

Computer in der analytischen Chemie

Autor(en): **Clerc, J.T. / Erni, F.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Mitteilungen aus dem Gebiete der Lebensmitteluntersuchung und Hygiene = Travaux de chimie alimentaire et d'hygiène**

Band (Jahr): **62 (1971)**

Heft 1

PDF erstellt am: **21.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-983573>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Computer in der analytischen Chemie

J. T. Clerc und F. Erni

Organisch-Chemisches Laboratorium

Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich/Schweiz

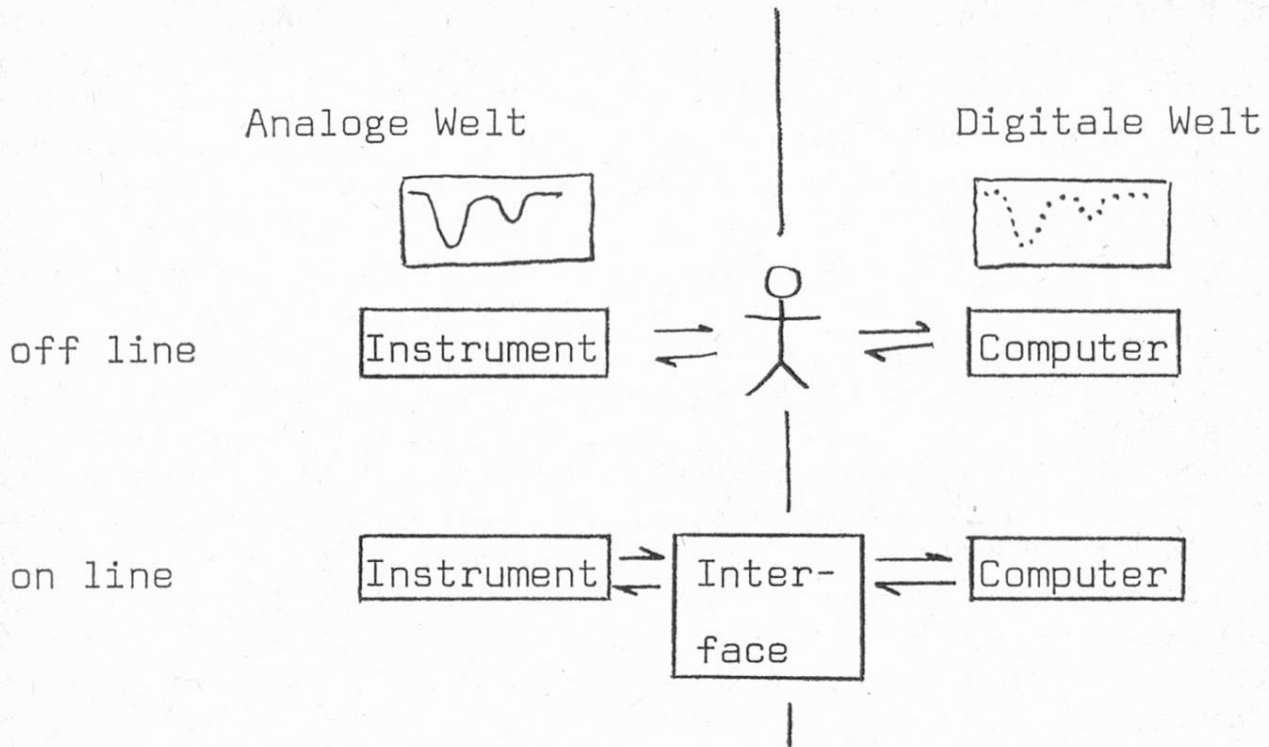
Der enorme technische Fortschritt der vergangenen 25 Jahre, im besonderen auf dem Gebiet der Elektronik, hat die Entwicklung und den Routineeinsatz neuer physikalisch-chemischer Analysenverfahren ermöglicht. Diese modernen Analysemethoden sind einerseits sehr leistungsfähig, indem sie, verglichen mit den klassischen Methoden, mehr Resultate pro Zeiteinheit, neuartige und oft auch genauere Resultate zu liefern vermögen. Andererseits sind die entsprechenden Transducer und Instrumente in ihrem Aufbau und in ihrer Funktion so komplex geworden, daß es für den nicht weitgehend spezialisierten Benutzer oft kaum mehr möglich ist, apparative Artefakte gegenüber reellen Resultaten zu differenzieren und so die Ergebnisse mit der notwendigen Kritik auszuwerten und zu interpretieren (1). Dementsprechend besteht in der analytischen Chemie die Tendenz, nicht mehr das aufgrund einiger weniger Messungen erhaltene Datenmaterial erschöpfend zu verwerten und zu interpretieren, sondern aus einer Vielzahl von Meßresultaten jene Daten zu verwenden, deren Auswertung ohne ausgesprochenes Expertenwissen möglich ist. Am deutlichsten tritt diese Tendenz bei der Strukturaufklärung organischer Verbindungen mit spektroskopischen Methoden zutage (2).

