

Für den Theoretiker dagegen ist der direkte Zugang zu einer Rechenanlage bereits selbstverständliche Voraussetzung für ein erfolgreiches Arbeiten geworden.

Den folgenden Fortschrittsberichten seien einige Bemerkungen vorangestellt:

Die Berichte sind keineswegs nur für den Fachmann geschrieben worden. Auch der mit der Datenverarbeitung nicht vertraute Chemiker sollte sich für diese Probleme interessieren; selbst wenn er Details überliest, wird ihm schnell klar werden, welche Möglichkeiten sich eröffnen. Gewisse Wiederholungen ließen sich nicht vermeiden. An die hauptsächlich aus dem Englischen stammende Computerterminologie muß man sich gewöhnen. Einige Fachausdrücke sind in einem Anhang erklärt.

Abschließend ist eine Warnung angebracht. Die uns heute zur Verfügung stehenden Methoden der experimentellen Analytik können sehr leicht dazu verleiten, mit riesigem Aufwand Probleme bearbeiten und lösen zu wollen, die den Aufwand im Hinblick auf den tatsächlichen Erkenntniswert in keiner Weise rechtfertigen. Schnell kann es zu Überlastungen des analytischen Apparates kommen, ohne daß wirklich Neues erarbeitet wird. Mehr denn je ist eine kritische Beurteilung und Auswahl der mit diesen großartigen Hilfsmitteln zu bearbeitenden Probleme vonnöten. In der Begeisterung über unsere heutigen Möglichkeiten sollten wir schließlich denen unsere Reverenz erweisen, die ohne dieses Potential, d.h. vor 1952, hervorragende Leistungen erbracht haben.

Eingegangen am 18. November 1971 [A 865]

## Computersysteme für die chemische Forschung

Von Engelbert Ziegler, Dieter Henneberg und Gerhard Schomburg<sup>[\*]</sup>

### 1. Einleitung

Wie in nahezu alle Bereiche unseres Alltags sind elektronische Digitalrechner auch in den Bereich der chemischen Forschung eingedrungen. Denkt man an die ersten Erfolge von *Corey* und *Wipke*<sup>[1]</sup>, die ein Computersystem zur Aufindung und Optimierung von Synthesewegen in der präparativen Chemie einsetzen, oder an die Entwicklung von Dokumentationssystemen für die chemische Literatur oder für Molekülspektren, so läßt sich erahnen, welche neuen Möglichkeiten dem Chemiker durch den verstärkten Einsatz von Computern in der Zukunft noch geboten werden und welche Auswirkungen auf den chemischen Arbeitsstil möglich sind.

Im folgenden soll jedoch weniger ein Bild der zukünftigen Entwicklung gezeichnet als vielmehr eine kurze Übersicht über die derzeitigen Einsatzbereiche von Digitalrechnern in der chemischen Forschung und über die dabei verwendeten Computersysteme gegeben werden. Sodann wird das am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim/Ruhr aufgebaute System beschrieben.

### 2. Einsatzbereiche in der chemischen Forschung

Die derzeit in der chemischen Forschung üblichen Anwendungen von Digitalrechnern lassen sich in zwei Einsatzbereiche unterteilen:

#### 1. Rechenaufgaben („Off-line“-Betrieb) und

#### 2. Kopplung von analytischen Meßgeräten mit einem Rechnersystem („On-line“-Betrieb).

##### 2.1. Off-line-Anwendungen

Im Off-line-Betrieb werden Rechenprobleme aus der theoretischen Chemie, meist solche, die bei den verschiedensten Verfahren der MO-Theorie auftreten, sowie Probleme aus der Reaktionskinetik gelöst. Ferner fallen in diesen Bereich auch Rechnungen nach Programmen aller Art aus dem umfangreichen Gebiet der Spektroskopie und der Analytik sowie der Literatur- und Spektrendokumentation.

Viele dieser Rechenprogramme stellen hohe Ansprüche an die Leistungsfähigkeit und Kapazität eines Rechners. Als typische Anforderung kann eine Kernspeicherkapazität von 32 K Worten zu 36 (oder mindestens 32) Bits gelten. Außerdem ist der hohe Rechenzeitbedarf charakteristisch für derartige Off-line-Programme. Rechenzeiten von einer Stunde und mehr (bezogen auf den „Standard“ IBM 7094) sind durchaus keine Seltenheit. (Besonders rechenintensiv sind z.B. Auswertprogramme für die Röntgen-Strukturanalyse.) Ein weiteres Charakteristikum der meisten dieser Programme (Ausnahme: Dokumentationssysteme) ist der relativ geringe Anteil von Ein- und Ausgabeoperationen.

Sofern die Programme ausgetestet sind und Wartezeiten („turnaround“-Zeiten) von mehreren Stunden bis zu einigen Tagen in Kauf genommen werden können, eignen sie sich für den konventionellen „Batch“-Betrieb, in dem die Programme nacheinander abgearbeitet werden.

Für kleinere Hilfsrechnungen aller Art, wie sie in der täglichen Laborroutine anfallen können, ist jedoch ein schneller Zugang zum Rechner und eine ebenso schnelle Ergeb-

[\*] Dr. E. Ziegler, Dr. D. Henneberg und Dr. G. Schomburg  
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung  
433 Mülheim/Ruhr, Kaiser-Wilhelm-Platz 1

nismeldung wünschenswert. Eine im Laboratorium aufgestellte Ein-/Ausgabeschreibmaschine („Teletype“), die mit einem Computer verbunden ist, fördert den Rechneinsatz für derartige Aufgabenstellungen erheblich.

## 2.2. On-line-Anwendungen

Ein völlig andersartiger Einsatzbereich eines Computers ist die Echtzeiterfassung von Meßdaten aus direkt angeschlossenen analytischen Meßgeräten. Die Meßdaten fallen entweder unmittelbar in digitaler Form an, oder – und das sehr viel häufiger – als analoge Meßwerte, üblicherweise elektrische Spannungen. Zur Verarbeitung durch den Computer muß diese Meßspannung zunächst mit einem Analog/Digital-Wandler (A/D-Wandler) digitalisiert werden. Zwischen A/D-Wandler und Computer befindet sich eine elektronische Anpassungseinheit, das „Interface“.

Man könnte sich auf den Standpunkt stellen, daß es unerheblich ist, ob an den Computer ein Kartenleser, ein Magnetband oder ein A/D-Wandler angeschlossen ist. In dieser Sicht wäre das Interface zu einem analytischen Meßgerät eben nur eine zusätzliche periphere Einheit in einem normalen Computersystem, wie es für die vorher besprochenen Off-line-Programme verwendet wird.

Während jedoch konventionelle Peripheriegeräte wie Magnetbänder oder Lochkartenleser Daten in den Rechner abgeben, wann und wie das Programm es bestimmt, müssen die Meßdaten eines Analysengerätes zu Zeitpunkten vom Rechner empfangen werden, die das jeweilige Experiment bestimmt (Echtzeit-Datenerfassung).

