

А.И. ТОРЯНИК, доктор хим. наук, ХГАТП,
А.Г. ДЬЯКОВ, канд. техн. наук, ХГАТП,
А.Ф. ДАНИЛЕНКО, канд. техн. наук, НТУ "ХПИ",
А.А. ФИОФИЛОВА (г. Харьков)

ИЗМЕРЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА САМОДИФФУЗИИ СПЕКТРОМЕТРОМ ЯМР

Запропоновано і обгрунтовано підхід для автоматизованого визначення коефіцієнта самодифузії методом спінової луни. Основна увага зроблена на застосування комп'ютерних технологій при виконанні досліджень шляхом спрощення методики вимірювань. Показано, що запропонований метод дозволяє обійти складні обчислення визначення коефіцієнта самодифузії та зменшити вимоги до технічних параметрів вимірювальної системи установки ЯМР.

The automated determination of coefficient of self-diffusion by the method of spinecho is offered and grounded. Basic attention is spared to application of computer technologies at to conducting of researches by simplification of measuring method. It is shown, that the offered method allows going round the difficult calculations of determination of coefficient of self-diffusion and lowering the requirements to the technical parameters of the measuring system of the NMR setting.

Постановка проблемы и анализ литературы. Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является одним из современных методов исследования свойств веществ. Учитывая сложность проведения данных исследований, в настоящее время ведутся интенсивные работы по их автоматизации на основе использования компьютерных технологий [1]. Однако непосредственное их применение без учета особенностей проведения измерений вызывает значительные сложности. Примером таких измерений является определение коэффициента самодиффузии, который позволяет оценить молекулярную подвижность в исследуемых веществах.

В соответствии с теоретическими положениями, приведенными в [2], для измерения коэффициента самодиффузии исследуемый образец помещают в радиочастотную катушку, которая находится в постоянном магнитном поле. Сигнал спинового эха появляется после воздействия на образец двух радиочастотных импульсов, следующих друг за другом через интервал времени τ , частота заполнения, которых ω соответствует резонансной частоте ядер исследуемого вещества в образце и определяется из соотношения:

$$\omega = \gamma H_0, \quad (1)$$

где γ – гиромагнитное отношение ядер спиновой системы исследуемого образца (в данном спектрометре производятся исследования на ядрах водорода); H_0 – напряженность внешнего магнитного поля в образце.

Длительность радиочастотных импульсов, подаваемых на катушку с помещенным в нее образцом, определяется известными соотношениями [2, 3].

Амплитуда эхо-сигнала, возникающего в приемной катушке после импульсного воздействия магнитного поля, через время 2τ , определяется функциональной зависимостью:

$$A(\tau) = A_0 \exp\left(\frac{-2\tau}{T_2} - \frac{2}{3}\gamma^2 G^2 D\tau^3\right), \quad (2)$$

где τ – время между первым и вторым радиочастотным импульсом; T_2 – время спин-спиновой релаксации; D – искомый коэффициент самодиффузии; G – градиент магнитного поля.

После логарифмирования и преобразования выражение (2) можно представить в виде:

$$y(\tau) = y_0 + k_1\tau + k_2\tau^3, \quad (3)$$

где $y(\tau) = \ln A(\tau)$ – амплитуда эхо-сигнала; $y_0 = \ln A_0$ – постоянный для данного образца коэффициент; $k_1 = 2/T_2$ – коэффициент, определяющий значение T_2 ; k_2 – коэффициент, определяющий значение коэффициента самодиффузии D .

Выражение (3) линейно относительно неизвестных коэффициентов y_0 , k_1 и k_2 , которые легко можно определить после проведения серии испытаний с различными значениями τ регрессионными методами [4].

Принимая во внимание традиционный подход определения коэффициента самодиффузии [5], оценим возможность его реализации с применением компьютерных технологий.

На каждом отдельном образце проводится измерение эхо-сигнала A_1 и A_2 при определенном значении τ между первым и вторым импульсом и при различных значениях градиента постоянного магнитного поля G_1 и G_2 . Взяв отношение A_1 к A_2 можно получить значение для D в виде:

$$D = \frac{3}{2\gamma^2\tau^3} \cdot \frac{\ln(A_1 / A_2)}{(G_2^2 - G_1^2)}. \quad (4)$$

Таким образом, коэффициент самодиффузии можно определить путем измерения времени τ между первым и вторым радиоимпульсами, градиентов магнитного поля G_1 и G_2 и амплитуд сигналов спинового эха A_1 и A_2 . Наиболее сложной задачей для данной методики проведения исследования является определение градиентов магнитного поля. Градиент поля создается двумя катушками Гельмгольца, которые включены встречно. Сложность его определения состоит в том, что помимо градиента, создаваемого катушками, необходимо учесть и естественный градиент в зазоре постоянного магнита. Существующие методики таких измерений требуют применения дополнительной аппаратуры, эталонных образцов, изготовленных с высокой точностью, и высокой квалификации исследователя.