Diese Entwicklung bringt es mit sich, daß heute schon in vielen Fällen die Erfassung der am Instrument anfallenden Rohdaten, ihre Reduktion und ihre Umformung in eine dem Verbraucher angepaßte Form die Leistungsfähigkeit des analytischen Laboratoriums begrenzt. Da es sich bei dieser Datenerfassung und Reduktion meist um verhältnismäßig primitive Operationen handelt, liegt es nahe, diese einem Computer zu überbinden und so den Analytiker von einer lästigen Routinearbeit zu befreien.

Da analytische Instrumente im allgemeinen analoge Information liefern, während moderne Computer nur mit digitalen Daten arbeiten können, ist eine Transformierung der anfallenden Daten unumgänglich (vgl. Abbildung 1). Im einfachsten Fall erfolgt diese Umwandlung durch den Menschen, eventuell mit Hilfe eines am Gerät angebrachten Analog-Digital-Konverters (z. B. Digital-Voltmeter). Die so erhaltenen digitalen Daten werden durch den Menschen einem geeigneten Computer zur Weiterverarbeitung eingegeben. Diese Betriebsweise wird mit «off line» bezeichnet.

Soll die Verarbeitung der anfallenden Daten ohne Verzögerung erfolgen, so muß der (langsame und unzuverlässige) Mensch als Mittler zwischen Instrument und Computer eliminiert werden. Seine Aufgabe wird durch ein geeignetes Zwischenglied, das Interface, übernommen. Eine solche, durch direkte Kopplung des Instrumentes mit dem Computer gekennzeichnete Betriebsweise wird mit «on

Abbildung 1



line» bezeichnet. Sie erlaubt gegebenenfalls die Weiterverarbeitung der Daten gleichzeitig mit ihrer Erfassung: Verarbeitung in Echtzeit («real time»). Vor- und Nachteile der beiden genannten Betriebsarten sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1 Vor- und Nachteile von «on line» und «off line» Betrieb

| | on line | off line |
|---|---------------------|--------------|
| Preis | hoch | mäßig |
| Auswahl des Computertyps | kritisch | unwesentlich |
| Programmieraufwand | sehr hoch | hoch |
| Echtzeitverarbeitung | möglich | unmöglich |
| Geräte-Steuerung | möglich | unmöglich |
| räumliche Trennung zwischen Instrument und Computer | technisch aufwendig | problemlos |
| Benutzer-Komfort | hoch | gering |

Im «on line»-Betrieb sind zwei grundsätzlich verschiedene Varianten denkbar. Entweder ist einem analytischen Instrument ein Kleincomputer fest zugeteilt, der nur die Erfassung und die Auswertung der Daten dieses einen Instruments besorgt: «Dedicated» Computer-System (vgl. Abbildung 2). Die andere Möglichkeit besteht darin, mehrere Instrumente über einen Multiplexer an einen leistungsfähigen Computer anzuschließen, der die an den verschiedenen Instrumenten anfallenden Daten nacheinander abfragt und weiterverarbeitet: «Time shared» Computer-System (Abbildung 2). Es sind auch Zwischenlösungen denkbar: «Satellite»-Computer-System (Abbildung 2). Vor- und Nachteile der beiden genannten Systeme sind in Tabelle 2 zusammengestellt.

