CHRISTOPH SCHLIER

Kriterien für die Anwendung der Rechnersteuerung
von Großmeßgeräten

Kriterien für die Anwendung der Rechnersteuerung von Großmeßgeräten

Prof. Dr. Ch. Schlier

Physikalisches Institut der Universität Freiburg

Kriterien für die Anwendung der Rechnersteuerung von Großmeßgeräten*

Prof. Dr. Ch. Schlier

Physikalisches Institut der Universität Freiburg

Obgleich die rechnergesteuerte Automatisierung von Großmeßgeräten der analytischen Chemie in zunehmendem Maße angestrebt wird, befindet sich das rechnergesteuerte Messen gegenwärtig fast überall noch in der Experimentierphase, und auch die kommerziell angebotenen Gerätekombinationen sind noch keine endgültigen Lösungen. In diesem Aufsatz werden die Rechnerfunktionen systematisch untersucht und Kriterien für eine sinnvolle Auswahl und Weiterentwicklung rechnergesteuerter Meßsysteme angegeben.

Rechnergesteuerte Meßsysteme wurden zuerst und am weitesten im Bereich der Kernphysik angewandt. Aber auch in chemischen Laboratorien werden in zunehmendem Maße für analytische Großmeßgeräte, wie Gaschromatographen, Massenspektrometer, optische Spektrometer, Kernresonanz- und Elektronenspinresonanz-Spektrometer, Röntgendiffraktometer usw., direkte Ankopplungen an Rechner aufgebaut, und einige Kombinationen von Meßgeräten und Rechnern sind bereits im Handel. Trotz dieser Existenz von Prototypen befindet sich das rechnergesteuerte Messen gegenwärtig aber durchaus noch in der Experimentierphase, und selbst die kommerziell angebotenen Gerätekombinationen stellen noch keine endgültigen Lösungen dar.

Der Meßvorgang

Um die Teilfunktionen zu erkennen, die eine Rechnersteuerung übernehmen muß, sei zunächst ein normaler handbetriebener Meßvorgang unter besonderer Berücksichtigung des Informationsflusses bei der Messung betrachtet. Damit man überhaupt messen kann, muß zunächst Information in das Meßgerät eingegeben werden: der Netzschalter wird eingeschaltet, die Probe eingeführt, der Empfindlichkeitsschalter betätigt usw., und schließlich wird ein Signal gegeben, das „Messen“ befiehlt. Alle diese Schritte bedeuten eine Steuerung des Meßgerätes durch seinen Bediener.

Das Messen selbst besteht im einfachsten Fall im Ablesen eines Zeigerausschlags und seiner Notierung. Heute wird i. a. die Meßgröße als Funktion einer Steuervariablen gemessen und ausgegeben, z. B. Absorptionsspektren als Funktion der Wellenlänge oder gaschromatographische Intensitäten als Funktion der Retentionszeit (Datenerfassung). Die Menge an Daten, d. h. der Informationsfluß liegt zwischen etwa 100 bit/s bei optischen Spektrometern oder konventionellen Gaschromatographen und momentanen Datenflüssen von einigen Mbit/s bei schneller hochauflösender Massenspektrometrie oder auch Impuls-Kernresonanzspektroskopie (vgl.: Telefonkanal ≈ 2000 bit/s).

Die Verarbeitung der Daten wird sinnvoll in zwei Stufen eingeteilt: in eine Vorstufe der Datenreduktion und in die eigentliche Verarbeitung. Kennzeichen der Datenreduktion soll es sein, daß mit sehr unkomplexen Mitteln ein Teil der Information, die das Meßgerät liefert, weggelassen wird, ohne daß dabei im engeren Sinne viel gerechnet würde (z. B. das Signal eines Gaschromatographen in der Zeit, in der kein Peak kommt oder das Detektorsignal eines IR-Spektrographen während des Wechsels der Probe)¹⁾. Zur Datenverarbeitung gehören alle hierauf folgenden Schritte, anfangen z. B. mit der Bestimmung von Lage und Fläche der Peaks in den Meßkurven, bis zu Aussagen über Art und Menge der zu ermittelnden Substanzen. Formal ist auch dies eine Reduktion der Informationsmenge, es entsteht weniger, aber signifikantere Information, eine Kennzeichnung, die allerdings nicht ohne weiteres durch die Informationstheorie erfaßbar ist. – Schließlich ist noch die Rückkopplung von Teilergebnissen auf den Meßvorgang zu erwähnen, z. B. – im einfachsten Fall – Ausschalten des Gerätes nach der Messung, oder so lange messen, bis eine bestimmte Genauigkeit für eine abgeleitete Größe erreicht ist.

