

研究所における分析自動化システム

Laboratory Automation System for Material Analyses

三井泰裕* Mitsui Yasuhiro

研究所の分析室に自動化システムを導入することは、分析の質的、量的向上が期待できるのでニーズは高い。しかし、研究所での自動化は実験形態が複雑であり、かつ多目的であるために、システムの最適化を図ることは困難であった。

本自動化システム開発では、研究所の分析に適合する汎用性をもったシステムとして、会話形式とモジュール化形式を基本としたモデルを提案し、総合自動化の第一段階として日立製作所中央研究所分析センタのデータ処理に対して自動化を実施した。このモデルは実験者とシステムの一体化が可能で、実験者が試行錯誤を行ないやすいだけでなく、開発の初期コストを比較的低減させ、順次総合自動化に発展させることができる。本データ処理システムはミニコンピュータ(HITAC 20)を用いた複数分析機器に対するオンライン同時処理システムであり、その内容をシステム制御方法を中心に説明した。

1 緒 言

ラボラトリオートメーション(以下、LAと略す)は、1966年ごろから米国で導入が試みられるようになり、1970年代になってからのミニコンピュータ、マイクロコンピュータの目覚ましい発展とともにますます導入が盛んになってきた。LAの応用範囲は広く、導入目的や導入箇所状況によって様々な形態を取り、導入の難易も異なる。

分析の自動化もLAの一分野であるが、当初は単に計算機と分析機器を直結するものとして、省力化、分析時間の短縮などを目的とした固定化されたルーチンワーク用のシステムが多く^{1),2)} 導入場所も工場とかプラントラボが多かった。

リサーチラボの分析でもLA導入のニーズは高かったが、ルーチンワークとリサーチワークが混在しているとか、分析機器の種類が多いなどの問題点があり、導入が遅れていた。特にリサーチワークではLAは研究開発の設備であり、研究開発の有効な手段となることが必要であって、システムに柔軟性が要求される。すなわち、試料前処理、測定、データ処理などの分析の各過程で省力化、時間短縮はもちろんであるが、LAシステムを使うことにより新しいアイデアが容易

にテストできるとか、計算機がなければ手も出ないような実験が容易に企てられるなどの、目に見えない間接的な効果も期待するものである。

近年、リサーチラボに適するシステムも徐々に発表されており^{3)-5),7)}、LAに対する認識も明確化されつつある。

本開発でもまずリサーチラボの分析に適するLAシステムの基礎検討を行ない、(1)会話手法とモジュール化手法を用いて実験者とシステムの一体化を図る、(2)固定化したシステムとしても使用可能にする(ルーチンワーク用)、(3)開発初期コストを低減させ、しかも将来の総合自動化が行ないやすいように拡張性をもたせる、などを基本的な考えとした。

今回のシステムは、このような基本的な考えのもとに総合自動化の第一段階として、リサーチラボの分析のデータ処理を自動化したもので、ミニコンピュータ(HITAC 20)を用いた会話型オンライン分析データ同時処理システムである。

2 分析自動化システム概要

リサーチラボの分析室では次に述べるような問題点があるために、工場とかプラントラボに比べて自動化システムの導入を困難にしている。

- (1) 分析機器、試料処理手法、データ処理手法などの自動化の対象が極めて広く、しかも使用頻度はあまり高くない。
- (2) リサーチワークとルーチンワークが混在している(詳細は後述する)。
- (3) 分析者はシステムを意識したくない。

- (a) 各々の分析者は実験スケジュールを自由に立てている。
- (b) 分析者はシステム化ないしはシステムを使用するための勉強はしたくない。

(2)に関する問題点としては、リサーチワークとルーチンワークでは一般にシステムに対する考え方が異なることである。

図1にリサーチラボでの分析の流れを示すが、ルーチンワークとは分析手法が定まっているものであるから、システムとしても固定化されたシステムが適しており、分析者にとっては簡単な初期設定だけで最終結果が迅速にでてくるものが望

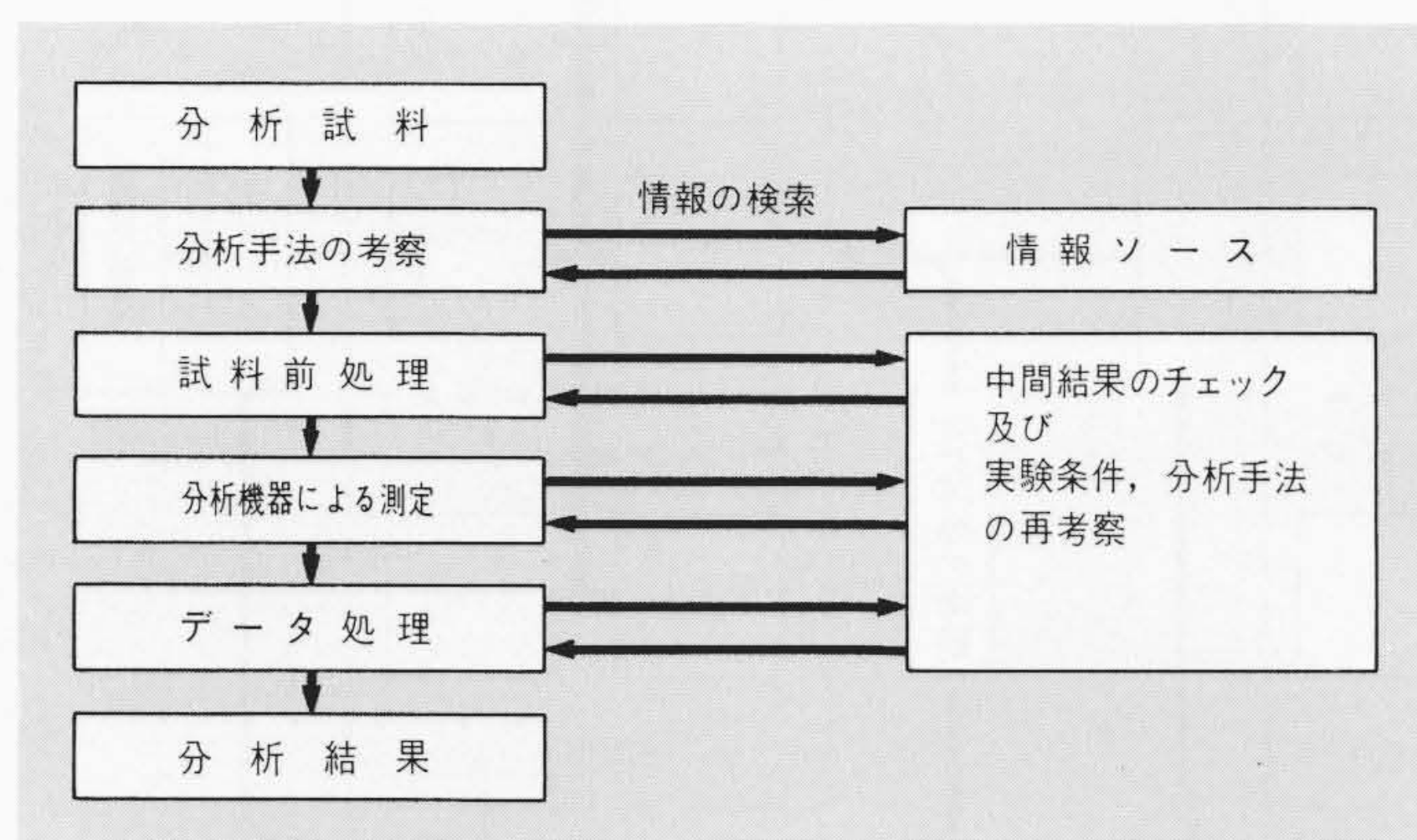


図1 分析の流れ概要 研究所の分析には、ルーチンワークとリサーチワークがあり、リサーチワークは分析の流れが複雑である。

* 日立製作所中央研究所

ましい。また結果の信頼性が高いことも必要である。

一方、リサーチワークとは分析手法が未知であり、試料前処理、測定、データ処理の過程で実際に実験を行なってみて、試行錯誤を繰り返しながら、試みた分析手法の妥当性を検討するものである。したがって、システムには

