

多目的マイクロコンピューターシステムと その化学への応用

植 村 允 勝*

A Multipurpose Microcomputer System and its Applications in Chemistry

Masakatsu UYEMURA

A microcomputer system has been modified to incorporate various external devices, including floppy disks, a mark card reader, a high speed printer, a XY-plotter, and other interface circuits for the control of instruments and data acquisition. Outlines of the interface circuits and their driver routines are presented. This system has been utilized in the classes of laboratory experiments, computer programming, and physical chemistry; it has also utilized in the control and data processing of a Raman spectrometer. Some results of these applications are presented, and the impact of the microcomputer revolution is discussed.

1. はじめに

我国の大学に於てコンピューターが本格的に利用される契機となったのは、1965年に設置された東京大学大型計算機センターを初めとする全国共同利用計算機センターの発足であろう。しかし、これらの計算センターの利用目的は研究に限られ、また発足当時の利用形態はバッチ処理が主体であった。このように利用目的と利用形態が厳しく制限された状況にあっては、各方面からコンピューターの利用について多くの期待が寄せられても、それらは実行不可能であった。たとえば、コンピューターを教育に応用することは外国に於て、かなり早い時期から試られ、既に成書もいくつか見られる¹⁾のに対して、我国に於ては、このような問題に対する取組みが遅れている。これは我国の大学に於て、TSSによる実時間処理システ

ムの普及が遅れたことにそのひとつの原因が求められるであろう。

また近年、計測機器の制御とデータ処理にコンピューターを応用する試みも盛んになりつつあり、これらには、主としてミニコンピューターが使われて来た。ここで問題となるのは、一般に、計測機器に比べ、コンピューターに多額の費用を必要とすることと、ミニコンピューターを自由に駆使するための技術を修得する事の難しさである²⁾。

ところで、最近のマイクロコンピューターの普及とその機能向上は目覚しく、このことは、コンピューターを必要な時に、必要な場所に於て利用可能にしたという点に於て画期的出来事である。しかし、現在、市販されているマイクロコンピューターシステムの多くは、そのままでは教育と研究に応用するための十分な機能を持っているとはいえない。ここでは、化学研究室に於て試作した、多目的マイクロコンピューターシステムの概

* 一般教育化学助教授
昭和56年10月6日受理

要とその応用例について紹介する。

2. 多目的マイクロコンピュータシステム (CHEM 1) の構成

化学研究室の多目的マイクロコンピュータシステム (CHEM 1) は Interface 社, MICACE-80 型マイクロコンピュータを骨格として, これを改造したものであり, 改造前のハードウェア構成とソフトウェア構成は, それぞれ図 1 及び図 2 に於て破線の枠内に示した通りであった. このシステムは, 紙テープを媒体とし, エディターとアセンブラを使ってソフトウェアを開発するように設計されていたので, 上記以外のソフトウェア (例えば BASIC) は紙テープからその都度ロードして実行せざるを得なかった. このシステムで使用可能な高級言語は BASIC であったが, これは文法を修得し易いという利点もある一方, (i) 文法が標準化されていない. (ii) サブルーチンを別のモジュールとすることができない. (iii) インタープリター方式の実行では演算速度が遅い. 等の欠点もある.

このような MICACE-80 型システムの機能強化をはかるためには, まず, 紙テープの代わりとなる外部記憶装置と, これを管理するオペレーティングシステム (OS) が必要となる. ここでは 8 インチ標準フロッピーディスクを外部記憶装置として採用した. また, OS としては 8080 CPU のもとで動く, デジタル・リサーチ社の CP/M を採用し, これに伴う改造は Interface 社に依頼した. これによって, フロッピーディスク内でファイルの管理を行うことが出来るようになり, 作業の能率が向上したと同時に, CP/M の管理下で動く多様なソフトウェアを使用できるようになった.

a. CHEM 1 のソフトウェア構成

現在の CHEM 1 のソフトウェア構成を図 1 に示す. ここでは, FORTRAN 等の高級言語が使用可能となった他に, エディターとアセンブラも従来のものより機能が強化されており, また, 各種のユーティリティーも加えられている. この中