Aufbau eines rechnergesteuerten Systems

In Abb. 1 ist die Struktur eines rechnergesteuerten Meßsystems grob skizziert. Die oberen Blöcke sind Bestandteile des Rechners. Das Zentralwerk ist die oberste Instanz, die für die Verknüpfung von Daten, für das Rechnen, für das Entscheiden und für den Ablauf zuständig ist. Ihm stehen Speicher zur Verfügung, und zwar heute normalerweise ein schnell (in μ s) zugänglicher Kernspeicher und ein langsamer (in 10 bis 100 ms) zugänglicher Platten- oder Trommelspeicher. Der Grund für die Aufteilung ist der hohe Kostenfaktor von 10 bis 100, um den der Kernspeicher teurer ist. Beide Speicher werden von Programmen und Daten gemeinsam benutzt. Über die Eingabe- und Ausgabewege für Daten, die Datenkanäle, laufen die Anweisungen der Bedienungsperson sowie alle Daten, die der Rechner mit dem Meßgerät austauscht. Dieser letztere Austausch läuft über ein Koppelwerk,

* Neubearbeitete Fassung eines Vortrages auf der Dechema-Jahrestagung, 26. und 27. Juni 1969 in Frankfurt/M.

1) Vgl. auch den Beitrag von R. Kaiser, dieses Heft, S. 872.

(„Interface“), das alle die Dinge enthält, die zu speziell sind, um sie in jeden Rechner einzubauen, die aber benötigt werden, damit der Rechner die Information mit dem Meßgerät austauschen kann, z. B. Speicher, Zeitgeber, Analog/Digital-Umsetzer u. ä., aber auch Schaltungen, die schon vor dem Rechner der Datenreduktion dienen, wie etwa Schwellwert-Detektoren. Weitere Anpassungsglieder müssen am Meßgerät selbst angebracht werden, z. B. ein sonst von Hand betätigter Drehknopf wird mit einem Motor versehen, Grenzwertkontakte werden eingebaut oder auch nur Spannungsniveaus einander angepaßt.

Abb. 1. Strukturschema eines rechnergesteuerten Meßsystems. Bei der zentralen Steuerung mehrerer Meßgeräte durch einen Rechner („time-sharing“) sind die Blocks „Bedienung“, „Koppelwerk“ und „Meßgerät“ mehrfach vorhanden.

Die technischen Fragen des Baues eines Interface sind nicht so schwierig, wie meist angenommen wird. Ein bis zwei Dutzend typische Baugruppen, leicht variiert und geeignet kombiniert, dürften für die meisten vorkommenden Fälle ausreichen. Ein Problem entsteht erst dadurch, daß eine bestimmte Funktion der Informationsverarbeitung durchaus an verschiedener Stelle wahrgenommen werden kann und daher verschiedene Interface-Strukturen möglich sind. Ein Beispiel ist das Zählen von Zählrohrimpulsen: Man kann sie z. B. alle einzeln in den Rechner geben, so daß bei jedem Impuls der Rechner kurzzeitig belegt ist. Man kann aber auch im Interface einen Zähler anordnen, der den Datenfluß puffert (was einer Datenreduktion entspricht, da die Zeit des Eintreffens der Impulse nun dem Rechner nicht mehr bekannt ist). Hierbei kann der Zähler entweder nach festen Zeiten abgelesen werden oder nur dann, wenn er „überläuft“.

Es ist leicht ersichtlich, daß diese Fragen auf Optimierungsprobleme hinauslaufen, die allerdings besonders schwierig sind, weil die Optimierung immer auch die sog. „software“, d. h. die Programme mit einschließt, die je nach der verwendeten elektronischen „hardware“-Lösung verschieden sind.

Kriterien für die Rechneranwendung

Bei der Frage nach den Vorteilen der Rechnersteuerung von Großmeßgeräten dürfen zum Vergleich nicht billige, handbediente Geräte, sondern es müssen moderne, auf kon-

ventionelle Art aber hoch automatisierte Apparate herangezogen werden. Gegenüber diesen bedeutet die Rechnersteuerung:

- 1.) Eine Erhöhung des Automatisierungsgrades (weniger Bedienungsaufwand, schnelleres Messen sowie die Ermöglichung komplizierterer Meßprozesse, komplizierterer Algorithmen für die Auswertung und der Integration der Meßergebnisse in allgemeinere „Informationssysteme“).
- 2.) Eine Erniedrigung des Spezialisierungsgrades des Automaten. Sie ist für denjenigen Benutzer am wertvollsten, der selbst programmieren kann. Aber auch im anderen Fall ist ein Vorteil gegeben, denn der Gerätehersteller wird die erworbene Flexibilität dazu verwenden, dem Benutzer viele Meßroutinen anzubieten. Für ihn bedeutet dies ja nicht mehr die Verdrahtung neuer Steuerungen, sondern nur Programmierung²⁾.