- (1) 分析実験を行ないながら、分析条件、分析手法のチェック及び変更が容易に行なえること(柔軟性)。
- (2) 新規開発の分析手法の追加が、システム全体の変更がないように容易に行なえること(拡張性)。
- (3) 自動化された諸プロセスは、種々の実験で利用できること(汎用性)。

などが要求される。以上のような問題解決に対し、本システム開発では次のような基本的考えをもっている。

(1) 自動化の対象の集中管理方式

自動化の対象が種々雑多である場合は、システム形態として多くの自動化の対象を集中管理する方式(共用システム又はハイアラキーシステム)^{6),7)}とする。この方式は開発のための初期コストは高いが、各々の自動化対象当たりのコストは低減される。

(2) 自動化の対象の同時処理方式

ユーザーが実験スケジュールを自由に立てられるために自動化の対象が並行に同時処理できる方式として、集中管理方式ではサテライトコンピュータ、及び上位コンピュータにマルチタスク又はマルチジョブ方式などの機能をもたせる。

(3) 自動化の対象のモジュール化方式と会話方式

リサーチワークでの複雑な分析の流れ、ルーチンワークでの固定した分析の流れに対応するために、自動化の対象のモジュール化手法と会話手法を導入する。このシステムイメージを図2に示す。すなわち、試料前処理、測定、データ処理での自動化の対象を処理単位ごとに細かくモジュール化(溶解、抽出、指数平滑、フーリエ変換、X線回折定性など)し

て、自動化する。またモジュールには、汎用性、柔軟性(実験条件の変更を可能にする)をもたせる。モジュールの実行方法をデータ処理を例にとり説明すると、実験者が試してみたいデータ処理手順をモジュールの中から適当に選択し、組み合わせてその実行順(例えば、算術平均平滑、二次微分ピーク検出、X線回折定性)、及びデータ処理条件(算術平均平滑でのデータ点数、X線回折定性での元素情報など)を会話I/O(入出力)機器より入力し実行させる。実験者は各モジュールからの出力結果をチェックして、必要なら、モジュール実行順、データ処理条件を変更して、再実行する。この方式により試行錯誤が行ないやすくなり、リサーチワークに対処できる。また分析手法の新規開発、変更に伴うシステムへの追加、変更もこのようなモジュールで扱うことにより、システム全体に及ぼす影響も少なく容易である。ルーチンワークに対しては、十分信頼性の高い分析手法に対してモジュール実行順、実験条件などを標準のデータとして、プリプロセッサないしはホストコンピュータにあらかじめ登録しておく。これを単純なコードで指定できるようにすると、簡単な操作で試料から最終結果まで出る固定化したシステムとなる。

日立製作所中央研究所分析センタでは以上のような基本的な考えのもとに総合自動化計画の第1段階として、X線回折、けい光X線分析を例にとり、データ処理自動化システムの開発を行なった。総合自動化に対する機器構成を図3に示す。

3 データ処理システム

3.1 データ処理システム基本機能

リサーチラボでの分析自動化システムとして、モジュール化手法を用いたオンライン会話型システム、同時処理システム、及び集中管理システムが適していることは前章で述べた。しかし、データ処理システムとしては、更に幾つかの基本機能が必要である。すなわち、

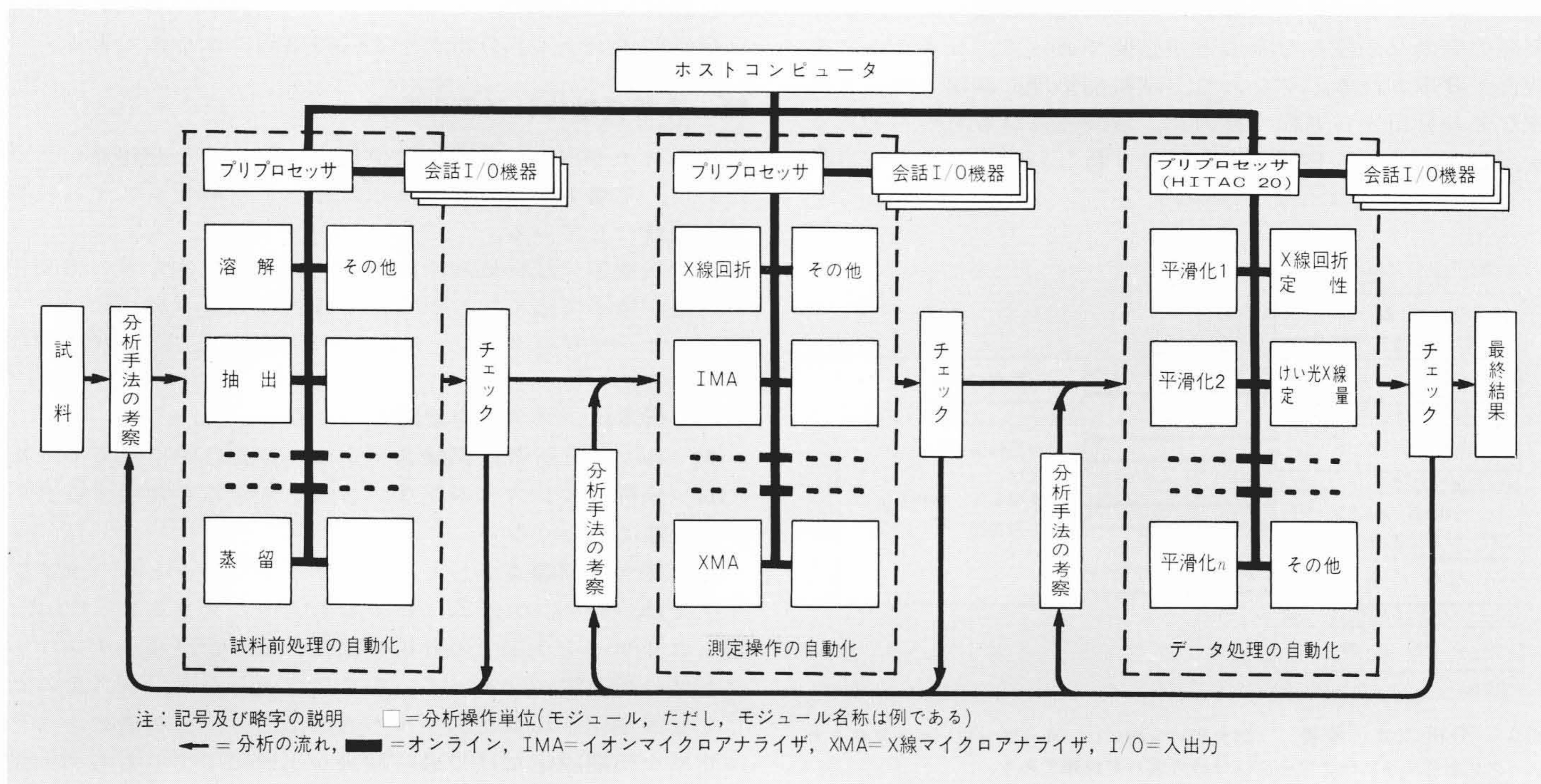
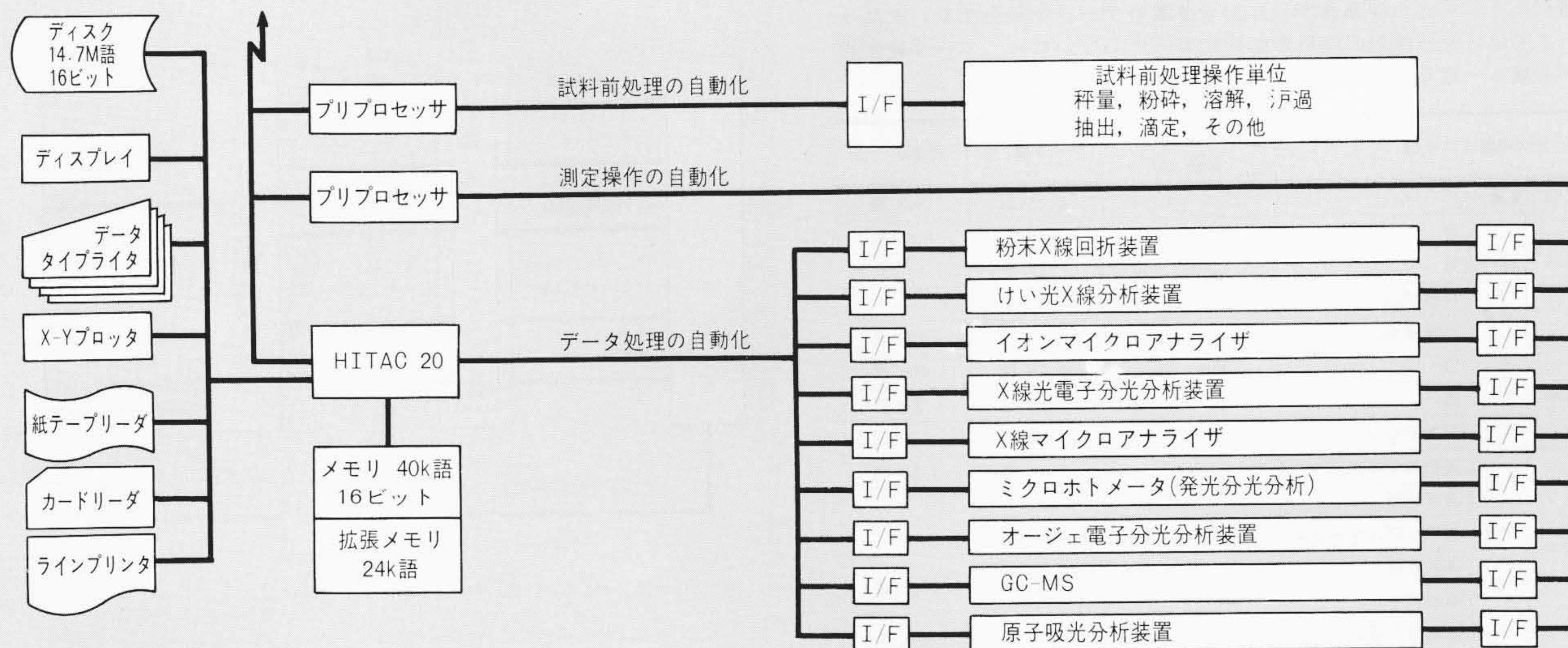


