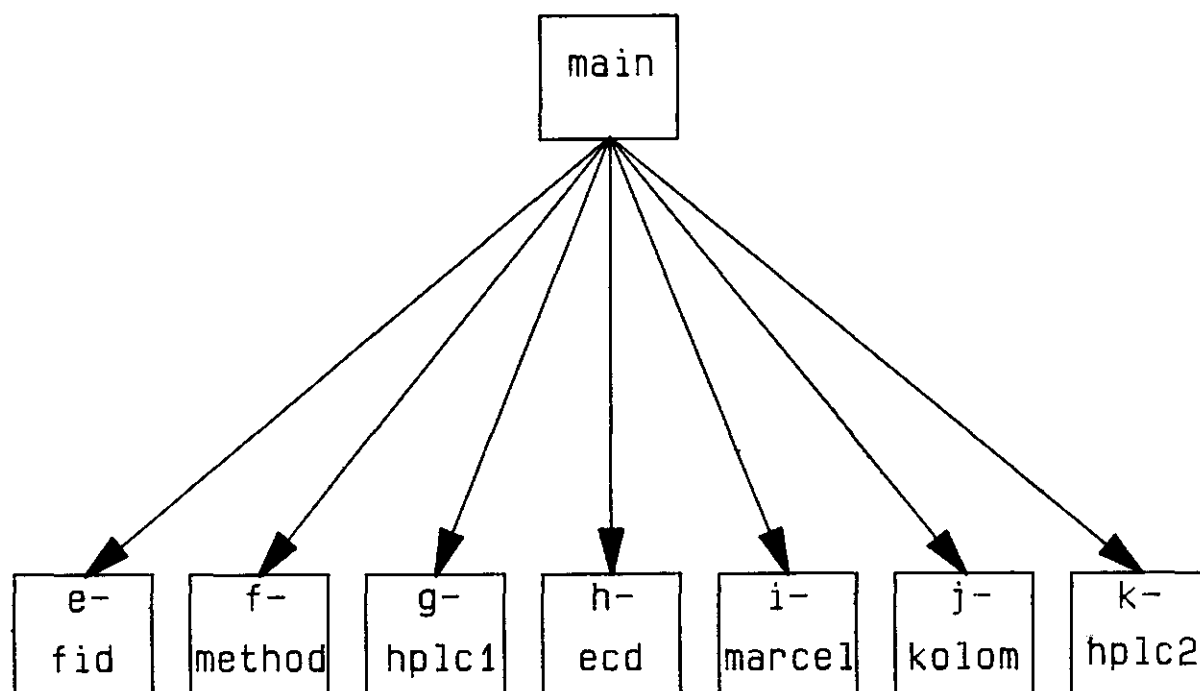


Fig. 3. Directory verdeling van de d-schijf van p.c. A.

De d-schijf wordt gebruikt voor het opslaan van chromatogrammen. De verschillende directories dragen een verschillende letter met zich mee, zoals e-fid of f-method. Deze letters komen overeen met de zogenaamde schijf die ze vertegenwoordigen. Bij het opstarten van de computer krijgt de computer namelijk de opdracht om de sub directory e-fid te vervangen voor e:\ en de sub-directory f-method voor f:\ enz.

Wanneer er nu iets wordt opgeslagen op de "e-schijf" dan komt dit automatisch in de sub-directory e-fid op de d-schijf te staan.

Het is de bedoeling dat gegevens in de volgende sub-directory cq. schijf worden opgeslagen als ze afkomstig zijn van:

| sub-dir | "schijf" | herkomst data | activiteit |
|-------------|----------|------------------|--------------------|
| d:\e-fid | e-schijf | interface 1 | gc met fid |
| d:\f-method | f-schijf | programma metgen | methodes maken |
| d:\g-hplc1 | g-schijf | interface 2 | ionchromatografie |
| d:\h-ecd | h-schijf | interface 4 | gc met ecd |
| d:\i-marcel | i-schijf | interface 1 | gc met fid |
| d:\j-kolom | j-schijf | interface 2 | kolom experimenten |
| d:\k-hplc2 | k-schijf | interface 2 | ionchromatografie |

Deze schema's (fig. 2 en 3) zijn op het moment van uitgave juist maar afhankelijk van het soort onderzoek en behoefte aan programma's kan dit veranderen. Daarom hangt boven p.c. A een schema van de indeling zoals die op dat moment geldt.

