

## ПИТАННЯ УПРАВЛІННЯ В СКЛАДНИХ СИСТЕМАХ

УДК 621.314.7

А.Ф. Даниленко<sup>1</sup>, В.В. Скороделов<sup>1</sup>, А.Г. Дьяков<sup>2</sup>, С.Н. Нечаусов<sup>1</sup> *Национальный технический университет «ХПИ», Харьков*<sup>2</sup> *Харьковский государственный университет питания и торговли, Харьков*<sup>2</sup> *Национальный аэрокосмический университет имени Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков*

## СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ЯМР-СПЕКТРОМЕТРОМ

*Предложено и обосновано подходы повышения качества измерения параметров пищевых продуктов. Наибольшее внимание уделено измерению коэффициента самодиффузии, как одного из основных показателей, что используется при исследованиях пищевых продуктов. Рассмотрены подходы к построению системы управления спектрометром ЯМР. На основе анализа требований к точности измерения параметров обоснована и предложена структура системы управления спектрометром ЯМР с использованием микроконтроллера АРМ.*

**Ключевые слова:** *пищевые продукты, спектрометр, ядерно-магнитный резонанс, самодиффузия.*

## Введение

**Постановка проблемы:** При выполнении исследований свойств пищевых продуктов значительное внимание уделяется методам спектрального анализа. Одним из наиболее применяемых методов является метод ядерно-магнитного резонанса (ЯМР), который позволяет установить изменение свойств вещества и состояния воды при воздействии на них различных добавок, что дает возможность более целенаправленно изучить влияние пищевых добавок на качественные показатели продуктов путем замены дефицитных и дорогостоящих пищевых добавок импортного производства продукцией, которая широко производится в Украине. Кроме того, применение пищевых добавок дает возможность улучшить качественные показатели продукта, увеличить сроки его хранения. Поэтому данная задача актуальна.

Выходной сигнал ЯМР-спектрометра имеет колоколообразную форму длительность, которого составляет 1 – 2 мс применительно к исследованиям водных структур [1 - 3], а именно такие структуры и подвергаются анализу в пищевых производствах. Величина отклика сигнала спектрометра ЯМР с учетом диффузии имеет вид:

$$A_i = A_0 \exp(-2\tau_i / T_2 - (2/3)\gamma^2 G^2 D \tau_i^3), \quad (1)$$

где  $A_0$  – величина, не зависящая от времени и определяется величиной влагосодержания исследуемого вещества;  $\tau_i$  – интервал времени между зондирующими импульсами спектрометра ЯМР;  $T_2$  – время спин-спиновой релаксации;  $\gamma$  – гиромагнитное отношение;  $G$  – градиент магнитного поля;  $D$  – коэффициент самодиффузии [1, 3].

Произведя анализ соотношения (1), можно увидеть, что при малых значениях интервал времени между зондирующими импульсами  $\tau_i$  вклад диффузии в амплитуду измеряемого сигнала почти не ска-

зывается и определить  $D$  крайне сложно. Вычислить непосредственно коэффициент самодиффузии  $D$  из уравнения (1) представляет определенные трудности, так как точное определение градиента  $G$  крайне сложная задача. Преобразуем уравнение (1) к виду:

$$A_i = A_0 \exp(-K_1 \tau_i - K_2 \tau_i^3), \quad (2)$$

где  $K_1 = -2/T_2$ ;  $K_2 = (2/3)\gamma^2 G^2 D$ , в этом случае можно говорить о величине пропорциональной коэффициенту самодиффузии. Для большинства исследований пищевых продуктов этого достаточно, так как наибольший интерес представляет тенденция изменения коэффициента самодиффузии, а не его абсолютное значение. Исходя из особенностей исследуемых веществ величины  $K_1$  и  $K_2$  имеют следующие ориентировочные значения  $K_1 = 10 - 20$  и  $K_2 = 200 - 400$ . Указанные значения коэффициентов приводят к тому, что при больших значениях амплитуда наблюдаемого сигнала падает и уровень помехи, который можно считать неизменным в процессе измерений, существенно начинает влиять на определение амплитуды измеряемого сигнала.

**Анализ литературы.** Существующие методы повышения точности измерения на спектрометрах ЯМР заключаются в использовании компьютеров не только для обработки результатов измерений, но и для непосредственной фиксации измеряемого сигнала, а так же автоматизации процессов измерения. Имеется параметр, который можно определить на спектрометре ЯМР – это коэффициент самодиффузии. Данный параметр наиболее информативен и непосредственно показывает степень подвижности протонов в веществах. Применение соотношения (2) для определения параметров продукта обосновывается тем, что при малом содержании воды в продукте вторым слагаемым (диффузионной составляющей) можно пренебречь по сравнению с первым, так как коэффициент самодиффузии достаточно