Solange die Rechnersteuerung an der Funktion der Meßgeräte und am Ablauf des Meßvorganges nichts ändert, d. h. lediglich vorhandene Regelmechanismen, Datenaufzeichnungen und Methoden der Datenreduktion im Verhältnis 1:1 durch andere – nämlich im Rechner ablaufende – ersetzt werden, solange ist die rechnergesteuerte Automatisierung von Meßgeräten für den Benutzer ziemlich uninteressant. Sie bietet dann Vorteile, wenn gleichzeitig mit der Übertragung eines Teils der alten Funktionen an den Rechner neue zur Verfügung gestellt werden, die das Meßgerät leistungsfähiger machen.

Aufteilung der Funktionen

Das zentrale Problem der Rechneranwendung beim Messen besteht in der optimalen Aufteilung der Einzelschritte auf konventionelle Regelung und Signalverarbeitung, Rechner und Bediener. Dabei berührt die erste Teilfrage, welche konventionellen Regelungen und Signalfade in den Rechner verlegt werden sollen, mehr den Hersteller des Geräts, die zweite Teilfrage, welche Bedienungs- und Auswertefunktionen vom Menschen auf die Maschine übertragen werden sollen, mehr den Benutzer.

Eine Schwierigkeit liegt besonders darin, daß es nicht darum geht, einfach Wunschlisten der vom Rechner zu übernehmenden Funktionen aufzustellen, sondern daß jede gewünschte Funktion mit bestimmten Kosten verbunden ist, und die Frage, ob die Funktion sinnvoll vom Rechner übernommen wird, eine Frage der Ermittlung dieser Kosten und der Bewertung des Nutzens dieser Funktion ist. Selbst Diskussionen unter Wissenschaftlern, die an dem Problem interessiert sind, haben gezeigt, daß ein großer Mangel an Vorstellungsvermögen darüber herrscht, wie schwierig und teuer es ist, diese oder jene Aufgabe von einem Kleinrechner durchführen zu lassen. Hierzu einige Beispiele:

- 1.) Die benutzten Rechner sind Digitalrechner, sie verkehren mit Analogsignalquellen und Analogsteuerungen (wozu fast alle Datenquellen und -steuerungen in Meß-
- 2) Ob man mit den Programmprodukten der Hersteller gegenwärtig zufrieden ist, steht auf einem anderen Blatt. Jeder, der heute rechnergesteuerte Meßgeräte benutzt, sollte selbst programmieren können.

geräten gehören) nur über Umwandler. Diese wird man einsetzen, wo es nötig ist, doch dabei stets versuchen, unnötige Analogsignale zu vermeiden. Man wird vor allem nicht alle Regelkreise über den Rechner laufen lassen, u. a. deshalb, weil der Informationsfluß in üblichen Regelkreisen ganz erheblich ist³⁾ und den Rechner unnötig belasten würde. Auf der anderen Seite ist der Rechner sehr leistungsfähig bei digitalen Rechenoperationen, wofür er ja gebaut ist, z. B. bei der Subtraktion von Untergrund, der Normierung auf ein Vergleichssignal, der Bildung von Mittelwerten, dem Anbringen von Korrekturen an Meßwerte und dem Integrieren über Zeit- oder Parameterbereiche, Dinge, die man i. a. weder einer Analogschaltung noch dem Menschen überlassen sollte. — Auch bei Steuerungen gibt es digitale Funktionen, die dem Rechner sehr leicht fallen, es ist z. B. eine Kleinigkeit, ein Dutzend Schalter für eine Empfindlichkeitsumschaltung durch den Rechner einzusetzen.

2.) Die Datenspeicherung im Rechner ist relativ billig, besonders wenn das Minimum erreicht ist, von dem ab es sich lohnt, Plattenspeicher zu verwenden. Der Rechner kann gut mit Tabellen umgehen. Man kann also bei der Datenverarbeitung sowohl mehr Daten gemeinsam verarbeiten, da sie „gleichzeitig“ zugänglich sind, als auch mehr externe Daten in den Verarbeitungsprozeß einfließen lassen. D. h., man kann z. B. zehnmal messen und dann erst auswerten, statt zehnmal auszuwerten und dann nachträglich zu mitteln, und man kann leichter komplizierte, empirische oder mathematisch vorgegebene Korrekturen bei der Auswertung berücksichtigen als bei konventionellen Automaten.

3.) Die Daten können benutzergerechter ausgegeben werden. Zwar sind Ausgabegeräte nicht besonders billig, aber sie sind standardisiert und stehen für jeden Rechner in großer Auswahl zu Verfügung.

