

УДК 664:539.1

АНАЛІЗ СПЕКТРОМЕТРА ЯМР ЯК ОБ'ЄКТА ДОСЛІДЖЕННЯ

О.І. Торяник

Доктор хімічних наук, професор*
Контактний тел.: (057) 349-45-00

Ж.В. Воронцова

Кандидат педагогічних наук, доцент*
Контактний тел.: (057) 349-45-00
E-mail: zhvorontsova@mail.ru

О.Г. Дьяков

Кандидат технічних наук, доцент*
Контактний тел.: (057) 349-45-00
*Кафедра енергетики та фізики

Харківський державний університет харчування та торгівлі
вул. Клочківська, 333, м. Харків, Україна, 61051

Розглянуто питання аналізу спектрометра ЯМР як об'єкта дослідження та з точки зору загальної теорії керування. Показано, що даний об'єкт не може бути керованим але може бути спостережливим

Ключеві слова: ядерний магнітний резонанс, теорії керування

Рассмотрены вопросы анализа спектрометра ЯМР как объекта исследования с точки зрения общей теории управления. Показано, что данный объект не может быть управляемым, но может быть наблюдаемым

Ключевые слова: ядерный магнитный резонанс, теория управления

The questions of analysis of the NMR spectrometer as an object discovery from point of general control theory are considered. It is shown, that it can not be object of controlled but it can be object of observed

Keywords: nuclear magnetic resonance, theory of management

Постановка проблеми у загальному вигляді

При проведенні досліджень харчових продуктів широке застосування знаходять спектрометричні методи. Одним з них є імпульсний метод ядерного магнітного резонансу (ЯМР), що дає можливість визначити стан води у харчових продуктах шляхом дослідження рухомості молекул води, застосовуючи резонанс протонів водню [1, 2].

Особливістю проведення цих досліджень є те, що вони потребують використання вимірювальної апаратури високої чутливості для визначення корисного сигналу на фоні впливу перешкод. Тому питання підвищення якості вимірювань, з використанням спектрометра ЯМР шляхом його аналізу як об'єкта керування, є актуальною задачею.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Для визначення шляхів підвищення якості вимірювань необхідно розглянути спектрометр ЯМР як звичайний об'єкт керування на основі сучасних підходів теорії автоматичного керування [3,4]. Відомо, що будь-який динамічний об'єкт може бути записаний наступною системою рівнянь:

$$\dot{\bar{x}} = F(t)\bar{x} + G(t)\bar{\omega}(t) + C(t)\bar{u}(t) \quad (1)$$

для $t \geq t_0$, де $x = x(t)$.

В рівнянні (1) \bar{x} – n-вектор який називають станом системи; $\bar{\omega}$ – p-вектор який називають збуренням; \bar{u} – r-вектор, який називають керування; t – час; F(t) – матриця розміром n × n; G(t) – матриця розміром n × p; C(t) – матриця розміром n × r. Передбачається, що ці три матриці неперервні у часі та мають назву матриці системи. Також вважається, що початковий час фіксовано і початковий стан $x(t_0)$ відомий. Елементи x мають назву змінні стану, а елементи ω та u відповідно змінними збурення та керування. Будемо вважати $\omega(t)$ і $u(t)$ довільними функціями.

Припустимо, що вихідні сигнали які дають змогу спостерігати за процесом можна описати за допомогою співвідношення:

$$\dot{\bar{y}}(t) = H(t)\bar{x}(t) + \bar{v}(t), \quad (2)$$

де \bar{y} – m-вектор, який має назву вектор вимірювання, \bar{v} – m-вектор, який має назву вектора похибки вимірювання, H(t) безперервна матриця розміру m × n яка пов'язує стан системи та вимірювання. Її називають матрицею вимірювання. Вектор y також називають вектором виходу системи. Система, що описується рівняннями (1), (2) має назву неперервна лінійна система [4].

При дослідженні таких систем передбачається, що відомі тільки вектори вимірювання $y(t)$ та керування $u(t)$. Шляхом обробки даних першого вектора треба визначити як діє система, а зміною другого вектора можна примусити систему діяти бажаним образом.

Складові $\omega(t)$ та $v(t)$ є небажаними сигналами які по можливості треба компенсувати.

