



Analytik  
Biotechnologie  
Datenbanken  
Ernährungsberatung  
Molecular Modelling  
Organische Chemie  
Rechenprogramme  
Schule und Ausbildung  
Spezialsoftware  
Zeichenprogramme

# UMSCHAU SOFTWARE

**Gesamtverzeichnis  
1995/96**

## Untersuchung und Optimierung chemisch-technischer Zusammenhänge

Das Programm ANALYSIS Version 5.5b ermöglicht es selbst kleinen Laboratorien, chemisch-technische Zusammenhänge auf der Grundlage von empirisch bestimmten Meßdaten schnell und effizient zu untersuchen. Dies geschieht auf dem Wege der Umformung von Meßdaten zu Funktionsgleichungen mit anschließender Erstellung eines mathematischen Modells. Mit Hilfe eines solchen Modells ist es daraufhin möglich, Zusammensetzungen von Zubereitungen oder Betriebsparameter vom Rechner selbst optimieren zu lassen. Das Programm macht damit Algorithmen für den Laboralltag verfügbar, die bislang nur wesentlich umfangreicheren Systemen vorbehalten waren. Dies gestattet Auswertungen nach dem Prinzip "Meßdaten rein - Optimum 'raus" und vermeidet somit wenig erfolgversprechende und daher Zeit und Geld kostende Versuche.

### Systemanforderungen

Die Software läuft auf IBM-kompatiblen PC ab 286er aufwärts. Getestet wurde sie auf 286er, 386er und 486er unter MS-DOS 3.0, MS-DOS 3.3, MS-DOS 5.0, NOVELL ELS 286 und NOVELL ELS 386. Das Programm weist einen modularen Aufbau auf, wobei die einzelnen Module sogar schon auf alten XT-Geräten ab DOS 2.0 lauffähig sind. Auf PC's ab 286er aufwärts erfolgt die Steuerung der individuell zu bedienenden Module mittels einer mitgelieferten Benutzeroberfläche nach SAA-Standard.

Unter WINDOWS wird diese nicht benötigt, so daß es hier möglich ist, die Module jeweils im DOS-Fenster zu betreiben. Auf der Festplatte erfordert das ausbaufähige Softwarepaket einen Speicherplatz von ca. 1,5 MByte (3 MByte im Vollausbau). Als freier LMB-RAM müssen mindestens 485 KByte zur Verfügung stehen. Oberhalb der 640-KB-Grenze des DOS kann das Programm auch auf einer ausreichend großen RAM-Disk (4 MByte empfohlen) betrieben werden.

### Installation

ANALYSIS wird in komprimierter Form und mit einer Installationsroutine versehen geliefert. Auf der Diskette befinden sich daher die Programmbeschreibung LIESDIES.EXE, die Installationsroutine INSTALL.BAT, das selbstentpackende Archiv ANALYSI#.EXE mit den einzelnen Programm-Modulen sowie das selbstentpackende Archiv PDMOD#.EXE mit einigen Public-Domain-Programmen als Beigabe, wobei die Letzteren über Analysis angesprochen werden. Installation und Entpacken der Module werden automatisch von INSTALL.BAT nach dem Schema INSTALL [Quell-Laufwerk:] [Ziel-Laufwerk:], also beispielsweise mit INSTALL A: C: vorgenommen. Die Installationsroutine legt daraufhin ein Verzeichnis mit dem Namen ANALYSIS auf dem Ziellaufwerk an. Existiert ein derartiges Verzeichnis bereits, so wird dies dem Benutzer gemeldet, und es erfolgt keine Programminstallation. Ob ausreichend Speicherplatz zur Verfügung steht, wird von der Installationsroutine nicht geprüft. Im Falle von unzureichendem Plattenspeicher kommt es daher zum Abbruch der Softwareinstallation unter Ausgabe einer DOS-Fehlermeldung.

Verläuft die Installation hingegen erfolgreich, so werden die nun nicht mehr benötigten Archive im Ziellaufwerk automatisch gelöscht und die erfolgreiche Programminstallation wird auf dem Bildschirm gemeldet. Der Start der Software kann daraufhin im Kommandozeilenmodus durch die Eingabe von 'START' im ANALYSIS-Unterverzeichnis erfolgen. Die Erläuterung einer weiteren Installationsroutine für die RAM-Disk (inklusive des Aufbaus der dazu notwendigen Konfigurationsdateien) findet sich in der LIESDIES.EXE-Beschreibung.