4.) Ein hoher Aufwand relativ zum Nutzen ist stets dann erforderlich, wenn man selten zu bedienende Funktionen durch den Rechner wahrnehmen läßt (z. B. Betätigen des Netzschalters oder Justiervorgänge). Hier wird man überlegen müssen, wie oft z. B. justiert werden muß, ob nicht sowieso ein Bediener dabei sein muß, oder ob man bei automatischer Justierung etwa die ganze Handbedienung einsparen kann.

5.) Die Frage der Abgrenzung von maschineller Datenverarbeitung und menschlicher Auswertung ist nicht leicht zu beantworten, wenn man von einfachen Operationen, wie sie oben erwähnt wurden, absieht. Denn trotz allem Optimismus der Computerenthusiasten ist der Rechner dem Menschen (und zwar nicht nur dem Spezialisten) in all den Dingen sehr unterlegen, bei denen es um Gestalterkennen (pattern-recognition), Strukturerkennen, Erfinden und Anwenden von Lösungsstrategien sowie Berücksichtigen von Erfahrung und Nebenumständen geht. Dies bedeutet nicht, daß es für den Rechner hier bestimmte Grenzen gibt, sondern zunächst nur, daß diese Dinge mit einem ungewöhnlich hohen Aufwand an Programmierarbeit und meist auch Rechnergröße verbunden sind und in

systematischer Form heute noch keineswegs gelöst sind. So kann z. B. selbst der kleine Rechner Peaks in Gaschromatogrammen und Spektrogrammen erkennen. Auch die Auswertung überlappter Peaks dürfte bei hohem Signal/Rausch-Verhältnis möglich sein. Macht man dieses jedoch etwas kleiner als gewöhnlich, wird die Aufgabe bereits schwierig, und die Erfahrungen haben gezeigt, daß unter diesen Umständen das Ideal, die Meßkurven „untouched by human hands“ bis in die publikationsreife Zeichnung zu übertragen, noch weit von einer Verwirklichung entfernt ist. — Meßverfahren, die zu Routinemessungen benutzt werden, fallen allerdings selten in diese Kategorie; denn für Routinemessungen sind überhaupt nur die Verfahren geeignet, die ein hohes Signal/Rausch-Verhältnis haben, und bei denen aufgrund der vielen Einzeldaten ein einzelner Fehler nicht ins Gewicht fällt. Hier wird man auch auf die Auswertung zweifelhafter Doppelpeaks, von Peaks, die kaum aus dem Rauschen herauskommen usw., von vornherein verzichten.

Auswahl des Rechners

Die Rechnerauswahl wird dadurch erschwert, daß sie bei den heute verfügbaren rechnergesteuerten Meßgeräten, die alle noch Experimentiercharakter haben, weitgehend von den Aufgaben beeinflusst wird, die der Rechner „sonst noch“ erfüllen soll⁴⁾. Darunter mögen gewisse, sehr weitgehende Auswertungen fallen, etwa die Berechnung von NMR-Spektren eines Moleküls mit anschließender Anpassung der Parameter eines theoretischen Modells, aber auch völlig isolierte Aufgaben, wie z. B. eine HMO-Rechnung eines theoretischen Chemikers im gleichen Institut oder Betrieb. Solche „Nebenforderungen“, die leicht zur Hauptforderung werden, müssen in jedem Einzelfall diskutiert werden.

In Laboratorien mit mehreren Großmeßgeräten stellt sich weiterhin die Frage nach der Steuerung durch mehrere Einzelrechner („dedicated computer“) oder einen Zentralrechner („time-sharing“)⁵⁾. Für die „time-sharing“-Ideologie spricht am meisten die Tatsache, daß ein großer Rechner manche Probleme lösen kann, für die ein Kleinrechner überhaupt nicht geeignet ist. Weiterhin spricht dafür das „sharing“ von Eingabe/Ausgabe-Geräten und Speichern, die Kostendegression für komplexe Operationen (z. B. Gleitkomma), die im Kleinrechner über Unterprogramme abgewickelt werden müssen, und schließlich die i. a. einfachere Programmierung. Gegen Großrechner als Meßgerätesteuerung spricht zunächst, daß ein einfacher Datentransport oder eine Addition in solchen Rechnern 10- bis 20mal mehr kostet als in einem Kleinrechner⁶⁾. Hinzu kommen die Allgemerkosten großer Betriebssysteme und nicht zuletzt der Kostensprung, wenn Raumklimatisierung

4) Wenn nicht überhaupt die Firmenpolitik die Rechnerauswahl diktiert.