4. ENKELE WERKWIJZEN

4.1 BATCH FILES

Een batch file is een file waar een aantal opdrachten in staan. Dit file kan geactiveerd worden door de naam van de batch file in te typen. Deze batch files staan in de sub-directory bat.

V.b: er is een batch file dat TERUG.BAT heet. De inhoud van de file is als volgt:

```
c:  
cd \nelson  
menu
```

Typt men nu [TERUG] in dan gaat de p.c. naar de c-schijf vervolgens naar de sub directory nelson en roept daar het hoofd menu op.

Hier volgt een lijst van de belangrijkste batch files die in de p.c.'s staan met hun functie;

| | |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| AC.BAT | Roept het programma ACQUIRE.EXE(verzamelen gegevens) op in de sub directory nelson. |
| CURSUS.BAT | Geeft een cursus in het integreren van chromatogrammen in de sub directory correctie. |
| DDIR.BAT | Geeft een lijst met files die in de directory staan maar dan pagina voor pagina. |
| FREE.BAT | Roept het tekenprogramma LOTUS FREE LANCE + in de directory free op. |
| GRAFIEK.BAT | Gaat naar de directory grafiek en start het programma rrgraph. |
| KOPIE.BAT | Maakt kopieën van floppy disks. |
| LOTUS.BAT | Gaat naar de directory lotus en roept het spread-sheet programma LOTUS 1-2-3 op. |

MARPOP.BAT Roept het hoofd menu in de sub directory correctie op.
OVERZ.BAT Roept het programma XTREE op.
TERUG.BAT Ongeacht welke schijf of directory terug brengt het hoofd
 menu in de subdirectory nelson op het scherm.

Deze batch files worden vanuit het menu automatisch geactiveerd.

Andere programma's die direct opgeroepen kunnen worden zijn alle programma's die eindigen op .EXE.

V.b. Als er chromatogrammen zijn die een herintegratie nodig hebben wordt het programma PEAKS.EXE gebruikt. Vanuit het menu wordt dit opgeroepen maar kan ook worden geactiveerd als in desbetreffende directory [PEAKS] wordt ingetypt.

Als er handelingen zijn die vaak uitgevoerd moeten worden kan daar, in overleg met de p.c. beheerder, een batch file voor geschreven worden.

N.b. Sommige van deze batch files staan niet in alle p.c.'s maar alleen in p.c. A.

4.2 UITZETTEN VAN DE P.C.

Wanneer aan het einde van de werkdag de p.c. uitgezet wordt is het aan te raden om de koppen van de harde schijf te "parkeren". Dit is om beschadigingen van de harde schijf te voorkomen. Deze handeling kan verricht worden door de optie {Parkeren van de koppen} uit het menu te kiezen. Let hierbij wel op dat er geen meetapparatuur aanstaat die aangesloten is op p.c. A. Is er wel apparatuur actief laat dan p.c. A aanstaan. P.c. B en D kunnen aan het einde van de dag zondermeer worden uitgezet nadat de koppen in de "parkeer stand" zijn gezet.

N.b. de aan/uit schakelaar zit bij p.c. D aan de achterzijde van de diskdrive.

4.3. "VASTLOPEN"

Het kan voorkomen dat de p.c. "vastloopt". Dat wil zeggen ongeacht welke toets u indrukt de p.c. geeft geen respons. Om hieruit te komen druk dan de toetsen [alt][ctrl][del] tegelijkertijd in. Als dit niet werkt kan de reset knop op de voorkant van de diskdrive gebruikt worden. De p.c. begint nu de opstart procedure zoals deze bij het aanzetten van de p.c. plaatsvindt. Na het opstarten verschijnt het hoofd menu in beeld.

Het komt ook voor dat de p.c. de melding geeft {...error... hit any key to return to system}, dat betekent dat er iets mis is gegaan en dat na het indrukken van een willekeurige toets de p.c. terug gaat naar MS-DOS. Type dan het woord [terug] in en de p.c. gaat automatisch terug naar het hoofd menu.

N.b. bij p.c. A werken de [alt][ctrl][del] toetsen niet goed dus hier meteen de reset knop gebruiken.

4.4. DE PRINTER

De drie p.c.'s zijn alle drie aangesloten op de printer (zie fig.1). Om de printer te gebruiken moet de schakelaar (data switch) in de desbetreffende stand worden gedraaid. Dus als p.c. D gebruikt wordt, stand D op de schakelaar kiezen.