Obwohl grundsätzlich sowohl «Dedicated» wie auch «time sharing»-Betrieb mit großen und kleinen Computern denkbar ist, werden aus wirtschaftlichen Erwägungen für den Betrieb als «dedicated» Computer kleine und mittlere, für den «time sharing»-Betrieb vorwiegend mittlere und große Computer eingesetzt. Die Einteilung in große, mittlere und kleine Computer ist notwendigerweise willkürlich: einige denkbare Beurteilungskriterien sowie typische Daten sind in Tabelle 3 zusammengestellt.

Die vollständige automatische Verarbeitung analytischer Daten erfolgt in drei Schritten:

- Datenerfassung
- Datenreduktion
- Datenauswertung

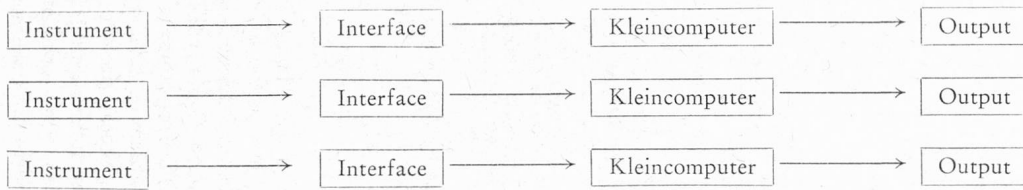
Bei der Datenerfassung werden die in analoger Form anfallenden Meßwerte digitalisiert und zusammen mit ergänzenden Zusatzinformationen abgespeichert. Die bei diesem Schritt auftretenden Schwierigkeiten sind im westentlichen elektronischer Art: die rauschfreie Umwandlung schwacher Analogsignale, ihre verzerrungsfreie Verstärkung bei genügend großem dynamischem Bereich sowie ihre Uebertragung zum Interface des Computers sind in der Praxis oft nicht ganz problemlos. Hingegen ist die Programmierung der eigentlichen Akquisitionsphase von wenigen Sonderfällen abgesehen einfach und bietet kaum besondere Schwierigkeiten.

Der verwendete Computertyp spielt dabei nur insofern eine Rolle, als seine Geschwindigkeit die maximal mögliche Datenrate beschränken kann. Dieser Fall tritt aber nur dann ein, wenn der Computer das langsamste Element des Eingabesystems ist.

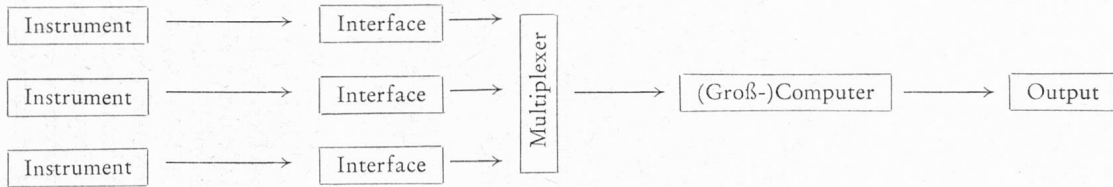
Bei modernen Computern der dritten Generation (mit integrierten Schaltelementen ausgerüstet) liegt diese Grenze aber weit oberhalb von 30 000 Meßwerten pro Sekunde. Ebenso wird der Aufwand für den Bau des Interfaces in hohem Maß vom gewählten Computertyp beeinflusst.