## **Programmaufbau**

ANALYSIS entstammt der Laborpraxis und ist nach der Methode des 'Software-Bundlings' im Verlaufe eines Jahrzehnts historisch gewachsen. Die Versionsnummer des Programms weist auf diesen Umstand hin. Es fanden Programmiersprachen wie PASCAL, diverse BASIC-Dialekte, ASSEMBLER, EBL usw. für die einzelnen Module Verwendung ('Multi-Language-Programming', MLP). Diese werden nach dem Programmstart vermittelt der SAA-Oberfläche aufgerufen. Abbildung 1 zeigt die an diesem Punkt verfügbare Programmstruktur. Alle Module liegen zwecks Einsparung von Speicherplatz in (mittels LZEXE) gecrunchter Form vor und sind zudem mehrfach laufzeitoptimiert worden.

Zu den Modulen selbst: Unter dem Menüpunkt 'INFO' sind fünf compilierte Textdatenbanken zu finden, welche die Anleitungen für die einzelnen Module, Anwendungsbeispiele, Grundlagenbeschreibung etc. enthalten. Suchfunktionen für einzelne Wörter sind selbstverständlich vorhanden. Diese Funktionen bieten dem Einsteiger in das System auf einfache Weise die Möglichkeit, sich über die Arbeitsweise des Programms zu informieren und mit chemometrischen Anwendungen vertraut zu machen. Unter dem Menüpunkt 'MEßDATEN' wird das Modul UMRECHNE zum Erstellen bzw. Manipulieren der index-sequentuellen ASCII-Meßdatenliste erreicht. Da lineare Zusammenhänge zwischen Meßwerten erfahrungsgemäß nur in den seltensten Fällen auftreten, gestattet dieses Modul es darüberhinaus, die Meßdaten mit einer Funktion zu überlagern - also z. B. alle Y-Werte zu radizieren oder alle X-Werte zu logarithmieren usw. Die Problematik unzulässiger Rechenoperationen (Kehrwerte von Null o. ä.) findet durch eingebaute Korrekturalgorithmen Berücksichtigung. Die Datenliste wird daraufhin unter dem Menüpunkt 'FUNKTIONEN' einer Regressionsanalyse unterzogen - hier finden sich die Module REGAN und MATRIX für die lineare, linearisierbare und die multiple Regressionsanalyse. Es sei noch angemerkt, daß es sich bei dem REGAN-Modul um den Nachfolger des gleichnamigen Programms aus der Umschau-Software handelt [2]. Mit Hilfe von REGAN sowie MATRIX erfolgt die Umformung der gemessenen Daten zum mathematischen Modell.

Schließlich beinhaltet die Software noch die Schnittstellen für die Sharewareprogramme MERCURY unter dem Menüpunkt 'BERECHNEN' sowie für QeditAdvanced unter dem Menüpunkt 'EDITOR'. Bei dem Letzteren handelt es sich um einen ASCII-Texteditor, mit welchem das mathematische Modell in idealer Weise gestaltet und kommentiert werden kann. Zudem ist dieser Editor sehr gut zur Erstellung von ASCII-Sourcecodes für die Programmierung unter C, BASIC, PASCAL etc. geeignet und kompatibel zum Übersetzungsprogramm FB-TRANSLATOR [3]. MERCURY hingegen bildet den Nachfolger des früheren kommerziellen Borland-Programms EUREKA [4] und führt mit Hilfe des von ANALYSIS generierten mathematischen Modells die Optimierung durch.

## **Anwendung**

Bei ANALYSIS handelt es sich um ein reines Rechenprogramm - nicht mehr und nicht weniger. Dieses Programm wurde allerdings speziell für den Einsatz im chemisch-technischen Bereich konzipiert. Seine Entwicklung resultierte aus der Anforderung, mit einfachster Laborausrüstung ein Maximum an Leistung zu erreichen. ANALYSIS benutzt zahlreiche mathematisch-statistische Verfahren zur Untersuchung der funktionalen Beziehungen zwischen den gemessenen Eingangsdaten und kann immer dann eingesetzt werden, wenn die Meßdaten keine Normalverteilung in Kombination mit gleichbleibender Tendenz aufweisen.