малая величина. Однако при проведении исследований, целью которых является изучение изменения состояния воды в зависимости от ряда добавок, возникают сложности с определением величины  $T_2$  из-за возможного влияния коэффициента самодиффузии. При проведении исследований раствора глицерина было установлено, что при концентрации глицерина в растворе от 40 до 100 % возможно применение формулы (2), а при меньших концентрациях необходимо вычисления вести по формуле (1). На такой характер спада амплитуды эхо-сигнала впервые обратил внимание А. Лёше [2]. Для исключения влияния коэффициента самодиффузии при исследовании маловязких жидкостей необходимо применять очень малые расстояния между зондирующими импульсами, что усложняет техническую реализацию спектрометра ЯМР. Однако Карр и Парселл [3] предложили более удобный способ измерения спада амплитуды эхо-сигнала который заключается в использовании большого числа импульсов следующих друг за другом. Первые два импульса являются обычными зондирующими импульсами, которые поворачивают вектор магнитной индукции на  $90^\circ$  и  $180^\circ$  и затем измеряется амплитуда сигнала эхо. Затем через определенный промежуток времени на образец воздействуют, вновь  $180^\circ$  импульсом и измеряют эхо-сигнал от действия этого импульса. Показано, что в этом случае характер изменения сигнала эхо от величины  $\tau$  определяется следующим соотношением:

$$A(\tau) = A_0 \exp\left(-\frac{\tau}{T_2} - \frac{5}{3}k \frac{\tau^3}{n^2}\right), \quad (3)$$

где  $A(\tau)$  – амплитуда сигнала на выходе измерительной системы спектрометра;  $A_0$  – начальная амплитуда сигнала;  $\tau$  – временной интервал между зондирующими импульсами;  $k$  – коэффициент пропорциональности;  $n$  – число импульсов.

Из выражения (3) следует, что в этом случае влияние коэффициента самодиффузии можно уменьшить в  $n^2$  раз, если общий интервал времени проведения исследований разделить промежуточными импульсами на  $n$  отрезков. Однако существующую измерительную систему установки ЯМР [4] с учетом её программного обеспечения и технической реализации невозможно модернизировать для реализации соотношения (3). Для её доработки требуется существенное изменение аппаратной и программной составляющей измерительной системы спектрометра и доработки алгоритмов вывода информации на дисплей, так как в ней не предполагалось записи сигналов эхо последовательности импульсов.

На рис. 1 представлены графики изменения относительной погрешности определения начальной амплитуды  $\Delta A_0$ , времени спиновой релаксации  $\Delta T_2$  и величины  $\Delta K_2$ , пропорциональной коэффициенту самодиффузии, в зависимости от ошибки измерения амплитуды  $\Delta A_i$ .

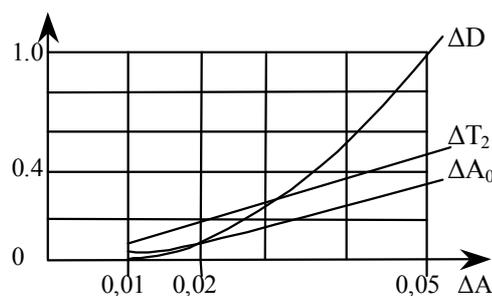


Рис. 1. Графики изменения ошибок от изменения амплитуды

Из графиков следует, что рост ошибок измерения амплитуды вызывают рост погрешности определения параметров  $A_0$ ,  $T_2$  и  $K_2$ .

**Целью данной работы** является совершенствование системы управления спектрометром ЯМР с применением микроконтроллеров АРМ и учетом требований к проведению многократных исследований в пищевых технологиях.

### Структурная реализация

Моделирование системы на базе реальных значений параметров пищевых продуктов показало, что если повысить точность измерения при  $\tau = 0,05$  и  $\tau = 0,06$ , то можно существенно уменьшить ошибку определения параметров. Для уменьшения влияния случайных ошибок использован метод накопления и затем последующего усреднения полученного результата [4]. Приведенный анализ показал, что существенно повысить точность измерений можно увеличением количества измерений для всех значений интервалов зондирующих импульсов, что нецелесообразно, так как существенно возрастет время проведения эксперимента. Применение АЦП с большей разрядностью, может повысить точность измерения, однако снять проблемы связанные с влиянием помехи нельзя. При увеличении числа измерений возникает проблема их автоматизации, так как резко возрастет длительность проведения исследований. При этом, возможно придется решать задачи связанные с дрейфом основных параметров установки ЯМР. Автоматизация процесса измерений должна учитывать ряд последовательно выполняемых действий (учета количества измерений, фиксация полученных результатов, обработка полученной информации и непосредственное управление спектрометром) целесообразно использовать последовательный порт USB или системную шину компьютера, через которые выполняется управление измерительной аппаратурой ЯМР спектрометра.

Важную роль в процессе измерений играет температурный режим. Во многих случаях требуется только регистрировать температуру. Для этого целесообразно использовать для ввода информации о температуре отдельный канал измерения. Поскольку данный параметр меняется относительно медленно, то для передачи данных в персональный компьютер можно использовать последовательный

канал типа USB. Причем для работы с данным портом целесообразно использовать АЦП последовательного приближения, так как частота изменения сигнала не превышает 1 - 10 Гц.

С учетом приведенных доводов целесообразная структурная схема системы управления спектрометром ЯМР имеет вид, представленный на рис. 2.