Im nächsten Schritt, bei der Datenreduktion, sind die auftretenden Probleme programmiertechnischer und logischer Art. Das Programm muß die in der Akquisitionsphase erfaßten und gespeicherten Daten prüfen, meß- und übertragungstechnische Artefakte erkennen und ausscheiden, die relevanten Meßwerte von den

Abbildung 2 «Dedicated» Computer System



«Time shared» Computer System



«Satellite» Computer System

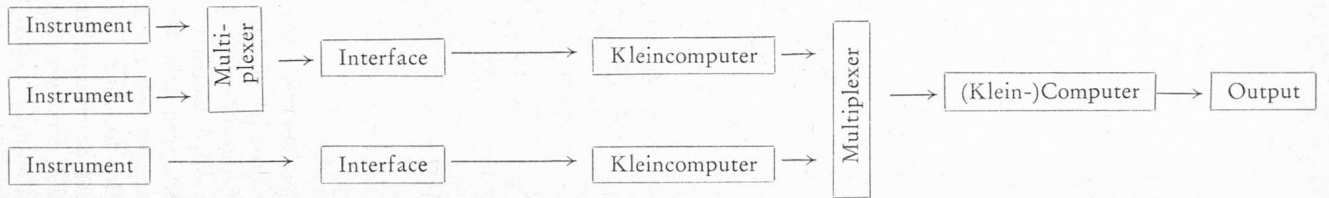


Tabelle 2 Vor- und Nachteile bei «dedicated»- und «time shared»-Betrieb

Dedicated Computer System

| Vorteile | Nachteile |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> — Benutzer verfügt allein über den ganzen Computer — Computer kann nacheinander an verschiedene Instrumente angeschlossen werden — Investitionskosten gering — Mehrere Computer pro Labor vertretbar | <ul style="list-style-type: none"> — Leistungsfähigkeit des Kleincomputers ist beschränkt — Große Kernspeicher und/oder aufwendige periphere Geräte sind wirtschaftlich kaum vertretbar — Aufwand für Programmierung und für Bau von Interface groß — Programmierung in Maschinensprache unumgänglich |

Time shared Computer System

| Vorteile | Nachteile |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> — Leistungsfähiger Großcomputer wirtschaftlich vertretbar — Anstellung von Fachpersonal zur Bedienung des Computers gerechtfertigt — Programmierung in problemorientierten Sprachen möglich — Ausnutzung des Computers hoch | <ul style="list-style-type: none"> — Hohe Investitionskosten — Computer-Fachpersonal notwendig — Leistungsfähigkeit des Computers durch Monitorprogramm herabgesetzt — Bei Defekt des Computers werden alle Instrumente in Mitleidenschaft gezogen — Benutzer vom Computer räumlich getrennt — Benutzer können sich ungewollt gegenseitig stören |

irrelevanten abtrennen und aus dem Satz der relevanten Daten die analytisch sinnvollen Parameter errechnen. Der Aufbau und der logische Fluß eines solchen Programms hängt in hohem Maße davon ab, von welchem Gerät die zu verarbeitenden Daten stammen, da die zu lösenden Probleme je nach Gerät völlig verschieden sein können. So muß beispielsweise in einem GC-Programm erkannt werden, ob ansteigende Meßwerte auf eine Basislinien-Verschiebung oder auf den Beginn eines Peaks zurückzuführen sind. Ebenso müssen überlappte Peaks als solche erkannt und die durch Integration erhaltene Gesamtfläche vernünftig auf die einzelnen Komponenten verteilt werden. Das Erstellen eines solchen Programms verlangt nicht nur gute Kenntnisse der Programmiertechnik des verwen-

Tabelle 3 Klassifikation von Computern

| Kriterium | Kleinkomputer | mittlerer Computer | Großcomputer |
|------------------|--------------------------|--|----------------------------|
| Wortlänge | 8 ... 18 Bit | 12 ... 32 Bit | ≥ 32 Bit |
| Kernspeicher | 4 ... 8 K | 8 ... 32 K | ≥ 32 K |
| Zykluszeit | $\leq 12 \mu\text{sec}$ | $\leq 2 \mu\text{sec}$ | $\leq 2 \mu\text{sec}$ |
| Massenspeicher | kein | Disk, Tape, Drum | reichhaltig |
| Periphere Geräte | Lochstreifen Teletype | gut ausgebaut einige schnelle Geräte | reichhaltig und schnell |
| Preis in SFr. | 30 000—200 000 | 200 000—2 000 000 | $> 2 000 000$ |