Целью работы является рассмотрение вопросов разработки автоматизированной измерительной системы определения относительных коэффициентов самодиффузии для исследуемых образцов без предварительной градуировки градиента постоянного магнитного поля.

Решение проблемы. Предпосылкой разработки данного метода является то, что в подавляющем большинстве случаев (например, при исследовании технологических параметров пищевых продуктов) необходимо знать не абсолютное значение коэффициента самодиффузии, а соотношение этих коэффициентов между некоторым эталоном и исследуемым образцом. Таким образом, можно определить тенденцию изменения качественных показателей образца в зависимости от его структуры.

Вопросы автоматизации процесса определения параметров вещества с применением спектрометра ЯМР достаточно полно рассмотрены в [6 – 7]. При этом предполагалось, что время τ , используемое при проведении исследований, мало и коэффициент k_2 можно не учитывать в расчетах.

Вопрос о применении подобного подхода для оценки значения D может быть решен только после дополнительного анализа влияния погрешностей измерения амплитуды на коэффициент самодиффузии, обусловленных воздействием внешних помех, что требует дальнейших изысканий. Подробный анализ этого в рамках данной работы не проводился. Запишем выражения для коэффициента самодиффузии известного образца D_E и исследуемого D_X :

$$D_E = \frac{3}{2\gamma^2 \tau^3} \cdot \frac{\ln(A_{1E} / A_{2E})}{(G_2^2 - G_1^2)}; \quad (5)$$

$$D_X = \frac{3}{2\gamma^2 \tau^3} \cdot \frac{\ln(A_{1X} / A_{2X})}{(G_2^2 - G_1^2)}. \quad (6)$$

Взяв отношение величин (5) и (6) получим:

$$\frac{D_X}{D_E} = \frac{\ln(A_{1X} / A_{2X})}{\ln(A_{1E} / A_{2E})}. \quad (7)$$

Следовательно, величина

$$K = \frac{\ln(A_{1X} / A_{2X})}{\ln(A_{1E} / A_{2E})} \quad (8)$$

определяет относительное изменение коэффициента самодиффузии по отношению к эталону. Для автоматизации проведения измерений аппаратная часть измерительной системы ЯМР должна быть дополнена генератором стабильного тока для создания необходимого постоянного значения градиента. В данной системе генератор тока подключен к источнику питания и

управляется от сигналов, получаемых от ПК, благодаря параллельному порту последнего. Преобразование кода в необходимое значение тока для задания величины градиента осуществляется ЦАП непосредственно в самом генераторе тока.

Предлагаемый подход требует определенной переработки и дополнения измерительной системы ЯМР, предложенной в [8]. В этом случае и программное обеспечение дополнено модулями, позволяющими производить вычисления по приведенным выше математическим соотношениям. Обобщенная структурная схема разработанной измерительной системы приведена на рис. 1.

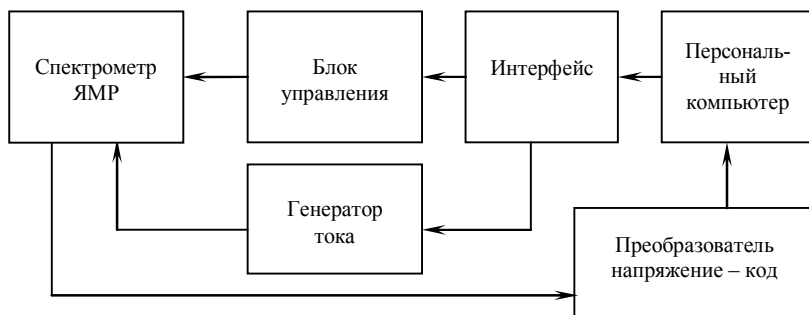


Рис. 1. Структурная схема измерительной системы ЯМР

Особенностью проводимых измерений является то, что при изменении градиента происходит изменение формы импульса (пример изменения приведен на рис. 2).