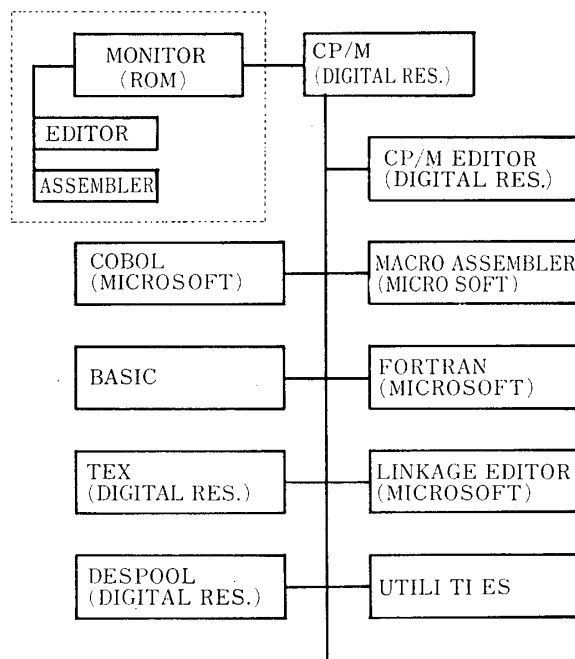


図1 CHEM 1 ソフトウェア構成図
(破線内は改造前のもの)

に含まれているマイクロソフト社の FORTRAN は JIS 7000 に近い水準を持っており⁴⁾, (i) 複素数演算が出来ない. (ii) 整数型データの桁数は最大が 16 ビットとやや小さい. 等の欠点も見られるが, 他方, (i) 一般の FORTRAN にはない入出力命令 (例 IN, OUT) があり, インターフェイス回路に対して直接に入出力を行うことが出来る. (iii) FORTRAN ランタイムルーチンを利用者が比較的容易に変更し, 自分の機器構成に合わせて使うことができる, 等の長所も持っている. これらを総合的に判断すると, マイクロソフト FORTRAN は, 文法上の多少の相違点に注意すれば, 本学電子計算機室の OKITAC SYSTEM 50 FORTRAN 等の JIS 7000 水準の仕様を持つものと十分に互換性のあるプログラムを作ることができるものである. この CP/M のもとでは, エディターによるプログラムの作製, FORTRAN の翻訳, 実行等を会話形式で行うことが出来るが, これらの機能は従来の大型計算機による TSS の機能に近いものである. また, ソフトウェア構成図中の TEX は, ファイルの内容を決められた書式に印刷するための一種のワードプロセッサー

であり、DESPOOL は、ファイルをプリンターに出力中に於てもシステムが別の仕事の実行を可能にするためのソフトウェアである。

b. CHEM 1 のハードウェア構成とインターフェイス

CHEM 1 を化学の教育、及び研究に応用するために、次に示すような各種の周辺機器を接続し、また、これに必要なインターフェイス回路とこれらを管理するソフトウェアを製作した。次にこれらの概要を示す。

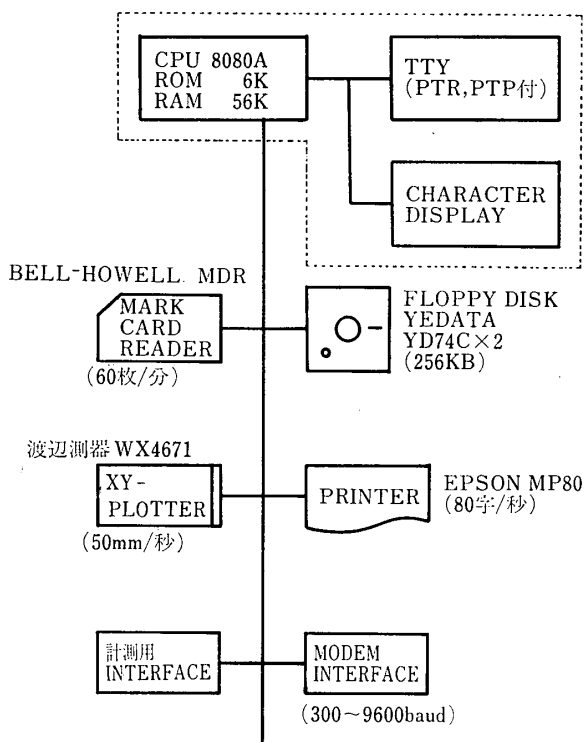


図 2 CHEM 1 ハードウェア構成図
(破線内は改造前のもの)

