

分光測定のためのハードウェアとソフトウェア

泉本 勝利*

(受理: 1981年11月30日)

Hardware and Software for Full-Automatic
Measurement of Spectrophotometer

Masatoshi IZUMIMOTO*

摘 要

分光測定機の起動、波長走査、休止の自動制御と測光値のデータ処理の自動化をコンピューターを使って行なうシステムの開発を試みた。付加回路は1ビットの信号で自動制御が行なえるように組み込まれた。測光値はA/D変換器によってデジタル化してコンピューターに直接入力し、プログラム演算された。その結果、試料の情報は短時間に処理される。操作はCRTディスプレイ表示され、整理されたデータは必要に応じてプリンターに出力される。測定はあらかじめ設定された時間に自動的に行なうことができる。この自動測定システムは長時間の継続測定や多くの測定データあるいは高度の演算処理を行う場合に有効である。

I. はじめに

多くの測定機において、測定値(電圧)の記録のためにアナログレコーダーが用いられ、データの整理は記録されたアナログ量を読みとり、演算処理、解析、判断の手順をとるのが一般的である。この場合、人手による測定値の読みとりと演算処理のためのデータ入力に莫大な労力を要することが少なくない。これらの処理が自動化されれば効率的である。

分光測定は測定目的が多岐にわたり、測定のプロセス、データ処理の方法に高い自由度が要求される。この自動化は命令を自由にプログラム設定できるマイクロコンピューターの活用が最適である。またコンピューターによるアナログデータ処理システムは汎用性があり、多くの測定機に適用できると考えられる。アナログ量である測定値を直接コンピューター処理することにより、測定値の読みとりと演算処理の自動化を簡単に行なうことができる。そこで測定データ数が多く、データ処理に長時

間要する事例の多い分光測定機の操作およびデータ処理の自動化を試みた。

II. 自動化の方法

1. ハードウェア

(1) システムの構成

分光測定の自動化のシステムは、自記分光光度計(日立323型)とこれの制御のためのマイクロコンピューター(PET 2001)およびA/D変換器によって構成される。システムの構成図をFig. 1に示す。

自動制御の大まかなアルゴリズムは次のとおりである。(1)所定の測定時間になると波長走査信号によって測定機が始動し、波長走査を開始する。(2)測定値(電圧)のアナログ量のサンプリングを行ない、A/D変換インターフェースによってデジタル化する。(3)設定された波長になると同時にサンプリングデータは保持(data hold)された後コンピューターのI/Oポートに入力する。データはメモリーに取り込まれ、ただちに(2)にもどる。(4)先の(2)、

*帯広畜産大学畜生産科学科畜肉保蔵学研究室

*Laboratory of Meat Preservation, Obihiro University of Agriculture and Veterinary Medicine, Obihiro, Japan 080

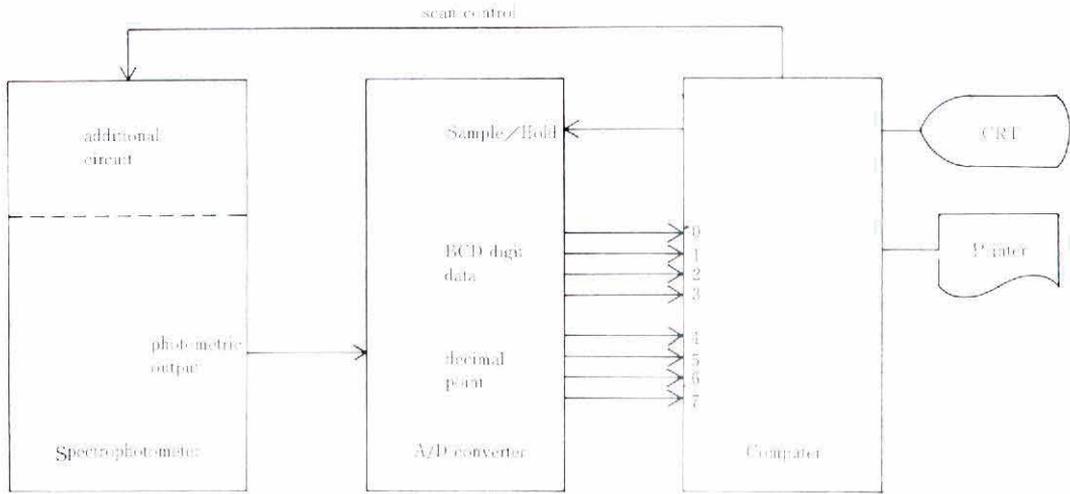


Fig. 1. Block diagram for full-automatic system of spectrophotometer.