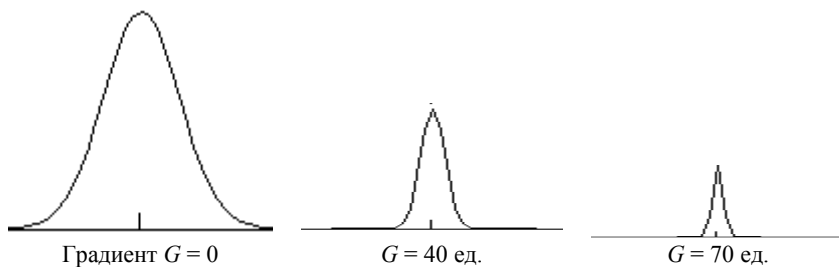


Рис. 2. Импульсы эхо-сигнала при различных значениях градиента

Из приведенных на рис. 2 графиков можно сделать вывод, что сигнал с нулевым градиентом поля, очевидно, имеет более узкий спектр, чем сигналы, фиксируемые при наличии градиента. Эта особенность приводит к необходимости проведения дополнительного анализа частотных свойств измерительного канала с целью исключения ограничения спектра

исследуемых импульсов, что могло бы привести к ошибкам определения амплитуд измеряемых сигналов. Для устранения возможных возникающих погрешностей предлагается следующий подход: при возможности выбора АЦП желательно использовать такой, который имеет максимально высокое быстродействие, возможно даже за счет уменьшения дискретности преобразования. Опытная эксплуатация измерительной системы, с учетом указанных рекомендаций, показала ее работоспособность и проверена при исследовании растворов сахарозы на установке ЯМР

Выводы. Обоснован и предложен подход для определения коэффициента самодиффузии веществ, реализуемый на спектрометре ЯМР. Показано, что при определенных допущениях можно исключить необходимость точного измерения градиента магнитного поля в зоне исследуемого образца и ограничиться измерением относительного коэффициента самодиффузии. Установлено, что в этом случае погрешность определения коэффициента самодиффузии определяется только погрешностью измерения амплитуды эхосигнала, которая, в свою очередь, может зависеть от спектра пропускания измерительного канала.

Предложенный подход не снижает ценности получаемых результатов и существенно упрощает процесс измерения коэффициента самодиффузии вещества. В целом подобная методика сокращает время измерений и повышает эффективность проведения исследований.

Список литературы: 1. Байбалов С.П., Гаун Д.Д. Управление установкой импульсного спектрометра ЯМР // Электронный журнал "ИССЛЕДОВАНО В РОССИИ", <http://zhurnal.ape.relam.ru/articles/2001/068.pdf>. 2. Фаррар Т., Беккер Э. Импульсная и Фурье-спектроскопия ЯМР. – М.: Мир, 1973. – 164. 3. Вацман А.А., Пронин И.С. Ядерная магнитная релаксация и её применение в химической физике. – М.: Наука, 1979. – 223. 4. Методы исследований и организация экспериментов / Под ред. проф. К.П. Власова – Х.: Изд-во "Гуманитарный Центр", 2002. – 256 с. 5. Торяник А.И. Методы измерения коэффициентов диффузии // Экспериментальные методы химии растворов. Денсиметрия, вискозиметрия, кондуктометрия и другие методы. – М.: Наука, 1997. – С. 308 – 343. 6. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Информационно-измерительная система установки ЯМР // Вестник НТУ "ХПИ". – Х.: НТУ "ХПИ", 2003. – № 19. – С. 69 – 72. 7. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Система управления спектрометром ЯМР // Вестник НТУ "ХПИ". – Х.: НТУ "ХПИ", 2004. – № 26. – С. 119 – 123. 8. Дьяков А.Г., Даниленко А.Ф. Повышение точности измерений в ЯМР спектрометре // Вестник НТУ "ХПИ". – Х.: НТУ "ХПИ", 2005. – № 46. – С. 83 – 86.

Поступила в редакцию 28.03.2007

В.М. УДОВИЧЕНКО, канд. техн. наук, НТУ "ХПІ", (м. Харків)

ОПЕРАТОРИ ФУР'Є ТА ХАРТЛІ, ПОБУДОВАНІ НА ОСНОВІ МЕТОДУ ФАЙЛОНА ТА КУБІЧНИХ В-СПЛАЙНІВ, ТОЧНІ НА ТРИГОНОМЕТРИЧНИХ ПОЛІНОМАХ ЗАДАНОГО СТЕПЕНЯ

Побудовано оператори Фур'є та Хартлі на основі методу Файлона (Filon) обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів. Дані оператори є точними на тригонометричних поліномах заданого степеня. Приведені співвідношення між розглянутими операторами, графік їх дискретних нормованих амплітудно-частотних характеристик, теореми та приклад.

In this article operators Fourier and Hartley are considered. These operators are constructed on the basis of Filon's method calculations of integrals from trigonometric functions and cubic B-splines. These operators possess property - they are exact on trigonometrical polynoms of the set degree. The theorems and an example are given.