図2 モジュール化された会話型分析自動化システム モジュール化された会話型システムにより、リサーチワークでの試行錯誤が行ないやすくなる。中間結果のチェックは、図中のチェック箇所だけでなく分析操作単位と分析操作単位のつなぎ目のいたるところで可能である。



注：I/F=インタフェース，GC-MS=ガスクロマトグラフィ-マススペクトロメトリー

図3 日立製作所中央研究所分析センタにおけるLAシステム機器構成
での総合自動化は、データ処理、測定操作、試料前処理の自動化が必要である。

- (1) データ処理プログラム開発のための高級言語のサポート
 - (2) 複数の分析機器に対する同時データ収集
 - (3) 測定されたデータの長期間保存
 - (4) データ量の定義の画一化
- などである。

(1)はリサーチワークでは不可決である。データ処理プログラムは実験者自身が開発することが望ましいので、本システム開発では種々の計算機に比較的互換性のある高級言語としてFORTRANを採用した。モジュール化された会話型システムにFORTRANを用いることにより、実験者は解析の新しいアイデアを容易に試みることができる。

3.2 データ量の定義

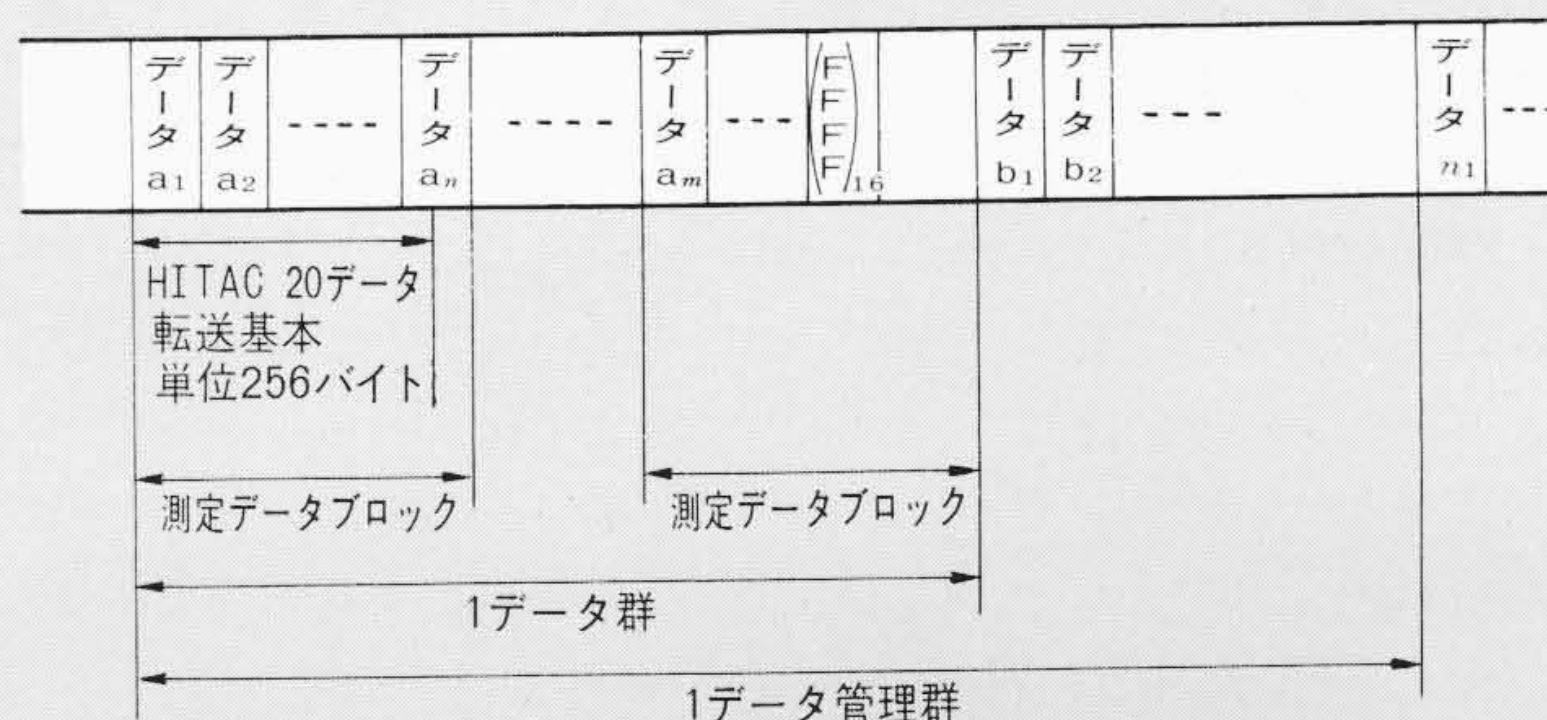
測定モードによって実験者が定義するデータ量は異なる。また、計算機で扱うデータ単位と実験者が扱うデータ単位は異なる。したがって、それらのインタフェースとなる単位としてデータ群、データ管理群の2種のデータ量を定義した(図4)。実験者はこのデータ群、及びデータ管理群に自由に元素に対するデータ、試料に対するデータ、スキャンに対するデータなどを実験時に割り付けることができる。また、データ群及びデータ管理群の管理は、各分析機器ごとに索引順アクセス法的なデータインデックステーブルをデータ収集時に作成して管理する。このデータ量の定義により、実験者にシステムを意識させないとともに、各分析機器及びモードに対するデータ収集、並びにデータ処理でのデータ量単位が画一化でき、システムでの取扱いが便利になった。