5) Vgl. auch den Beitrag von H. Günzler, dieses Heft, S. 877.

6) Rechnet man die Kosten der Zentraleinheit allein, so ergeben sich für 10⁹ Operationen vom Typ Addition für Kleinrechner (z. B. Varian 620/i) 0,50 DM, für mittlere Rechner (z. B. IBM 360/44) ca. 3,— DM, für Großrechner (z. B. Univac 1108) ca. 12,— DM.

3) Ein stabilisiertes Netzgerät mittlerer Güte hat in seinem Regelkreis einen größeren Informationsfluß als eine Telefonleitung.

erforderlich wird. — Letztlich hat jedoch die Alternative Einzelrechner/Zentralrechner gar nicht die Ausschließlichkeit, mit der sie oft diskutiert wird. Selbstverständlich wird man in einem Laboratorium mit z. B. 20 Gaschromatographen ähnlicher Bauart heute nicht für jeden einen Einzelrechner aufstellen, da bei dem geringen Datenfluß solcher Geräte schon ein Kleinrechner im „time-sharing“-Betrieb zu arbeiten vermag. Trotzdem kann man einem hochauflösenden Massenspektrometer aufgrund der hohen Organisationskosten für das gleichzeitige Messen, der Störanfälligkeit und des vorläufigen Charakters heutiger Lösungen einen anderen Rechner zuteilen.

Es ist zu erwarten, daß das rechnergesteuerte Laboratorium der Zukunft sich auf Hierarchien von Rechnern stützen wird, die durch direkte, nicht notwendig sehr schnelle Datenleitungen verbunden sind. Das wird einerseits die Entwicklung integrierter rechnergesteuerter Großmeßgeräte erlauben, deren Rechnerteil in vernünftigem Kostenverhältnis zum Meßgerät steht, andererseits braucht der Benutzer nicht auf die Datenendverarbeitung mit Großrechnern zu verzichten. Im folgenden sei daher nur noch auf Eigenschaften eingegangen, die ein kleiner, optimal einem oder wenigen Meßgeräten angepaßter Rechner haben muß:

1.) Die Wortlänge des Rechners ist wichtig, weil jedes bit Geld kostet, sowohl für die Speicherung wie für die Verarbeitung. Meßdaten haben selten mehr als 3 bis 4 Dezimalen, d. h. 10 bis 14 bit Genauigkeit. Die heute üblichen Wortlängen von 16 oder 18 bit erscheinen daher dem Problem angepaßt.

2.) Die Rechengeschwindigkeit der heutigen Kleinrechner liegt bei 1 bis 2 μ s pro Kernspeichertakt, wobei ein Datentransport meist zwei Takte dauert. Das ist für die Datenflüsse, wie sie die meisten Meßgeräte liefern, bei weitem ausreichend.

3.) Die Zahl der Befehle eines Rechners ist zwar schwierig genau festzustellen, qualitative Vergleiche sind jedoch möglich. Man sollte Rechnern mit zu magerer Befehlsstruktur mit Vorsicht begegnen, da sie nicht nur langsamer arbeiten, sondern auch mehr Programmspeicherplatz brauchen.

4.) Zu den Kosten tragen nicht unerheblich die Peripheriegeräte bei, sobald man einmal über den üblichen Fernschreiber hinausgeht. Die Kosten für das Minimalsystem werden durch solche Anforderungen leicht verdoppelt, gerade hier lohnen sich also Kostenvergleiche.

5.) Die Frage, wie leicht ein Rechner programmiert werden kann, d. h. die „software“, wird meist unterschätzt. Sie ist um so wichtiger, je mehr der Benutzer die große Flexibilität, die ihm ein rechnergesteuertes Meßgerät zur Verfügung stellt, selbst ausnutzen will, je weniger es sich also um festgelegte Routinen handelt.

Oft wird das Problem beim rechnergesteuerten Messen in der Koppelung des Rechners an das Meßgerät gesehen. Die Fragen des Interface, der „hardware“, sind jedoch schnell gelöst im Vergleich zu der Entwicklung leistungsfähiger Programme. Die Rationalisierungsmöglichkeiten sind auf dem Gebiet der Programmierung erheblich größer

als auf dem der Elektronik, wobei die Kosten oft fälschlicherweise als Rechnerkosten auftreten, da schlechte Programme häufig einen größeren Rechner erforderlich machen, als eigentlich nötig wäre.