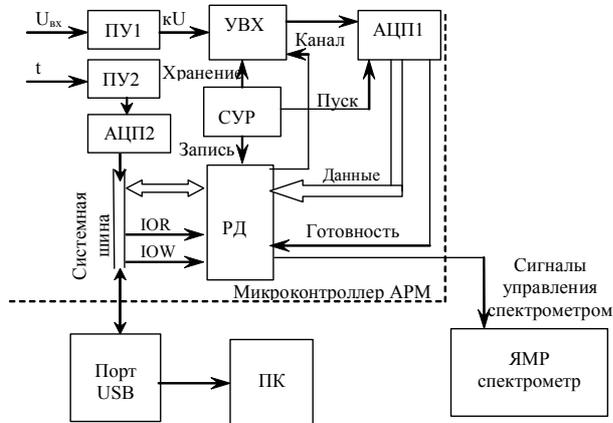


Рис. 2. Структурная схема системы управления спектрометром ЯМР

В данной системе измерительный сигнал поступает на вход предварительного усилителя ПУ1 и после необходимого преобразования в АЦП и поступает на вход устройства выборки-хранения – УВХ, назначение которого состоит в запоминании сигнала на время преобразования сигнала АЦП1. Низкочастотные сигналы (от датчика температуры) через согласующий каскад усиления ПУ2 поступают прямо на АЦП2 и через порт USB и вводятся в персональный компьютер (ПК) [5]. Управление измерительными блоками спектрометра ЯМР осуществляется сигналами микроконтроллера АРМ, параметры которых через порт USB поступают от ПК. Программное обеспечение предлагаемой системы управления состоит из двух основных частей: – программа формирования зондирующих импульсов с применением МК АРМ32 и специального, – программа для предварительной обработки полученной информации, управления спектрометром ЯМР, а

также ведения протокола проведения экспериментов ее документирование. Для реализации данной задачи был применен микроконтроллер АРМ 32, который имеет в своём составе 8 встроенных 12 разрядных АЦП и 6 таймеров. Применение таймеров позволяет значительно сократить расход машинного времени процессора на управление спектрометром ЯМР при формировании зондирующих импульсов и использовать его приема и сохранения получаемых данных при анализе состояния продукта.

## Выводы

На основе анализа предметной области сформулирована постановка задачи к реализации системы управления спектрометром ЯМР. Отмечено, что достижение приемлемой точности определения коэффициента самодиффузии возможно без существенного увеличения общего объема измерений для уменьшения влияния помех на исследуемый сигнал, путем повышения точности измерений при больших  $t$ . Предложена и обоснована структурная схема системы управления спектрометром ЯМР с применением микроконтроллера АРМ 32.

## Список литературы

1. Фаррар Т., Беккер Э. Импульсная Фурье-спектроскопия / – М.: Мир, 1973. – 164 с.
2. Лёше А. Ядерная индукция. Издательство иностранной литературы. М. 1963. 684 с.
3. Carr H.Y. Влияние диффузии на свободную прецессию в опытах по ядерному магнитному резонансу / Carr H.Y., Purcell E.M. Phys Rev., 94, 630 (1954).
4. Даниленко А.Ф. Повышение точности измерений при исследовании продуктов с небольшим влагосодержанием / Даниленко А.Ф., Дьяков А.Г. // Вісник НТУ "ХПИ" Зб. наук. праць. Тематичний випуск: Інформатика і моделювання – Х.: НТУ "ХПИ".-2006.- №46. С155-159
5. Олсон Г. Цифровые системы автоматизации процесса управления / Олсон Г., Пиани Д. - СПб.: Невский диалект, 2012. – 254 с.

Надійшла до редколегії 25.05.2016

Рецензент: д-р техн. наук, проф. С.В. Козелков, Державний університет телекомунікацій, Київ.

## СИСТЕМА УПРАВЛІННЯ ЯМР-СПЕКТРОМЕТРОМ

О.Ф. Даниленко, В.В. Скорodelов, О.Г. Дьяков, С.М. Нечаусов

Запропоновано і обґрунтовано підхід для підвищення якості вимірювання параметрів харчових продуктів. Розглянуто підходи до побудови системи управління спектрометром ЯМР. Найбільша увага приділена вимірюванню коефіцієнта самодифузії, як одного з основних показників, що використовується при дослідженнях харчових продуктів. На основі аналізу вимог до точності вимірювання параметрів обґрунтована і запропонована структура системи управління спектрометром ЯМР з використанням мікроконтролера АРМ.

**Ключові слова:** продукти харчування, спектрометр, ядерно-магнітний резонанс, самодифузія.

## CONTROL SYSTEM NMI-SPECTROMETER

A.F. Danilenko, V.V. Skorodelov, A.G. Dyakov, S.V. Nechausov

The approaches to construction of control system to NMR – spectrometer are considered. The most attention is given to the measurement of self-diffusion coefficient as one of principal indices which are used by the research of food products. On the base of the analysis of demands to the precision of parameters' measurement the structural scheme of control system to NMR – spectrometer is grounded and proposed the use ARM microcontroller.

**Keywords:** food products, spectrometer, nuclear-magnetic resonance, self-diffusion.