3.3 データ収集方式

オンラインでデータを収集する場合に問題となるのは、表1に示すような複数の分析機器から同時に発生してくるデータを即時に計算機に取り込めるかどうかである。また、データが即時に取り込めたとしても多量のデータ発生を行なう分析機器では、リアルタイムデータ処理が困難である。

本システムではこれらの問題に対処するために、次に述べる方法を用いた。

- (1) ハードウェアインタフェース内に、図5に示すような2面バッファを設け、データ発生速度を緩和する。



- 注：1. 測定データブロック；各々の分析機器のデータ発生速度によって決まるデータ収集でのデータ転送量単位で、後述(データ収集方式)のインタフェース内バッファサイズと一致する。
2. データは単一又は複数の語(16ビット)から構成される。
3. (FFFF)₁₆；データ群の区切り符号(データ収集時にハードウェアインタフェースでセットする。)

図4 データ群、データ管理群の定義
実験者は、データ群、データ管理群に実行時に目的に応じたデータ量(例えばスキャン、元素、試料など)を割り当てることができる。

- (2) データはCentral Processing Unit(以下、CPUと略す)内メモリバッファ(各分析機器で共用)を介して、各分析機器ごとに設けられたディスクファイルに格納する。
- (3) ハードウェアインタフェース内バッファからCPU内バッファへのデータ転送は、ダイレクトメモリアクセス(DMA)とする。
- (4) データ収集は他の処理から分離した独立なタスクとし、最高の優先順位をもたせる。
- (5) インタフェース内バッファからのデータ転送の開始は、CPUへの割り込みで行なう。すなわち、分析機器がマスタとなり計算機がスレーブになる。

この方式によるデータ収集の動作の概略を図6に示す。同図で②の割り込みがあった場合、データ収集プログラム(CPU内バッファからディスクへのデータ転送をつかさどる)がデータ転送中ならば、非標準入出力制御ルーチンは②の割り込み

表1 各分析手法に対するデータ量 リサーチラボの分析室には種々の分析機器があり、それらは高速で、しかも多量のデータを発生する。またリサーチワークでは、分析機器の使用形態が定まっていなため、データ発生速度及びデータ量も一定してない。

分析機器又は手法		サンプリング 間隔 ms	データ量/日	標準データ
発光分光(定性, 定量)		1~4	2.1M 語	55K 語
X線回折	定性	18.75~1,200	344K 語	1.8M 語
	格子定数	600~2,400	18K 語	—
	定量	検量線法	600~2,400	24K 語
		非検量線法	150~1,200	172K 語
けい光X線分析	定性	300~750	88.8K 語	60K 語
	定量	$1 \times 10^3 \sim 8 \times 10^5$	1.44K 語	2K 語
	ステップスキャン	$2 \times 10^3 \sim 8 \times 10^5$	15K 語	—
	連続スキャン	2~40	350K 語	1.5K 語
イオンマイクロアナライザ	定性	深さ分析	$50 \sim 2 \times 10^4$	5K 語
		ステップスキャン	—	—
		深さ分析	—	—
	定量	連続スキャン	2~10	2M 語
		連続スキャン	10~40	700K 語
		ステップスキャン	$50 \sim 2 \times 10^4$	2K 語
オージェ電子分光分析	定性	1~	600K 語	10K 語
	定量	1~	600K 語	—
X線光電子分光分析	定性	100~	360K 語	75K 語
	定量	100~	100K 語	—
	化学シフト	—	—	10K 語
原子吸光分析(グラファイト炉)		10~100	150K 語	—
GC-MS		0.2~	3M 語	1M 語
X線マイクロアナライザ(非分散)	定性	5~	50K 語	1K 語
	定量	5~	10K 語	—

注：1. 本表でのデータは分析機器の性能、用途によって異なる。
2. 1語=2バイト

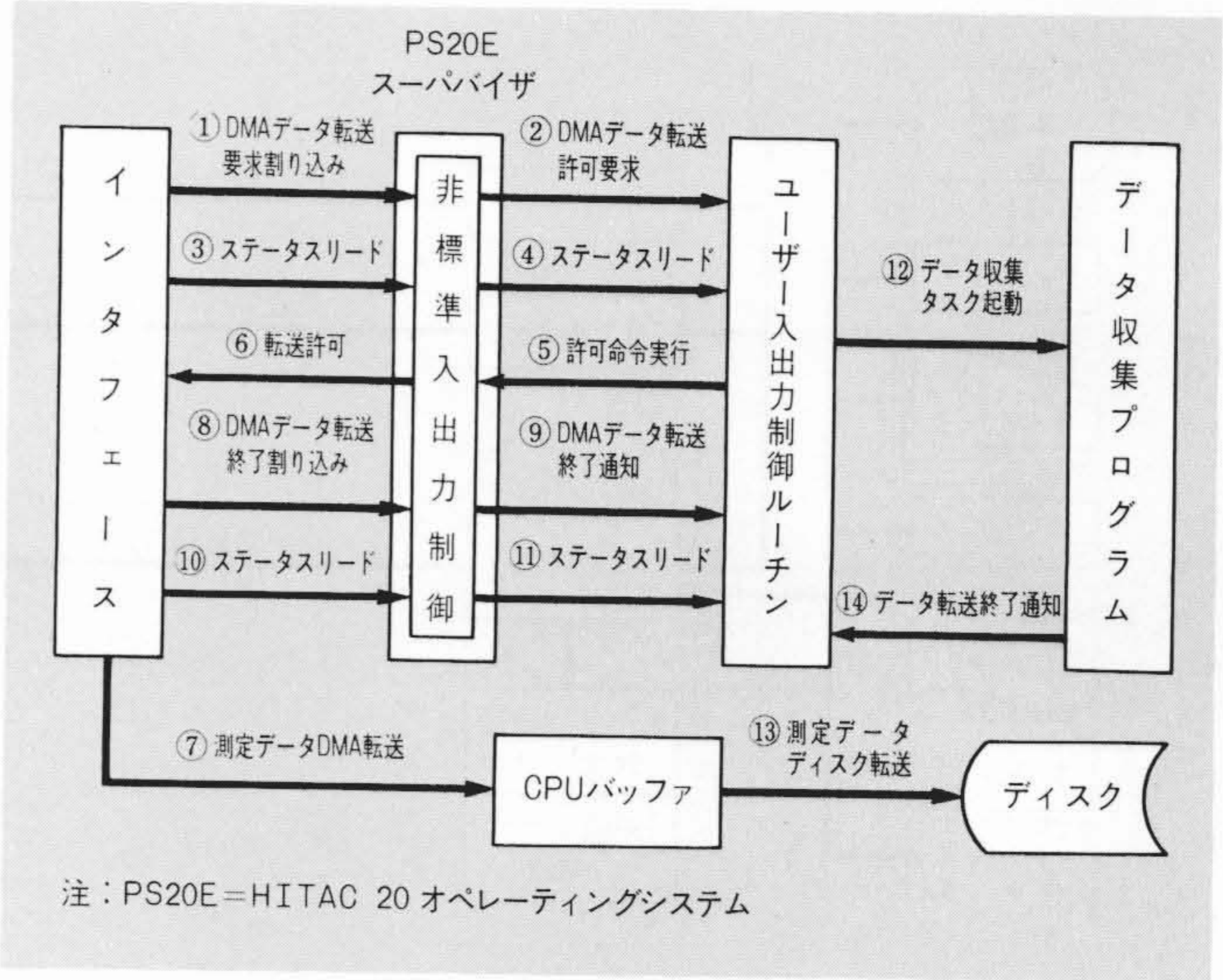


図6 データ収集動作概略 本図は分析機器1台当たりのデータ収集動作であり、複数分析機器の同時データ収集を行なう場合は、②データ転送許可要求に対する待ち行列管理がユーザー入出力制御ルーチン及びデータ収集プログラムで必要である。