Проблема, яку ми розв'язуємо в даній роботі, полягає в побудові інструментарію інформаційних технологій в базисах Фур'є та Хартлі – операторів дискретно-неперервних та дискретних перетворень Фур'є (ДПФ), а також дискретно-неперервних та дискретних перетворень Хартлі (ДПХ) на основі методу Файлона та кубічних В-сплайнів, які б мали кращі характеристики точності, ніж "класичні" ДПФ та ДПХ. Тому проблема є актуальною.

В літературі, присвяченій дискретному перетворенню Фур'є та Хартлі, основними напрямками досліджень є різноманітні варіанти реалізації швидких алгоритмів ДПФ та ДПХ [1 – 3], порівняння швидких алгоритмів ДПФ та ДПХ [4], створення багатовимірних варіантів ДПФ та ДПХ [5]. В прикладних задачах, орієнтованих на інформаційні технології, ДПФ [2, с. 58] використовують у вигляді:

$$X[k] = T \sum_{n=0}^{N-1} x[n] \exp(-j2\pi k n / N), \quad k = \overline{0, (N-1)}, \quad j = \sqrt{-1};$$

$$x[n] = (NT)^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} X[k] \exp(j2\pi k n / N), \quad n = \overline{0, (N-1)},$$

а ДПХ [3, с. 34] – у вигляді:

$$H[v] = N^{-1} \sum_{\tau=0}^{N-1} f[\tau] \operatorname{cas}(2\pi v \tau / N), \quad v = \overline{0, (N-1)};$$

$$f[\tau] = N^{-1} \sum_{v=0}^{N-1} H[v] \operatorname{cas}(2\pi v \tau / N), \quad \tau = \overline{0, (N-1)},$$

де $\text{cas}(\alpha) = \cos(\alpha) + \sin(\alpha) = \sqrt{2} \cos(\alpha - \pi/4)$, [3].

Безпосереднє використання "класичних" ДПФ та ДПХ, з точки зору характеристик точності, не є ефективне. В роботах [6, 7] запропоновано оператори дискретно-неперервних та дискретних перетворень Фур'є [6] та Хартлі [7] (скорочено $F \& H$), які побудовані на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, або скорочено $b_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $L_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$, де F/H – Фур'є або Хартлі.

Метою роботи є побудова операторів $F \& H$, на основі методу Файлона та кубічних В-сплайнів, точних на тригонометричних поліномах заданого степеня, або скорочено $g_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $U_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$, де $g_{Mp, N}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ та $U_{Mp, N}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ – відповідно прямі та обернені оператори Фур'є, $g_{Mp, N}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ та $U_{Mp, N}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ – відповідно прямі та обернені оператори Хартлі, які мають специфічні характеристики точності в порівнянні з [6, 7].

Побудова операторів $F \& H$ на основі методу Файлона та кубічних В-сплайнів, точних на тригонометричних поліномах заданого степеня. Під фінітними перетвореннями $F \& H$ ми розуміємо перетворення $F \& H$ від фінітної, дійсної або комплексної функції дійсного аргумента. Не зменшуючи загальності ми вважаємо, що носій функції $f(x)$, $\text{supp } f(x) = D$, $D = [-\pi, \pi]$. Хай $f(x) \in C^r(D) \cap L_p(D)$, $r = 1, 2, 3, \dots$; $p = 1, 2$ задовольняє вимогам теореми Найквіста [8]. (Умова 1). Областю визначення дискретизованої функції $f(x_i)$ є множина елементів $\{i \Delta\}$, $i = \overline{-Mp, Mp}$, $Mp = M + 1$, яка при $\Delta = 2\pi / (2Mp + 1)$, знаходиться на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ з кроком Δ . (Умова 2). Для подальшого застосування умови 1 і 2 позначимо як умову "V".

Теорема 1. Оператори дискретно-неперервних перетворень $F \& H$, побудовані на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, які задовольняють умову "V":

$$U_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(v) = \sum_{k=-N}^N g_{Mp, N, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f) \left[\frac{\exp(jkv)}{\sqrt{2} \cos(kv - \pi/4)} \right], \quad (1)$$

$$v \in \mathfrak{R}, N = Mp,$$

де

$$g_{Mp, Mp, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f) = \begin{cases} D(k, M, \Delta) \sum_{p=-Mp}^{Mp} z_p(f) \left[\frac{\exp(-j k p \Delta)}{\sqrt{2} \cos(k p \Delta - \pi/4)} \right], k \neq 0; \\ \sum_{p=-Mp}^{Mp} f(x_p), k = 0, \end{cases} \quad (2)$$

