

# COMPUTERGESTÜTZTES EXPERIMENTIEREN II

## P R A K T I K U M

### Gesteuerter chemischer Reaktor

Ein chemischer Reaktor, der in der beiliegenden Abbildung skizziert ist, soll mit einem Prozessrechner gesteuert werden. Die Reaktion, die darin untersucht werden soll, ist die Briggs-Rauscher-Reaktion, die sich durch oszillierende Konzentrationsänderungen einiger Reaktionspartner auszeichnet (siehe J. Chem. Educ. **50** (1973) 496, Scientific American **3** (1983) 96). Folgende Funktionen sollen dabei mit dem Rechner durchgeführt werden: Die Reagenzien werden aus Vorratsgefässen mit drei Dosierpumpen in den Reaktor gepumpt, wo sie von einem Magnetrührer gemischt werden. Die Pumpen fördern die Flüssigkeiten in einzelnen Pumpenhüben, deren Hubvolumen von ungefähr 0.5 ml in einem Vorversuch geeicht werden muss, so dass mittels der Anzahl der Hübe eine definierte Dosierung möglich ist. Der Verlauf der Reaktion wird mit einer Pt-Redox-Elektrode verfolgt. Nach Beendigung der Reaktion wird das Gemisch durch ein Magnetventil abgelassen und der Reaktor mit Wasser gespült, welches mit einer weiteren Pumpe eingespritzt wird. Diese Übersicht zeigt schon, dass es sich hier um eine umfangreiche und komplexe Steuerungsaufgabe handelt.

Anhand dieser Übungsaufgabe soll gelernt werden, wie komplexe Programme von computergestützten Experimenten in kleinere, parallel ablaufende Programme zerlegt werden können. In diesem Programmbetrieb, dem sogenannten Multitasking, müssen die einzelnen Teilprogramme miteinander kommunizieren können und sie müssen sich synchronisieren. Ein weiteres Ziel dieser Aufgabe ist es daher, die dazu notwendigen, in der Vorlesung besprochenen Verfahren in der Praxis kennenzulernen. Schliesslich sollen die in der Vorlesung besprochenen Methoden zur Planung von umfangreicheren Softwareprojekten geübt werden.

Übersicht über die Hardware:

Die Steuerung und die Datenerfassung erfolgt mit der LabPC<sup>+</sup>-Schnittstellenkarte von National Instruments, deren Programmierung in der separaten Beschreibung zusammengefasst ist. Setzen einzelner Bits der digitalen Ein-/ausgabe aktiviert den Rührmotor, die Pumpen, und das Magnetventil. Da zur Steuerung dieser Komponenten Spannungen bzw. Ströme benötigt werden, die nicht direkt von der Schnittstellenkarte geliefert werden können, wird die notwendige Anpassung von einer zwischengeschalteten Elek-

tronik vorgenommen. In dieser Anpassung ist eine Sicherheitsschaltung integriert, die den gesamten Reaktor und/oder die Dosierpumpen inaktiviert und die zum Betrieb mit zwei Bits der Digitalausgabe entsperrt werden muss. Die meisten Komponenten werden statisch gesteuert, d.h. der Zustand des entsprechenden Bits der Digitalausgabe aktiviert die Komponente. Lediglich die drei Dosierpumpen werden durch den Übergang von logisch 0 nach 1 zur Ausführung eines Pumpenhubes veranlasst.

Die Spannung der Redoxelektrode wird über Kanal 0 des Analog/Digital-Umsetzers erfasst. Da die Elektrode nur ein schwaches Nutzsignal von ungefähr 5 mV liefert, welches einer Offsetspannung von ungefähr 500 mV überlagert ist, muss es durch Verstärken und durch Kompensieren der Offsetspannung in den Messbereich des Analog/Digital-Umsetzers gebracht werden. Diese Aufgabe übernimmt ein Vorverstärker, der erlaubt, die Kompensationsspannung und den Verstärkungsfaktor manuell oder mit dem Computer einzustellen. Im computergesteuerten Betrieb wird die Offsetspannung mit dem Digital/Analog-Umsetzer DAC0 kompensiert und der Verstärkungsfaktor mit zwei Bits der Digitalausgabe bestimmt.

Konfigurieren Sie das PortA und das untere Nibble von PortC der digitalen Ein-/ausgabe für die Ausgabe. Die Bits der Digitalausgabe haben folgende Funktion:

PortA:	Bit0	Freigabe der Elektronik
	Bit1	Freigabe der Dosierpumpen
	Bit2	Magnetrührer einschalten
	Bit3	Ablassventil öffnen
	Bit4	Spülpumpe einschalten
	Bit5	Auslösen eines Hubs der Dosierpumpe 1
	Bit6	Auslösen eines Hubs der Dosierpumpe 2
	Bit7	Auslösen eines Hubs der Dosierpumpe 3

PortC:	Bit 0-1	Verstärkungsfaktor des Vorverstärkers		
		Bit1	Bit0	Verstärkung
		0	0	1
		0	1	10
		1	0	100
		1	1	1000

Aufgaben:

1. Schreiben Sie ein Programm, das den gesamten Ablauf der Reaktion steuert. Es soll dabei besonderer Augenmerk darauf gelegt werden, dass die Reagenzien möglichst kontinuierlich zugegeben werden. Der dazu entwickelte Algorithmus soll ferner

geeignet sein, mit jeder der drei Dosierpumpen unterschiedliche Volumina zu fördern. Modularisieren Sie das Programm so weit, dass die Module in der zweiten Aufgabe einfach zu den einzelnen Programmen modifiziert werden können. Testen Sie Ihr Programm mit Wasser, bevor Sie die Reagenzien einsetzen.

2. Steuern Sie die Reaktion durch einzelne Programme im Multitasking-Betrieb. Eine mögliche Zerlegung in Teilprogramme (Subprozesse) ist in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Programm	Funktion
STEUERN	Steuern des gesamten Messablaufes. Nach der Eingabe der Reaktionsparameter ist der Ablauf der Reaktion durch Starten der folgenden Subprozesse zu steuern.
INITIAL	Initialisieren der Apparatur, Einschalten des Rührers und Entsperren der Sicherheitsschaltung, Vorbereiten des Vorverstärkers.
PUMPE <sub><i>i</i></sub>	Pumpen einer vorgegebenen Anzahl Hübe des Reaktanden <i>i</i> mit der Pumpe <sub><i>i</i></sub> in die Reaktionskammer.
SAUBER	Reinigen der Reaktionskammer, Öffnen des Ablassventils, Betätigen der Spülpumpe, Schließen des Ventils.
EICHEN	Einstellen des Vorverstärkers, d.h. Kompensieren der Signal-Offsetspannung und Einstellen des Verstärkungsfaktors.
MESSEN	Messen der Spannung der Redox-Elektrode im vorgegebenen Abtastintervall, Aufzeichnen des zeitlichen Verlaufes.

Verwenden Sie zur Kommunikation der Subprozesse untereinander den gemeinsamen Datenbereich mit Namen GEMEIN\_DAT, der 4 k Worte umfasst und dessen Struktur Sie festlegen. Starten Sie Subprozesse mit der Systemdirektive SYS\$SPAWN(Prozessname,...) (siehe Beilagen). Synchronisieren Sie die Subprozesse mittels Ereignisvariablen oder mittels Variablen im gemeinsamen Datenbereich. Der Eintritt in kritische Prozessabschnitte soll mit Semaphoren verwaltet werden (Systemdirektive SYS\$ENQW(...)).

Lernziele: Multitasking, Prozess-Kommunikation, Prozess-Synchronisation.