(FFFF)₁₆コードがセットされた場合で、本インタフェースでは(FFFF)₁₆コードがセットされた時点で、DMAデータ転送要求をだす。ただし、連続測定の場合のデータ群とデータ群の間の時間は、 T よりも大きいとする)を考慮して、

$$(2M-1)(m+n) \leq S/u \dots\dots\dots(1)$$

m : CPU内バッファからディスクへの転送時間
 n : データ収集に関する m 以外のCPU処理時間
であればデータ収集が可能となる。

実際にHITAC 20では($m+n$)は最大約90msであり、本システムでは10台程度の分析機器のオンライン化を想定しているので、表1のサンプリング間隔から算出した S は表2となる。

- 以上のようなデータ収集方式では次の利点がある。
- (a) データファイル方式によってオフラインバッチモードでの使用が可能となり、データ再処理が行なえる。
 - (b) 複数の分析機器のデータ収集に対して画一的な取り扱いができ、分析機器1台当たりのオンライン費用を低減した。
 - (c) 2面バッファの使用により高速のデータ発生を行なう分析機器でもデータ収集のための専用計算機、又は分析機器に対する複雑な制御機構を用いることなく、1台の計算機で複数分析機器の同時データ収集が可能になった。

3.4 データ処理制御方式

3.4.1 データ処理プログラム構造

データ処理は、データ収集によってディスクファイルに格納されたデータを取り出して行なう(図7)。前章で述べたモジュール化と会話形式の考え方にに基づき、データ処理プログラム構造は図8に示すようなデータ処理制御プログラム(Data Processing Control Program: 以下、DPCPと略す)下に並列にデータ処理プログラムモジュール(Modularized Fortran Data Processing Program: 以下、MDPPと略す)を結合したものである。MDPPは多くのデータ処理手法に対処するため膨大な量(現在X線回折、けい光X線分析に対してモジュール数300、総量0.6M語/16bit)になり、将来新しいデータ処理手法の開発に伴い更に追加されるのでディスクファイルに格納しておく。

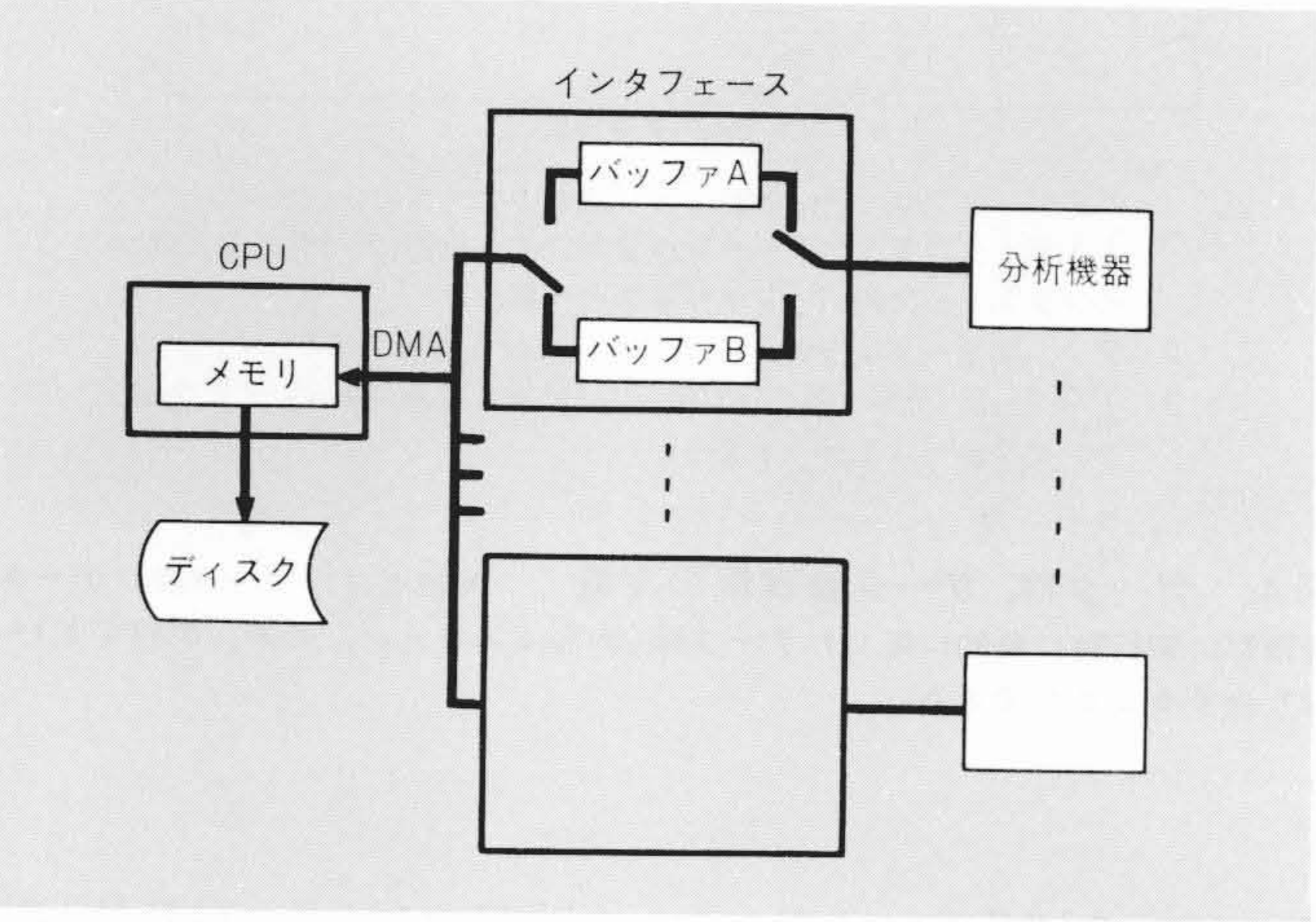


図5 インタフェース構造 インタフェースに2面バッファを用いることにより、データ発生速度の緩和を図り、分析機器に対する複雑な制御機構なしに複数台分析機器の同時データ収集が可能となる。

に対するキューを作成する。この割り込みキューは同一の分析機器のインタフェースの他のバッファからDMAデータ転送要求割り込みが発生されるまで(この時間を T)に消去されればよい。 T は通常はインタフェース内バッファ(一面)の大きさを S 、データ発生速度を u とすると $T=S/u$ である。この S に適当な大きさを与えて単位時間での各分析機器の割り込み頻度を均一にすると、 M 台の分析機器が同時にデータ発生を行なっている場合は特殊な場合(各分析計には2面のバッファがあり、A又はBのいずれかのバッファの先頭に