(3)のループによって所定の波長の測光値の取り込みが終了すると、測定機を休止し、(1)にもどる。

測光値の出力電圧範囲は $\pm 1V$ である。A/D変換は3 $\frac{1}{2}$ 桁 ($\pm 1.999 V$ max) で、BCDミリアルデータ出力型によって行なった。

(2) 波長の確定と走査制御

波長の確定と走査制御は回折格子あるいはプリズムの回転角度を検出する方法が直接的であり、波長送りの回転角度をパルス変換してカウントする方法が一般的である。しかしパルス数をカウントするシステムはハードウェア的にもソフトウェア的にも煩雑になる。分光測定機の波長制御その他の自動制御の各部分をコンピューターによって直接管理することも可能であるが、多くの信号線によって行なうことになり、このためには特別なインターフェースを必要とする。波長制御方式は機種によって異なるので、機種専用のソフトウェアは汎用性に欠けるものとなり、また信号線が多いほどアフターケアが難しくなる。そこで、最も少ない信号線で波長制御するための付加回路を測定機に組み込んだ。

一般に分析機やレコーダーの回転系にはパルスモーターが使用され、回転角度は電源周波数と同期していることはよく知られている。本機の波長走査は時間と同期していることが確かめられたので、波長の確定はコンピューターのリアルタイムカウンターによるソフトウェアによって行ない、波長の制御は一本の信号線（1ビット）で

行なうことにした。

(3) 付加回路

測定機内に組み込んだ自動制御のための付加回路をFig. 2に示す。測定はソフトウェアであらかじめ指定することにより、繰り返し測定を開始することができる。測定信号はリレーを用いて電氣的に分離され、コネクタ(CN 13)の3, 4に入る。Ry Tがonで測定機は始動し、offで休止となる。Ry Aの回路で波長走査を制御する。Ry Cの回路は設定された初期波長への復帰とXYレコーダーの初期化を行なう。休止の状態はRy Bの回路で決められ、光源を遮断し、騒音源のセクターを止め、測光部を休止する。光源の遮断は光の影響を避けたい反応の観察を行なう事例が生じたために行なうようにした。

付加回路には測定目的により2種類の機能があり、スイッチSW1のS側は波長走査(スペクトル測定)を行ない、M側は固定波長の測定を行なう。タイミングチャートは、Fig. 3に示すとおりである。スペクトルはXYレコーダーにアナログ記録し、固定波長の場合は打点することができるようにした。所定の波長あるいは時間ごとの測定値は別回路から出力される。

2. ソフトウェア

測定機の起動、波長走査、測光値の読み込み、測定終了後の休止、これらの繰り返しであるシステムの自動化は、ソフトウェアによって実行した。なお、数字の右にDを記して10進数を示し、Hを記して16進数を示した。

