

Små datorer i kemisk forskning och laboratoriearbete

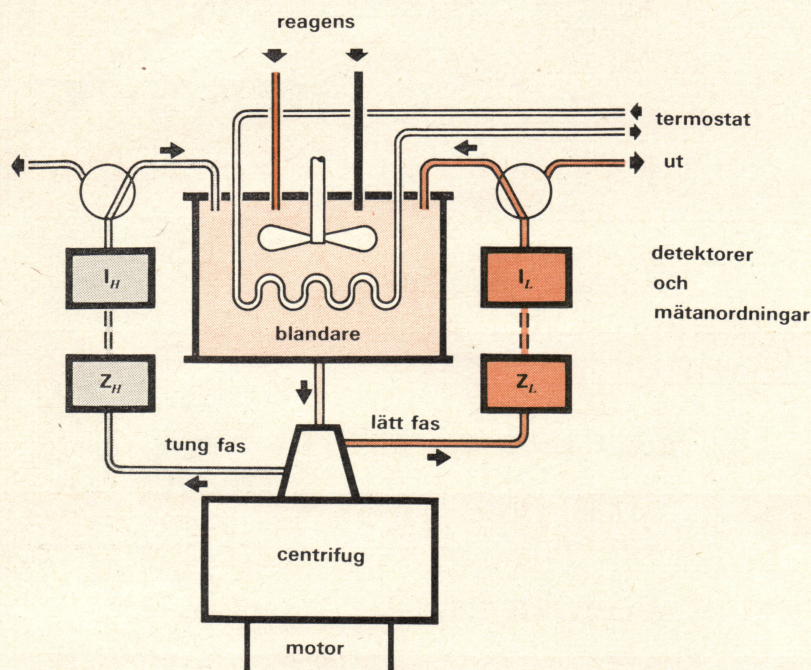


Bild 1. Schematisk bild av AKUFVE

I en serie artiklar ämnar vi ta upp datorernas användning inom kemitekniken. Fältet är stort, och vi ska börja med de små datorerna. Sjunkande priser och minskande storlek samtidigt med ökande tillförlitlighet och miljötålighet leder till en större användning av små datorer inom kemin. Olika användningsmöjligheter belyses och exemplifieras med en redogörelse över ett datorstyrt mätsystem, som utvecklats vid institutionen för kärnkemi, CTH. I en senare artikel ämnar vi ge en allmän översikt över processdatamaskiner.

Docent Jan-Olof Liljenzin
Institutionen för kärnkemi, CTH

Den expansiva utvecklingen på elektronikområdet under 60-talet har lett till att kostnaden för elektroniska komponenter sjunkit mer än 1 000 gånger. Detta har gjort det möjligt att i dag tillverka och sälja små datorsystem till priser jämförbara med priserna på mera avancerade fysikalisk-kemiska mätinstrument. Priserna ligger nu i området 50 000 till 500 000 kr beroende på datorns snabbhet och ordlängd samt kringutrustningens storlek (skrivminnen, magnetbandstationer, bildskärmar, etc.).

Även volymen på datorerna har minskat kraftigt genom en långt driven miniatyrisering av ingående komponenter. En dator som i slutet av 50-talet fyllde en större hall ryms i dag ledigt på skrivbordet eller laboratoriebänken.

Fastän priserna sjunkit och storleken krympt har prestanda förbättrats och tillförlitligheten ökat kraftigt. Felfrekvensen för moderna centralenheter är nu omkring ett fel per år. För kringutrustningen kan den dock vara betydligt högre på grund av att rörliga delar oftast ingår. Denna utveckling har gjort det möjligt att flytta ut datorn från sin "drivhusmiljö" på datacentralen till användarna på fabriker och laboratorier.