де $D(k, M, \Delta) = \frac{3}{(2Mp+1)[4 - \cos(k \Delta)]}$, $k = \overline{-Mp, Mp}$, $\Delta = \frac{2\pi}{2Mp+1}$;

$$z_p(f) = 4f(x_p)/3 - [f(x_{p-1}) + f(x_{p+1})]/6, \quad x_p = p \Delta;$$

$$x_p \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2], \quad Mp = M + 1,$$

отримані як результат обчислення функціоналу [9]:

$$g_{Mp, N, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f) = \frac{\sum_{p=-Mp}^{Mp} z_p(f) \int_{(p-2)\Delta}^{(p+2)\Delta} h3(x, p, \Delta) \begin{bmatrix} \exp(-j k x) \\ \text{cas}(k x) \end{bmatrix} dx}{\sum_{p=-Mp}^{Mp} \begin{bmatrix} \exp(j k x_p) \\ \text{cas}(k x_p) \end{bmatrix} \int_{(p-2)\Delta}^{(p+2)\Delta} h3(x, p, \Delta) \begin{bmatrix} \exp(-j k x) \\ \text{cas}(k x) \end{bmatrix} dx}, \quad N \leq Mp,$$

$$\text{де } h3(x, p, \Delta) = \frac{1}{6} \begin{cases} 0, & x \leq x_{p-2}; \\ t^3, & x_{p-2} < x \leq x_{p-1}, \quad t = (x - x_{p-2})/\Delta; \\ 1 + 3t + 3t^2(1-t), & x_{p-1} < x \leq x_p, \quad t = (x - x_{p-1})/\Delta; \\ 1 + 3(1-t) + 3t(1-t)^2, & x_p < x \leq x_{p+1}, \quad t = (x - x_p)/\Delta; \\ (1-t)^3, & x_{p+1} < x \leq x_{p+2}, \quad t = (x - x_{p+1})/\Delta; \\ 0, & x > x_{p+2}, \quad p = -Mp, -M, \dots, -1, 0, 1, \dots, M, Mp; \end{cases}$$

$$x_p = p \Delta,$$

мають властивості:

$$1: U_{Mp, Mp}^{F, 1d, Sp^3} f(x) = U_{Mp, Mp}^{H, 1d, Sp^3} f(x). \quad (3)$$

Якщо $f(x) \in T_N$, де T_N є множина тригонометричних поліномів степеня N , при $N = Mp$:

$$2: U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x) = f(x). \quad (4)$$

Тобто оператори $U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x)$ є точними на тригонометричних поліномах степеня N . Доведення виконується безпосереднім обчисленням.

При обчисленні (2) значення функції $f(x_p)$, які виходять за межі інтервалу $[-\pi, \pi]$ приймаємо: $f[x_{(M+2)}] = f(x_{-Mp})$ та $f[x_{-(M+2)}] = f(x_{Mp})$. При цьому ми користуємося властивістю періодичності частотних характеристик перетворень $F \& H$.

Оператори дискретних перетворень $F \& H$, побудовані на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точні на тригонометричних поліномах заданого степеня, отримуюмо з (1), замінюючи $v \in \mathfrak{R}$ на $x_p = p\Delta$, $p = \overline{-Mp, Mp}$:

$$U_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x_p) = \sum_{k=-N}^N g_{Mp, N, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f) \left[\begin{array}{c} \exp(jk p \Delta) \\ \sqrt{2} \cos(k p \Delta - \pi / 4) \end{array} \right], \quad (5)$$

$$N \leq Mp, \quad p = \overline{-Mp, Mp}.$$

$g_{Mp, N, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ визначаються (2).

Теорема 2. Оператори дискретних перетворень $F \& H$, побудовані на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точні на тригонометричних поліномах заданого степеня, на інтервалі $x_p \in [-\pi + \Delta / 2, \pi - \Delta / 2]$ мають властивості:

$$U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x_p) = f(x_p), \quad p = \overline{-Mp, Mp}, \quad (6)$$

для функцій $f(x)$, які задовольняють умову "V". Доведення виконується безпосереднім обчисленням.

Для наступного застосування скористаємося властивістю $cas(\alpha)$:

$$cas(-\alpha) = \cos(\alpha) - \sin(\alpha) = \sqrt{2} \cos(\alpha + \pi / 4). \quad (7)$$

З урахуванням (7) маємо наступні теореми:

Теорема 3.

$$\exp(\pm jx) = \left(\frac{1 \pm j}{2} \right) cas(x) + \left(\frac{1 \mp j}{2} \right) cas(-x), \quad x = \sum_{s=1}^n z_s, \quad z_s \in \mathfrak{R}. \quad (8)$$

Доведення виконується із застосуванням формули Ейлера. 3 (8) отримуюмо:

Теорема 4.

$$cas(\pm x) = \left(\frac{1 \mp j}{2} \right) \exp(jx) + \left(\frac{1 \pm j}{2} \right) \exp(-jx), \quad x = \sum_{s=1}^n z_s, \quad z_s \in \mathfrak{R}. \quad (9)$$

Теорема 3 та теорема 4 визначають зв'язок між ядрами одновимірних ($n=1$) та n -вимірних перетворень F & H .