Die typischen Anforderungen an ein On-line-System sind nicht spezifizierbar, ohne auf die jeweilige Aufgabenstellung näher einzugehen. Der Aufbau eines On-line-Systems wird wesentlich bestimmt durch:

Datenrate (zu registrierende Meßpunkte pro Sekunde)

Datenmenge (Anzahl der Meßpunkte)

Genauigkeit der Meßwerte

Geforderte Echtzeit-Datenreduktion

Ausmaß an Echtzeit-Rückmeldungen und -Steuerung („Closed-loop“-Operationen)

Anzahl gleichzeitig zu bedienender analytischer Methoden

Anzahl gleichzeitig zu bedienender gleichartiger Analysengeräte

Ab- und Zwischenspeicherung von Daten

Kompliziertheit der Datenauswertung

Art und Geschwindigkeit von Parametereingabe und Ergebnisausgabe

Erforderliche Flexibilität von Hardware und Software

Häufigkeit der Änderungen von Problemstellungen

Grad der geforderten Betriebszuverlässigkeit

Vorhandene Laborstruktur und Ausmaß einer eventuell notwendigen Umorganisation

Verfügbare finanzielle Mittel für Anschaffung und Unterhalt

Verfügbares Personal.

Zur Hardware eines On-line-Systems zählen neben dem Computer üblicherweise ein A/D-Wandler, eine Echtzeituhr als externer Taktgeber sowie Relais- und -ausgänge zur Registrierung und Steuerung von Start-Stop-Vorgängen. In fast allen Fällen ist ein peripherer Datenspeicher (vorzugsweise Platte oder Band) unentbehrlich. Closed-loop-Systeme benötigen oft auch einen D/A-Wandler.

## 3. On-line-Systeme für die Analytik

Spektroskopische und analytische Meßgeräte sind bis jetzt ständig verbessert worden; zugleich wurden sie meist auch komplizierter und teurer. Der Direktanschluß dieser Meßgeräte an einen Digitalrechner ist ein weiterer Schritt in dieser Richtung. Für die betroffenen Analytiker und Spektroskopiker jedoch ist dieser Schritt keineswegs unproblematisch. Einerseits bieten sich ihnen verlockende neue Möglichkeiten, andererseits sehen sie sich einem für sie neuen und vielfältig komplizierten Sachgebiet konfrontiert. Da überdies die Anschaffungskosten für ein On-line-System mindestens so hoch sind wie für ein analytisches Großgerät, sollte man sich die Installation eines solchen Computersystems besonders gründlich überlegen. Deshalb seien hier für die „Computerisierung“ analytischer Meßgeräte einige Argumente aufgezählt, deren Gewichte von den spezifischen Gegebenheiten eines Labors abhängen und für den Einzelfall diskutiert werden müssen:

Erhöhung der Analysengenauigkeit

Beschleunigung der Auswertung

Erhöhung des Analysendurchsatzes

Gewinnung von mehr Information

Durchführung neuartiger Experimente

Experimentsteuerung

Aufbereitung von Spektren für Dokumentationszwecke

Einsparung von Personal

Überwachung des Personals.

Die Vielfalt der auf dem Markt befindlichen Meßgeräte, die von Labor zu Labor sehr unterschiedlichen Problemstellungen, die differierenden Organisationsformen der analytischen Arbeit und schließlich die große Anzahl in Frage kommender Computertypen haben die Entwicklung von vielen sehr unterschiedlichen On-line-Systemen verursacht. Die meisten der bisher bekannten Systeme lassen sich in eine der folgenden Kategorien einordnen:

1. Einzelmethodensysteme („dedicated“ Systeme)

2. Mehrmethodensysteme

3. Gemischte Systeme (off-line und on-line) ohne Satellitenrechner und mit solchen.

Die Einsatzbereiche dieser drei Kategorien von On-line-Systemen sind in Tabelle 1 zusammengefaßt. Ihre wesentlichen Charakteristiken werden im folgenden kurz beschrieben.

Tabelle 1. Einsatzbereiche der Typen von On-line-Systemen.

System	Aufwand	besonders geeignet für	typische Umgebung
<b>Einzelmethodensysteme</b> 1. ein Gerät pro Rechner	Kleinrechner, 4–8 K	Gerätesteuerung, schnelle Datenerfassung, Langzeitexperimente	weitgehend unabhängig vom Labortyp
2. Mehrzwecksysteme	Kleinrechner, 4–8 K	alternativen Anschluß an eines von mehreren Geräten	Forschungslabor (Universität)
3. mehrere gleichartige Geräte pro Rechner	kleiner bis mittelgroßer Rechner, 8–16 K	langsame Datenerfassung, einfache Auswertung, beschränkte Gerätesteuerung	Routinelabor (Industrie)
<b>Mehrmetho­densysteme</b> (kleiner oder mittelgroßer Rechner)	meist mittelgroßer Rechner, 8–16 K		Routinelabor mit praktisch unveränderter Problemstellung
<b>Gemischte Systeme</b> (mit konversationellem Time-Sharing-Betrieb)	großer Rechner, 32 K, umfangreiche Peripherie	Echtzeit-Datenerfassung, Bewältigung großer Datenmengen, komplizierte Auswerteverfahren, beschränkte Steuerungsfunktion, Off-line-Rechnungen im Dialogverkehr	Forschungs- und Industrielabors mit vielen analytischen Methoden
<b>Satellitensysteme</b> (mit dedicated Satelliten)	großer Rechner, 48 K, mehrere Kleinrechner, umfangreiche Peripherie, evtl. komplizierte Datenübertragung	Gerätesteuerung, viele Geräte mit hohen Datenraten, komplizierte Auswerteverfahren, Off-line-Rechnungen	große Institutionen mit breiter Skala von analytischen Methoden, Großrechenzentren mit einigen Echtzeitanwendungen

### 3.1. Einzelmethodensysteme (dedicated Systeme)

Zu dieser Gruppe zählen Computersysteme, die entweder ein einzelnes Meßinstrument oder mehrere gleichartige Geräte (etwa eine Gruppe von Gaschromatographen) bedienen. Wesentlich ist, daß der Rechner mit einem einheitlichen Programmsystem („Software“) arbeitet.

#### 3.1.1. Computersystem für ein einzelnes Meßgerät

Meßgeräte für schnell ablaufende physikalische Vorgänge (z. B. ein Fourier-Transform-NMR-Spektrometer oder ein Schnell-Scan-Massenspektrometer) erzeugen in kurzer Zeit sehr viele digitalisierte Meßwerte (Datenraten im kHz-Bereich), die vom Rechner erfaßt und weiterverarbeitet oder abgespeichert werden müssen. Zu den hohen Datenraten kommen oft noch komplizierte Auswertprogramme. Deshalb kann für Geräte mit solchen Anforderungen ein eigener Kleinrechner notwendig sein.

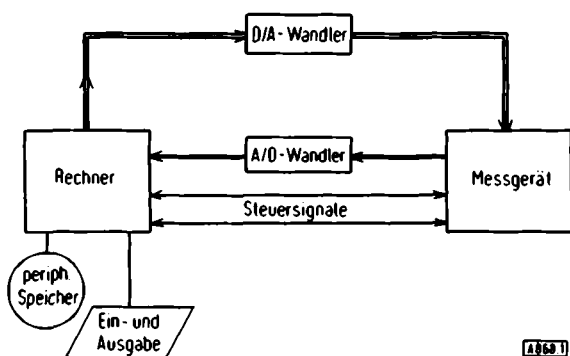


Abb. 1. Blockschema eines Einzelmethodensystems (dedicated Systems), bei dem ein Rechner für die Datenerfassung und zur Steuerung eines einzelnen analytischen Meßgerätes benutzt wird.

Einzelgerät-Computersysteme (Abb. 1) können den Erfordernissen des jeweiligen Meßgerätes optimal angepaßt werden und eignen sich daher besonders für Experimente, die viele Rücksteuerungsoperationen des Computers erfor-

dern, wie etwa die computergesteuerten Einkristall-Diffraktometer. Bei dieser letzteren Anwendung kommt hinzu, daß sich eine Messung gewöhnlich über mehrere Tage hinzieht und deshalb eine besondere Systemzuverlässigkeit verlangt, die komplizierte Computersysteme meist nicht aufweisen.