Tabell 1: Användningstyper

Ändamål	Typiska krav på centralenhet		Speciella krav på kringutrustning	Användning
	snabbhet (additionstid)	kärnminne (1k=1024 ord)		
Kommunikation med större dator	måttlig (5–10 μ s)	litet ($\lesssim 4$ k)	modern utrustning för anslutning till telenät	Litteratursökning, datareduktion, styrning m.m.
Beräkningsarbete	måttlig (5–10 μ s)	medelstort ($\gtrsim 8$ k), vid tidsdelning stort ($\gtrsim 16$ k)	externt massminne (band, skiva, trumma)	Modellberäkningar, enklare simuleringar, rutinberäkningar där resultat snabbt behövs
Behandling av mätdata	låg ($\gtrsim 10$ μ s)	litet ($\lesssim 4$ k)	analoga och digitala ingångar, tåligt utskriftsorgan	Datainsamling, datareduktion, redigering och utskrift m.m.
Styrning av instrument	måttlig–stor ($\lesssim 5$ μ s)	medelstort ($\gtrsim 8$ k)	externt massminne (band, skiva, trumma), analoga och digitala ingångar, avbrottsystem, analoga och digitala utgångar, intern klocka	Automatiska mätsystem för mera komplicerade undersökningar t.ex. AKUFVE-försök

Användningsmöjligheterna för datorer i kemisk forskning och laboratoriearbete sammanfattas i tabell 1. Som framgår av tabellen finns det i huvudsak fyra relativt skilda användningssätt.

Kommunikation med större dator

En flod av publikationer och rapporter väller i dag fram. Manuell bevakning och genomgång av litteratur blir allt mer mödosam och tidskrävande. Problematiken vid datorbase-
rade system ligger på inmatningssidan¹. Tendensen är här mot internationellt samarbete. Varje land bidrar med kodning och inspelning av de publikationer, som utkommer inom landets gränser. Ett sådant samarbete är redan i funktion på atomenergiområdet under ledning av FN:s atomenergiorgan (IAEA)². På kemisidan distribueras på försök magnetbandsversioner av Chemical Abstracts och Chemical Titles, bl. a. till Biomedicinska Dokumentationscentralen på Karolinska Institutet (BMDC) i Stockholm³.

Inom en icke avlägsen framtid kommer det att vara möjligt att via en terminal och en bildskärm, troligen kompletterad med en lokal dator – kontakta en central databank, där all nyare kemisk litteratur finns lagrad på band. Med hjälp av bildskärmen kan man sedan snabbt få fram önskad information⁴.

Beräkningsarbete

Vid många typer av beräkningsarbete krävs en nära kontakt mellan kemist och datamaskin. Problemets natur kan vara sådant, att många olika modeller måste testas. Vidare kan ofullständiga kunskaper medföra, att en generell beräkningsgång ej går att ta fram på teoretisk väg⁵. Av speciellt intresse för en kemist är den verksamhet som pågår med teoretisk beräkning av kemiska reaktioner⁶. Man startar här med givna molekylmodeller av reaktanterna och söker med hjälp av kvantmekanik beräkna data för den reaktion som leder till bildning av en given produkt. Reaktionsförloppet åskådliggörs i form av molekylorbitaler och energidiagram på en bildskärm.

När kemisten på konventionellt sätt måste anlita en datacentral för sina beräkningar, är han tvungen att syssla med flera problem samtidigt för att vara effektiv trots de oundvikliga väntetiderna. Detta leder ofta till stress och splittring med åtföljande ineffektivitet. Varje problem måste aktualiseras på nytt, när resultaten återkommer från datacentralen. Enligt våra erfarenheter på institutionen för kärnkemi, CTH ökar den enskilde forskarens effektivitet och kreativitet mångdubbelt, om han har ständig tillgång till en dator. Han kan utföra sina beräkning utan avbrott och vid behov ingripa i programmets exekvering.