Schlußfolgerungen

In diesem Aufsatz wurde versucht, Gesichtspunkte herauszustellen, unter denen die rechnergesteuerte Automatisierung von Großmeßgeräten der analytischen Chemie und anderer Bereiche sinnvoll erscheint. Daß sie technisch heute möglich ist, steht außer Zweifel. Wirtschaftlich ist sie vermutlich nur unter folgenden Bedingungen:

- 1.) Man stellt nicht ad hoc Kombinationen von Rechner und Meßgerät zusammen, sondern führt die in diesem Aufsatz skizzierte Systemanalyse für jeden Gerätetyp detailliert durch.
- 2.) Man automatisiert so weit, daß die Messungen ohne ständige Eingriffe ablaufen und dem Experimentator weitgehend reduzierte Daten übergeben werden.
- 3.) Die Aufgabe, schon heute das „totale“ Analytiklabor-Informationssystem bauen zu wollen, sollte vorerst den wenigen Gruppen vorbehalten bleiben, die bereit sind, sich hoch zu engagieren, und bei denen Wirtschaftlichkeitsfragen zunächst keine übergeordnete Bedeutung haben.

Die Wirtschaftlichkeit, wie sie hier verstanden wird, muß sich allerdings nicht unbedingt in Kostenersparnis äußern. Die wichtigste Erwartung, die man an das rechnergesteuerte Messen stellen darf, ist die Erhöhung von Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Meßdaten.

Anhang: „Fragebogen“ zum rechnergesteuerten Messen

Wenn es auch am günstigsten erscheint, daß rechnergesteuerte Meßsysteme von Fachleuten entworfen werden, die sowohl die nötigen Kenntnisse auf dem Rechnergebiet haben als auch die entsprechenden Meßgeräte genau kennen, so muß dies doch angesichts der heutigen Ausbildungssituation meist nur ein Wunsch bleiben. Um den Dialog zwischen dem Meßgeräteentwickler und dem Rechnerspezialisten zu erleichtern, sind im folgenden Fragen aufgeführt, die der Rechnerfachmann stellen muß, bevor er mehr als intuitiv-pauschale Urteile über nötige Rechnergrößen, Peripheriegeräte und Interfaces abgeben kann. Der Übergang vom konventionellen zum rechnergesteuerten Messen wurde dabei in vier Stufen fortschreitender Automatisierung aufgeteilt:

Stufe I:

Anschluß des Meßgeräts an den Rechner ohne weitere Veränderungen am Meßgerät. (Dies ist nur als vorläufige Lösung zu empfehlen, vgl. S. 868.)

- 1) Welche „Detektoren“ müssen mit dem Rechner verbunden werden,
 - a) Analogsignale (Information = Amplitudenwerte)?
 - b) Digitalsignale (Impulsfolgen, Information = Momentanfrequenz)?
- 2) Charakterisierung des Informationsflusses im Fall 1a):
 - a) zur Auswertung benötigtes Frequenzband;
 - b) Abfragefrequenz;
 - c) Spannungs- oder Strombereich des Signals, Quellwiderstand;
 - d) Genauigkeit der Digitalisierung (nicht besser als das erwartete Rauschen machen!);
 - e) falls die Information schubweise erscheint: Länge des Schubs und der Pausen.

- 3) Charakterisierung des Informationsflusses im Fall 1b):
 - a) maximale Impulsfrequenz (minimaler Impulsabstand);
 - b) Länge der Summationsintervalle für eine „Einzelablesung“;
 - c) mittlere Impulsfrequenz;
 - d) Zahl der signifikanten Stellen (benötigte Genauigkeit) der Impulszahlen (nicht besser als das Rauschen machen!);
 - e) falls die Information schubweise erscheint: Länge der Schübe und der Pausen;
 - f) Form der Impulse (Amplitude, Steilheit, Länge, Standardisierungsgrad, Quellwiderstand).
- 4) Sonstige Ablesungen: Welche sonstigen Einstellungen des Meßgeräts sollen automatisch abgelesen und bei der Auswertung berücksichtigt oder protokolliert werden? Für jede solche Größe ist anzugeben:
 - a) Art des Meßwertumformers;
 - b) Art des Signals: analog, digital seriell (Impulse), digital parallel;
 - c) Abfragefrequenz;
 - d) Charakterisierung des Signals nach Spannungsbereich (Strombereich) bzw. Impulsform; Quellwiderstand;
 - e) benötigte Genauigkeit.
- 5) Zeitliche Korrelation von „Einzelmessungen“ [d. h. Abfragezeitpunkten im Fall 1a), Meßintervallanfang und -ende im Fall 1b)]: müssen hier Bedingungen eingehalten werden (z. B. Gleichzeitigkeit der Ablesung mehrerer Detektoren) und wenn ja, wie genau? In Frage kommen Zeitbeziehungen von:
 - a) mehreren „Detektoren“ (Meßkanälen) untereinander;
 - b) „Detektoren“ im Verhältnis zu einem „Stimulus“ (Startsignal);
 - c) „Detektoren“ im Verhältnis zur Tageszeit;
 - d) „Detektoren“ im Verhältnis zu sonstigen Ablesungen nach Punkt 4);
 - e) „sonstige Ablesungen“ untereinander und zur Tageszeit.