Vom wirtschaftlichen Standpunkt sind derartige On-line-Systeme derzeit noch sehr ungünstig; der Computer samt Peripherie und Interface ist in der Regel teurer als das Meßinstrument selbst. Allerdings zeichnet sich die Entwicklung „integrierter“ Meßinstrumente ab, bei denen die Computer-Hardware als integraler Bestandteil des Instruments über dessen Bauelemente verteilt ist. Dies erfordert allerdings eine völlige Neukonstruktion der konventionellen analytischen Meßinstrumente. Solche Geräte mit „eingebautem“ Computer brauchen als Folge der steten Weiterentwicklung und Verbilligung der Bauelemente nicht unbedingt teurer zu sein als die jetzigen Instrumente ohne Computer.

#### 3.1.2. Mehrere gleichartige Geräte an einem System

Aus wirtschaftlichen Gründen wird man vorerst noch versuchen, mit einem Computer möglichst viele Meßgeräte gleichzeitig zu bedienen (Abb. 2). Handelt es sich um gleich-

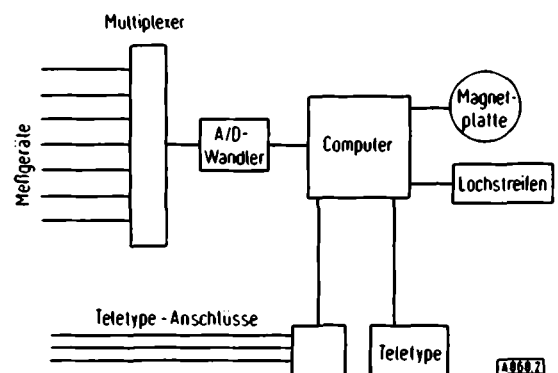


Abb. 2. Über einen Multiplexer sind die Meßausgänge mehrerer gleichartiger Meßgeräte mit einem Rechner verbunden.

artige Geräte, etwa um eine Anzahl von Gaschromatographen, so gelingt dies auch noch relativ einfach, da alle Geräte mit dem gleichen Programmsystem arbeiten, also Datenerfassungsroutinen und Auswertprogramme nur einmal im Rechner vorhanden sein müssen.

### 3.2. Mehrmethodensysteme

Sind verschiedenartige Meßgeräte (z. B. Gaschromatographen neben IR-, NMR- oder Massenspektrometern) an das gleiche Computersystem zur gleichzeitigen Bedienung angeschlossen, so sind für die Messungen nach jeder der Methoden unterschiedliche Auswertprogramme und oft auch unterschiedliche Datenerfassungsprogramme erforderlich. Dazu wird ein Betriebsprogramm („Monitor“) benötigt, das den zeitlichen Ablauf regelt, also die Rechenzeit der Zentraleinheit abwechselnd an die Programme vergibt.

Um während der Datenverarbeitung auch noch die Daten aktiver Meßgeräte erfassen zu können, muß der Rechner über ein „Interruptsystem“ mit mehreren Prioritätsebenen verfügen. Mit diesem System kann eine externe Echtzeituhr durch einen elektronischen Impuls das gerade laufende Programm im Rechner unterbrechen. Auf einen solchen „Interrupt“ hin entscheidet das Betriebsprogramm, welches Gerät für die Erfassung eines Meßwerts an der Reihe ist, schaltet den Multiplexer auf den entsprechenden Kanal und startet die A/D-Umwandlung. Bis zu deren Vollendung (die wiederum durch einen „Interrupt“ signalisiert wird) kann der Rechner zum vorher unterbrochenen Programm zurückkehren oder auch auf ein anderes Programm überwechseln.

Der Programmieraufwand für ein solches Mehrmethodensystem ist recht erheblich. Die nebeneinander laufenden Messungen müssen in bezug auf Kernspeicherbedarf, externe Speicherbelegung, Datenraten und Rechenzeiten aufeinander abgestimmt sein.

Die Programmpflege (Beseitigung von Programmierfehlern, programmtechnische Verbesserungen, Einbau neuer Auswertalgorithmen) kann in solchen Systemen zu einem ernsthaften Problem werden. Nur relativ große, „komfortable“ Rechner verhindern bei der Änderung eines Programms eine Beeinflussung (z. B. durch fehlerhaftes Programmieren) von parallel laufenden Programmen. Alle Programmänderungen müssen deshalb oft recht mühsam am Gesamtsystem ausgetestet werden. Je mehr verschiedenartige Meßgeräte aber gleichzeitig an das Computersystem angeschlossen sind, desto häufiger werden derartige Änderungen, die dann den Gesamtbetrieb erheblich stören.

Aus diesem Grunde sind Mehrmethodensysteme in Verbindung mit kleinen oder mittelgroßen Rechnern insbesondere für Forschungslaboratorien mit häufig wechselnden Problemstellungen sehr schlecht geeignet. Für manche Routinelabors in der Industrie, die über längere Zeit hinweg mit einem Satz ausgetesteter Programme ohne Programmänderungen arbeiten können, mögen derartige Systeme jedoch brauchbar sein.

Der Vorteil eines Mehrmethodensystems gegenüber mehreren Einzelmetho-

den peripheren Einheiten (die deshalb etwas großzügiger ausgelegt werden können) wird nur je ein Exemplar benötigt.

### 3.3. Gemischte Systeme (On-line- und Off-line-Verarbeitung simultan)

Wenn ein Computersystem nicht nur mehrere direkt angeschlossene analytische Instrumente bedient, sondern gleichzeitig auch noch ein oder mehrere Off-line-Programme („Hintergrund-Verarbeitung“) rechnet, so handelt es sich um ein „gemischtes System“.

Soll ein derartiges System wirkungsvoll arbeiten, so ist ein leistungsfähiger Zentralrechner erforderlich, dessen Hardware überdies die einzelnen Programme hundertprozentig gegeneinander absichert. Da sich unter den Off-line-Programmen in der Regel ein beachtlicher Anteil noch nicht voll ausgetesteter und deshalb potentiell fehlerhafter Programme befinden wird, ist ein derartiger Programmschutz unentbehrlich.

Ein gemischtes System bietet den Vorteil, daß die meist umfangreiche Peripherie eines großen Rechners wie Zeilendrucker, Kartenleser, Magnetplatten und -bänder auch den On-line-Benutzern Möglichkeiten bietet, die ein Kleinrechnersystem nicht aufweist.

Manche gemischten Systeme verwenden neben dem großen Zentralrechner eine Reihe untergeordneter Kleinrechner („Satelliten“) für die Erfassung der Meßdaten von den angeschlossenen analytischen Geräten und für eine Vorverarbeitung dieser Meßdaten. Der Zentralrechner kann durch Satelliten insbesondere von den reinen „Buchführungsaufgaben“ entlastet werden und braucht sich nur noch mit den rechenintensiven Auswertarbeiten zu befassen.

Eine Abart eines Satellitensystems ist das „Multi-Mini“-System, bei dem als Zentralrechner ein Kleinrechner eingesetzt wird (möglichst vom gleichen Typ wie die Satelliten) oder auf einen Zentralrechner ganz verzichtet wird. Im letzteren Fall sind die „dedicated“ Kleinrechner netzwerkartig miteinander verbunden. Das Fehlen eines leistungsfähigen Zentralrechners erfordert allerdings den Verzicht auf rechenintensivere Verarbeitungsprogramme. Außerdem kann das Betriebssystem eines zentralen Kleinrechners, das den Datenverkehr zu den Satelliten organisieren muß, naturgemäß nicht so flexibel und leistungsfähig ausgelegt werden, wie dies bei einem Großrechner möglich ist.

