

А.Ф. ДАНИЛЕНКО, канд. техн. наук, НТУ "ХПИ",
А.Г. ДЬЯКОВ, канд. техн. наук, ХГАТП, (г. Харьков)

АЛГОРИТМ ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ ОБРАЗЦА В ЯМР-СПЕКТРОМЕТРЕ

Проведен анализ влияния параметров измерительной установки ЯМР-спектрометра на интенсивность принимаемого эхо-сигнала. Предложен алгоритм оптимизации позиционирования ампулы с образцом в магнитном поле катушки. Применен поиск экстремума сигнала в установке ЯМР-спектрометра на основе чисел Фибоначчи с целью получения максимальной амплитуды принимаемого эхо-сигнала. Рассмотрена возможность реализации данного алгоритма на микроконтроллере и введения устройства позиционирования в систему управления ЯМР-спектрометром.

Ключевые слова: измерительная установка, ЯМР-спектрометр, эхо-сигнал, алгоритм оптимизации, позиционирование ампулы, магнитное поле, поиск экстремума, числа Фибоначчи, микроконтроллер, устройство позиционирования.

Постановка проблемы и анализ литературы. При исследовании образцов на установке ядерного магнитного резонанса (ЯМР) необходимо учитывать их расположение в магнитном поле. Определение наилучшей точки положения образца позволяет значительно повысить амплитуду эхо-сигнала, повысить точность измерения его параметров и сократить время на получение информации о структуре исследуемого вещества.

Образец с исследуемым веществом при проведении исследований пищевых продуктов на установке ЯМР-спектрометра находится одновременно под действием постоянного и переменного магнитного поля [1]. Величина постоянного магнитного поля определяет частоту и интенсивность переменного магнитного поля, которое должно создаваться измерительной катушкой ЯМР-спектрометра. Основными параметрами исследования являются времена спин-спиновой (T_2) и спин-решеточной релаксации (T_1) определяемых из следующих соотношений:

$$T_1 = -\frac{\Delta T_i}{\ln(1 - A_i/A_0)}; \quad T_2 = -\frac{2(\Delta \tau_i)}{\ln(A_i/A_0)}, \quad (1)$$

где ΔT_i – интервал между сериями зондирующих импульсов; A_0 – начальная амплитуда импульса; A_i – амплитуда импульса при i -м интервале между зондирующими импульсами; $\Delta \tau_i$ – интервал времени между зондирующими импульсами.

Из соотношений (1) видно, что ошибка в определении амплитуды импульсов сказывается на точности определения времен релаксации. Поэтому образец должен быть установлен так в магнитном поле катушки, чтобы амплитуда принимаемого сигнала была максимальной. В этом случае будет обеспечено наилучшее соотношение сигнал-шум и точность определения времен релаксации будет наилучшей. В большинстве случаев

позиционирование образца обеспечивается путем визуального наблюдения за амплитудой сигнала и последующей корректировкой положения образца в измерительной катушке [2].

В [3] приведено соотношение которое позволяет оценить амплитуду принимаемого сигнала ЯМР в зависимости от параметров спектрометра:

$$U = Q\gamma B^2 \chi n V_e / L_k, \quad (2)$$

где: Q – добротность измерительного контура спектрометра; γ – гиромагнитное отношение, определяющее резонансную частоту изотопа в магнитном поле; B^2 – суммарная магнитная индукция, образуемая магнитными моментами протонов после возбуждения образца; χ – магнитная спиновая восприимчивость; n – число витков приемной катушки; V_e – объем исследуемого образца, на который воздействует высокочастотное поле; L_k – длина приемной катушки.

Из выражения (2) следует, что при неизменных параметрах измерительной системы спектрометра точка позиционирования образца влияет на величину принимаемого сигнала. Поэтому систему управления спектрометром целесообразно дополнить блоком позиционирования с реализованным в нем алгоритмом определения наилучшей точки установки образца в магнитном поле катушки.

Целью работы – является определение, выбор и обоснование алгоритма работы устройства позиционирования образца в магнитном поле катушки для получения максимальной амплитуды принимаемого сигнала с возможностью реализации его на микроконтроллере и дальнейшем введением его в систему управления ЯМР-спектрометром.

Для оценки влияния высоты расположения образца в катушке предварительно были проведены опыты с разным объемом заполнения ампулы. Она заполнялась водой на высоту 6,5; 10 и 12,5 мм. Далее путем постепенного перемещения ампулы с образцом в катушке определялось положение, при котором выходной эхо-сигнал был максимальным. Результаты обработки экспериментальных данных в относительных единицах приведены на рисунке. По оси ординат откладывались значения амплитуды сигнала, а по оси абсцисс отложено число оборотов механизма перемещения ампулы с образцом. Один оборот механизма перемещения соответствует смещению образца на 1,5 мм.