Особливістю проведення дослідження на спектрометрі ЯМР є те, що вимірювання проводяться не безперервно у часі, а дискретно. У такому разі для опису поведінки системи дослідження доцільно використати систему лінійних різницевих рівнянь першого порядку:

$$\begin{aligned} \bar{x}(k+1) &= F(k+1, k)\bar{x}(k) + \\ &+ G(k+1, k)\bar{\omega}(k) + C(k+1, k)\bar{u}(k) \end{aligned} \quad (3)$$

для $k=0, 1, \dots$. В рівнянні (3) вектори $\bar{x}, \bar{y}, \bar{\omega}$ мають таке саме число компонент як і в рівнянні (2) і являють собою відповідно вектори стану, збурення та керування системи. Однак вони визначені тільки у дискретні моменти часу. Назвемо матрицю $F(t)$ розміру $n \times n$ перехідною матрицею стану системи; матрицю $G(t)$ – розміру $n \times r$ перехідною матрицею збурення та матрицю $C(t)$ розміром $n \times l$ перехідною матрицею керування. Припустимо, що $k=0$ відповідає початковому фіксованому стану часу t_0 та початковий стан системи $x(0)$ відомий.

Послідовність $\{\omega(0), \omega(1), \dots\}$ має назву послідовності збурення, а $\{u(0), u(1), \dots\}$ – послідовністю керування. Коли ці послідовності та вектор $x(0)$ відомі то використовуючи рівняння (3) можна визначити послідовність стану $\{x(1), x(2), \dots\}$.

Вимірювальна система визначається рівнянням

$$\bar{y}(t) = H(k+1)\bar{x}(k+1) + v(k+1) \quad (4)$$

для $k=0, 1, \dots$, де \bar{y} та \bar{v} – m -вектори, а H – матриця розміру $m \times n$.

Послідовність $\{y(1), y(2), \dots\}$ має назву вихідної послідовності системи, а $\{v(1), v(2), \dots\}$ має назву послідовність похибок вимірювання.

Перехід від безперервної до дискретної форми рівнянь системи виконується за відповідними співвідношеннями [4, 5]. У подальшому буде розглядатись тільки дискретні системи. Фундаментальним поняттям теорії лінійних систем є поняття спостережливості та керованості системи [4, 5].

Вивчення цих понять базується у відповіді на два питання:

1. При яких умовах можна встановити поведінку вектора стану x динамічної системи на кінцевому інтервалі часу коли відома поведінка вектора вимірювання у на тому ж інтервалі часу?

2. При яких умовах можна перевести динамічну систему із заданого початкового у необхідний кінцевий стан за обмежений час з використанням кусково-неперервного керування?

Відносно спектрометра ЯМР це означає теоретичну перевірку можливостей спектрометра спостерігати та змінювати стан речовини, яка досліджується.

Мета та завдання статті

Метою статті є аналіз спектрометра ЯМР як об'єкта керування для визначення шляхів його удосконалення з метою підвищення ефективності його роботи під час проведення досліджень.

Спочатку зробимо припущення що збурення та похибки вимірювання відсутні. Питання спостережливості та керованості систем детально розглянуті у загальній теорії систем керування [5]. Запишемо систему загальної системи керування у вигляді

$$\begin{aligned} \bar{x}(k+1) &= F(k+1, k)\bar{x}(k) + C(k+1, k)\bar{u}(k) \\ \bar{y}(k+1) &= H(k+1)\bar{x}(k+1). \end{aligned} \quad (5)$$

Має місце твердження, [5] що дискретна система (5) буде повністю відповідати умовам спостереження, тоді і тільки тоді коли симетрична матриця розміру $n \times n$

$$W(0, N) = \sum_{i=1}^N F^T(i, 0)H^T(i)H(i)F(i, 0) \quad (6)$$

буде позитивно визначена для деякого $N > 0$, $F(i, 0) = F(i, i-1)F(i-1, i-2)\dots F(1, 0); i = 1, \dots, N$.

Відносно можливостей керування стверджується, [4] що дискретна система (5) буде повністю керованою, тоді і тільки тоді коли симетрична матриця розміру $n \times n$

$$Q(0, N) = \sum_{i=1}^N F(0, 1)C(i, i-1)C^T(i, i-1)F^T(0, i) \quad (7)$$

буде позитивно визначена для деякого $N > 0$, $F(0, i) = F(0, 1)F(1, 2)\dots F(i-1, 0); i = 1, \dots, N$.

Виклад основного матеріалу

Розглянемо питання спостереження та керованості відносно спектрометра ЯМР з урахуванням вище наведених співвідношень.

Спектрометр ЯМР дозволяє оцінити рухомість протонів водню шляхом визначення часу спин-спінової релаксації T_2 . Стан системи, що досліджується, характеризується наступним вектором

$$x^T = \|a \ b \ c\|, \quad (8)$$

де a – величина, що залежить від маси зразка, b – коефіцієнт, що залежить від часу релаксації, c – коефіцієнт, що залежить від коефіцієнта самодифузії зразка.