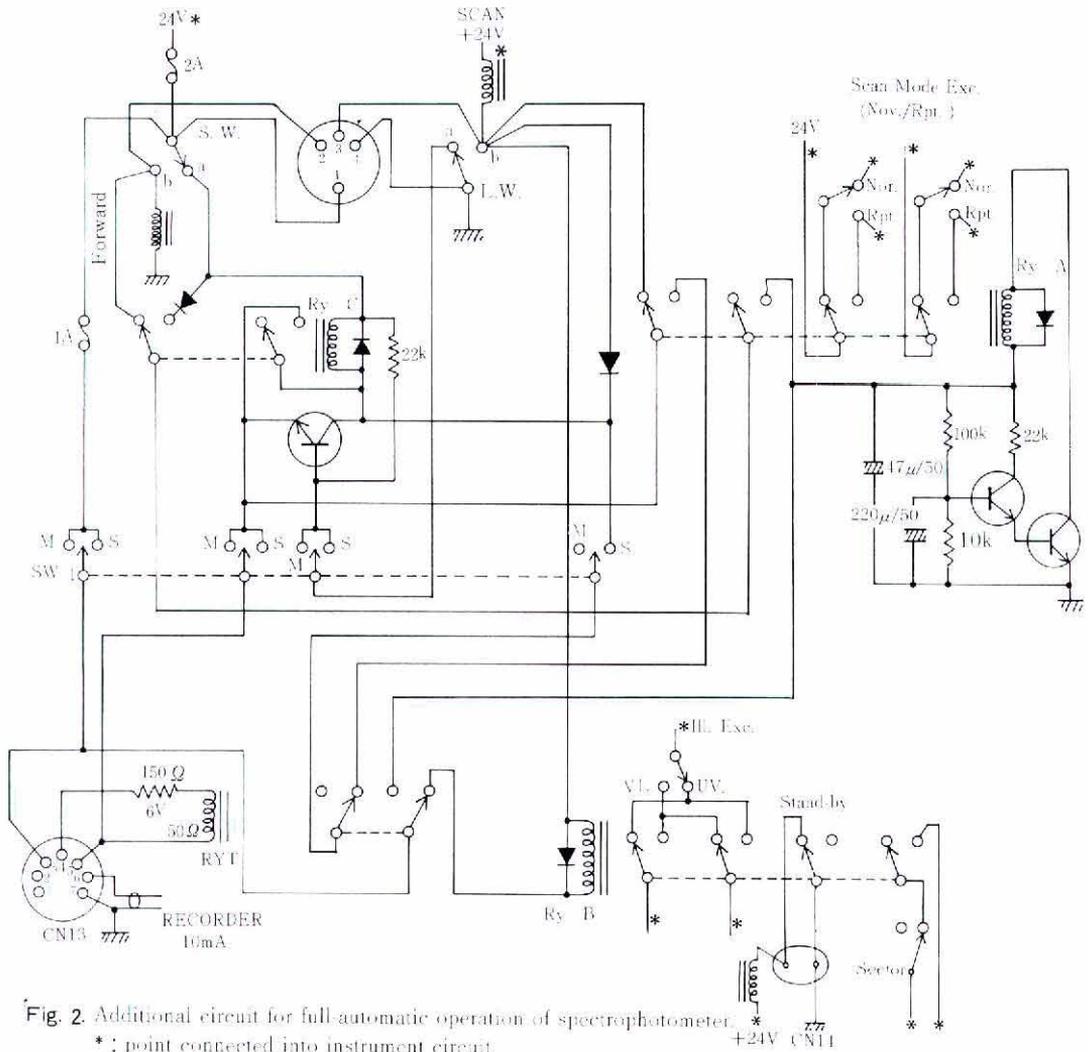


Fig. 2. Additional circuit for full-automatic operation of spectrophotometer.
 *: point connected into instrument circuit

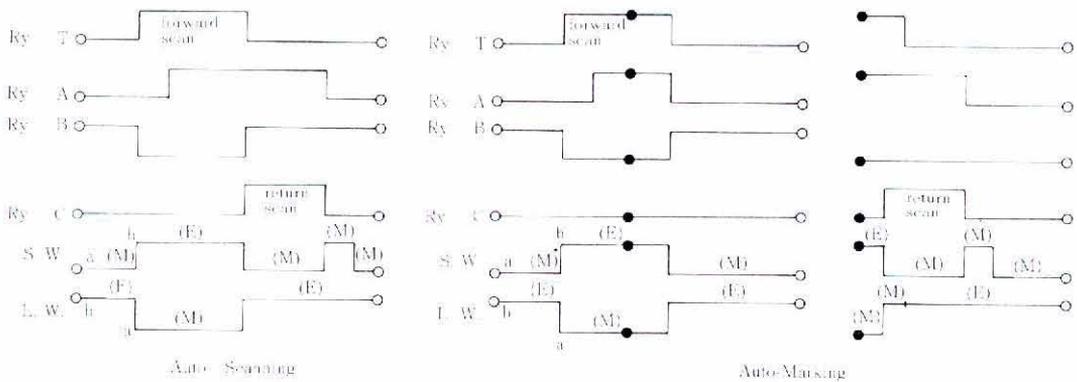


Fig. 3. Timing chart for full-automatic operation of spectrophotometer.
 ○, ● : continue to the same symbols
 (E) : electrical, (M) : mechanical

(1) 測定機の自動制御

先に述べたように、測定機の起動、波長走査、休止の一連の過程は1ビットの信号で行なえるように付加回路が組み込んである。コンピューター側からの指令は電流負荷容量の大きいカセットモーター用の信号によって、直接リレーを駆動し、リレー接点から波長制御信号線を取り出した。この制御は BASIC によって行ない、