Für eine allgemeine Diskussion der Vor- und Nachteile eines gemischten Systems wird auf Abschnitt 4 verwiesen, in dem das „Mülheimer Computersystem“, das als ein typisches gemischtes System gelten kann, beschrieben wird.

### 3.4. Failsafe-Systeme

Die Computerisierung der Meßgeräte macht die analytischen Laboratorien in hohem Maße vom Computer abhängig. Je mehr Geräte an ein System angeschlossen sind, desto unangenehmer ist deshalb ein Zusammenbruch des Systems.

Die sicherste Maßnahme gegen derartige „Katastrophen“ wäre ein identisches Zweitsystem, das parallel zum ersten System die gleichen Meßdaten verarbeitet. Ein derartiger Aufwand dürfte in der Regel aber nur für manche zur Fabrikationskontrolle eingesetzte Prozeßrechenanlagen zu rechtfertigen sein. In diesem Fall wird man selbstverständlich versuchen, das zu duplizierende System so klein wie möglich zu halten.

Für die computerisierten Experimente im Bereich der chemischen Forschung ist keine derart hohe Betriebssicherheit erforderlich. Deshalb reicht eine Teilsicherung – gegen die schlimmsten Ausfälle – schon aus.

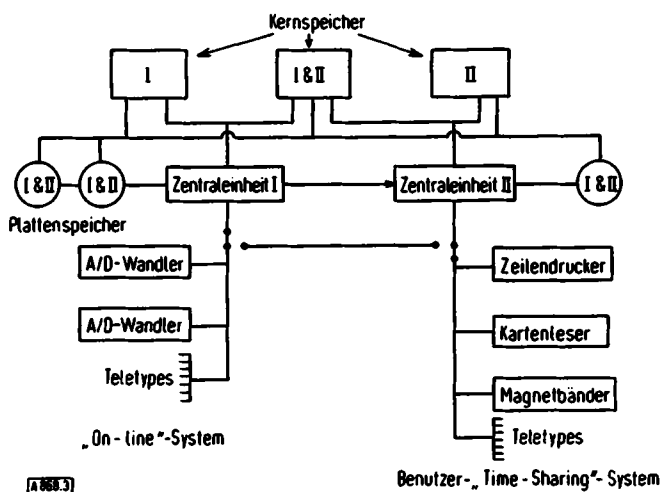


Abb. 3. Failsafe-System bei der Firma Du Pont. Bei Ausfall der mit der Echtzeit-Verarbeitung betrauten Zentraleinheit I werden deren Aufgaben von der Einheit II übernommen.

Interessant ist in diesem Zusammenhang ein Failsafe-System, das bei der Firma Du Pont, Experimental Station, Wilmington (USA), aufgebaut wird<sup>[\*]</sup>. Dieses System besteht aus zwei gekoppelten (PDP10-)Zentraleinheiten. Normalerweise dient eine davon ausschließlich der Echtzeiterfassung der Daten von den analytischen Instrumenten, während die andere zur Auswertung der Echtzeit-Daten und zum Rechnen von Off-line-Programmen eingesetzt wird (Abb. 3). Ein Teil des Kernspeichers und einige periphere Einheiten sind beiden Zentraleinheiten gemeinsam zugänglich. Fällt die für die Echtzeit-Datenerfassung zuständige Zentraleinheit aus, so übernimmt die andere Zentraleinheit selbsttätig deren Aufgaben.

#### 4. Das „Mülheimer Computersystem“

##### 4.1. Computer-Einsatzbereiche am Max-Planck-Institut in Mülheim/Ruhr

Am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung einschließlich Abteilung Strahlenchemie in Mülheim/Ruhr sind die meisten der in der chemischen Forschung möglichen Einsatzbereiche für Computer vertreten. Zu den Off-line-Aufbestellungen gehören Programme zur

[\*] Dr. E. A. Abrahamson, Dr. J. Fok und Dr. J. Read, Wilmington, persönliche Mitteilung.

Röntgen-Strukturanalyse

MO-Theorie

Reaktionskinetik

Simulation und Iteration von Spektren

Auswertung von Spektren

Spektrendokumentation

Literaturdokumentation

Unterstützung der Institutsverwaltung.

Dazu kommen noch kleinere Hilfsprogramme aller Art.

Die umfangreichen spektroskopischen, analytischen und physikalisch-chemischen Laboratorien des Instituts verfügen über eine große Anzahl analytischer Meßinstrumente, von denen einige möglichst direkt an einen Computer angeschlossen sein sollten (augenblicklicher Stand siehe Abschnitt 4.6):

##### 1. „Langsame“ Meßgeräte (Datenraten ca. 20 Hz):

20–30 Gaschromatographen

1 Massenspektrometer

2–3 NMR-Geräte

1 IR-Spektrometer

1 Ramanspektrometer

1 ESR-Gerät

1 Spektralanalysator.

##### 2. „Schnelle“ Meßgeräte (Datenraten 1 bis 20 kHz):

2 niedrigauflösende Schnellscan-Massenspektrometer

1 Impuls-NMR-Gerät.

Als 1967 die Anschaffung eines oder mehrerer Computersysteme für alle diese Einsatzbereiche zur Debatte stand, boten sich dem Institut zwei Alternativen:

1. Die Anschaffung eines mittelgroßen bis großen Rechners, der im Batch-Betrieb für alle Off-line-Rechenprobleme eingesetzt wird, ergänzt durch eine Reihe von Kleinrechnern zum Aufbau mehrerer dedicated On-line-Systeme für die analytischen Meßinstrumente.

2. Die Anschaffung eines einzigen, dafür etwas leistungsfähigeren Rechners, der sowohl Hardware als auch Software für ein „multiprogramming time-sharing“-System besaß und der einen simultanen Off-line- und On-line-Betrieb zuließ.

#### 4.2. Hardware-Konfiguration der PDP 10-Rechenanlage

Aus finanziellen und organisatorischen Gründen entschied man sich damals für die zweite Möglichkeit:

Im Dezember 1968 wurde der erste Teil einer PDP 10-Anlage<sup>[\*\*]</sup> in Betrieb genommen, im April und September 1969 wurde die für die On-line-Anwendungen benötigte zusätzliche Hardware installiert, und im Juli 1970 wurde das System um 32 K Kernspeicher und eine Magnetplatteneinheit erweitert. Die derzeitige Systemkonfiguration ist in Abbildung 4 skizziert.

[\*\*] Hersteller: Digital Equipment Corporation, Maynard, Mass. (USA).

