

А.Г. ДБЯКОВ, канд. техн. наук, ХГАТП,
А.Ф. ДАНИЛЕНКО, канд. техн. наук, НТУ “ХПИ” (г. Харьков)

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ВЫБОР ПАРАМЕТРОВ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ ЯМР

Запропоновано і обґрунтовано підхід для автоматизованого визначення вимірювальних параметрів сигналів установки ЯМР. Автоматизація виконується з метою підвищення точності і достовірності одержуваних відповідних імпульсів при аналізі харчових продуктів. На основі аналізу вимог по точності визначена методика проведення експериментів, яка направлена на збільшення амплітуди сигналу після збудження зразка магнітним полем з великою напруженістю поля.

Offered and grounded approach on the automated determination of measuring parameters of signals for setting ЯМР. Automation is executed with the purpose of increase of exactness and authenticity of the got returns impulses at the analysis of food products. On the basis of analysis of requirements on exactness the method of conducting of experiments is certain directed on the increase of amplitude of signal after excitation of standard by the magnetic field with large tension of the field.

Постановка проблемы. В настоящее время для исследования изделий и обработки технологических процессов в пищевой промышленности широко используется метод ядерно-магнитного резонанса (ЯМР). Для получения необходимых параметров путем экспериментального наблюдения за исследуемыми объектами используются спектрометры ЯМР с системами управления, построенными на основе компьютерных технологий [1 – 4]. Исследуемое вещество, помещаемое в ампулу, подвергается воздействию постоянного магнитного поля H_0 и результирующий вектор намагниченности M устанавливается вдоль него.

После установления больцмановского распределения населенностей уровней спиновой системы образец облучается мощным импульсом переменного электромагнитного поля H_1 , частота которого ν_0 должна соответствовать ларморовской прецессии ядер (установка работает на ядрах водорода)

$$\nu_0 = \frac{\gamma}{2\pi} \cdot H_0, \quad (1)$$

где γ – гиромагнитное отношение ядер спиновой системы вещества.

Под действием частоты ν_0 в спиновой системе начинаются энергетические переходы между различными ядерными уровнями. После прекращения действия радиоимпульса, заполненного частотой ν_0 , спиновая система вещества самопроизвольно начинает возвращается к исходному распределению. При этом в приемной катушке импульсного спектрометра ЯМР индуцируется электрический сигнал, пропорциональный ядерной

намагниченности. Зарегистрировав и обработав данный сигнал можно сделать заключение о структуре и свойствах исследуемого вещества.

Актуальность. Воздействие электромагнитного поля H_1 , направление которого перпендикулярно полю H_0 , приводит к тому, что вектор намагниченности вещества M начинает поворачиваться на угол θ за время t_u действия поля H_1 . Угол поворота (в радианах) определяется соотношением:

$$\theta = \gamma H_1 t_u. \quad (2)$$

При определенном задании значений H_1 и t_u угол поворота θ будет точно соответствовать 90° , что и составляет основное условие обеспечения точного проведения измерений на спектрометрах ЯМР. Достоверность полученного результата в большой степени зависит от точности поворота M на угол в 90° . Однако выполнению данного условия предшествует требование обеспечения достаточно высокой однородности поля H_0 . Поэтому вопросы проверки однородности H_0 и последующего определения длительности величины зондирующего импульса t_u являются актуальными при проведении исследования веществ методами ЯМР.

Цель работы. Определение и обоснование подходов по анализу условий и выбору параметров импульсов и однородности напряженности поля при проведении исследований на установке ЯМР.

Теоретическими расчетами и экспериментальными исследованиями установлено, что спад сигнала свободной индукции (ССИ) при высокой однородности поля H_0 изменяется по экспоненциальному закону [5]. Это можно определить визуально в процессе анализа результатов измерений либо записав сигнал и впоследствии проанализировав его соответствующими программными средствами. Однако, если в образце из-за неточной установки образца имеется неоднородность δH_0 , регистрируется сигнал, имеющий не экспоненциальный спад (ССИ). В этом случае необходимо изменить координаты установки положения образца, где неоднородность поля δH_0 будет незначительной. Практически это можно произвести следующим способом: регистрируем ССИ, анализируем характер спада сигнала, применив соответствующие математические методы, по результатам отклонения измерений даем заключение об однородности поля. Изменение спада ССИ при правильной установке образцов в магнитном поле может быть представлено в виде:

$$U = U_0 \exp(\alpha t). \quad (3)$$

В случае нарушения однородности поля сигнал ССИ в первом приближении может быть представлен в виде:

$$U = U_0 \exp(\alpha t + \beta t^2 + \gamma t^3), \quad (4)$$

где α , β , γ – коэффициенты, вычисляемые в ходе эксперимента.