deten Computers, sondern vor allem auch ein Expertenwissen in Bereich der zu automatisierenden analytischen Methode. Auch beim Vorhandensein aller notwendigen Voraussetzungen bleibt der Aufwand enorm. Für größere Echtzeitprogramme muß mit Programmierkosten von rund 100 Franken pro voll dokumentierten Maschinensprache-Befehl gerechnet werden. Eine Verminderung dieses Aufwandes ist bei Verwendung von höheren Programmiersprachen wie z. B. Fortran, Basic, Focal, PL/1 möglich. Allerdings geht dabei die Kontrolle über die Größe des Programms und über die Ausführungszeit weitgehend verloren, so daß dieser Ausweg nur bei langsamen bzw. nicht in Echtzeit ablaufenden Programmen oder auf sehr leistungsfähigen Großcomputern gangbar ist (3).

Einige typische Echtzeitanwendungen in der analytischen Chemie sind im Literaturverzeichnis zusammengestellt (4).

Der letzte Schritt schließlich, die eigentliche Datenauswertung, beschränkt sich heute meist auf die saubere und übersichtliche Darstellung der errechneten Resultate. Eine Interpretation dieser Daten scheint beim gegenwärtigen Stand der Technik zwar durchaus möglich, scheitert aber daran, daß heute maschinengerechte Interpretationsmethoden noch weitgehend fehlen. Die Leistungsfähigkeit des Menschen für die Verarbeitung digitaler Daten ist um Größenordnungen kleiner als die eines Computers, wie dies in Tabelle 4 dargestellt ist. Der Computer ist schnell, zuverlässig, aber primitiv; der Mensch hingegen ist langsam, unzuverlässig aber phantasievoll und intuitiv. Dementsprechend führt die kritiklose Uebertragung der auf die Denkweise des Analytikers zugeschnittenen Methoden und Denkschemen auf den aufgrund seiner völlig anderen logischen Struktur dazu wenig geeigneten Computer trotz beachtlich hohem Aufwand oft zu bemerkenswert bescheidenen Ergebnissen (5). Entscheidende Fortschritte bei der automatischen Interpretation analytischer Daten können daher nur bei Anwendung computergerechter Methoden erwartet werden (6).

Tabelle 4

Leistungsfähigkeit von Mensch und Maschine bei der Verarbeitung digitaler Daten

| | Mensch | Computer |
|--|-------------------|-----------------------------|
| Informationsaufnahme | 9 ... 16 Bit/sec | $\sim 2 \cdot 10^7$ Bit/sec |
| Informationsverlust durch Vergessen in 10 sec | $\sim 75\%$ | 0 % |
| Schreibleistung | ~ 16 Bit/sec | $\sim 120\,000$ Bit/sec |
| Rechenleistung | ~ 12 Bit/sec | $\sim 4 \cdot 10^8$ Bit/sec |

Zusammenfassung

Der prinzipielle Aufbau der Kopplung analytischer Geräte mit Computern wird diskutiert, wobei besonderer Wert auf die Erklärung von dem Analytiker meist fremden Fachausdrücken aus dem Gebiet der Computer-Technologie gelegt wird. Vor- und Nachteile der verschiedenen Kopplungsarten werden verglichen.

Résumé

On discute les principes du couplage d'instruments analytiques avec des ordinateurs, en accordant une grande importance à l'explication des termes techniques du domaine de la technologie des ordinateurs que les analystes ne connaissent pas en général. On compare les avantages et les inconvénients des différents systèmes de couplage.