(1) マークカード読取装置

学生が提出するプログラム実習の課題などを CHEM 1 で処理するためにはカード読取装置が必要である。このために、Bell-Howell 社のマークドキュメントリーダー (MDR) を接続した⁵⁾。CP/M にカード読取装置まで管理させるのは難しいので、この MDR は専ら FORTRAN 語のプログラムによって動作させるものとし、FORTRAN のランタイムルーチンのうち、入出力装置の割当てを変更し、MDR のための入力ルーチンを追加

した。その結果、FORTRAN 語のプログラムで 5 番の入力装置を指定するときは、MDR からマークカードが読取られるようにした。MDR のインターフェイス回路と入力ルーチンの流れ図を図 3 と図 4 に示す。

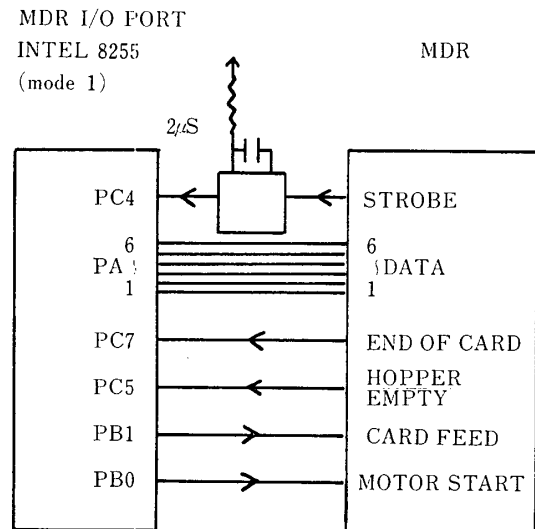


図 3 MDR インターフェイス・ブロック
ダイアグラム

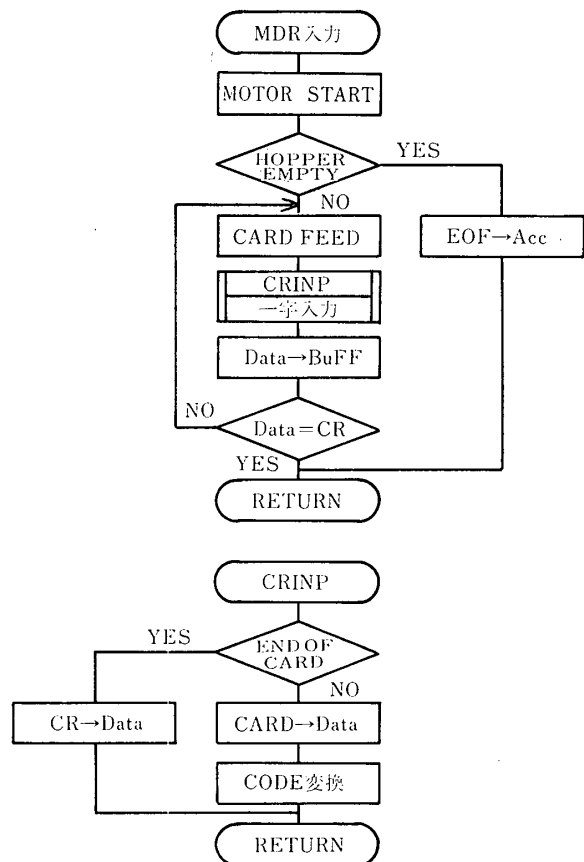


図 4 MDR 入力ルーチンの流れ図

(2) プリンターと XY-プロッター

ソフトウェアの開発を能率的に行うためには高速のリスト出力装置が必要であり、また、コンピュータによって行ったデータ処理の結果を単なる数値として表わすだけでなく、グラフのような図形として表わすことも必要である。そこで、リスト出力と図形を描くために、信州精器製 MP-80 型プリンターと渡辺測器製 WX 4671 型 XY-プロッター (MILOT) を接続した⁶⁾。プリンターは CP/M によって管理することが出来るが、XY-プロッターは MDR と同様に FORTRAN 語のプログラムによって動作させるものとして、FORTRAN のランタイムルーチンを変更、及び追加し、10 番の出力装置を指定すると XY-プロッターに出力されるようにした。一般の他のコンピュータシステムでは予め決められた命令を実行するサブルーチン群が用意されており、XY-プロッターを使用する場合には、利用者は必要に応じてこれらのサブルーチンを CALL することによって作図を行うのが普通である⁷⁾。そこで、ここでは、プログラムの互換性を出来る限り保つために、大型計算機の XY-プロッター用サブルーチンに近い機能を持ったサブルーチン群を作っ

表 I 表プロッターサブルーチン一覧表

	サブルーチン名	機 能
1	MOVE	直線的移動 (ペンアップ)。
2	PLOT	直線的移動 (ペンダウン)。
3	MARK	指定するマークを描く。
4	CHAR	文字の大きさと向きの指定。