Для определения коэффициентов аппроксимирующей кривой используются стандартные методы и функции нелинейной регрессии, имеющиеся в пакете MatchCad. Если коэффициенты β , γ можно признать незначимыми, то однородность поля считается удовлетворительной и возможно проведение дальнейшей настройки параметров эксперимента и проведение исследований. Для проведения подобного анализа целесообразно использовать стандартные методики теории планирования эксперимента [6].

На рис. 1 приведены осциллограммы ССИ в случае однородного и неоднородного поля. Применительно к приведенным сигналам были получены следующие аналитические выражения составляющих:

$$y(t) = 100 \exp(-2t) \quad \text{и} \quad z(t) = 100 \exp(-0,18t - 2t^2). \quad (5)$$

Из анализа полученных выражений следует, что кривая $z(t)$ отличается от необходимой экспоненциальной зависимости и координаты положения образца необходимо изменить.

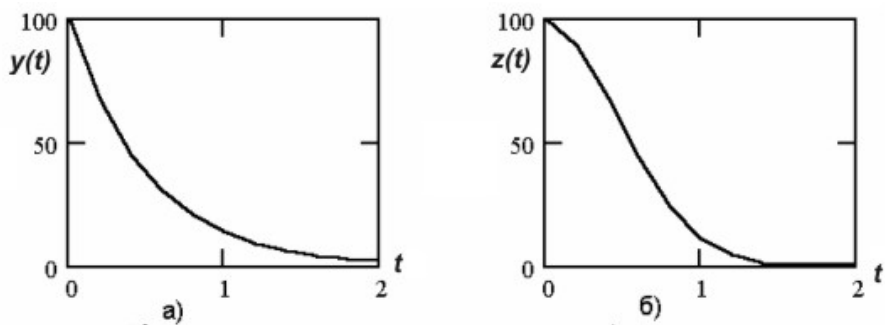


Рис. 1. Сигнал ССИ после действия 90° импульса
а) – однородное магнитное поле; б) – неоднородное магнитное поле

Второй параметр, который должен быть точно задан при проведении исследований – это длительность первого зондирующего импульса t_u , реакция от которого должна повернуть результирующий вектор намагниченности M на угол, точно равный 90° .

В ссылке [5] предложена методика определения длительности импульса, предполагающая наличие синхронного детектора в измерительной системе спектрометра ЯМР, что не всегда имеет место, и что в ряде случаев сильно усложняет построение канала измерения. При наличии в системе спектрометра ЯМР только амплитудного детектора невозможно воспользоваться указанной методикой. Поэтому предлагается следующий

метод определения величины длительности сигнала первого зондирующего импульса t_u . После регистрации ССИ определяется величина, согласно выражения:

$$S(t_u) = \int_0^T f(t) dt, \quad (6)$$

где $f(t)$ – запись сигнала ССИ; T – время регистрации сигнала; i – номер измерения.

Изменяя в ходе эксперимента длительность зондирующего импульса t_u , находят такое его значение, при котором будет выполняться условие:

$$S(t_u^*)_i = \max_i S(t_i), \quad i = \overline{1, n}, \quad (7)$$

где n – число экспериментов.

Выполнение данного условия обеспечивает поворот результирующего вектора намагниченности на угол 90° .

После нахождения наилучшего значения t_u необходимо уточнить длительность сигнала ССИ. Последнее обстоятельство обусловлено тем, что для получения максимального значения эхо-сигнала в измерительной катушке второй зондирующий радиочастотный импульс должен быть расположен как можно ближе к первому с целью получения сигнала максимальной амплитуды, что обеспечивает более высокую точность измерения. Если же интервал между импульсами будет меньше T (длительность переходного процесса спада ССИ), то результаты измерения амплитуды эхо-сигнала будут неверными. Поэтому минимальное расстояние между зондирующими импульсами должно немного превышать величину T . Длительность второго зондирующего импульса t_u должна быть в два раза больше первого [7, 8], чтобы обеспечить поворот результирующего вектора намагниченности на угол 180° , что обусловлено методикой проведения исследований.

Типовое соотношение длительностей подачи зондирующих сигналов и реакция образца, в виде временной диаграммы, представлены на рис. 2.

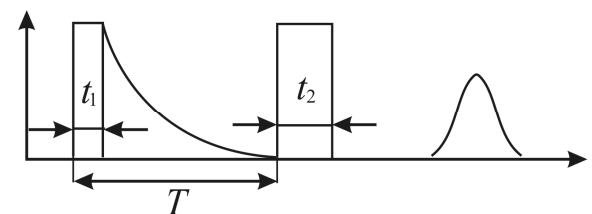


Рис. 2. Схема подачи зондирующих импульсов спектрометра ЯМР

Выводы. Предложена и обоснована методика по выбору параметров зондирующих импульсов и режима измерения сигнала при проведении исследований на спектрометре ЯМР. На числовом примере показано, что компьютерные технологии позволяют практически реализовать предложенные технические решения. Применение подобных решений повысит точность и достоверность получаемых результатов исследований, проводимых с применением спектрометров ЯМР.