Die Hardware der PDP10-Zentraleinheit umfaßt 366 Maschinenbefehle (darunter Gleitkomma- und Byte-Instruktionen), ein Interruptsystem mit sieben Prioritätsebenen sowie Speicherschutz-Register. Die derzeitige Kernspeicherkapazität beträgt 64 K Worte zu je 36 Bits. Zwei Kanäle für schnelle Übermittlung von Daten

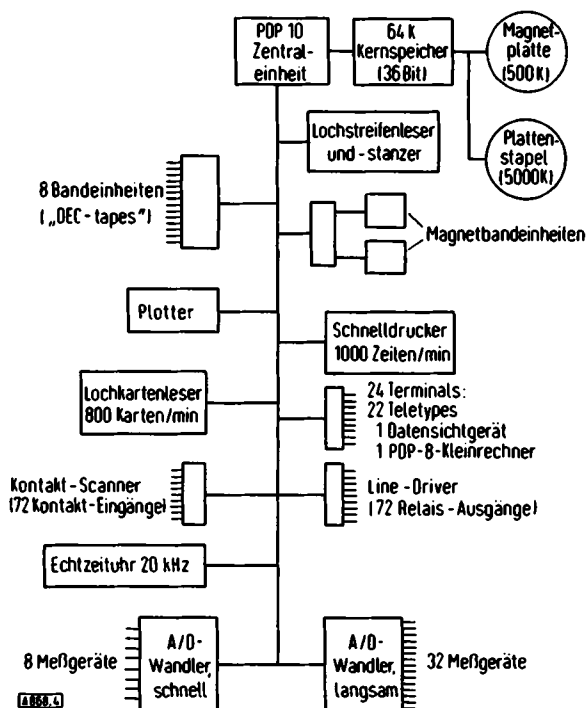


Abb. 4. Hardware-Konfiguration der PDP10-Rechenanlage am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim/Ruhr.

verbinden den Kernspeicher mit einer Festkopf-Magnetplatte (mittlere Zugriffszeit 17 ms, Übertragungsgeschwindigkeit 77 K Worte/s, Kapazität 500 K Worte) und einem Plattenstapel (mittlere Zugriffszeit 60 ms, Übertragungsgeschwindigkeit 62 K Worte/s, Kapazität 5000 K Worte). Ein Teil der Festkopfplatte wird zur kurzzeitigen Aufnahme von Kernspeicherabbildern laufender Programme benutzt („Swapping“-Betrieb), wenn der Kernspeicher nicht ausreicht, um alle parallel laufenden Programme aufzunehmen. Der weitaus größte Teil der Plattenkapazität dient jedoch der Speicherung von Programmen und Daten.

Als weitere periphere Einheiten sind Schnelldrucker, Lochkartenleser, Magnetbandeneinheiten, Plotter, Lochstreifenleser und -stanzer sowie 22 Ein-/Ausgabeschreibmaschinen („Teletypes“) als Benutzerstationen im Time-Sharing-Betrieb vorhanden.

Als Interface zwischen Computersystem und den direkt angeschlossenen analytischen Meßinstrumenten dienen einige spezielle Einheiten: Über eine Multiplexereinheit können bis zu 32 „langsame“ Meßgeräte mit einem leistungsfähigen Analog/Digital-Wandler verbunden werden. Dieser A/D-Wandler arbeitet mit 13 Bit Auflösung in elf Verstärkungsbereichen und überstreicht damit einen dynamischen Bereich von nahezu  $10^7$ . Die Gesamtdatenrate beträgt bei automatischer Bereichsselektion 3.3 kHz.

Für die „schnellen“ Meßinstrumente wird ein weiterer A/D-Wandler benutzt, der mit Datenraten zwischen 1.25 und 20 kHz arbeiten kann. Die Auflösung beträgt 10 Bit, der dynamische Bereich  $2.5 \cdot 10^5$ , unterteilt in drei Verstärkungsbereiche. Über einen Multiplexer können bis zu acht Meßinstrumente an diesen A/D-Wandler angeschlossen werden. Um jedoch den normalen Time-Sharing-Betrieb und die gleichzeitige Datenerfassung von den „langsamen“ Meßgeräten nicht zu stören, darf nur jeweils eines der acht möglichen „schnellen“ Instrumente aktiv sein. Wegen der kurzen Registrierzeiten von ca. 2–3 Sekunden eines derartigen Meßinstruments bedeutet diese Einschränkung keine ernsthafte Behinderung.

Der Takt der Datennahme wird durch eine Echtzeitzuhr (Quarzoszillator für 20 kHz) über einen Zähler für jeden der beiden A/D-Wandler gegeben.

72 Kontakteingänge und eben so viele Relaisausgänge erlauben es, das Schließen und Öffnen externer Stromkreise zu erkennen bzw. ermöglichen es, externe Relais durch den Rechner zu öffnen und zu schließen. Damit erkennt das Betriebssystem Start- und Stopbefehle für die Echtzeit-Datenerfassung und kann seinerseits externe Vorgänge steuern. Nicht zeitlinear registrierende Meßgeräte wie IR-Spektrometer können den Zeitpunkt jeder einzelnen A/D-Umwandlung dem Betriebssystem durch Schließen eines externen Kontakts anmelden.

#### 4.3. Die Time-Sharing-Betriebsweise

In der derzeitigen Version des Betriebssystems können bis zu 23 „Jobs“ gleichzeitig abgewickelt werden. Die Jobs werden von den Benutzern von den im Hause verteilten Teletype-Stationen aus zu beliebigen Zeiten initialisiert und kontrollieren den Ablauf von je einem Programm, das

STATUS OF MUELHEIM 4572R.1A4 AT 15:21:50 ON 03-SEP-70

UPTIME 165:01:50, 54% NULL TIME = IDLE+LOST = 51% + 3%

JOB	WHO	WHERE	WHAT	SIZE	STATE	RUNTIME
1	***	DET	SEL DAT	2K	SL	00:04:59
2	***	DET	MSDAT	4K	SL	00:00:00
3	1,2	TTY26	ORGANI	1K	SL	00:36:42
4	13,33	TTY17	ADSTAT	4K	TC SW	00:05:04
5	56,102	TTY11	PIP	1K	TT	00:00:42
6	5,21	TTY7	SYSTAT	2K	RN	00:00:15
7	11,30	TTY15	TECU	2K	TT	00:07:12
8	11,30	TTY1	REFREP	11K	TT	00:04:13
9	13,33	TTY5	TECO	2K	TT SW	00:00:48
10	150,45	TTY2	PIP	1K	ID	00:01:39
11	200,202	TTY6	TECU	2K	TT	00:00:01
12	11,30	CTY	PARAM	6K	TT	00:00:00
13	5,14	TTY4	ADSTAT	4K	TT SW	00:00:00
14	***	DET	OPFILE	3K	TC SW	00:00:38
15	40,63	TTY16	HEY11	8K	TT	00:01:17
16	***	DET	HIP	4K	TC SW	00:00:49
18	22,40	TTY10	NMRCAT	8K	TC SW	00:00:02

[A8885]

Abb. 5. „Momentaufnahme“ des Zustands der gleichzeitig bearbeiteten Jobs im „Mülheimer System“: SELDAT (Job 1) ist das Datenerfassungsprogramm für die „langsamen“ On-line-Instrumente, MSDAT (Job 2) das Datenerfassungs- und Vorreduktionsprogramm für das Massenspektrometer; ORGANI ist ein Kontrollprogramm, das mehrere Programme initialisiert; REFREP (Job 8) erzeugt Ausdrucke von Gaschromatogrammen; PARAM (Job 12) wird zur Eingabe von Parametern für On-line-Läufe „langsamer“ Instrumente benutzt; NMRCAT (Job 18) ist ein Time-Averaging-Programm für NMR-Spektren.

der Benutzer durch Eintippen eines Befehls am Teletype gestartet hat. Auch die Eingabedaten können am Teletype eingetippt und die Ergebnisse ausgeschrieben werden. (Selbstverständlich lassen sich auch beliebige andere periphere Einheiten zur Datenein- und -ausgabe benutzen.)