表2 デバイスインタフェースバッファサイズ 表1に示すようなデータ発生を行なう複数分析機器の同時データ収集を行なう場合、図5に示す2面バッファには、本表のようなバッファサイズが必要である。

分 析 機 器 名	バッファサイズ(1面)
発光分光分析	2 K 語
X線回折	120語
けい光X線分析	20語
イオンマイクロアナライザ	1 K 語
オージェ電子分光分析	2 K 語
X線光電子分光分析	20語
GC-MS	5 K 語
X線マイクロアナライザ	400語
原子吸光分析	200語

3.4.2 MDP P実行制御

MDP Pの実行方法は前章のモジュール化と会話手法で述べた方法である。すなわち、実験者が会話入力機器を介してデータ処理システム管理プログラムに入力したMDP P実行順データ(以下、PNと略す)に従って、DPCPはMDP Pを呼び出し実行させる。またデータ処理パラメータ(波形近似関数を定義するパラメータ、定性や定量分析に必要な各種補助情報など。以下、PPと略す)もPNと同時に入力できる。このPN及びPPのデータ処理制御データは、場合によっては数百キャラクタに及ぶことがあるので、種々の入力機器が用意されている(図7)。更に、ルーチンワークに適するように標準のPN、PPがディスクに登録されている。

3.4.3 データ処理タスク

データ処理は、各分析機器ごとに平行に同時処理する必要がある。したがって、本システムでは各分析機器ごとにDPCPとMDP Pで構成される独立なタスクをもっている(図8)。