POKE 59456, 207

で走査を開始し、

POKE 59456, 223

で走査を終了する。

(2) 入力データの保持

A/D 変換に先立ち、入力データの値を保持(data hold)すると読み込みデータは確実になる。使用した A/D 変換器のデータ保持とサンプリングの切替は信号 High のときサンプリングとなり、Low のとき保持になる。信号線は I/O ホートの CB 2 に接続した。CB 2 の High, Low の切替は周辺コントロールレジスタ¹⁾(59468番地)で行なわれ、BASIC によって実行した。

POKE 59468, PEEK (59468) AND 31 OR 192

によって、データは保持され、

POKE 59468, PEEK (59468) AND 31 OR 224

によって、データのサンプリングとなる。

(3) データ入力ルーチン

高速データ処理を必要とするデジタルデータの処理ルーチンはマシン語プログラムによって行なった。マシン語プログラムエリアは BASIC との連結による効率的プログラムを意図して、BASIC インタプリタの未使用アドレスを使った。

シリアルデータの入力ルーチンのアセンブリー言語(CPU 6502)のソースリストを、List 1 に示す。シリアルデータは1バイトで、下位4ビットがBCDデータ、上位4ビットが桁指定になるように結線した。処理の都合上、桁指定は下位ビットは0上桁になるように、すなわち E 84 F₀のビット4 (10₀) は4桁目でビット7 (80₀) は1桁目になるように結線した。このルーチンは 033 A_nから開始される。033 A_n~033 F₀は桁指定の初期化で、034 I_n~0348₀のルーチンにより 03 DO_nに桁指定される。036 D_n~037 C₀のサブルーチンにより、指定桁の BCD データを CPU のレジスタに取り込んでおく。レジスタの BCD データは 034 B_n~035 B₀のループによって新規のデータであることが再確認される。以上の 034 I_n~035 B₀のループにより BCD 数値の ASCII 文字列は上

```

:033A LDA IM 00
:033C STA AB 03D0
:033F LDV IM 00
:0341 INY
:0342 LDA AB 03D0
:0345 ASL
:0346 BCS 035E
:0348 STA AB 03D0
:034B JSR AB 0360
:034E CLC
:034F ADC IM 30
:0351 TAX
:0352 CMP AV 03DA
:0355 BEQ 0341
:0357 TNA
:0358 STA AV 03DA
:035B JMP AB 034B
:035E LDA IM 00
:0360 STA ZP 71
:0362 LDA IM 00
:0364 STA ZP 72
:0366 LDA IM 04
:0368 JSR AB 0360
:036B RTS
:036C BRK
:036D LDA AB E84F
:0370 TAX
:0371 AND AB 03D0
:0374 CMP AB 03D0
:0377 BNE 036D
:0379 TNA
:037A AND IM 0F
:037C RTS
:037E BRK

```

List 1. Assembly source list for digital data input.

	0	1	2	3	4	5	6	7
:033A	A9	00	80	D0	03	A0	00	C8
:0342	A0	D0	03	0A	E0	16	80	D0
:034A	03	20	60	03	18	69	30	AA
:0352	09	DA	03	F0	EA	8A	99	DA
:035A	03	4C	4E	03	A9	DE	85	71
:0362	A9	03	85	72	A9	04	20	8D
:036A	06	60	00	AD	4F	E8	AA	2D
:0372	00	03	CD	D0	03	D0	F4	8A
:037A	29	0F	60	00	00	00	00	00

List 2. Machine language list for digital input.

位から下位桁に順次インデックスド・アドレスリスト・アドレスリング²⁾により 03 DB_n~03 DE_nに4桁の数値文字列が格納される。続いて、035 E_n~0368₀のルーチンにより数値文字列は D 68 D_nの BASIC モニターのシステムサブルーチンによりプロテクトレジスタに格納され、BASIC のUSR命令によって数値として呼び出さ

いて度々みられる。

測定データ数が多く、これを演算処理する場合は、測定値の読みとりおよびデータ入力的时间と労力は多大で、測定時間よりもデータ処理時間が数10倍になることが少なくない。吸収スペクトル変化による誘導形態変化や反射スペクトルからの色の観察などは熟練により直感的に把握することができるが、曖昧であることに変わりない。