Die an den Teletypes eingetippten Befehle werden vom Betriebssystem interpretiert. Letzteres bestimmt auch die Verteilung der Rechenzeit der Zentraleinheit, die Zuteilung des Kernspeichers und die Zuordnung der peripheren Einheiten zu den einzelnen Jobs. Immer, wenn ein Job mit Ein- und Ausgabeoperationen – über eine der sieben Prioritätsebenen des Interruptsystems – beginnt, oder nach Ablauf der zugeteilten Rechenzeit („time slices“ von 0.5 bis 2 Sekunden), sucht das Betriebssystem nach einem anderen Job, der dann über die Rechenzeit der Zentraleinheit verfügen kann. In Abbildung 5 ist eine repräsentative „Momentaufnahme“ des Computerbetriebes dargestellt.

Die Time-Sharing-Betriebsweise erlaubt einen regelrechten Dialog zwischen einem Rechenprogramm und seinem Benutzer. In Abbildung 6 ist als Beispiel eines solchen Dialogs die Eingabe von Parametern in einem Zeichenprogramm dargestellt. Erläuterungen und Warnungen für ungeübte Benutzer sind im Programm vorgesehen.

```
R DATPLT
ANSCHLUSSNR.: 15
EIN DATENSATZ FUER ANSCHLUSS 15 VORHANDEN!
ANSCHLUSSNR.: 14
(-ANFANGS- UND ENDWERT: ?
INFANG UND ENDE DES GEWUNSCHTEN AUSSCHNITTS MUESSEN DURCH
DIE DAZUGEHÖRIGEN PUNKTNUMMERN SPEZIFIZIERT WERDEN.
SOLL DIE GESAMTE MESSKURVE GEZEICHNET WERDEN, SO GENUEGT
:IN <CR>.
(-ANFANGS- UND ENDWERT: 1000,3000
DEHNUNG (PUNKTE/ZOLL): 5
WARNUNG! DIE ZEICHNUNG WIRD 10.16 M LANG! OK?: NEIN
DEHNUNG (PUNKTE/ZOLL): 100
MAXIMALAMPLITUDE (ZOLL): ?
DIE NUTZBARE ZEICHENHOEHE BETRAEGT 10 ZOLL.
FUER BELIEBIGE DEHNUNGEN KOENNEN JEDOCH AUCH GROESSERE
AMPLITUEDEN ANGEZEICHNET WERDEN.
MAXIMALAMPLITUDE (ZOLL): 20
TEXT: DEMONSTRATION
```

Abb. 6. Beispiel eines programmierten Dialogs: Ein Benutzer startet durch Eintippen des Befehls „R DATPLT“ ein Programm zur Plotter-Darstellung eines on-line registrierten Spektrums und spezifiziert im Dialog mit dem Programm die benötigten Parameter. (Zur Verdeutlichung sind alle Benutzereingaben unterstrichen.)

Der Wissenschaftler, der über ein an seinem Arbeitsplatz aufgestelltes Teletype unmittelbaren Zugang zum Rechner und den dort gespeicherten, abfragbaren Datenbanken hat, kann den Rechner als immer verfügbares Denkhilfsmittel („Denkzeug“) benutzen, so wie er auf niedrigerer Ebene einen Rechenschieber oder ein Tabellenwerk gebraucht.

#### 4.4. Organisation der Echtzeit-Datenerfassung

Der dynamische Time-Sharing-Betrieb ermöglicht den simultanen Ablauf von On-line- und Off-line-Anwendungen. Für die Echtzeit-Datenerfassung werden ein gemeinsamer Datenjob für alle „langsamen“ Meßgeräte und je ein Datenjob für jedes aktive „schnelle“ Meßgerät benötigt. Es handelt sich hierbei um Programme, die im wesentlichen Datenpuffer für die einzelnen Meßgeräte enthalten. Die einzelnen Daten werden vom Rechner auf einer der Interruptsebenen eingelesen, so daß laufende Programme nur jeweils für mehrere Mikrosekunden unterbrochen werden. Solange Meßgeräte aktiv Daten übertragen, müssen die dazugehörigen Datenjobs im Kernspeicher bleiben, dürfen also nicht im Rahmen des Swapping-Betriebs kurzzeitig auf den Plattenspeicher abgeschoben werden. In dieser Hinsicht und in einer etwas bevorzugten Behandlung bei der Zuteilung von Rechenzeit unterscheiden sich die Datenjobs von den anderen Benutzerprogrammen.

Für die „langsamen“ Meßgeräte werden die Meßdaten ohne jede Vorverarbeitung pufferweise auf den Plattenspeicher übertragen, wo separate Datensätze für jedes Meßgerät angelegt werden. Für die „schnellen“ Massenspektrometer dagegen wird in der Regel vom Datenjob bereits eine Datenvorreduzierung vorgenommen; nur die reduzierten Daten gelangen auf den Plattenspeicher.

Nach dem Stopbefehl werden die zu einem Meßgerät gehörenden Daten von Analysenprogrammen (die als getrennte Jobs laufen) weiterverarbeitet. Benutzen mehrere Meßgeräte (z. B. eine Gruppe von Chromatographen) das gleiche Analysenprogramm, so kann dieses Programm so initialisiert werden, daß es in regelmäßigen Zeitabständen für alle in Frage kommenden Meßgeräte nachkontrolliert, ob ein Meßlauf zu Ende gegangen ist, und dann selbsttätig die Auswertung durchführt. (Zur detaillierten Beschreibung der Software-Organisation siehe<sup>[2, 31]</sup>.)

#### 4.5. Flexibilität des Systems

Das Time-Sharing-System erlaubt eine sehr flexible, stufenweise Auswertung der Meßdaten. Ein Auswerteprogramm kann in Dialogform angelegt sein, so daß der Benutzer Zwischenergebnisse am Teletype mitgeteilt erhält und über den weiteren Ablauf einer Auswertung befragt wird. Die einzelnen Stufen der Auswertung können auch mit mehreren nacheinander aufrufbaren Programmen durchgeführt werden. Je nach Zwischenergebnis kann sich der Benutzer beliebig für die weiterhin zu benutzenden Programme entscheiden. Beispielsweise können für ein Molekülspektrum je nach dem Ergebnis des Experiments Glättungsverfahren, Verfahren zur Auflösungsverbesserung, Signalsuchalgorithmen usw. in beliebiger Abfolge herangezogen werden. Die Freiheit des Benutzers wird dabei in keiner Weise durch andere Benutzer, die zur gleichen Zeit mit dem Rechner arbeiten, beeinträchtigt – abgesehen von der Belegung gemeinsamer peripherer Einheiten wie Schnelldrucker oder Plotter.

Dieses hohe Maß an Flexibilität ist für analytische Laboratorien in einem Forschungsinstitut mit häufig wechselnden

Aufgabenstellungen nicht nur vorteilhaft, sondern notwendig (siehe auch <sup>[4,5]</sup>). Trotzdem jedoch kann für gewisse Routineanalysen mit immer gleichen Auswerteverfahren ein Standardprogramm eingesetzt werden, das keinerlei Parametereingabe benötigt und unmittelbar das Endergebnis, etwa in Form eines Berichts auf dem Teletype, liefert.

Besonders vorteilhaft erweist sich die Time-Sharing-Betriebsweise beim Entwickeln und Austesten neuer Programme. Beispielsweise können neue Auswerteprogramme ausgetestet werden, ohne daß die Möglichkeit einer Störung anderer Benutzer besteht. Programmänderungen lassen sich vom Teletype aus durch Text-Editoren einführen, und die geänderten Programme können sofort – unter Umgehung längerer Wartezeiten für Batch-Systeme – gestartet werden. Dieser unmittelbare Kontakt zwischen Programmierer und Rechner hat die Entwicklung der Programme für die On-line-Anwendungen wesentlich beschleunigt.