3.4.4 データ処理形態

本システムでは、ルーチンワークとリサーチワークにより適するように次の2種類のデータ処理形態を用意している。

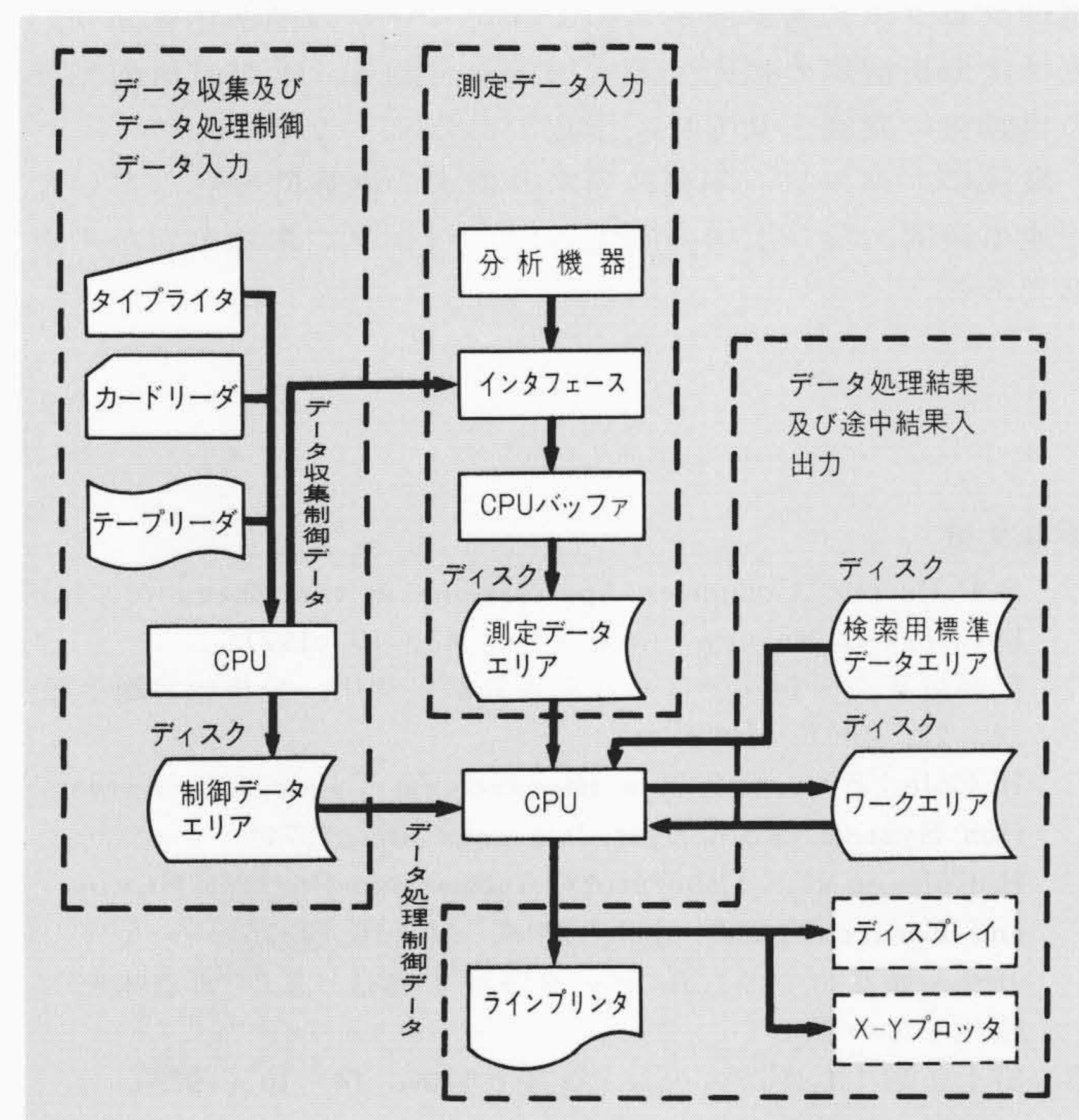


図7 各種データの流れ 収集されるデータは多量であり、しかも発生速度が高いため、いったんディスクに格納される。

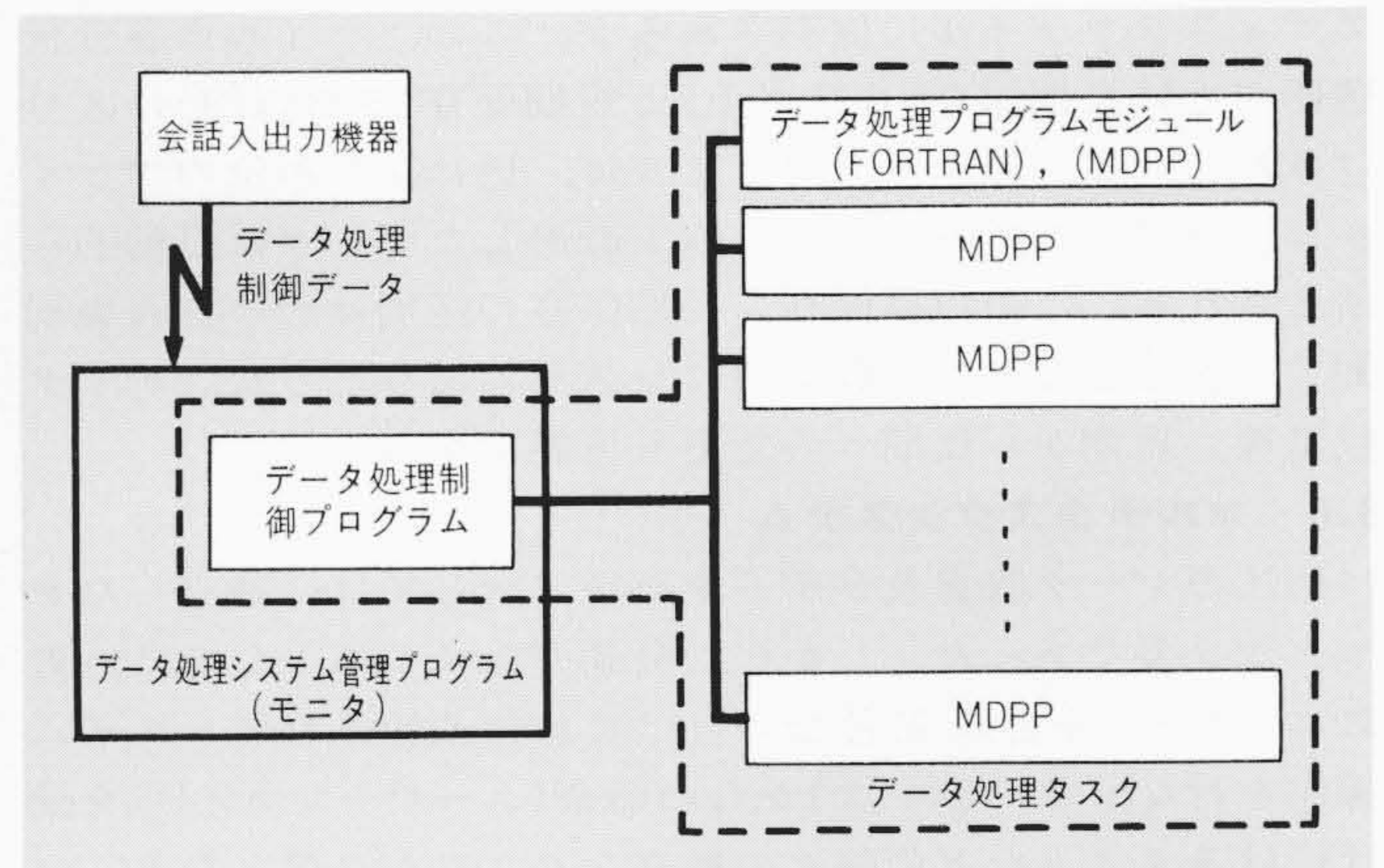


図8 モジュール化された会話型システムにおけるデータ処理プログラム構造 MDP Pの組み合わせによって、種々のデータ処理手法が可能となる。

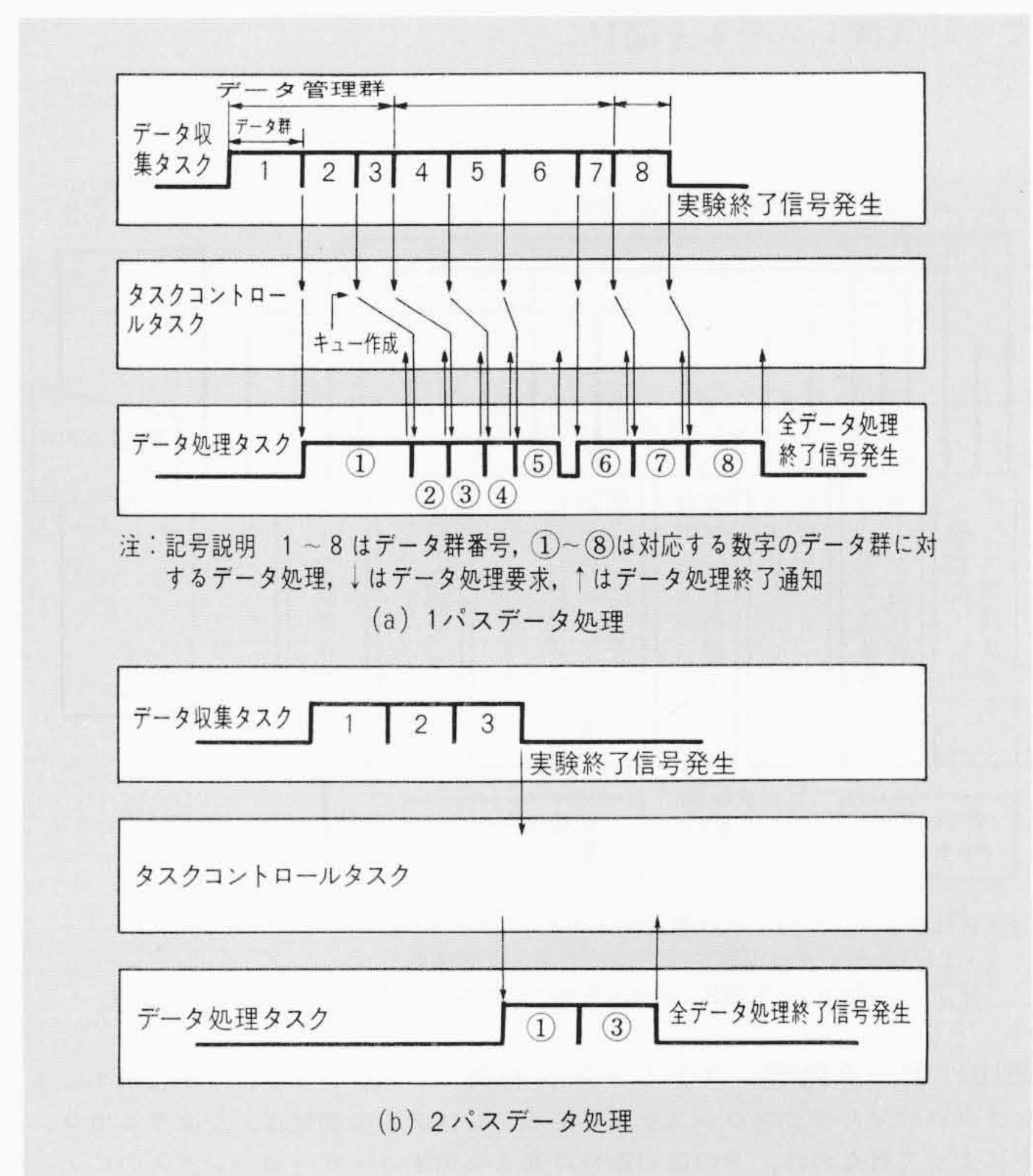


図9 1パスデータ処理及び2パスデータ処理 (a)データ収集とデータ処理が連続しているデータ処理形態で、ルーチンワークに適している。(b)データ収集とデータ処理が独立しているデータ処理形態で、リサーチワークに適している。