5	LINE	実線、破線の別と破線ピッチの指定。
6	AXIS	X 軸, Y 軸を描く。
7	SCALE	X 軸, Y 軸上の目盛に数値を描く。
8	CONV	作図のための変数変換。
9	SYMBOL	指定する文字列を描く。
10	NUMBER	実数型データの値を描く。
11	INTEG	整数型データの値を描く。
12	PDATA	一連の測定点をマークで表わす。
13	CIRCLE	円, 楕円, または弧を描く。
14	RECT	長方形を描く。
15	GRID	格子を描く。

た。これらのサブルーチン名とそれらの機能を表 1 に示す。

(3) 計測器制御とデータ入力のためのインターフェイス回路

CHEM 1 は化学研究室に於て自作したラマン分光計の制御とデータ処理にも使用されている。このために CHEM 1 は (i) ステッピングモーター制御回路, (ii) パルス計数回路, (iii) A/D 変換回路, (iv) インターバルタイマー, を持っている。これらの回路はラマン分光計の構成と原理に深く結びついており、全部をここに示すことはできないので、ここでは A/D 変換回路について説明することに止める⁸⁾。

この A/D 変換回路は二重積分方式の A/D 変換用 CMOS IC である Intersil 社の ICL-7109 を使用しており、12 ビットのデータ (B1~B12) の他にオーバーレンジ (OR) と入力の極性 (POL) を出力することができる⁹⁾。二重積分方式の欠点は変換時間が長いことであるが、この変換回路では、約 100 msec 以下であり、これは一般のチャートレコーダーに出力するデータを変換することを想定すれば十分に実用に耐え得るものである。

A/D 変換回路のような外部機器を制御するのはアセンブラー語によることが多いが、データ処理は殆んどの場合、FORTRAN 語で行なわれるので、FORTRAN 語のプログラムに於て

CALL ADCIN (IDATA, IOVR)

を実行すると、A/D 変換が行なわれるサブルーチン ADCIN を作った。ここで IDATA は 2 バイト長、2 の補数表示による整数型データであり、1 mV 単位で表わされた A/D 変換回路への入力電圧を表わす。また IOVR は 1 バイト長の論理型変数であり、変換中にオーバーレンジが生じたときには .TRUE., 生じなかったときには .FALSE. の値が代入される。次にこの A/D 変換回路のブロックダイヤグラムとサブルーチン ADCIN の流れ図を図 5 と図 6 に示す。