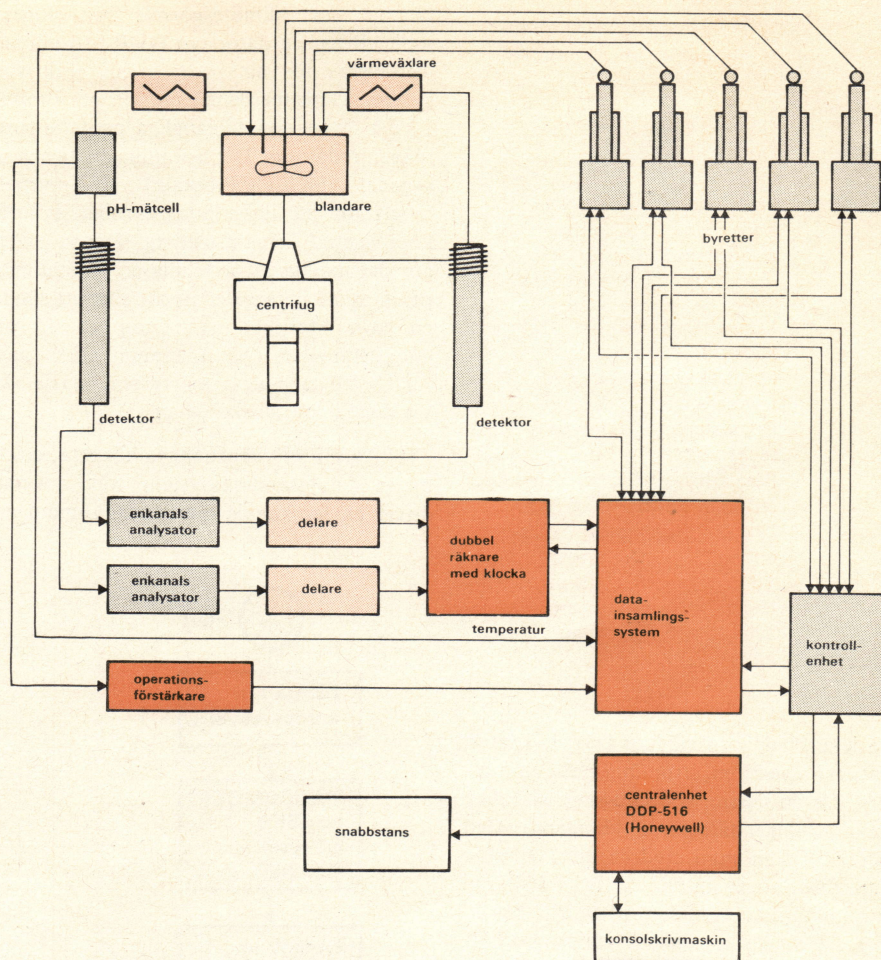


Bild 2. Schematisk bild av AKUFVE med ansluten dator.

Behandling av mätdata

Genom datorns relativt måttliga pris kan den ersätta specialbyggd elektronik för datainsamling, datareduktion, redigering och utskrift i konventionella mätsystem⁷. I dag finner man t. ex. små datorer inbyggda i mångkanalsanalysator⁸, röntgendiffraktometrar⁹, röntgenfluorescensspektrometrar, gaskromatografer¹⁰, IR-spektrofotometrar¹¹ och analysrobotar¹². Ett gemensamt drag hos dessa tillämpningar är att ingen eller minimal styrning av instrumenten utförs. Däremot sker ofta en utvärdering av mätdata före utskrift.

En tendens, som märks är övergång till "read-only" minnen i de maskiner som nyttjas för inbyggnad. Om detta genomförs helt, övergår dessa datorer till avancerade kalkylatorer, då det lagrade programmet ej kan modifieras av maskinen.

Styrning av instrument

Användning av datorer till drift och styrning av instrument är ännu relativt ovanlig. Här närmar man sig de problem, som förekom-

mer vid datorstyrning inom processindustrin. Lämpliga och tillförlitliga givare måste vara inbyggda i instrumentet.

Det måste finnas styrorgan, som är möjliga att ansluta till datorns analoga eller digitala utgångar. De använda styrprogrammen skall ta hänsyn till systemets regleringsegenskaper, så att instabilitet och svängningar undviks. Datorn måste vidare ha tillräcklig snabbhet, så att de nödvändiga beräkningarna kan genomföras innan nya styrsignaler krävs. Slutligen bör mätproblemet vara av sådan natur, att mätinstrumentets funktion eller det undersökta objektet förändras för att önskade resultat skall erhållas.