Literatur

1. Simon W.: Pure and Applied Chemistry **18**, 97 (1969).
2. Silverstein R. H., Bassler G. C.: Spectrometric Identifications of Organic Compounds, John Wiley & Sons, Inc., New York, London 1963;
Simon W.: Z. Anal. Chem. **221**, 368 (1966).
3. Ziegler E., Henneberg D., Schomburg G.: Anal. Chem. **42** (9), 51A (1970).
4. Burlingame A. L., Smith D. H., Olsen R. W.: Anal. Chem. **40**, 13 (1968);
Perone S. D., Jones D. O., Gutknecht W. F.: Anal. Chem. **41**, 1154 (1969);
James G. E., Pardue H. L.: Anal. Chem. **41**, 1618 (1969);
Hicks G. P., Eggert A. A., Toren E. C.: Jr., Anal. Chem. **42**, 729 (1970);
Stephens F. B., Jakob F., Rigdon L. P., Harrar J. E.: Anal. Chem. **42**, 764 (1970);

- Willis B. G., Bittikofer J. A., Pardue H. L., Margerum P. W.: *Anal. Chem.* **42**, 1340 (1970);
- Sweely C. C., Ray B. D., Wood W. I., Holland J. F.: *Anal. Chem.* **42**, 1505 (1970).
5. Barbes M., Powers P., Wallington M. J., Wolstenholme W. A.: *Nature* **212**, 784 (1966);
 Biemann K., Cone C., Webster B. R.: *J. Amer. chem. Soc.* **88**, 2597 (1966);
 Biemann K., Cone C., Webster B. R., Arsenault G. P.: *J. Amer. chem. Soc.* **88**, 5598 (1966);
 Petterson B., Ryhage R.: *Arkiv Kemi* **26**, 293 (1967);
 Shin-Ichi Sasaki, Hidetsugu Abe, Tatsumi Ouki, Masayoshi Sakamoto, Shukichi Ochiai: *Anal. Chem.* **40**, 2220 (1968);
 Senn M., Venkataraghavan R., McLafferty F. W.: *J. Amer. chem. Soc.* **88**, 5593 (1966);
 Venkataraghavan R., McLafferty F. W., Van Lear G. E.: *Organic Mass Spectrometry* **2**, 1 (1969);
 Lederberg J., Sutherland G. L., Buchanan B. G., Feigenbaum E. A., Robertson V. A., Duffield A. M., Carl Djerassi: *J. Amer. chem. Soc.* **91**, 2973 (1969);
 Duffield A. M., Robertson A. V., Carl Djerassi, Buchanan B. G., Sutherland G. L., Feigenbaum E. A., Lederberg J.: *J. Amer. chem. Soc.* **91**, 2977 (1969);
 Schroll G., Duffield A. M., Djerassi C., Buchanan B. G., Sutherland G. L., Feigenbaum E. A.; Lederberg J.: *J. Amer. chem. Soc.* **91**, 7440 (1969);
 Buchs A., Delfino A. B., Duffield A. M.; Djerassi C., Buchanan B. G., Feigenbaum E. A.; Lederberg J.: *Helv. Chim. Acta* **53**, 1394 (1970);
 Sheldrick B.: *Quarterly Reviews* **24**, 454 (1970);
 Jurs P. C., Kowalski B. R., Isenhour T. L., Reilley C. N.: *Anal. Chem.* **42**, 1387 (1970).
6. Erni F., Clerc J. T.: *Chimia* **24**, 388 (1970);
 Knock B. A., Smith I. C., Wright D. E., Ridley R. G., Kelly W.: *Anal. Chem.* **42**, 1516 (1970).

Fortbildungskurs über «Fette als funktionelle Bestandteile von Lebensmitteln»

Am Agrikulturchemischen Institut der Eidg. Technischen Hochschule, Zürich, wird am 30. September/1. Oktober 1971 ein Fortbildungskurs für Lebensmittelwissenschaftler mit dem Thema «*Fette als funktionelle Bestandteile von Lebensmitteln*» abgehalten. Das Programm umfaßt 13 Vorträge aus den Gebieten der Chemie und Analytik der Fettfraktion, der funktionellen Eigenschaften der Fette und der Bedeutung der Fette bei der Verarbeitung von Lebensmitteln. Das Programm ist ab 1. Juni 1971 zu beziehen bei

Prof. Dr. J. Solms, Agrikulturchemisches Institut der ETHZ, Universitätsstraße 2, 8006 Zürich.