CHEM 1 にはこの他に、直列データ転送のためのモデムインターフェイス回路があり、他の端

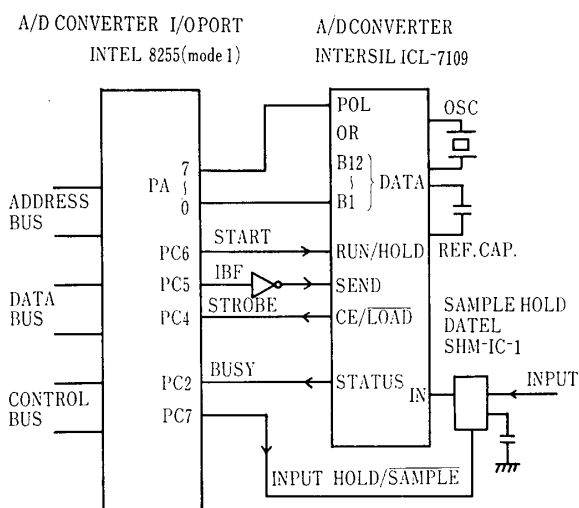


図 5 A/D 変換回路ブロックダイアグラム

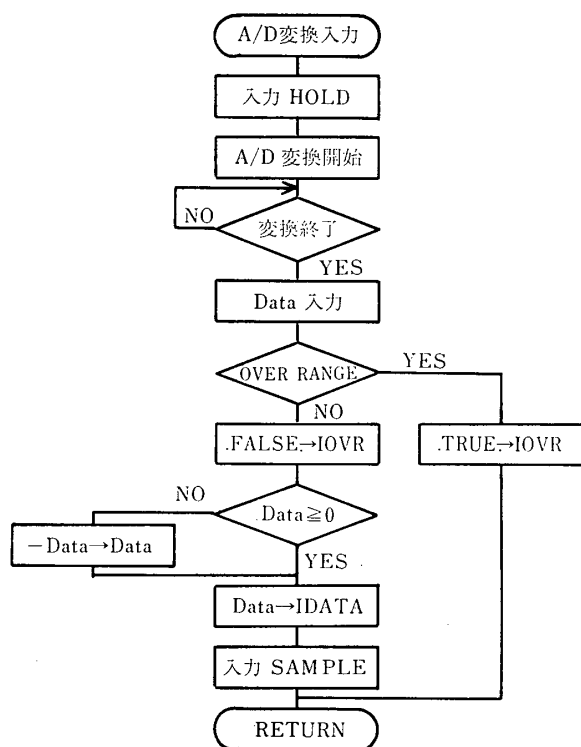


図 6 サブルーチン ADCIN の流れ図

末、または他のコンピューターと情報の交換を行うことができる¹⁰⁾。

3. 多目的マイクロコンピューターシステム (CHEM 1) の応用

a. FORTRAN の演習授業

「化学コンピュータープログラミング」は 3 年次工業化学科の学生を対象とした 1 単位の演習で

あり、FORTRAN の文法の基本と化学への応用を学習させることを目的としている。従来、この授業では、学生がマークカードにプログラムをマークし、電子計算機室の OKITAC SYSTEM 50 によって授業時間内に処理していた。ところが、90 分の授業時間の枠内で、処理→デバッグ→修正という過程を納得が行くまでくり返すことは難しく、その結果、学生に与えられた課題のうちの相当部分を授業時間外に処理しなければ授業は円滑に進まない。しかし、担当教員が授業時間外に電子計算機に出向いて指導することも難しい。そこで、教員のところにプログラムが出来次第持って来させて、教員の空いている時間を利用して、CHEM 1 の MDR から入力し、マイクロソフト FORTRAN を使って処理している。マイクロソフト FORTRAN と OKITAC の FORTRAN の文法上の相違点は初心者で作製するプログラムに於ては殆んど問題にならない。CHEM 1 の処理速度は OKITAC に及ばないが、学生のジョブが殺倒しない限り、実用上問題にはならない。CHEM 1 では、学生のプログラムに誤りがあるとき、学生にその誤りを指摘させた上でエディターを使ってプログラムを修正して再処理を行うことができるので、わずらわしいマークカードの作り直しを学生にさせずに済むという長所もある。学生に課した課題の提出を学期末に求めたところ、そのうちの約半数は CHEM 1 によるものであった。

b. 物理化学の演習授業に於ける分子軌道の計算

工業化学科 3 年次の「工業物理化学演習」の一部では Hückel MO の簡単な解説を行っている。このような理論を学ばせるときには、具体例に対して直ちに適用してみせることが望ましいことは言うまでもないのであるが、Hückel MO を求めるための永年方程式を解析的に解くことが出来るのは、極めて簡単な分子であるか、または高い対称性を持つ分子に限られてしまう。従って化学的に興味がある分子を取り上げようとする、永年方程式を数值的に解く必要が生ずるが、これを筆