AKUFVE-systemet

Vid vår institution bedrivs en intensiv forskning på att automatisera studiet av vätskeextraktionsprocesser. Som ett resultat härav har framkommit en anordning kallad AKUFVE (Anordning för Kontinuerlig Undersökning av Fördelningsfaktorer vid Vätske vätske Extraktion). Uppbyggnaden av denna enhet visas schematiskt i bild 1. ►

Tabell 2: Tillgänglig datorutrustning**Typ:**

Honeywell DDP - 516

Centralenhet:

Cykeltid 0,96 μ s.
 Ordlängd 16 bit.
 Fullständig aritmetisk enhet
 (med mult., div., etc.)
 Kärnminne 8192 ord.
 Avbrottsmöjlighet.

Kringutrustning:

Konsolskrivmaskin: Teletype
 ASR 33, 10 tecken/s.
 Remsläsare: Digitronics, 300
 tecken/s.
 Remsstans: Teletype, 110
 tecken/s.
 Radskrivare: Honeywell, 450
 rader/min.
 Digitalt in-ut organ: "SKS-ocp-
 option", 16 ledningar in och
 16 ledningar ut. Dessa är in-
 dividuellt adresserbara. Ingen
 avbrottsmöjlighet via in-led-
 ningarna.

Två icke blandbara vätskor bringas i intim kontakt i blandaren, strömmar ned i en centrifug, där de separeras, och vidare via olika mätanordningar tillbaka till blandaren. Med AKUFVE kan man studera, hur ett visst ämne fördelar sig mellan de två vätskorna som funktion av samtidigt mätta eller beräknade, fysikaliska och kemiska variabler¹³⁻¹⁷.

Vid undersökning av ett system med AKUFVE kan man ändra temperaturen och tillsätta olika reagens för att ändra koncentrationen hos något löst ämne, som förmodas påverka det studerade ämnets fördelning mellan de två faserna. Målet är härvid i allmänhet att ur erhållna mätdata skapa en realistisk modell för det studerade systemet. Detta uppnås endast på ett effektivt sätt, om mätdata, efter hand som de föreligger, nyttjas för testning av ett antal troliga modeller. Med ledning av mellanresultat förändras sedan systemet genom lämpliga reagenstill-satser, så att en effektiv skiljning mellan de olika modellerna erhålles.

Om man ansluter en dator till AKUFVE, kan beräkningarna utföras med nödvändig snabbhet. Systemets uppbyggnad framgår av bild 2. Före ett experiment inmatas lämpliga program och modeller m. m. de båda lösningsmedlen tillförs, och AKUFVE startas. Systemet arbetar sedan automatiskt, tills dess data samlats vilka entydigt (om möjligt) diskriminerar mellan givna alternativ och avslutar med en beräkning av ingående jämviktskonstanter, kinetik samt entalpi- och entropiändringarna för de aktuella reaktionerna. Det beskrivna systemet har provats i en förenklad version under hösten 1969.

AKUFVE-systemet med ansluten dator

Genom stort tillmötesgående från Honeywell AB har en dator typ DDP-516 kunnat disponeras för att prova ovan beskrivna system. Data för denna maskin ges i tabell 2, där även den tillgängliga periferiutrustningen redovisas. Det befintliga digitala in-ut organet (SKS-OCP-option) är normalt avsett för att underlätta styrning av mer komplicerad kringutrustning. Denna enhet gör det möjligt att avkänna en jordslutning på en av 16 ingångsledningar eller att sända en kort styrepuls på någon av 16 utgångsledningar. All kommunikation med AKUFVE och dess mätsystem måste ske via denna spartanska enhet.