Für unkritische zeitliche Korrelationen, die durch Ordnungsbeziehungen (Reihenfolgen) beschrieben werden können, vgl. Punkt 9e).

- 6) Steuerung durch den Rechner: Welche Größen (Einstellungen) des Meßgeräts müssen in Ablauf der Messung a) mechanisch verstellt oder b) elektrisch verändert werden?
- 7) Für mechanisch zu verstellende Größen gebe man an:
 - a) Art des Stellgliedes (Magnet, Stellmotor, Schrittmotor, Servosystem);
 - b) für Ein/Aus-Verstellungen: Häufigkeit, maximale Schaltzeit, geforderte zeitliche Genauigkeit, elektrische Leistung;
 - c) für die Einstellung stetiger Größen: Stellbereich, Genauigkeit, Auflösung, Stellgeschwindigkeit (wenn bekannt: Strom/Spannungs- und Frequenz-Charakteristik der Motoren);
 - d) ist mit der Verstellung eine Rückmeldung verbunden? Wenn ja: Bei Ein/Aus-Verstellungen: Art der Rückmeldung; bei stetigen Verstellungen: Angaben wie Punkt 4);
 - e) zeitliche Lage der Verstellungen relativ zum Meßprozeß, besonders: „während“ desselben (dann Angaben analog 5d) und 5e) erforderlich) oder in den „Pausen“ der Messung?
 - f) sind nach Verstellungen Wartezeiten nötig?
- 8) Für elektrische Steuersignale gebe man an:
 - a) Spannungsbereich, Strombelastung, Genauigkeit, Auflösung, Frequenzbereich;
 - b) muß das Steuersignal dauernd oder nur zeitweilig anliegen? Im zweiten Fall: Häufigkeit, Dauer?
- 9) Zeitliche Struktur einer „unvollständigen Messung“. Unter einer solchen sei ein Meßvorgang verstanden, der so vollständig ist, daß die erzeugte Information einen selbständigen Sinn hat. Der Unterbegriff ist „Einzelmessung“ oder „Einzelablesung“, der Oberbegriff „Meßreihe“.
 - a) Besteht die Messung aus der einmaligen Aufnahme einer Funktion $y(x)$ oder $y(t)$ oder werden solche Einzelmessungen wiederholt und gemittelt?
 - b) Wieviele Punkte enthält die zu messende Funktion y , welchen zeitlichen Abstand haben sie?

- c) Bei Mittelung: Wie oft, welche Pausen zwischen zwei Einzelabläufen?
- d) Werden Glättungsprozeduren benutzt?
- e) Werden die „sonstigen Ablesungen“ (Punkt 4)) sofort zur Datenreduktion benutzt? Wie sieht dann deren zeitliche Einordnung aus [vgl. 5a)]?
- f) Wo liegt der Taktgeber für die ganze Messung: im Rechner oder im Meßgerät?

- 10) Speicherung der „vollständigen Messungen“:
 - a) Welche Daten enthält eine vollständige Messung?
 - b) Welche Protokolldaten gehören zu einer ganzen Gruppe von solchen Messungen?
 - c) Können die Daten einer vollständigen Messung weiter reduziert werden, ohne daß die wichtige Information verloren geht?
 - d) Wie werden die Daten zu 10a, b gespeichert oder ausgegeben?
 - e) Wieviel muß insgesamt gespeichert werden?
 - f) Bei Weiterverarbeitung im gleichen Rechner: Geschieht diese während oder vor der nächsten Messung? Welche Algorithmen? Was wird schließlich ausgegeben, welcher Datenträger?
 - g) Kann der Datenfluß uninteressanter Daten in den Rechner hinein schon vor diesem durch einfache Maßnahmen reduziert werden (z. B. Peak-Detektor, Unterbrechung der Datenspeicherung in vorher bekannten Parameterbereichen)?
- 11) Gedankenexperiment: Man stelle sich das Meßgerät unsichtbar im Nebenraum vor, es sei zur Messung vorbereitet, und man will eine Messung von Anfang bis Ende durchführen, ohne den Raum zu verlassen, indem man einen Laien beauftragt, bestimmte (numerierte) Knöpfe zu drehen, Hebel umzulegen und Instrumente abzulesen. Ist alles, was zu und von der Bedienungsperson übermittelt wird in den Punkten 1) bis 10) berücksichtigt?