算で行うことは難しい。そこで、上記の演習授業では、学生に MO 法を応用する機会を与えるために、Hückel MO を計算するためのプログラム HUCK を作り、学生がマークカードに用意したデータをもとにして直ちに MO の計算が出来るようにした。

c. 化学実験に於ける学生の実験データの検討¹¹⁾

写真工学、画像工学、及び工業化学科の1年次生を対象とする「化学実験」では、実験終了後、直ちにデータを整理させて、教員がこれを点検することにより、学生が疑問を持ったまま実験室から帰って行くことのないように努めている。ところで、教員がデータの点検の際に指摘しなければならない事項のうち、かなりの部分は学生全体に共通した問題であり、例えば、数値計算に於ける有効数字の取扱いなどはそのひとつである。そこで、滴定の実験データとそれから得られる未知試料の濃度などを入力して、有効数字の取扱いが正しいか？、数値計算の結果が正しいか？ 点検し、誤りを指摘するプログラム TITR を作った。

このプログラムはデータ処理の誤りを単に数値の相対誤差の上から判断するのではなく、有効数字の桁数の扱いが正しいか否かも判断している点が特徴である。次に TITR の実行例を図7に示す。

また、過酸化水素の分解速度の実験に於て反応物質の濃度の対数 $\log C$ を反応時間 t に対してプロットした結果を XY-プロッター上に描き、それから最小二乗法によって反応速度定数 k を求めるプログラム KIN も作った。これは、誤差を含む一連のデータ (x_i, y_i) に対して直線をあてはめるときには、最小自乗法によるべきであることを理解させることを目的としている。

これらのプログラムは現在のところ試験的に使用しているが、これらを効果的に利用することによって、学生の理解の程度を、より詳しく点検することができるであろう。

d. ラマン分光計の制御とデータ処理⁸⁾

一般に、各種の分析機器から得られるデータは装置に固有の系統的誤差や雑音などの偶然誤差を含んでいる。従って、このようなデータから真の情報を得るためには装置の再現性のよい制御とデ

***** TEKITEI NO DATA SHORI *****

HYOJUN-YOOEKI NO NOODO (N) WA ?	<u>0.1012</u>	} 標準溶液の濃度と体積を入力
HYOJUN-YOOEKI NO TAISEKI (ml) WA ?	<u>10.00</u>	
1-BANME NO TEKIKARYO (ml) WA ?	<u>9.77</u>	…滴下量の入力開始
2-BANME NO TEKIKARYO (ml) WA ?	<u>9.67</u>	
3-BANME NO TEKIKARYO (ml) WA ?	<u>9.7</u>	} 9.7 と9.70とを有効数字の桁数の違いとして 区別する。
???? TAISEKI WA 0.01 ml MADE YOMUKOTO		
3-BANME NO TEKIKARYO (ml) WA ?	<u>9.70</u>	
4-BANME NO TEKIKARYO (ml) WA ?	<u>0.0</u>	…滴下量入力の打ち切り
TEKIKARYO NO HEIKINCHI (ml) WA ?	<u>9.71</u>	
SAMPLE NO NOODO (N) WA ?	<u>0.1042</u>	…滴下量の平均値の有効数字は3桁であるため
???? YUUKOOSUJI NO MACHIGAI		
SAMPLE NO NOODO (N) WA ?	<u>0.104</u>	
***** SEIKAI DESU TSUGI O DOZO *****		

図7 プログラム TITR の実行例 (~~~~部はコンソールからの入力)

ータ処理とが必要となる。このような目的のために、CHEM 1 はインターフェイス回路を介して自作のラマン分光計に接続され、分光計の制御とデータ処理に使われている。また、これを実行するためのプログラム RAMAN を作った。これによって、光源強度の変動に対する補正、S/N 比の向上などを行うことができる他に、スペクトルの微分、積分等の処理も行うことができる。また、データ処理する前の生のデータをフロッピーディスク内にデータファイルとして保存しておき、このデータを必要に応じて呼び出して使用することもできる。