Till AKUFVE-utrustningen hör ett specialbyggt datainsamlingssystem som normalt driver en famkanals remsstans. Genom att

nyttja några ingångs- och utgångsledningar från datorn kan den starta och avläsa datainsamlingssystemet. Ytterligare ledningar nyttjas för att styra fem motordrivna kolvbyretter för reagens tillsatser och några dessutom för att avläsa externa tidssignaler från en klocka. Ett "interface", som omvandlar datorns logiska nivåer ("1" = 0V, "0" = +6V) till nivåer anpassade för vår utrustning ("1" = -12V, "0" = 0V) byggdes. Små rutiner för start av mätvärden, stegning av motorbyretter och avläsning av tidssignaler konstruerades. Detta gjorde det möjligt att betrakta dessa funktioner, som om de utförts av därför speciellt avsedda in- och utorgan på datorn. Bild 3 visar en sådan rutin. Exemplet visar, hur elektronik kan bytas mot program på bekostnad av minnesutrymme. Nästa steg var att skriva större rutiner, som på en lägre nivå utförde mätning, höll reda på verklig tid och satsade givna kemikaliemängder. Samtliga nämnda rutiner skrevs i maskinkod.

Rutinerna nyttjades sedan i sin tur som "subrutiner" i ett större Fortran-program anpassat för den aktuella typen av experiment och modell, bild 4.

Vid intrimningen av systemet uppträdde tre problem: Datorn måste simulera den bortkopplade remsstansen utan att påverka datainsamlingssystemets funktion. Detta innebar, att samtliga pulstider måste justeras, så att avläsningen gick med den hastighet som stansen skulle haft. Problemet löstes genom att man lade in justerbara vänteslingor i avläsningsrutinen. Dessa ställdes sedan in med hjälp av oscilloskop och ett speciellt testprogram.

Det andra problemet var att datorn måste uppfatta de externa tidssignalerna under pågående beräkningar, ty via "SKS-OCP-option" var det ej möjligt att erhålla programavbrott. En ställbar vippa anslöts för mellan klocka och ingång. När tidssignalen anlände, ställde denna ut vippan i till-läge. I tidsrutinen testades vippans läge, och om denna var till, nollställdes den, och ett tidsintervall registrerades. I det färdiga Fortran-programmet infördes sedan hopp till tidsrutinen på lämpliga ställen. Dessa var så avpassade, att minst ett hopp gjordes mellan varje tidssignal.

Det tredje problemet var avsaknaden av ett snabbt yttre massminne, varför hela programsystemet måste rymmas i det tillgängliga kärnminnet. Enda sättet att lösa detta var att programmera effektivt och snåla med utrymmet. Efter en del studier av Fortran-kompilatorns arbetssätt och övergång till heltalsaritmetik, där så var möjligt, kunde ett fungerande programsystem passas in i kärnminnet. Det färdiga systemet visas i bild 5.

Vid testkörningar på extraktion av koppar med acetylacetone har systemet fungerat