Als p.c. A gegevens verzamelt van de interfaces ga dan eerst terug naar het hoofd menu (main menu) en schakel dan pas de schakelaar (data-switch) om. Vergeet niet na het gebruik van de printer de schakelaar (data-switch) terug te zetten in de A-positie.

Zorg altijd voor voldoende print-papier vooral als er lange series monsters in een van de autosamplers staan.

4.5. DE PLOTTER

Alle p.c.'s zijn aangesloten op de plotter (zie fig.1). Hier geldt weer het zelfde verhaal als bij de printer. Wanneer er 'geplot' wordt vanuit B moet stand B op de schakelaar (data-switch) gekozen worden enz.

Wanneer de plotter aangezet wordt moet de plotter eerst een blaadje 'laden'. De plotter geeft dit aan op het display {load paper to plot}. Druk nu op het knopje [auto feed], links boven, zodat het sterretje in de linker bovenhoek van het display verdwijnt. Druk daarna op het knopje [load/unload]. De plotter 'laadt' nu het blaadje. Druk nu weer op het knopje [auto feed] zodat het sterretje weer verschijnt.

Wanneer er een beschreven blaadje of helemaal geen blaadje in de plotter zit zorg dan dat er wel een sterretje in de linker bovenhoek aanwezig is en druk daarna op het knopje [load/unload].

Worden deze handelingen niet verricht dan werkt de plotter niet!

Wanneer het papier op is moet de papier lade opengetrokken worden en kan er nieuw papier tussen de beugeltjes gelegd worden.

technische gegevens over de aansluiting:

| | |
|-------------------|-------------------|
| serial | 1 |
| hp-ib adress | 05 |
| monitor mode | off |
| standard/enhanced | standard |
| bypass | off |
| handshake mode | hardwire direct |
| data flow | remote standalone |
| duplex | full |
| parity | 8-bits off |
| baud rate | 9600 |

De kabels van de verschillende p.c.'s naar de data switch zijn van het zogenaamde straight through type. Dat houdt in dat pin 1 met pin 1, pin 2 met pin 2, enz. met elkaar zijn verbonden. De kabel van de data switch naar de plotter is van het modem eliminator type. Hieronder staat het aansluit schema (fig.4) afgebeeld.