Теорема 5. Для операторів дискретно-неперервних та дискретних перетворень F & H , побудованих на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів [6, 7], на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ виконується наступне:

$$\begin{aligned} b_{Mp, Mp, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1-j}{2}\right) b_{Mp, Mp, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1+j}{2}\right) b_{Mp, Mp, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f), \\ b_{Mp, Mp, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1+j}{2}\right) b_{Mp, Mp, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1-j}{2}\right) b_{Mp, Mp, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f), \end{aligned} \quad (10)$$

$$k = \overline{1, Mp},$$

для функцій $f(x)$, які задовольняють умову "i". Доведення отримуємо при застосуванні до $b_{Mp, Mp, \pm k}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ теореми 3.

Теорема 6. Для операторів дискретно-неперервних та дискретних перетворень F & H , побудованих на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів [6, 7], на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ виконується наступне:

$$\begin{aligned} b_{Mp, Mp, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1+j}{2}\right) b_{Mp, Mp, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1-j}{2}\right) b_{Mp, Mp, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f), \\ b_{Mp, Mp, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1-j}{2}\right) b_{Mp, Mp, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1+j}{2}\right) b_{Mp, Mp, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f), \end{aligned} \quad (11)$$

$$k = \overline{1, Mp},$$

для функцій $f(x)$, які задовольняють умову "V". Доведення отримуємо при застосуванні до $b_{Mp, Mp, \pm k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$ теореми 4.

Теорема 7. Для операторів дискретно-неперервних та дискретних перетворень F & H , побудованих на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точних (операторів) на тригонометричних поліномах заданого степеня, на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ виконується наступне:

$$\begin{aligned} g_{Mp, Mp, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1-j}{2}\right) g_{Mp, Mp, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1+j}{2}\right) g_{Mp, Mp, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f), \\ g_{Mp, Mp, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f) &= \left(\frac{1+j}{2}\right) g_{Mp, Mp, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1-j}{2}\right) g_{Mp, Mp, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f), \end{aligned} \quad (12)$$

$$k = \overline{1, Mp},$$

для функцій $f(x)$, які задовольняють умову "V". Доведення отримуємо при застосуванні до $g_{M_p, M_p, \pm k}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ теореми 3.

Теорема 8. Для операторів дискретно-неперервних та дискретних перетворень $F \& H$, побудованих на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точних (операторів) на тригонометричних поліномах заданого степеня, на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ виконується наступне:

$$g_{M_p, M_p, -k}^{H, 1d, Sp^3}(f) = \left(\frac{1+j}{2}\right) g_{M_p, M_p, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1-j}{2}\right) g_{M_p, M_p, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f),$$

$$g_{M_p, M_p, +k}^{H, 1d, Sp^3}(f) = \left(\frac{1-j}{2}\right) g_{M_p, M_p, -k}^{F, 1d, Sp^3}(f) + \left(\frac{1+j}{2}\right) g_{M_p, M_p, +k}^{F, 1d, Sp^3}(f), \quad (13)$$

$$k = \overline{1, M_p},$$

для функцій $f(x)$, які задовольняють умову "V". Доведення отримуємо при застосуванні до $g_{M_p, M_p, \pm k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$ теореми 4.

Користуючись твердженнями теореми 5 та теореми 7, для порівняння властивостей операторів $g_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $b_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ на рис. приведено графіки односторонніх, дискретних амплітудно-частотних характеристик $g_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $b_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ [6, 7].

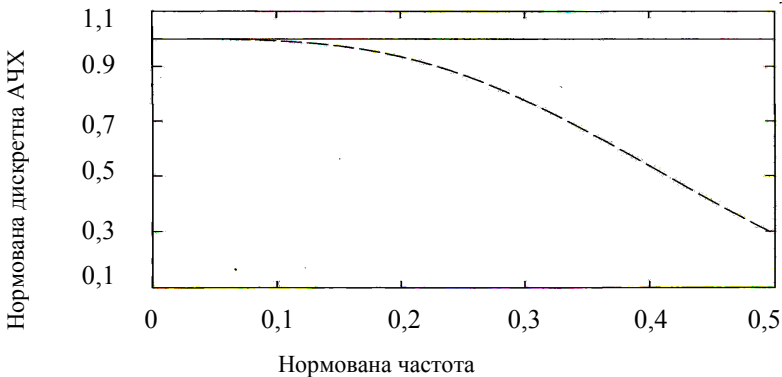


Рис. Оператори $b_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ -line dash, $g_{M_p, M_p, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ -line solid.