Приведенная на рис. кривая 1 показывает график изменения амплитуды сигнала в зависимости от положения образца в поле катушки при заполнении ампулы на 6,5 мм. Графики 2, 3 – соответствуют заполнению ампулы на 10 и 12,5 мм соответственно. Из приведенных графиков видно, что при заполнении ампулы на 10 мм максимальная относительная амплитуда сигнала достигает максимума при установлении ампулы на высоте приблизительно 3 мм от начального значения. При этом максимальное значение амплитуды достигается примерно в средней части интервала перемещения. Это значение и

является наиболее целесообразным при проведении измерений свойств вещества. В свою очередь, наибольшее абсолютное значение сигнала было получено при заполнении ампулы на 12,5 мм. Однако, погрешности позиционирования, в этом случае значительно больше, из-за большей остроконечности изменения зависимости сигнала от положения ампулы с исследуемым образцом в поле катушки ЯМР-спектрометра.

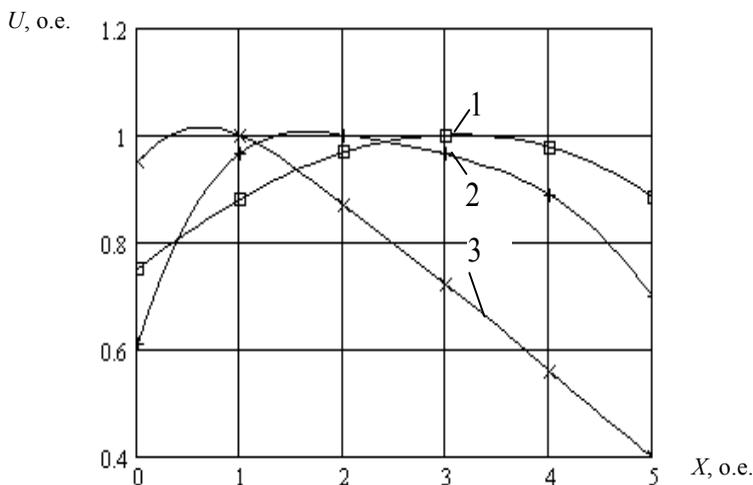


Рис. Зависимость амплитуды сигнала образца от положения ампулы при различной степени её заполнения

Исследования показали, что при анализе твердых образцов, которые не могут полностью заполнить ампулу, также целесообразно не превышать уровень 10 мм, потому что возможен выход образца за границы однородности магнитного поля создаваемого постоянным магнитом.

В качестве алгоритма для определения наилучшего положения образца был исследован алгоритм поиска экстремума на основе чисел Фибоначчи. Числа Фибоначчи определяются следующей последовательностью [4]:

$$F_0 = F_1 = 1; F_N = F_{N-1} + F_{N-2}; N > 1.$$

Использование чисел Фибоначчи в технических устройствах позволяет реализовать алгоритм для организации оптимального поиска экстремума функции одной переменной.

Доказано, что если требуется найти положение экстремума функции $H(x)$, определенной на интервале (a, b) с абсолютной ошибкой не превышающей

$$\Delta = \frac{b-a}{F_N}, \quad (3)$$

где F_N – N -е число Фибоначчи, то для отыскания положения экстремума достаточно вычислить не более N значений функции $H(x)$.

Алгоритм определения положения наилучшей точки для проведения измерения состоит из следующих этапов:

1. Вводится начальная a и конечная b точки позиционирования образца. Задается интервал Δ , в пределах которого необходимо найти наилучшую точку позиционирования образца. Для реальных графиков, представленных на рис, величину Δ можно принять равной 0,1 от общего интервала (a, b) измерения.

2. Определяется число Фибоначчи, которое будет использоваться при поиске точки максимума из выражения

$$F_N = \frac{b - a}{\Delta}.$$

3. Определяется шаг поиска по формуле (3)

4. Определяется значение амплитуды $A(a)$ в начальной точке интервала a .

5. Определяется координата первой точки проведения измерения

$$X^1 = a + \Delta_N F_{N-1}.$$

6. Сравниваются значения полученных амплитуд в точках X^1 и a . Если $A(X^1) > A(a)$, то шаг считается удачным и следующая точка Δ определяется из выражения:

$$X^2 = X^1 + \Delta_N F_{N-3}.$$

Если $A(X^1) < A(a)$, то шаг неудачный – следующая точка Δ определяется из выражения:

$$X^2 = X^1 - \Delta_N F_{N-3}.$$

7. Последующие шаги выполняются с уменьшающейся величиной шага $\Delta X^i = \pm \Delta_N F_{N-2-i}$ по следующему правилу: если предыдущий шаг удачный, то следующий $(i+1)$ -й шаг выполняется из точки $X^{i+2} = X^{i+1} + \Delta X^i$; если шаг неудачный, то из точки $X^{i+2} = X^i - \Delta X^{i+1}$.