ANALYSIS vermag zwischen 2 und 450 Meßwertpaaren sowie 2 bis 300 Meßwertupel bei einer 15\*15-Matrixkonfiguration zu verarbeiten. Für 9 von 10 Meßreihen reicht dies aus. Umfangreichere Datenbestände hingegen müssen in kleinere Subsysteme aufgeteilt werden. Komplexe dynamische (chaotische) Systeme lassen sich zwar nicht untersuchen, wohl aber die darin auftretenden und der Ramsey-Theorie folgenden regelmäßigen Strukturen. Alle von der Software zu behandelnden Daten müssen in Form einer unformatierten Datenliste, d. h. als indexsequentielle ASCII-Datei vorliegen. Diese Datenliste kann sowohl durch manuelle Eingabe unter ANALYSIS selbst sowie unter QeditAdvanced erstellt oder aber - ggf. nach entsprechender Konvertierung - von Online-Titratoren und anderen Meßgeräten übernommen werden.

Die Liste muß die Bezeichnung WERTE.LST tragen. Nach dem Handshaking-Verfahren wird WERTE.LST unter 'MEßDATEN' oder unter 'FUNKTIONEN' eingelesen, wobei ANALYSIS die Informationen bzgl. des Datenumfangs aus der automatisch erzeugten Datei INI.NEU entnimmt. Unter 'FUNKTIONEN' werden die empirischen Daten direkt in Funktionsgleichungen überführt. Das Resultat erscheint auf dem Bildschirm und kann bei Bedarf als \*.EKA-File, d. h. als direkt unter MERCURY lauffähiges mathematisches Modell abgespeichert werden. Wird WERTE.LST hingegen unter 'MEßDATEN' eingelesen, so lassen sich die Meßwerte mit verschiedenen Funktionen überlagern. Einer solchen Überlagerung muß immer (!) zunächst die Datenkorrektur (vgl. Abbildung 2) vorausgehen. Der vom System vorgeschlagene Korrekturbetrag

befindet sich dabei außerhalb der Meßgenauigkeit, so daß eine Verfälschung der Meßdaten praktisch ausgeschlossen ist. Erst nach diesem Schritt kann die Funktionsüberlagerung (s. Abbildung 3) durchgeführt werden. Diese Manipulationen der Meßwerte erfaßt ANALYSIS automatisch in einer Datei mit dem Namen MANIP.ASC, welche sich später vermittle des Editors in das mathematische Modell integrieren läßt. Im Anschluß an die Funktionsüberlagerung können die nun umgeformten Daten wieder wie beschrieben einer Regressionsanalyse unterzogen und als mathematisches Modell abgespeichert werden.

Der Menüpunkt 'BERECHNEN' aktiviert bei dem voll ausgebauten System die MERCURY-Shareware für den Lauf des - ggf. unter 'EDITOR' noch verbesserten - mathematischen Modells. Je nach der Modellstruktur führt MERCURY (numerische) Berechnungen oder Optimierungen durch, deren Resultate an beliebige Ausgabeeinheiten gegeben werden können. Dabei sind Optimierungsalgorithmen dergestalt zu programmieren, daß man ein gewünschtes Sollresultat zusammen mit den Bereichen für die Eingangsvariablen und den Funktionsgleichungen vorgibt. Der PC iteriert dann die numerischen Beträge für eben diese Variablen und optimiert auf diese Weise eine Rezeptur oder die Parameter für einen Prozeßschritt. Letztlich wird das Programm unter 'ENDE' beendet und zurück zur DOS-Ebene verzweigt.

Die Erfahrungen bei dem praktischen Einsatz der Softwaresammlung zeigen, daß sich das Programmpaket sehr gut bei der Entwicklung von Qualitätskontrollmethoden für Wareneingang, Prozeßüberwachung und Warenausgang, bei der Reaktionsaufklärung in Zubereitungen, bei der Löslichkeitsuntersuchung und -optimierung von Polymeren, bei der PC-Generierung von Produktrezepturen und Prozeßparametern, bei der Dokumentation und bei der Erstellung von Online-Meßverfahren für chemisch-technische Prozesse eignet. Zwar vermag es das voll ausgebaute System keineswegs, Messungen selbst zu ersetzen, doch lassen sich vermittle Computersimulation wenig aussichtsreiche Folgeversuche von vornherein ausgrenzen. Bei der Messungsauswertung kann ANALYSIS die dazu erforderliche Zeit erfahrungsgemäß meist um 80 bis 90 Prozent gegenüber anderen Methoden reduzieren. Diese Zeitersparnis führt zur Kosteneinsparung, welche wiederum bewirkt, daß sich die Software innerhalb kürzester Zeit amortisiert. Daneben werden mathematisch optimierte Prozeßschritte und Zubereitungsrezepturen generiert, welche mit einer manuellen Auswertung kaum zu erreichen sind.