Дискретні амплітудно-частотні характеристики $g_{M_p, M_p, k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$ та $b_{M_p, M_p, k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$ приведені до базису Фур'є.

В табл. 1 наведені значення K_PosL – коефіцієнта послаблення на кінці частотного діапазону односторонніх, дискретних АЧХ для операторів $b_{M_p, M_p, k}^{F\setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ (в децибелах).

Таблиця 1

M	10	30	50	70	90
K_PosL	-9,81	-10,71	-10,92	-11,01	-11,06

Тестовий приклад. В табл. 2 наведені результати обчислення оцінки приведених похибок наближення модуля функції $f(x)=u(x)-Tr[u(x)]$, де: $u(x)=x^2 e^{-0,37x} \sin(13x/\sqrt{7}+0,23)+j e^{0,71x} (x-1) \cos(29x/\sqrt{11}-0,47)$. $Tr[u(x)]$ є лінійний тренд $u(x)$ [8].

Таблиця 2

M	R	$\alpha 1$	$\alpha 2$	$kCzU$	$kCwU$	$kL2U$
10	55	1,14 E-1	9,14 E-2	7,8 E+13	1,02	1,65
30	155	2,76 E-2	2,69 E-2	2,0 E+13	1,23	2,32
60	305	1,37 E-2	1,32 E-2	3,0 E+12	1,30	2,39

Продовження таблиці 2.

$\beta 1U$	$\beta 2U$	$\beta 1$	$\beta 2$	$kL2L$	k_vdL
1,12 E-1	1,2 E-15	2,22 E-1	1,49 E-1	0,415	2,63
2,25 E-2	1,7 E-15	3,01 E-2	2,24 E-2	1,04	7,21
1,05 E-2	4,2 E-15	1,19 E-2	7,86 E-3	1,46	14,1

В табл. 2 використанні наступні позначення:

$\alpha 1 = \max_{-R \leq r \leq R} |\mu(x_r)| / \Theta$; $\alpha 2 = \max_{-M_p \leq r \leq M_p} |\mu(x_r)| / \Theta$; $\mu(x_r) = f(x_r) - S_{M_p}^{F\setminus H} f(x_r)$;
 $S_{M_p}^{F\setminus H} f(x_r)$ – сума Фур'є (Хартлі) відповідно. N – порядок тригонометричного полінома (для $N = M_p$, $R = k M_p$, де $k = 5$ – кількість інтервалів інтерполяції на інтервалі $[x_k, x_{k+1}]$ довжини $\Delta = 2\pi / (2M + 3)$);

$$\Theta = \max_{-R \leq r \leq R} |f(x_r)|, \quad \beta 1U = \max_{-R \leq r \leq R} |\lambda(x_r)| / \Theta; \quad \lambda(x_r) = f(x_r) - U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x_r);$$

$$\beta 2U = \max_{-Mp \leq r \leq Mp} |\lambda(x_r)| / \Theta; \quad \beta 1 = \max_{-R \leq r \leq R} |\chi(x_r)| / \Theta; \quad \beta 2 = \max_{-Mp \leq r \leq Mp} |\chi(x_r)| / \Theta;$$

$$\chi(x_r) = f(x_r) - L_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x_r); \quad \Omega 1 = \int_{-Mp \Delta}^{Mp \Delta} [f(x) - S_{Mp}^{F \setminus H} f(x)]^2 dx;$$

$$\Omega 2U = \int_{-Mp \Delta}^{Mp \Delta} [f(x) - U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x)]^2 dx; \quad \Omega 2L = \int_{-Mp \Delta}^{Mp \Delta} [f(x) - L_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x)]^2 dx$$

– оцінки похибки наближення функції $f(x)$, $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ в нормі L_2 за допомогою суми Фур'є (Хартлі) та операторів $U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$, $L_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ відповідно. $U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ – оператори, що визначаються (1). $L_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ – оператори, що визначаються [6, 7]. $kCwU = \alpha 1 / \beta 1U$, $kCzU = \alpha 2 / \beta 2U$, $kL2U = \Omega 1 / \Omega 2U$, $kL2L = \Omega 1 / \Omega 2L$ – оцінки ефективності наближення функції $f(x)$ операторами $U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $L_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ відповідно, в порівнянні з наближенням функції $f(x)$ за допомогою сум Фур'є (Хартлі) відповідно, на інтервалі $x \in [-\pi + \Delta/2, \pi - \Delta/2]$ в нормі C та в нормі L_2 . k_vdL – кількість відліків на один період компоненти $f(x)$ з максимальною частотою.