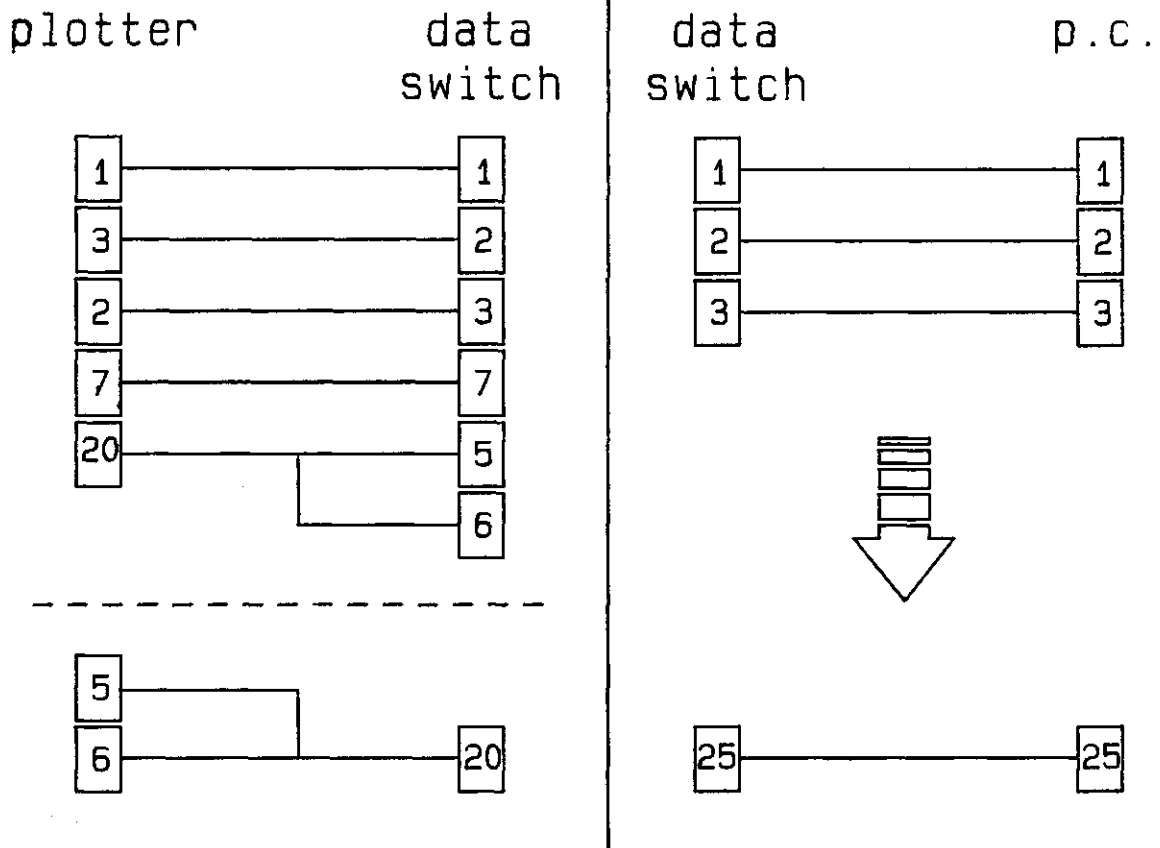


Fig. 4. Aansluitingsschema van de dataswitch naar de plotter

4.6. BACK UP'S

De kans bestaat dat door een storing in de p.c. gegevens zoekraken. Om te voorkomen dat dit gebeurt wordt regelmatig een back up (copy van de harde schijf) gemaakt van de d-schijf. Deze back up slaat alle nieuwe files op. Met ander woorden de files die er in de afgelopen tijd zijn bijgekomen. Tenminste iedere maand wordt de d-schijf volledig aan een back up onderworpen. Van de c-schijf wordt ook regelmatig een back up gemaakt. Op dit moment worden alleen back up's gemaakt van p.c. A en p.c.B. Het kan dus voorkomen dat p.c. A en p.c. B. daardoor enige tijd buiten gebruik zijn, maar niet geklaagd het is in uw eigen belang.

4.7. FLOPPY DISKS

Voor het opslaan van lotus worksheets, RRGGRAPH grafieken, tekstfiles enz. worden floppy disks gebruikt. Hiervoor is gekozen omdat floppy disks makkelijk van de een naar de andere p.c. te verplaatsen zijn en de harde schijf van de p.c. niet 'vervuild' raakt met persoonlijke gegevens van de verschillende medewerkers. Het is aan te raden regelmatig back up's van uw eigen floppy disk('s) te maken zodat de kans dat gegevens verloren gaan zo klein mogelijk wordt gehouden.

Back up's van een floppy disk maken gaat als volgt:

* kies de optie [kopiëren van een floppy disk] uit het hoofd menu.

* De p.c. repliceerd met; {insert SOURCE diskette in drive A and strike any key when ready}. Met andere woorden stop de orginele floppy disk in disk drive A en druk een willekeurige toets in.

- * Daarna komt de opdracht; {insert DESTINATION diskette in drive A and strike any key when ready}. Dus stop de floppy disk waar de back up op moet komen in disk drive A en druk een willekeurige toets in.

- * Na het kopiëren van de floppy disk vraagt de p.c. of u nog een floppy disk wilt kopiëren, wordt het antwoord [NO] gegeven dan keert de p.c. naar het hoofd menu terug. Wordt het antwoord [Yes] gegeven dan begint de procedure opnieuw.

5. Herintegreren van chromatogrammen

5.1. HERINTEGREREN M.B.V. MUIS EN CURSOR

Wanneer een chromatogram niet juist is geïntegreerd is het soms nodig om hem te herintegreren. Het herintegreren wordt in de sub directory correctie gedaan. Hier volgt de procedure die gevolgd moet worden.

- * Vanuit het hoofd menu wordt de optie {Ga pieken berekenen in correctie} gekozen.
- * Op het scherm verschijnt nu de eerste pagina van het programma peaks en de eerste vraag die beantwoord moet worden is;

{raw data file name} []

Hier wordt b.v. [aaa101] ingevuld. Daarna wordt [enter] ingedrukt.

- * De rest van de vragen wordt beantwoord door bij iedere vraag de [enter] knop in te drukken. Behalve bij de vierde vraag op pagina 2 {PRINT EXTERNAL STANDARD table} (Y or N) [YES] moet de YES veranderd worden in NO door het intoetsen van een [N].
- * Na de tweede pagina verschijnt het chromatogram in beeld. Nu kan het chromatogram gecorrigeerd worden.
- * Soms is een piek erg klein en is het nodig deze piek uit te vergroten. Dit kan op 2 manieren namelijk met de muis of met de cursor. Standaard is de muis aangesloten. Wanneer er gebruik van de cursor wordt gemaakt moet de letter [c] ingetypt worden en wanneer de muis weer gebruikt wordt moet de letter [m] ingetypt worden.