#### 4.6. Augenblicklicher Stand und Zuverlässigkeit des „Mülheimer Systems“

Bis jetzt sind 23 Gaschromatographen, ein NMR-Spektrometer, ein IR-Spektrometer, ein Spektralphotometer („Cary 60“), ein ESR-Gerät und ein langsames Massenspektrometer über den „langsamen“ A/D-Wandler sowie ein Schnellscan-Massenspektrometer und ein Impuls-NMR-Gerät über den „schnellen“ A/D-Wandler direkt angeschlossen.

Von der derzeit genutzten Rechenkapazität (im 24-Stunden-Betrieb 20 bis 25%) entfallen fast 90% auf die Off-line-Rechnungen und nur ca. 10% auf die Erfassung und Verarbeitung der On-line-Daten.

Off-line-Programme, die mehr als 28 K Kernspeicher benötigen, müssen nachts, d. h. zwischen 17 Uhr und 8 Uhr, gerechnet werden – zum Teil, weil sie während des Tagesbetriebs einen zu unrationellen Swapping-Betrieb bedingen würden, zum Teil, weil für sehr große Programme der vom speicherresidenten Time-Sharing-Betriebssystem freigelassene Kernspeicher (zur Zeit 41 K) nicht ausreicht, so daß ein spezielles Betriebssystem geladen werden muß.

Die Zuverlässigkeit des Betriebssystems erhöhte sich durch ständige Verbesserungen im Laufe der bisherigen Betriebszeit, so daß derzeit praktisch keine Software-Zusammenbrüche mehr auftreten.

Jedoch gibt es gelegentlich Hardware-Ausfälle, die den Computer meistens eine Stunde bis zu einem oder zwei Tagen (bisheriges Maximum) stilllegen.

#### 4.7. Nachteile des „Mülheimer Systems“

Ein großes Computersystem wie das „Mülheimer System“ ist immer dann schwerfällig, wenn Änderungen innerhalb des sehr komplizierten Betriebssystems notwendig sind. Neben den Interruptroutinen zur Echtzeit-Datenerfassung müssen auch alle in Echtzeit notwendigen Rückmeldungen

an ein angeschlossenes Meßgerät als Unterprogramme im Betriebssystem enthalten sein. Deshalb ist es unmöglich, Echtzeitrückmeldungen in solchen Fällen vorzusehen, in denen das Betriebssystem wegen wechselnder experimenteller Anforderungen häufig geändert werden müßte. Außerdem ist der „Buchführungs“-Aufwand für Echtzeitroutinen innerhalb eines Time-Sharing-Systems beträchtlich. Insbesondere aber sollten keine über sehr lange Zeiten, z. B. mehrere Tage, laufende Echtzeitexperimente an ein großes System angeschlossen werden, da der normale Betrieb nicht nur durch die regelmäßigen Wartungsarbeiten, sondern auch durch unvorhersehbare Systemzusammenbrüche unterbrochen werden kann. Aus diesem Grunde wurde in Mülheim nicht versucht, das automatische Röntgen-Diffraktometer durch die PDP 10-Anlage steuern zu lassen<sup>[6]</sup>.

#### 4.8. Personalaufwand

Die Mülheimer Rechenanlage wird von einem Physiker, einem Mathematiker, zwei Programmierern, einem Operateur und einem Wartungsingenieur betreut. Diese Gruppe entwickelte auch den größten Teil der Software für die On-line-Anwendungen. Daneben beschäftigen sich in den meisten analytischen Gruppen des Instituts noch mehrere Mitarbeiter zumindest zeitweise mit der Entwicklung von Programmen.

Als wesentliche Voraussetzung eines erfolgreichen Systemaufbaus erwies sich die gute Zusammenarbeit zwischen Computer-Personal und Analytikern. Dazu kommt die gelegentliche Mitarbeit von Elektronikern, wenn es um den möglichst störungsfreien Anschluß der Meßgeräte geht.

### 5. Vergleich von Computersystemen für die chemische Forschung

Da die meisten Forschungslaboratorien Zugang zu einem größeren Rechenzentrum haben, in dem die Off-line-Programme gerechnet werden können, ist meistens nur über die Anschaffung eines On-line-Systems zu entscheiden (siehe jedoch Abschnitte 5.6 und 5.7). Auf die Einsatzbereiche der Typen von On-line-Systemen wurde bereits in Abschnitt 3 eingegangen. Hier seien jedoch noch einmal die Vor- und Nachteile von kleineren „dedicated“ Systemen und von großen „gemischten Systemen“ hinsichtlich der wichtigsten Gesichtspunkte einander gegenübergestellt.

#### 5.1. Programmierung

Die Programmteile für die Echtzeit-Datenerfassung und eventuelle Echtzeitrückmeldungen sind in „dedicated“ Systemen leichter zu erstellen und in den meisten Fällen auch leichter abzuändern als in großen Systemen mit kompliziertem Betriebssystem.

Dagegen sind in großen Systemen die Analysenprogramme einfacher, nämlich gewöhnlich in einer höheren Program-



Tabelle 2. Programmierung von On-line-Systemen.

System	Echtzeit-Datenerfassung und -verarbeitung	Auswertung	Testen mit Ändern und Auswerteprogrammen	flexibler Einsatz verschiedener Auswerteprogramme
Einzelmethodensysteme 1. ein Gerät pro Rechner 2. Mehrzwecksysteme	sehr einfach (kein Überschneiden verschiedener analytischer Methoden)	aufwendig (meist Maschinensprache)	schwierig (kleiner Kernspeicher, wenig Testhilfen, umständliche Eingabe von Änderungen)	möglich bei komfortabler Peripherie
3. mehrere gleichartige Geräte pro Rechner	einfach (aber evtl. komplizierter Abtastalgorithmus)	sehr aufwendig (Maschinensprache, mehrere Geräte)		
Mehrmethodensysteme	schwierig (vielschichtige zeitliche Korrelation)	besonders schwierig (Maschinensprache, verschiedene analytische Methoden)	sehr umständlich (Änderung für eine Methode beeinflusst alle anderen)	eventuell möglich bei komfortabler Peripherie
Gemischte Systeme	sehr schwierig (Einbau in komplexes Betriebssystem), Time-Sharing-Betriebssystem vom Hersteller ist Voraussetzung	sehr einfach (FORTRAN, keine Überschneidung von Auswerteprogrammen verschiedener Geräte oder mit Datenerfassungsteil, komplizierte Auswerteverfahren einsetzbar, Zugriff zu umfangreichen Datenbanken)	sehr einfach (keine Beeinflussung anderer Benutzer, schnelles Arbeiten mit Text-Editoren, leistungsfähige Testhilfen, zusätzliche Möglichkeiten durch umfangreiche Peripherie)	extrem einfach (da die Möglichkeit des Time-Sharing-Dialogs besteht!), stufenweise Auswertung je nach Zwischenergebnis möglich
Satellitensysteme	einfach für dedicated Satelliten, aber evtl. Verzahnung mit Betriebssystem			

miersprache, z. B. FORTRAN, zu erstellen. Es stehen Hilfsprogramme für Fehlersuche und Text-Editoren für schnelle Programmänderungen sowie periphere Geräte zum bequemen Arbeiten (Listen, Kopieren von Programmen) zur Verfügung (siehe auch Tabelle 2).