Висновки. 1. Побудовано оператори дискретно-неперервних перетворень $F \& H$ на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точні на тригонометричних поліномах заданого степеня $U_{Mp, N}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(v)$, $g_{Mp, Mp, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$. Визначено їх властивості (3), (4), (6). Наведено графіки односторонніх, дискретних АЧХ $g_{Mp, Mp, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та $b_{Mp, Mp, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$ та оцінки коефіцієнта послаблення АЧХ на кінці частотного діапазона для операторів $b_{Mp, Mp, k}^{F \setminus H, 1d, Sp^3}(f)$. 2. Побудовано оператори дискретних перетворень $F \& H$ на основі методу Файлона обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій та кубічних В-сплайнів, точні на тригонометричних поліномах заданого степеня $U_{Mp, Mp}^{F \setminus H, 1d, Sp^3} f(x_p)$. 3. Наведено теореми 3, 4, які визначають зв'язок між ядрами одновимірних ($n=1$) та n -вимірних перетворень $F \& H$. 4. Наведени співвідношення (10), (11) між операторами $b_{Mp, Mp, \pm k}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ та $b_{Mp, Mp, \pm k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$.

5. Наведени співвідношення (12), (13) між операторами $g_{M_p, M_p, \pm k}^{F, 1d, Sp^3}(f)$ та $g_{M_p, M_p, \pm k}^{H, 1d, Sp^3}(f)$. 6. Наведено тестовий приклад, який підтверджує отримані теоретичні твердження. 7. Отримані оператори $U_{M_p, N}^{F, 1d, Sp^3}f(v)$ та $U_{M_p, N}^{H, 1d, Sp^3}f(v)$ доповнюють існуючий інструментарій інформаційних технологій в базисах $F \& H$. 8. Побудовані оператори $F \& H$ є подальшим розвитком методу Файлона [10] обчислення інтегралів від швидко осцилюючих функцій.

Перспективи досліджень у даному напрямку автор вбачає у застосуванні запропонованих оператори $F \& H$ при вирішенні деяких задач інформаційних технологій, наприклад, в системах автоматичного управління та регулювання, які застосовують сигнальні методи; у задачах математичного моделювання та комп'ютерної діагностики, у відомих непараметричних та параметричних методах спектрального оцінювання сигналів у цифровій обробці сигналів, у вимірювальній техніці при побудові комп'ютерних вимірювальних засобів, при побудові різноманітних систем кріптографії тощо.

Список літератури: 1. Рабинер Л., Гоулд Б. Теория и применение цифровой обработки сигналов. – М.: Мир, 1978. – 848 с. 2. Марпл-мл. С.Л. Цифровой спектральный анализ и его приложения. – М.: Мир, 1990. – 684 с. 3. Брейсуэлл Р. Преобразование Хартли. – М.: Мир, 1990. – 175 с. 4. Болд Э.Дж. Сравнение времени вычисления БПХ и БПФ // ТИИЭР. – 1985. – № 12. – С. 184–185. 5. Маккланн Дж.Х. Многомерный спектральный анализ // ТИИЭР. – 1982 – Т. 70. – № 9. – С. 139–152. 6. Литвин О.М., Удовиченко В.М. Оператори обчислення одновимірного фінітного дискретно-неперервного перетворення Фур'є на основі В-сплайнів третього степеня // Вестник НТУ "ХПИ". Сб. научных трудов. Тематический выпуск "Электроэнергетика и преобразовательная техника". – 2004. – № 4. – С. 59–65. 7. Литвин О.М., Удовиченко В.М. Оператори обчислення одновимірного фінітного дискретно-неперервного перетворення Хартлі на основі В-сплайнів третього степеня // Вестник НТУ "ХПИ". Сб. научных трудов. Тематический выпуск "Информатика и моделирование". – 2003. – № 19. – С. 95–100. 8. Отнес Р., Энксон Л. Прикладной анализ временных рядов. – М.: Мир, 1982. – 428 с. 9. Балакришнан А.В. Прикладной функциональный анализ. – М.: Наука, 1980. – 383 с. 10. Filon L.N.G. On a quadrature formula for trigonometric integrals // Proc. Roy.Soc. Edinburgh. – 1928. – P. 38–47.

Поступила в редакцію 28. 03. 2007