ここで、応用の一つの具体例をプログラムによって示す。List 3は反射スペクトルからCIE三刺激値を自動的に求めるBASICプログラムである。マシン語のデータ入力ルーチンはマシン語をBASICプログラム内に連結する方法⁸⁾によった。マシン語のBASICのDATA文への変換は自動的に行なう方法⁹⁾によって行なった。行番号(4)1430~1540はマシン語のルーチンをBASICで書き込むルーチンとDATA文である。/100~240はメインプログラムで、/150から順に(1)三刺激値を計算するための重係数⁹⁾の入力、(2)波長自動制御の初期化、(3)マシン語ルーチンの書き込み、(4)走査速度の設定と標準白色板の測定、(5)試料の測定、(6)反射率の印字と三刺激値の演算、(7)三

刺激値の印字、と続いて実行され、(5)にもどり測定は繰り返される。波長は380 nm~700 nmの10 nm間隔である。測定例として緑色と赤色の紙の測定結果を、Table 1に示す。

種々の方法による三刺激値の算出に要する時間の比較をTable 2に示す。全自動測定に比較し、半自動測定で

Table 2. The time spent of calculation of CIE tristimulus values by various methods.

Step	Manual	Semi-Automatic	Full-Automatic
Reflectance Measurement	min	min	min
Reading	15 ^{a)}	0.8 ^{b)}	0.8 ^{c)}
Calculation (CIE values)	—	5	—
Total time	25 ^{d)}	2.5 ^{d)}	0.08 ^{d)}
Total time	40	8.3	0.88

a: Measurement by hand operation

b: Recording Spectrophotometer

c: Electronic Calculator

d: Programming

REFLECTIVITY DATA					* GREEN PAPER *					
	14.88	15.33								
	15.33	15.61	15.76	16.15	16.45	17.01	18.07	19.30	20.44	22.38
	27.25	36.88	40.15	38.88	34.90	31.05	26.94	22.76	20.07	17.5
	15.36	14.32	13.85	13.66	13.55	13.53	13.60	13.76	14.21	14.68
	15.18									
X, Y, Z (%)	X	Y	Z							
ILLUM. A	19.61	23.94	6.982							
ILLUM. B	18.54	25.58	15.97							
ILLUM. C	18.58	26.07	21.80							
REFLECTIVITY DATA					* RED PAPER *					
	15.45	15.04								
	14.28	14.08	13.94	13.84	13.85	13.75	13.36	13.06	12.57	12.48
	12.18	12.19	12.29	12.31	12.5	12.98	14.24	16.52	23.72	34.03
	45.82	54.51	57.45	58.90	53.71	59.98	66.15	68.22	66.11	68.53
	60.91									
X, Y, Z (%)	X	Y	Z							
ILLUM. A	44.50	28.09	4.728							
ILLUM. B	34.88	24.23	11.41							
ILLUM. C	32.06	22.92	15.86							

Table 1. Output format for color measurement.

約10倍、手動測定で45倍の所要時間となる。したがって100検体程度の測定において、半自動測定で2日間も要するが、全自動では2時間たらずで終ることができる。

このデータ処理システムの基本は分光測定に限らず、多くの時間に対するアナログ（電圧）量のデータ処理に応用できる。とくに長期間の継続測定や迅速に情報を必要とする分野に有効であると考えられる。

付加回路の組立と調整に際し助力をいただいた岩原良晴君に感謝の意を表します。本試験の一部は文部省科学研究費の補助によって行なわれた。

参 考 文 献

- 1) コモドール・ジャパン：PET ユーザーズマニュアル、インターフェース2、(1978)
- 2) 昔野彼志：PET アセンブラ入門、57、(1979)、未来科学研究所
- 3) 岡村迪夫：トランジスター技術、18、290、(1981)、CQ出版
- 4) 隈井洋：エッセイマイクロベディア・アスキー、4、177、(1979)、アスキー出版
- 5) 日本規格協会：色彩科学ハンドブック、1316、(1980)、

東京大学出版会

Summary

The operating controls of the spectrophotometer and the photometric values obtained were computerized to run automatically. The automatic controls were performed by a 1 bit signal from the computer, and an additional circuit was put into the instrument. Photometric values, i. e. analog voltage, were supplied directly for computation after digital formation using an A/D converter, and were programmed to be calculated automatically. Consequently, the sample information was processed quickly. Operation followed by CRT display was done by keyboard, and processed data were printed. Measurements were performed automatically at pre-set intervals. This system can be adapted to many uses, such as continuous measurement over a long period of time, calculations involving much data or complex calculations.