Het uitvergrooten gaat als volgt;

m.b.v. de muis.

1. Breng de muis naar de hoek, links onder, van het uit te vergroten gedeelte.
2. Druk nu de linkerknop van de muis in en houd deze ingedrukt en verplaats de muis naar de hoek, rechts boven.
3. Laat de linkerknop los en druk op de rechterknop en het uitvergrote gedeelte komt op het scherm.

m.b.v. de cursor.

1. Maak de cursor los van de lijn door functietoets [F2] in te drukken en verplaats de cursor naar de hoek, links onder, het uit te vergroten gedeelte.
2. Druk nu op functietoets [F3] en rek met raam, m.b.v. de pijltjes, op tot de gewenste grootte.
3. Druk nu op functietoets [F4] en het uitvergrote gedeelte verschijnt op het scherm.

N.B. De snelheid van de muis cq. de cursor kan verhoogd of verlaagd worden door respectievelijk de [f] van faster of de [s] van slower, een of enkele malen, in te toetsen.

* Om nu de, al dan niet uitvergrote, piek te integreren moet de muis c.q. de cursor aan het begin van de piek geplaatst worden. Druk dan op functietoets [F7] en ga na het einde van de piek en druk dan op functietoets [F8]. Er verschijnt nu een lijn die het geïntegreerde gebied afbakt. Op het scherm en de printer verschijnt nu het oppervlak.

* Druk na het integreren van het chromatogram op functietoets [F1] zodat het hoofd menu verschijnt. Kies nu optie [0] van het hoofd menu, verwerken ruwe gegevens, en begin de hele procedure opnieuw.

* Geef op de lijst aan welke chromatogrammen gecorrigeerd zijn zodat deze door de p.c. beheerder uit het bestand gewist kunnen worden.

5.2. VAN CHROMATOGRAM NAAR LOTUS GRAFIEK

Soms is er behoefte om een chromatogram grafisch of rekenkundig te bewerken. Dit is mogelijk door het chromatogram in lotus 1-2-3 in te voeren met behulp van het programma SEQDAT.EXE. Deze procedure gaat als volgt;

- * Kies uit het menu de optie {Van chromatogram naar print file}. Het programma SEQDAT.EXE wordt nu gestart.
- * De p.c. vraagt naar de file die gelezen moet worden in:
{random .pts file to sequential file conversion program
name of file to read}
- * Hier moet dus de naam van de file ingevuld worden inclusief de letter van de "schijf" waarop deze file staat. Vb. [J:aaa101]
- * De p.c. maakt nu een print file aan dat dezelfde naam krijgt met dat verschil dat de laatste drie letters .prn zijn. Deze print file komt op de dezelfde "schijf" te staan als de .pts file staat. Vb. aaa101.prn
- * Tijdens het maken van de print file verschijnt er een teller in beeld en na de opdracht, {done}. De p.c. gaat automatisch terug naar hoofd menu.
- * Vervolgens wordt de optie {LOTUS dataverwerking} uit het hoofd menu gekozen. De print file kan nu ingelezen worden door de optie {File Import} te kiezen. Bij de vraag {Text or Numbers} moet numbers gekozen worden. Zorg wel dat er een floppy disk in de disk drive zit omdat de p.c. daar in eerste instantie zijn gegevens zoekt. Daarna kan, na twee keer de [escape] toets te hebben ingedrukt, de naam van de file plus de desbetreffende "schijf" ingevuld worden.
- * Het in een grafiek zetten gebeurt door uit het menu {Graph} te kiezen en de reeks getallen in de {A-range} uit te zetten.

Bijlage 1

Hier volgen voorbeelden van een aantal batch files.

| naam | inhoud |
|------------|---------------------------------------------|
| AC.BAT | cd \nelson acquire |
| CURSUS.BAT | show cursus menu |
| DDIR.BAT | dir sortj more |
| OVERZ.BAT | cd.. xtree cd \nelson menu |
| MARPOP.BAT | cd \correctie peaks |
| TERUG.BAT | c: cd \nelson menu |
| KOPIE.BAT | cls diskcopy a: a: cd \nelson menu |