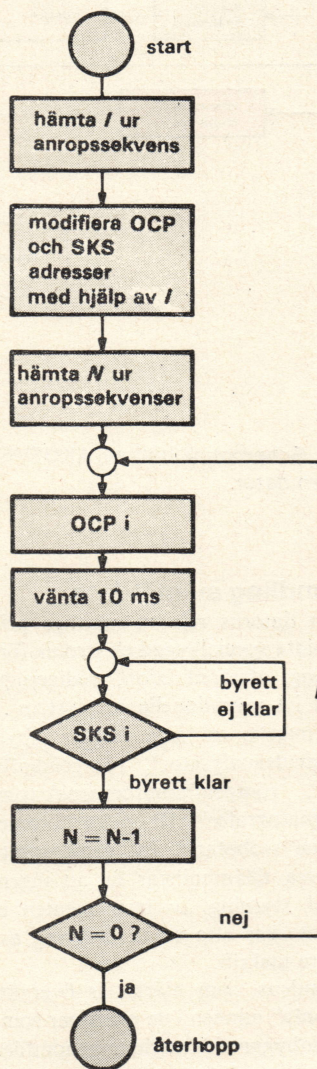
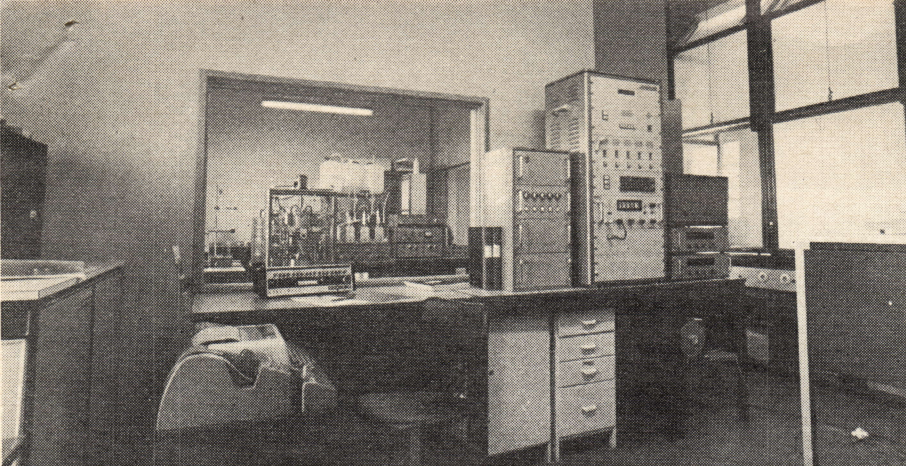
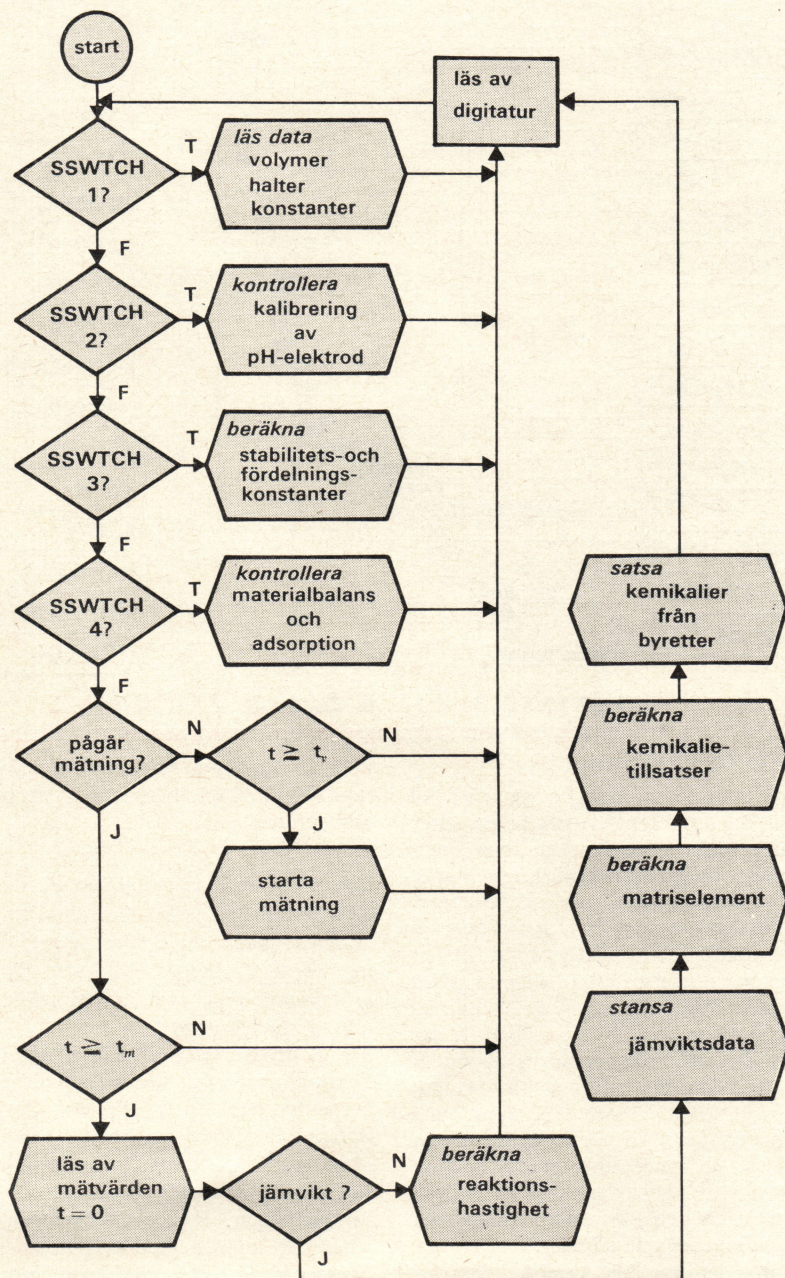