Stufe II:

Soll auch die Justierung und Eichung des Meßgeräts über den Rechner laufen? Das ist u. U. sehr vorteilhaft. Welche zusätzlichen Knöpfe, Hebel, Verstellungen, Ablesungen, Signale müssen noch berücksichtigt werden? Man mache Angaben zu Stufe I, Punkte 1) bis 10).

Stufe III:

Optimierung durch Veränderungen am Meßgerät: Die Kopplung des unveränderten Meßgeräts mit dem Rechner enthält in vielen Fällen redundante Bausteine (z. B. Digitalsignal/Analogsignal/ Digitalsignal oder Aktuator plus Rückmeldung, obwohl die Rückmeldung im nicht automatisierten Gerät nur wegen des Vergessens, nicht wegen der Unzuverlässigkeit notwendig war). Solche Meß- und Steuerkanäle lassen sich meist vereinfachen. Dasselbe gilt für die Elimination von überflüssiger Genauigkeit und z. B. den Ersatz von Regelkreisen im Gerät durch Korrekturen am Meßergebnis. Bei jedem Baublock des Meßgeräts ist zu fragen, ob er jetzt noch nötig ist.

Stufe IV:

Optimierung durch Verändern der Meßmethode: Die Geschwindigkeit, mit welcher der Rechner Steuersignale verändert und Meßdaten abspeichert, erlaubt oft Veränderungen der Meßmethode, die bei gleichem Aufwand mehr Genauigkeit (besseres Signal/Rausch-Verhältnis) liefern oder den Aufwand reduzieren lassen. Beispiele: zeitliche Verschränkung der Messung zu verschiedenen Parametern, stroboskopische Methoden, kompliziertere Gerätesteuerung, erfolgsabhängige Meßdauer.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft sei auch hier für die Unterstützung unserer Arbeiten gedankt.

Eingegangen am 26. Mai 1970 [B 2948]

Literatur

Auf dem behandeltem Gebiet gibt es bisher kaum systematische Untersuchungen. Einige wenige findet man noch am ehesten in den Computer and Control Abstracts unter den Überschriften 75.63 (Control Applications: Chemical and Oil Refining Industries), 75.90 (Other Control Applications), besonders 75.94 (Physical Instruments) und schließlich 88.10 (Other Computer Applications: Natural Sciences). – Folgende Bücher bringen eine Einführung in die rechnerische Seite des Themas (keines davon befaßt sich jedoch direkt mit dem rechnergesteuerten Messen; man sollte aber die Analogien zur Prozeßsteuerung durch Rechner nicht unterschätzen):

S. Dworatschek, Einführung in die Datenverarbeitung, Walter de Gruyter & Co., Berlin 1969.
C. W. Gear, Computer Organization and Programming, McGraw Hill Book Comp., New York 1969.
M. Klerer, G. A. Korn, Digital Computer Users Handbook, McGraw Hill Book Comp., New York 1967.
A. Schöne, Prozeßrechnersysteme der Verfahrensindustrie, Carl Hanser Verlag, München 1969.
G. Böhme, W. Born, Programmierung von Prozeßrechnern, Friedr. Vieweg & Sohn GmbH, Braunschweig 1968.

R. Pankalla, Aufbau und Einsatz von Prozeßrechenanlagen, Friedr. Vieweg & Sohn GmbH, Braunschweig 1968.

H. Hotes, Digitalrechner in technischen Prozessen, Walter de Gruyter & Co., Berlin 1967.

Die ausführlichste dem Verf. bekannte Sammlung von Einzelarbeiten ist in Band 13, Heft 1 [1969] des IBM Journal of Research and Development enthalten; man wird allerdings dem dort demonstrierten Zug zum Großrechnersystem skeptisch gegenüberstehen dürfen. Weitere Arbeiten:

J. R. Spinrad, Science [Washington] 158, 55 [1967].

H. M. Gladney, J. Comp. Phys. 2, 255–73 [1968].

Ch. Schlier, Meßtechnik 76, 147, 216 [1968].

R. A. Hites, K. Biemann, Advances in Mass Spectrometry IV (*E. Kendrick* ed.), Institute of Petroleum, London 1968.

G. J. Wasserburg, D. A. Papanastassion, E. V. Nenow, C. A. Bauman, Rev. sci. Instruments 40, 288 [1969].

H. Cole, Y. Okaya, F. W. Chambers, Rev. sci. Instruments 34, 872 [1963].

M. C. Seed, R. L. Beddoes, Elektron. Datenverarbeitg. 11, 433 [1969].

Schließlich sei auf eine internationale Diskussionsgruppe: Computer in Analytical Chemistry, verwiesen; näheres in Chromatographia 1, 48 [1970].