Указанный процесс продолжается до тех пор, пока не будут исчерпаны все числа Фибоначчи в убывающей последовательности.

Проведенные исследования и измерения дают возможность поставить вопрос о разработке автоматической системы [5 – 7], построенной на основе микроконтроллера, для установки образца в зону максимального сигнала. В качестве первого варианта подобной системы можно рассмотреть систему, которая будет давать рекомендации исследователю для установки образца в ручном режиме.

Выводы. Проведен анализ влияния степени заполнения ампулы веществом для исследования величины сигнала ЯМР. Установлено, что для данной конфигурации измерительной системы наиболее целесообразно проводить заполнение ампулы на высоту 10 мм. Определена степень влияния

положения образца на амплитуду выходного сигнала ЯМР- спектрометра. Предложен способ и алгоритм минимизации времени и усталости образца при подготовке эксперимента. Применение данного алгоритма позволяет на 40 % снизить затраты времени на позиционирование образца и повысить стабильность условий проведения измерений.

Список литературы: 1. *Ваишман А.А., Пронин И.С.* Ядерная магнитная релаксация и ее применение в химической физике. – М.: Наука, 1979. – 223 с. 2. *Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф.* Автоматизированный выбор параметров измерительной установки ЯМР // Вестник НТУ "ХПИ" .– Харьков: НТУ "ХПИ". – 2006. – Вып. – 40. – С. 65-69. 3. *Неронов Ю.И., Гарайбех З.* Ядерный магнитный резонанс в томографии и в спектральных исследованиях. Учебное пособие. С-Пб.: Санкт-Петербургский государственный институт точной механики и оптика, 2003. – 84 с. 4. *Бояринов А.И., Кафаров В.В.* Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия, 1975. – 576 с. 5. *Олсон Г., Лиани Д.* Цифровые системы автоматизации процесса управления. – СПб.: Невский диалект, 2002. – 254 с. 6. *Лыков А.В.* Тепломассообмен. Справочник. – М.: Энергия, 1972. – 600 с. 7. *Грон Д.* Методы идентификации систем. – М.: Мир. 1979. – 302 с.

УДК 621.314.7

Алгоритм позиціонування зразка в ЯМР-спектрометрі / Даниленко О.Ф., Д'яков О.Г.
// Вісник НТУ "ХПІ". Тематичний випуск: Інформатика і моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2008. – № 49. – С. 51 – 55.

Проведено аналіз впливу параметрів вимірювальної установки ЯМР-спектрометра на інтенсивність сигналу луни, що приймається. Запропоновано алгоритм оптимізації позиціонування ампули із зразком в магнітному полі котушки. Застосовано пошук екстремуму сигналу в установці ЯМР-спектрометра на основі чисел Фібоначчі з метою отримання максимальної амплітуди сигналу луни. Розглянута можливість реалізації даного алгоритму на мікроконтролері і введення пристрою позиціонування в систему управління ЯМР-спектрометром. Іл.: 1. Бібліогр.: 7 назв.

Ключові слова: вимірювальна установка, ЯМР-спектрометр, луна-сигнал, алгоритм оптимізації, позиціонування ампули, магнітне поле, пошук екстремуму, числа Фібоначчі, мікроконтролер, пристрій позиціонування.

UDC 621.314.7

Algorithm of positioning of standard in NMR-spectrometer / Danilenko A.F., Djakov A.G
// Herald of the National Technical University "KhPI". Subject issue: Information Science and Modelling. – Kharkov: NTU "KhPI". – 2008. – №. 49. – P. 51 – 55.

The analysis of influencing of parameters of the measuring setting is conducted NMR-spectrometer on intensity of the adopted echo-signal. The algorithm of optimization of positioning of ampoule is offered with a standard in the magnetic field of spool. The search of extremum of signal is applied in setting NMR-spectrometer on the basis of numbers Fibonacci with the purpose of receipt of maximal amplitude of the adopted echo-signal. Marketability this algorithm is considered on microcomptroller and introductions of device of positioning to the control system of NMR-spectrometer. Figs: 1. Refs: 7 titles.

Key words: the measuring setting, NMR-spectrometer, echo-signal, algorithm of optimization, positioning of ampoule, magnetic field, search of extremum, Fibonacci numbers, microcomptroller, device of positioning.

Поступила в редакцію 10.10.2008