4. ま と め

ここで紹介した多目的マイクロコンピュータシステム (CHEM 1) はフロッピーディスクを外部記憶装置とすることによって、その機能を格段に向上させることができた。その結果として、CHEM 1 は大型計算機システムの TSS の機能に近い機能を持つことができるようになった。

また、CHEM 1 には必要に応じて種々の入出力装置、及び計測用のインターフェイス回路を接続し、これらを最も一般的な高級言語である FORTRAN によって動かすことができるようになった。CHEM 1 が持つこれらの装置、及びインターフェイスの機能は従来ではミニコンピュータに於て実現されていたものに相当する。

マイクロコンピュータをこのように利用者の要求に対して柔軟に対応させることができたのは、マイクロコンピュータの構造が単純であり、かつ、そのハードウェア、及びソフトウェアについて、必要な情報が利用者に公開されているからである。即ち、マイクロコンピュータの出現は、コンピュータをコンピュータ室から解放して、必要な時に必要な場所に於て利用できるようにただけでなく、従来は利用者にとって殆んどブラックボックスに等しかったコンピュータシステムの内部を利用者が知る機会を与えたという点に於ても画期的である。

このように、コンピュータを利用する環境は著しく改善されて来たが、我々がこれからコンピュータの利用について考えるとき、次のような問題が重要であると思われる。即ち、従来の大型コンピュータ、及びミニコンピュータの機能のうちのかかなりの部分がマイクロコンピュータによって置換えられつつあると同時に、マイクロコンピュータの進歩は、コンピュータを応用した新しい技術を産み出し、これを急速に普及させつつあるから、我々はこれらを正しく評価して、自分の視野の中に入れておかなければならない。更にもうひとつ重要なことは、何を目的としてコンピュータを利用し、それによって我々が何を得ることができたかを、ここで改めて確認することが必要である。そして、これは同時に、我々が行っている教育と研究の解剖と再点検を要求されることになるであろう。これらの問題を解決して行く中で、我々は新しい教育のあり方とコンピュータ利用技術の新しい可能性を開くことができるであろう。

(注) 本稿印刷中に入手したマイクロソフト FORTRAN の新版 (Ver. 343) では、整数型データが 16 ビットから 32 ビットに拡張され、また IMPLICIT 文が加えられるなどの機能強化がはかられているので、マイクロソフト FORTRAN と OKITAC SYSTEM 50 FORTRAN との文法上の相違点は更に小さくなった。

参 考 文 献

- 1) J. S. Mattson, H. B. Mark, Jr., and H. C. MacDonald, Jr., "Computer-assisted instruction in chemistry (Part A and Part B)", Dekker (1974).
G. Lipperty (editor), "Computer-assisted test construction", Education Technology Pub. (1974).
"Computer series" in the Journal of Chemical Education.
- 2) 桜井捷海, "研究者と技術者のためのミニコン技術入門", 共立出版 (1974).

- 3) R. Zaks (村瀬康治訳), 「標準 CP/M ハンドブック」, アスキー出版 (1981).
- 4) "Microsoft FORTRAN Reference Manual", Microsoft (1978).
- 5) "Mark Document Reader User's Manual", Bell and Howell.
- 6) 中村一治, "プロッタ入門", ラジオ技術社 (1980).
- 7) "XY プロッター利用の手引", 東京大学大型計算機センター (1976).
- 8) 植村允勝, "ラマン分光計の制御とデータ処理", 化学教育, Vol. 29, No. 2, 106 (1981).
- 9) Intersil Linear Data Book.
- 10) 石田晴久, "マイコンをインテリ端末にするための FORTRAN プログラム", 東京大学大型計算機センターニュース, Vol. 12, No. 10, 46 (1980).
- 11) 植村允勝, "授業で扱う種々の実験データの整理Ⅲ 中和滴定と反応速度", 化学教育, Vol. 29, No. 2, 109 (1981).