Дальнейшая задача, которая должна быть решена с целью повышения уровня автоматизации измерений на спектрометре ЯМР – это создание программно-аппаратных средств, позволяющих в автоматическом режиме по определенному алгоритму изменять временные параметры между зондирующими импульсами, регистрировать амплитуды эхо-сигналов и вычислять необходимые параметры исследуемого продукта.

Решение подобных задач позволит впоследствии создать необходимые предпосылки по внедрению автоматизированных измерительных систем по проведению подобных экспериментов, что в значительной степени сократит как время проведения исследований, так и повысит их эффективность.

Список литературы: 1. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Информационно-измерительная система установки ЯМР // Вестник НТУ "ХПИ". – Харьков: НТУ "ХПИ", 2003. – Вып. 19. – С. 69–72. 2. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Система управления спектрометром ЯМР // Вестник НТУ "ХПИ". – Харьков: НТУ "ХПИ", 2004. – Вып. 26. – С. 119–123. 3. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Повышение точности измерений в ЯМР спектрометре // Вестник НТУ "ХПИ". – Харьков: НТУ "ХПИ", 2005. – Вып. 46. – С. 83–86. 4. Олсон Г., Пиани Д. Цифровые системы автоматизация процесса управления. – СПб.: Невский диалект, 2002. – 254 с. 5. Вацман А.А., Прошин И.С. Ядерная магнитная релаксация и ее применение в химической физике. – М.: Наука, 1979. – 236 с. 6. Хартман К. и др. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. – М.: Мир, 1977. – 522 с. 7. Эрнст Р., Боденхаузен Дж. и др. ЯМР в одном и двух измерениях. – М.: Мир, 1990. – 711 с. 8. Фаррар Т., Беккер Э. Импульсная и Фурье-спектроскопия ЯМР. – М.: Мир, 1973. – 164 с.

Поступила в редакцию 05.10.2006

УДК 519.766

Г.Ф. ДЮБКО, канд. техн. наук, ХНУРЭ (г. Харьков),
Е.Л. ЛЕЩИНСКАЯ, ХНУРЭ (г. Харьков)

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЫВОДА В ТИПИЗИРОВАННЫХ "ПЛЕКС-ГРАММАТИКАХ"

Обґрунтована необхідність використання спеціальних методів для опису мов, що подають графові структури даних (графових мов): UML, SYSML, VHDL, WWF та ін. Проаналізовані існуючі підходи для подання формальних моделей таких мов, їх переваги та недоліки. Запропоновано оригінальний підхід для формального опису підкласу графових мов (мов подання діаграм руху даних) на основі типізованих плекс-грамматик. Розроблені алгоритми породження та розбору фраз, що належать таким мовам. Доведено перевагу використання отриманих результатів у порівнянні з відомими підходами.

A need to use special methods to describe languages, that represent graph-like data structures, such as UML, SYSML, VHDL, WWF is proved. We call them graph languages. Known approaches to represent formal models of such graph languages are investigated, their advantages and disadvantage are marked. A novel approach to represent formal models of subclass of graph languages (data-flow diagram language) is introduced. This approach is based on typified plex-grammars. Generative and recognizing algorithms for such class of languages are developed. Advantages of obtained results application (compared to classic approaches) are argued.

Постановка проблемы. Хорошо известен широко распространенный формальный подход к описанию синтаксиса некоторого языка, т.е. правил построения конструкций этого языка, на основе аппарата формальных грамматик (ФГ) [1]. В классическом своем варианте аппарат ФГ применяется для описания текстов – линейных цепочек символов. С точки зрения грамматики такого вида существует всего два бинарных отношения между элементами её алфавита: «предшествует» и «следует за». На практике же представляет интерес использования такого формального аппарата для описания структуры языка, между элементами алфавита которого возможно произвольное число отношений любой размерности. Использование такого аппарата значительно упростит представление правил построения конструкций языков, описывающих древовидные и графовые структуры, а значит и создание новых языков такого типа, разработку для них синтаксических анализаторов, компиляторов, интерпретаторов, трансляторов. К множеству таких языков можно отнести унифицированный язык моделирования UML, язык описания цифровых электронных систем VHDL, язык описания систем широкого класса SYSML, язык визуального программирования на базе Windows Workflow Foundation [2] и пр. Все эти языки – неотъемлемая часть систем автоматизированного проектирования и моделирования. **Целью данной статьи** является описание разработанной авторами формальной грамматики для представления правил построения конструкций языков, описывающих графовые структуры данных, а также