(1) 1パスデータ処理方式

この方式は1データ群を単位として、分析機器より取り込まれるデータをディスクを介して即時に処理していく方式であり、ルーチンワークに適している(図9(a))。

(2) 2パスデータ処理

この方式は、データ収集のタイミングとデータ処理のタイミングが全く独立しており、一種のオフライン的要素をもっていて、リサーチワークに適している(図9(b))。

3.5 データ保存方式

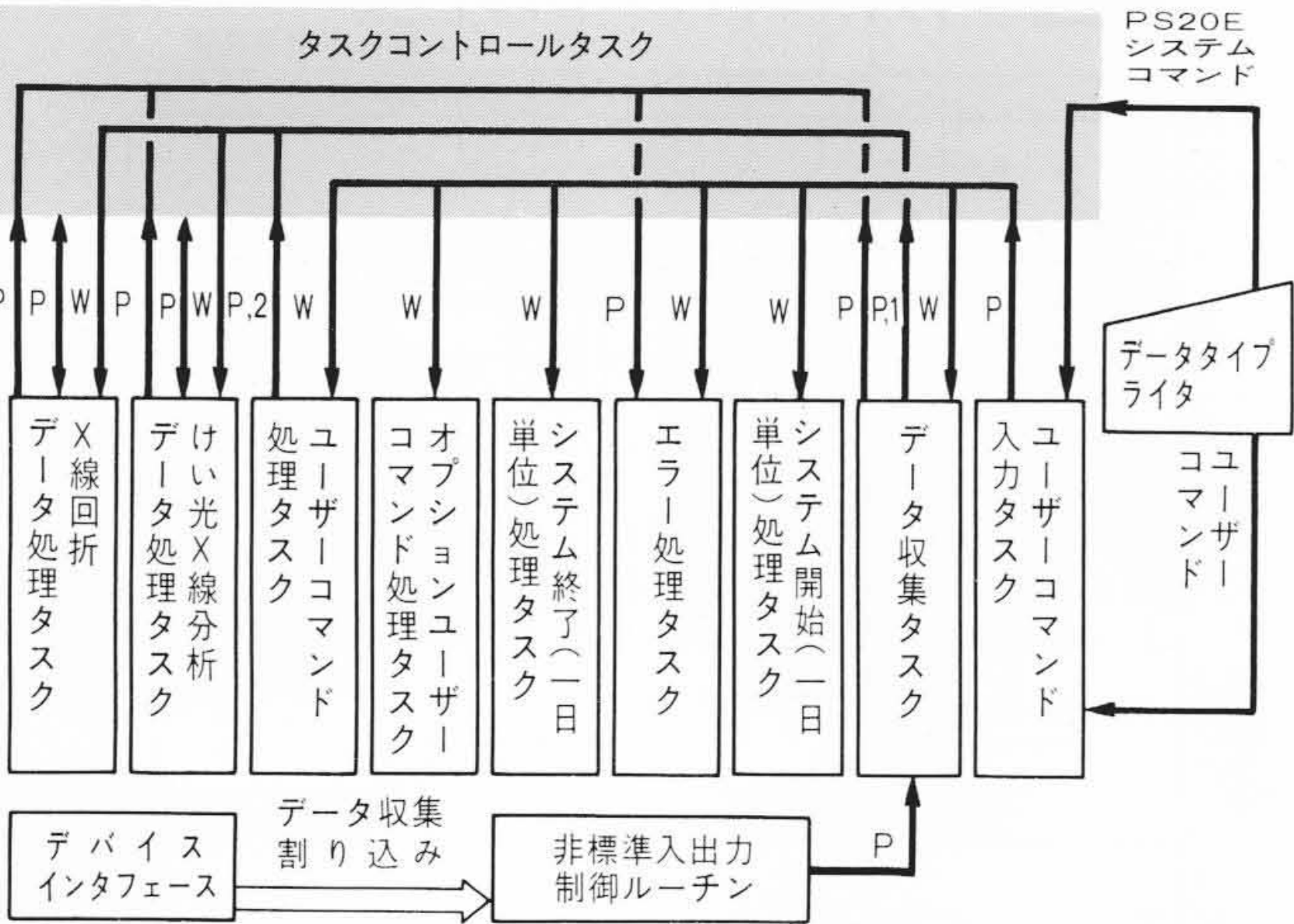
リサーチワークに対しては、データ処理の再実行のためにデータの保存が重要である。本システムでは、データはすべ

てディスクファイルに保存されるが、このファイルは各分析機器ごとに長期保存(6日以上)と短期保存(5日以内)に区分けされている。短期保存ファイルは、更に1日単位のファイルに区分けされており、6日以上経過したデータは自動的に消去される。この短期保存、長期保存の区別はデータ収集制御データとしてデータ収集時にシステムに与えるが、データ収集後、短期から長期への変更も可能である。

3.6 マルチタスクシステム

前述のデータ収集及びデータ処理に対しては、独立したタスクが必要であった。しかし、会話型システムとしては、更にユーザー(分析研究者ないしはこれに依頼されてシステム操作を行なうオペレータ)からの命令(ユーザーコマンド)を受け付けるタスクなどの種々の独立なタスクが必要となる。

本システムは、これらのタスクを制御するタスクコントロールタスクを中心とした図10に示すようなマルチタスクシステムである。また、会話機能として本システムで設定したユーザーコマンドを表3に示す。最後に本データ処理システムでの計算機システムを図11に示す。



注：Wはタスクの生成と実行要求(WAKE), Pはタスクの実行要求(POST)
1は1パスデータ処理要求, 2は2パスデータ処理要求
オプションコマンドは表3における\$SP, \$RESTART, \$SRL, \$SSL, \$QD, \$TD

図10 データ処理システムタスク制御 本システムは、図に示すようなタスクのマルチタスクシステムである。システムの開始は、システムコマンドによって行なわれ、その後の動作は表3に示すユーザーコマンド入力によって実行される。

表3 ユーザーコマンド一覧 本表のようなユーザーコマンドによりユーザーとシステムの会話が可能であり、特に、リサーチワークに対して使用しやすいものとなる。

コマンド名	意味	入力機器
\$I1	データ収集に対して長期、短期保存及び1パス、2パス処理の区別を与える。	DW
\$I2	データ収集及び1パスデータ処理に対して、データ収集、データ処理制御データを与える。	DW, CR, TR
\$I3	2パスデータ処理に対して、データ処理制御データを与える。	DW, CR, TR
\$I4	データ収集時に、インタフェースにデータ収集制御データ(測定条件など)を与える。	DW
\$GOOD MORNING	データ処理システムの1日の開始を宣言し、必要な初期設定を行なう。	DW
\$GOOD NIGHT	データ処理システムの1日の終了を宣言し、必要な終了処理を行なう。	DW
\$TD	保存されている測定データの状態を知りたいときに使用する。	DW
\$RESTART	システムダウンに対してダウン前と同一のコア状態に復帰させる。	DW
\$SP	データ処理制御データを標準のデータとして登録する(ルーチン分析に便利)	DW, CR, TR
\$SRL	長期保存測定データを消去する。	DW
\$SSL	短期保存測定データを長期保存に登録変更する。	DW
\$QD*	複数のデータ処理がマルチで行なわれているとき、その待ち状態を知らせる。	DW

注：記号説明 DW=データタイプライタ, CR=カードリーダー, TR=紙テープリーダー
*=現在は分析機器が2機種のため未サポート

4 結 言

リサーチラボの分析室では、システム化に対して種々の問題点があるが、特に未知の試料を分析する場合、及び分析手法を開発する場合に対するシステムの最適化が問題であった。本システム開発では、モジュール化と会話手法によりシステムと実験者の一体化を図り、分析条件及び分析手法の変更を容易にし、検討実験に適したシステムとしている。更に、集中管理方式、同時処理方式及びデータ処理に関しては、同時データ収集、言語はFORTRANなどのリサーチラボの分析室に適する機能を付加しており、現在稼働中のX線回折、及びけい光X線を例としたデータ処理システムは、分析業務の効率向上に有効なものとなっている。

今後、データ処理システムでのインタフェース及びデータ処理プログラムモジュールのよりいっそうの標準化を図り、更には分析機器の拡充、測定操作の自動化、及び試料前処理の自動化に発展させていく予定である。

最後に、システム開発に当たり多大な御援助をいただいた関連事業部、及び工場の関係各位に対し厚く謝意を表わす次第である。

参考文献

- 1) S.P.Perone: Computer Applications in the Chemistry Laboratory-A Survey, Anal Chem. 43, 10 (1971)
- 2) 二瓶好正: 分析化学における電算機の利用, 分析化学進歩総説, 22, 106R (1973)
- 3) H. Cole: System/7 in a Hierarchical Laboratory Automation System, IBM Syst. J. 4, pp. 307 (1974)
- 4) H. Cole, et al.: Laboratory Automation-Current Status and Future Trend, 計測と制御, 14, 10 (1975)
リサーチラボでのLA(データ処理を中心とした)の意味を明確化している。
- 5) 田上正昭: LAシステム, 計測と制御, 14, 10 (1975)
- 6) 石田順一: 最近のラボラトリー・オートメーションシステム, ぶんせき, 1976, 5, pp. 289
- 7) 江崎玲於奈: LA小特集に寄せて, 計測と制御, 14, 10(1975)



図11 分析データ処理におけるコンピュータシステム 日立製作所中央研究所分析センタでの会話型オンラインデータ処理システム中枢部のHITAC 20コンピュータシステム部分を示す。