Desweiteren besteht durch die ausschließliche Verwendung des ASCII-Formates eine sehr hohe Kompatibilität gegenüber anderer, handelsüblicher Software, so daß auch die Übernahme der Daten anderer Systeme von und nach ANALYSIS keine Schwierigkeiten bereitet. Das Programm eignet sich daher für alle Laboratorien, in denen Meßdaten auf etwaige Zusammenhänge mit dem Ziel der Optimierung untersucht werden müssen.

#### **Literaturhinweise**

- [1] Marte, E. (1986): "Das Programm APO für die Analyse multidimensionaler Systeme"; Chemie für Labor und Betrieb, September 1986, Umschau Verlag Frankfurt/ Main, S. 440-446.
- [2] Freuwört, E. (1992): "REGAN - Ein Programm zur Regressionsanalyse linearisierbarer Funktionen"; Chemie in Labor und Biotechnik, Februar 1992, Umschau Verlag Frankfurt/ Main, S. 104-105.
- [3] Freuwört, E. (1992): "FB-TRANSLATOR - Eine echte Übersetzungshilfe"; Chemie in Labor und Biotechnik, Januar 1992, Umschau Verlag Frankfurt/ Main, S. 43-44.
- [4] Kroos, R. (1988): "Eureka - Ein Programm für mathematische Anwendungen"; Chemie für Labor und Betrieb, Juni 1988, Umschau Verlag Frankfurt/ Main, S. 321.

**Autor:** Eckard Freuwört, Lauenau

**Preis:** DM 290,- ohne Mehrwertsteuer, DM 333,50 mit Mehrwertsteuer

Hotline für techn. Fragen zum Programm: Tel. (02304) 8 18 54, Fax (02304) 8 32 71