Амплітуда вихідного сигналу спектрометра пов'язана з вектором стану зразка наступним співвідношенням [2]

$$h(\tau) = a \exp(b\tau + c\tau^3), \quad (9)$$

де τ – час між зондувальними імпульсами.

Логарифмуючи (9) можна здобути наступне рівняння

$$y(\tau) = A + b\tau + c\tau^3, \quad (10)$$

де $y(\tau) = \ln(h(\tau))$, $A = \ln a$.

У дискретній формі рівняння (5), з урахуванням (8) (10) приймуть вигляд

$$\begin{aligned} x(k+1) &= F(k+1, k)x(k) \\ y(k+1) &= H(k+1)x(k+1), \end{aligned} \quad (11)$$

де матриця F – одинична матриця розміру 3×3 , H – вектор-рядок розміру 1×3 який має вигляд $H = \|1 \tau \tau^3\|$.

Аналізуючи (10) (11) видно, що змінити стан речовини дослідження при обраній методиці неможливо. Це обумовлено тим, що матриця керування $S(k)$ відсутня у рівнянні (3). Тому можна стверджувати, що спектрометр ЯМР при даній конфігурації системи вимірювання та вибору вхідних та вихідних змінних, не дає можливості керувати станом речовини, що досліджується. В той же час він відповідає умовам спостереження і дає можливість визначити стан речовини тобто знайти коефіцієнти рівняння (9).

Для перевірки цього твердження знайдемо матрицю W з урахуванням введених позначень шляхом підстановки в (6) даних з формули (11). Наприклад для $N=3$ (три різні значення інтервалу зондувальних імпульсів) після підстановки та остаточних перетворень знаходимо

$$W(0,3) = \begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^3 \tau_i & \sum_{i=1}^3 \tau_i^3 \\ \sum_{i=1}^3 \tau_i & \sum_{i=1}^3 \tau_i^2 & \sum_{i=1}^3 \tau_i^4 \\ \sum_{i=1}^3 \tau_i^3 & \sum_{i=1}^3 \tau_i^4 & \sum_{i=1}^3 \tau_i^6 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Для виконання умов спостережливості необхідно щоб матриця W була позитивно визначеною. Згідно з

теорії матричного обчислення для виконання цієї умови досить [6] щоб визначник W був позитивним. Коли величини τ_i різні, ця умова виконується завжди.

Аналогічну перевірку можна провести відносно умов керованості шляхом аналізу матриці $Q(0,N)$. Однак з рівняння (11) видно, що відсутній сигнал який може змінити стан $x(k)$ речовини, що досліджується, як було зазначено вище.

Висновки

Проведено аналіз спектрометра ЯМР як об'єкта керування. Встановлено, що при використанні існуючої на даний момент методики вимірювання, та структурі вимірювальної системи спектрометр ЯМР, навіть при припущенні відсутності впливу перешкод, не відповідає умовам керованості тобто не може змінювати стан речовини, що досліджується.

В той же час він відповідає умовам спостереження що дає можливість визначати стан речовини, що досліджується. Для підвищення якості вимірювань також доцільно проаналізувати роботу спектрометра ЯМР з урахуванням можливого впливу сторонніх перешкод. Але попередньо треба провести визначення загальних параметрів цих перешкод, що діють на вимірювальний сигнал. Це особливо важливо при визначенні параметрів речовин, які характеризуються малим вихідним сигналом, який треба визначити на фоні перешкод.

Література

1. Торяник, О.І. Використання комп'ютерних технологій при дослідженні харчових продуктів методом ЯМР [Текст] / О.І Торяник, О.Г Дьяков // Матеріали ІХ Міжнародної науково-технічної конференції "Нові технології та технічні рішення в харчовій та переробній промисловості: сьогодення і перспективи", 17-19 жовтня 2005 р. – У 2 ч.-К.:НУХТ, 2005.-Ч II. с. 50.
2. Торяник, О.І. Підвищення якості оцінки результатів експерименту в ЯМР дослідженнях харчових продуктів [Текст] / О.І Торяник, О.Г Дьяков // Прогресивні техніка та технології харчових виробництв ресторанного господарства і торгівлі. Зб. наук. праць. Вип..2. Харків 2005. с 314-317.
4. Олсон, Г. Цифровые системы автоматизации процесса управления [Текст] Г. Олсон, Д. Пиани. – СПб. : Питер, 2003. – 928 с.
5. Медич, Дж. Статистически оптимальные линейные оценки и управление [Текст] / Дж. Медич. – М. : Энергия, 1973. 440 с.
6. Гантмахер, Ф.Р. Теория матриц [Текст] / Ф.Р Гантмахер, М. : Наука, 1967 – 575 с.