Bild 3. Flödesschema för styrrutin till motorbyretter. *I* är den aktuella byrettens nummer *N* är antalet steg, som byretten ska gå. *OCP i* och *SKS i* instruktionerna matar ut en puls på ledning *i* respektive avskärmar ledning *i*.



▲ Bild 5. AKUFVE med ansluten dator. Fotografiet är taget i anslutning till provkörningen på Cu-HAA-besensystemet. I förgrunden *fr.v.* centralenhet, konsolskrivmaskin, manöverpanel, kontrollenhet, datainsamlingssystem och räknare. Som fönstret syns AKUFVE med sin kringutrustning.

Bild 4. Flödesschema för AKUFVE-program. t är intervalltid t_v väntetid och t_m mättid. ▼



FORTS./SMÅ DATORER

oklanderligt. System av denna typ kan revolutionera hela vätske-extraktionskemin genom att det blir möjligt att på kort tid och med stor noggrannhet undersöka extraktionssystem av såväl teoretiskt kemiskt som industriellt intresse.

Framtidsutveckling

Man kan relativt säkert räkna med att priserna för små datorer kommer att sjunka ytterligare under kommande år, detta speciellt om man i framtiden finner ett billigare snabbminne än dagens ferritkärnor. Kostnaden för minnesenheten kan i dag utgöra nära 75 % av totala kostnaden för centralenheten. Sjunkande priser leder sedan till ökad inbyggd i instrument samt ökad spridning av små datorer för beräknings- och styrningsuppgifter. Användbarheten hos dessa små datorer ökas ytterligare genom den fortgående digitaliseringen på mätinstrumentisidan. Det kommer således med stor säkerhet att bli allt vanligare med små datorer, som nyttjas för skiftande uppgifter inom kemisk forskning och laboratoriearbete.

Litteratur

1. Rydberg, J: Svensk kemisk tidskrift 80:2 (1968)52.
2. El-Hadidy, Ali R: IAEA/SM - 128/26, Wien 1970.
3. Johansson, A, Kallner, A & Marksson, K: Kemisk Tidskrift, 82:4 (1970) 24.
4. Rolling, L: IAEA/SM - 128/52, Wien 1970.
5. Liljenzin, J O: Acta Chem. Scand., under tryckning.
6. Scientific Research, 4:22 (1969) 26.
7. Svensson, L: Display, nr 4 (1969) 6.
8. Hewlett-Packard Sverige AB, Svetsarvägen 7, Fack, 171 20 Solna 1. Models 5405A and 5406A multichannel analyzer systems (broschyr).
9. Pye Unicam Ltd., York Street, Cambridge, CB1 2PX, England (broschyr).
10. Hewlett-Packard Sverige AB, Svetsarvägen 7, Fack, 171 20 Solna 1, GC Data Processing System (broschyr).
11. Block Engineering Inc., 19 Blackstone st. Cambridge, Mass 02139, USA, Digilab (broschyr).
12. AGA:s Analytical Chemistry Robot, Digital Newsletter 2:7 (1970) 6.
13. Rydberg, J: Acta Chem. Scand. 23 (1969) 647.
14. Reinhardt, H & Rydberg, J: Acta Chem. Scand. 23 (1969) 2773.
15. Andersson, C, Andersson, S O, Liljenzin, J O Reinhardt, H & Rydberg, J: Acta Chem. Scand. 23 (1969) 2781.
16. Johansson, H & Rydberg, J: Acta Chem. Scand. 23 (1969) 2797.
17. Reinhardt, H & Rydberg, J: Chemistry and Industry (1969) 488.