## **UMSCHAU SOFTWARE**

**Umschau Zeitschriftenverlag Breidenstein GmbH**

**Postfach 11 02 62 60037 Frankfurt Telefon (069) 26 00-605**

Abbildung 1

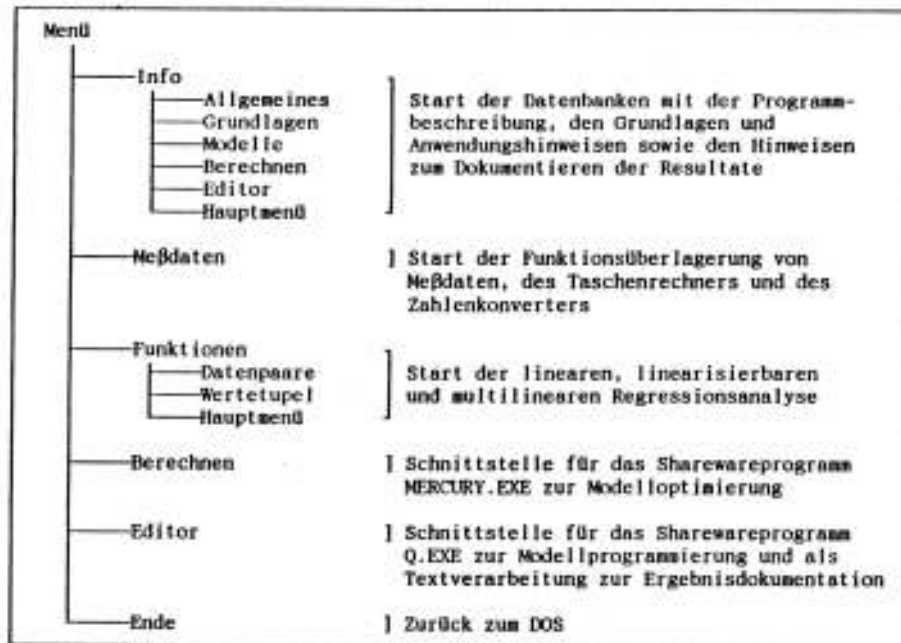


Abbildung 2

Ausschaltung von unzulässigen Rechenoperationen durch Meßwertkorrektur															
Datentyp : Wertetupel Datengruppen : 1 Y-Wert & 2 Spalten X-Werte Zu bearbeitende Datengruppe (X,Y) ? x Spaltenposition X-Werte (1... 2) ? 1															
Bereich $X(n, 1) = -3 \dots 7$ Korrigieren (J/N) ? j	Korrektur für Funktionstyp Nummer ? 13														
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%;">1. arsin n</td> <td style="width: 50%;">8. <math>(\sin n)/n</math></td> </tr> <tr> <td>2. arcos n</td> <td>9. log n zur Basis b</td> </tr> <tr> <td>3. artanh n</td> <td>10. <math>\sin(1/n)</math></td> </tr> <tr> <td>4. <math>1/n</math></td> <td>11. <math>n^{(1/n)}</math></td> </tr> <tr> <td>5. ln n</td> <td>12. <math>e^{(1/n)} - e^{(-1/n)}</math></td> </tr> <tr> <td>6. lg n</td> <td>13. <math>\sqrt{n}</math></td> </tr> <tr> <td>7. <math>(\ln n)/n</math></td> <td>14. <math>n - \sqrt{n}</math></td> </tr> </table>	1. arsin n	8. $(\sin n)/n$	2. arcos n	9. log n zur Basis b	3. artanh n	10. $\sin(1/n)$	4. $1/n$	11. $n^{(1/n)}$	5. ln n	12. $e^{(1/n)} - e^{(-1/n)}$	6. lg n	13. $\sqrt{n}$	7. $(\ln n)/n$	14. $n - \sqrt{n}$	Korrekturalgorithmus:  $n := n + [nMin] + \text{Korrektur}$
1. arsin n	8. $(\sin n)/n$														
2. arcos n	9. log n zur Basis b														
3. artanh n	10. $\sin(1/n)$														
4. $1/n$	11. $n^{(1/n)}$														
5. ln n	12. $e^{(1/n)} - e^{(-1/n)}$														
6. lg n	13. $\sqrt{n}$														
7. $(\ln n)/n$	14. $n - \sqrt{n}$														
Vorgeschlagener Korrekturbetrag: .001 Übernehmen (J/N) ? n                      --> Andere Eingabe: ? 0.0001															

Abbildung 3

Funktionsüberlagerung durch Meßwerttransformation												
1. $1/n$	9. $(\ln n)/n$	17. $n^2 * \sin n$	25. cosh n									
2. ln n	10. $(\sin n)/n$	18. $e^{-(n^2+n)}$	26. tanh n									
3. lg n	11. $n - \sqrt{n}$	19. $n^2 * e^n$	27. coth n									
4. $10^n$	12. log n zur Basis b	20. $ \sin n $	28. arsin n									
5. $e^n$	13. $\sin(1/n)$	21. cos n	29. arcos n									
6. $\sqrt{n}$	14. $n^{(1/n)}$	22. tan n	30. arsinh n									
7. sin n	15. $1 - e^{-n}$	23. cot n	31. artan n									
8. $n^a$	16. $e^{(1/n)} - e^{(-1/n)}$	24. sinh n	32. artanh n									
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td>M = Menü</td> <td>Eingabe</td> <td>? x</td> </tr> <tr> <td>X = Transformation X-Werte</td> <td>X-Position (1 bis 2)</td> <td>? 2</td> </tr> <tr> <td>Y = Transformation Y-Werte</td> <td>Nummer der Transformation</td> <td>? 7</td> </tr> </table>				M = Menü	Eingabe	? x	X = Transformation X-Werte	X-Position (1 bis 2)	? 2	Y = Transformation Y-Werte	Nummer der Transformation	? 7
M = Menü	Eingabe	? x										
X = Transformation X-Werte	X-Position (1 bis 2)	? 2										
Y = Transformation Y-Werte	Nummer der Transformation	? 7										
---> Bitte Wählen: <--- A) Manipulation der Originaldaten B) Zusätzliche Manipulation von bereits veränderten Daten Eingabe ? b												