## 5.2. Rechenkapazität

Die höhere Rechenleistung und die größere Speicherkapazität eines großen Systems sind für manche Auswerteverfahren (z. B. bei der Massenspektroskopie) wünschenswert und manchmal auch notwendig. Kleinsysteme können in solchen Fällen oft nur die reine Datenerfassung oder eine beschränkte Vorverarbeitung durchführen, so daß die abgespeicherten Daten später in einem Rechenzentrum offline ausgewertet werden müssen.

## 5.3. Flexibilität

Wie schon an anderen Stellen betont, ist ein großes gemischtes System, das einen konversationellen Time-Sharing-Betrieb ermöglicht, in vieler Hinsicht flexibler für den Benutzer als ein dedicated System.

Dies gilt für die Programmierung ebenso wie für die Handhabung der Meßdaten. Der Gesichtspunkt, Programme ohne großen Aufwand ändern und neuen Anforderungen anpassen zu können, ist insbesondere für Laboratorien mit häufig wechselnden Aufgaben wesentlich.

Dedicated Systeme sind demgegenüber flexibler in ihrer Hardware-Zusammensetzung. Sie eignen sich deshalb bes-

ser für Laboratorien, in denen viel mit Hardware experimentiert wird.

## 5.4. Wartung und Betrieb

Für ein dedicated System wird in der Regel kein Wartungspersonal benötigt, auch braucht der Benutzer keinerlei Rücksicht auf andere Benutzer zu nehmen. Das kleine System ist auch meist zuverlässiger als komplizierte große Systeme.

Ausfälle sind bei großen Systemen zwar häufiger, dauern dafür aber meist nicht so lange, da geschultes Personal für die Reparatur zur Stelle ist.

## 5.5. Labororganisation

Für einzelne kleine Laboratorien kommen aus finanziellen Gründen selbstverständlich nur „dedicated“ Systeme in Frage. Auch Laboratorien mit mehreren analytischen Geräten, aber nur geringem Meßanfall können mit einem „dedicated“ System arbeiten, das je nach Bedarf immer nur mit einem der Meßgeräte verbunden wird (Standard-Interface vorausgesetzt!). Ein solches, eventuell transportables „Mehrzweck“-Kleinrechnersystem wird für Messungen nach jeder analytischen Methode mit einem anderen Programmsystem geladen. Für eine relativ einfache Datenauswertung können „Interpreter“-Sprachen (wie BASIC, FORCAL usw.) oder speziell entwickelte Sprachen für die Analytik benutzt werden.

Für größere oder für eine Anzahl benachbarter kleiner Laboratorien überwiegen jedoch die Vorteile eines großen Computersystems.

## 5.6. Kaufentscheidung

Die Entscheidung zum Kauf eines Kleinsystems ist wegen des geringeren finanziellen Aufwands und des damit verbundenen geringeren Risikos leichter zu fällen. Bei der Anschaffung eines großen Systems bedarf es der Zusammenarbeit vieler Beteiligten. Eine Einigung muß nicht nur über Finanzierung, Art und Umfang des anzuschaffenden Systems, sondern auch über die spätere Organisation und Betriebsweise gefunden werden (siehe Tabelle 3).

In vielen Fällen hemmen bereits vorhandene Rechenzentren die Anschaffung eines großen gemischten Systems. Allerdings wird leicht übersehen, daß manche der vorhan-

arbeitenden Chemikers, der Aufbau von Dokumentationssystemen sowie immer ausgefeiltere Analysemethoden der Spektroskopie stimulieren die Anschaffung von größeren Rechnern für den chemischen Anwendungsbereich. Da viele Dokumentationssysteme und kompliziertere Auswerteverfahren auf die Meßdatensätze von On-line-Systemen zurückgreifen, ist überdies eine möglichst enge Verbindung – wie sie das gemischte System optimal bietet – von chemischem Off-line- und On-line-System wünschenswert.

Wegen der relativ geringen Ausnutzung eines großen Systems durch die On-line-Anforderungen allein wird ein großes System erst durch die Einbeziehung einer Reihe

Tabelle 3. „Management-Gesichtspunkte“ bezüglich der On-line-Systeme.

System	typischer Preis (DM)	Kaufentscheidung	Unterhaltsaufwand
<b>Einzelmethodensysteme</b>			
1. ein Gerät pro Rechner	80 000	leicht (geringe Kosten, geringes Risiko, keine organisatorischen Schwierigkeiten, schnelle Betriebsfähigkeit)	gering
2. Mehrzwecksysteme	100 000		
3. mehrere gleichartige Geräte pro Rechner	200 000		
<b>Mehrmethodensysteme</b>	400 000–1 500 000	erschwert (Interessen mehrerer Beteiligten müssen aufeinander abgestimmt werden, beschränkte Leistungsfähigkeit des Systems)	gering
<b>Gemischte Systeme</b>	2 000 000	schwierig (hohe Kosten, viele Beteiligte, evtl. Umorganisation oder Zusammenlegung von Labors, langwierige Planung und Entwicklung, Berücksichtigung vorhandener Rechenzentren und firmenpolitischer oder nationaler Motive bezüglich Computerherstellern)	Wartungsingenieure und hochspezialisiertes Personal notwendig
<b>Satellitensysteme</b>	3 000 000		

denen Rechenanlagen auch ohne die technisch-wissenschaftlichen oder chemischen Anwendungen weitgehend ausgelastet sind oder es innerhalb weniger Jahre sein werden. Überdies sind zumindest im industriellen Bereich die Rechenzentren normalerweise auf kaufmännische Anwendungen zugeschnitten. Wissenschaftlich-technische Anwendungen, für die andere Rechnerarten und andere Organisationsformen des Rechenbetriebs geeigneter sind, wirken dann oft als Fremdkörper.

## 5.7. Zukünftige Entwicklung

Nicht nur wegen der Erfordernisse der Datenerfassung und -verarbeitung für direkt angeschlossene analytische Instrumente sind große gemischte Systeme für die chemische Forschung wünschenswert: Die schon eingangs erwähnten, noch in den Anfängen stehenden Entwicklungen von Computerprogrammen zur Unterstützung des präparativ

rechenintensiver Off-line-Aufgaben wirtschaftlich genutzt. Eine gleichwertige Auslastung könnte auch durch die Ausbildung von Studenten an den Terminals eines interaktiven Time-Sharing-Rechners erreicht werden.

Eingegangen am 18. November 1971 [A 868]

- [1] E. J. Corey u. W. T. Wipke, *Science* 166, 178 (1969).
- [2] E. Ziegler, Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy, Cleveland 1969; E. Ziegler, D. Henneberg u. G. Schomburg: Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy, Cleveland 1970.
- [3] E. Ziegler, D. Henneberg u. G. Schomburg, *Anal. Chem.* 42, 51A (Aug.) (1970).
- [4] G. Schomburg, F. Weeke, B. Weimann u. E. Ziegler: 8. Internat. Symposium on Gaschromatography, Preprints, Paper 15; G. Schomburg, F. Weeke, B. Weimann u. E. Ziegler, *Angew. Chem.* 84, 390 (1972); *Angew. Chem. internat. Edit.* 11, Heft 5 (1972).
- [5] D. Henneberg, K. Casper, E. Ziegler u. B. Weimann, *Angew. Chem.* 84, 381 (1972); *Angew. Chem. internat. Edit.* 11, Heft 5 (1972).
- [6] C. Krüger, *Angew. Chem.* 84, 412 (1972); *Angew. Chem. internat. Edit.* 11, Heft 5 (1972).