

Библиографический список

1. Кабеш К. Аналого-цифровые вычислительные системы /Под ред. И.М.Витенберга. - М.: Радио и связь, 1983. - 149 с.

УДК 681.3; 001.891; 537.635

Т.С.Белозерова, А.В.Данилов, Г.Е.Кибрик,
А.Ю.Поляков

АВТОМАТИЗИРОВАННОЕ РАБОЧЕЕ МЕСТО
ДЛЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
(г. Пермь)

Радиоспектроскопия является одной из наиболее быстро развивающихся областей науки. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР), ядерный квадрупольный резонанс (ЯКР), электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), являющиеся ее основными методами, широко используются в химии, физике и химии твердого тела, биологии и медицине /1, 2/.

В последние годы в спектроскопии ЯМР и ЯКР получили наиболее широкое распространение импульсные и многоимпульсные методы исследования, потребовавшие создания принципиально новой техники измерений. Современный импульсный радиоспектрометр должен иметь высокие чувствительность, точность, быстродействие и стабильность параметров, обладать большой мощностью радиосимпульсов, быть простым в управлении. Часть этих требований может быть удовлетворена только за счет использования вычислительной техники, которая обеспечивает следующие возможности:

формирование разнообразных последовательностей радиоимпульсов с заданными фазовыми и временными соотношениями;

поддержание с заданной точностью большого числа параметров в течение длительного времени;

оперативное изменение этих параметров;

запоминание и представление экспериментальных данных;

накопление данных;

оперативная математическая обработка результатов измерений;

длительное хранение результатов эксперимента и их постэкспериментальная обработка.

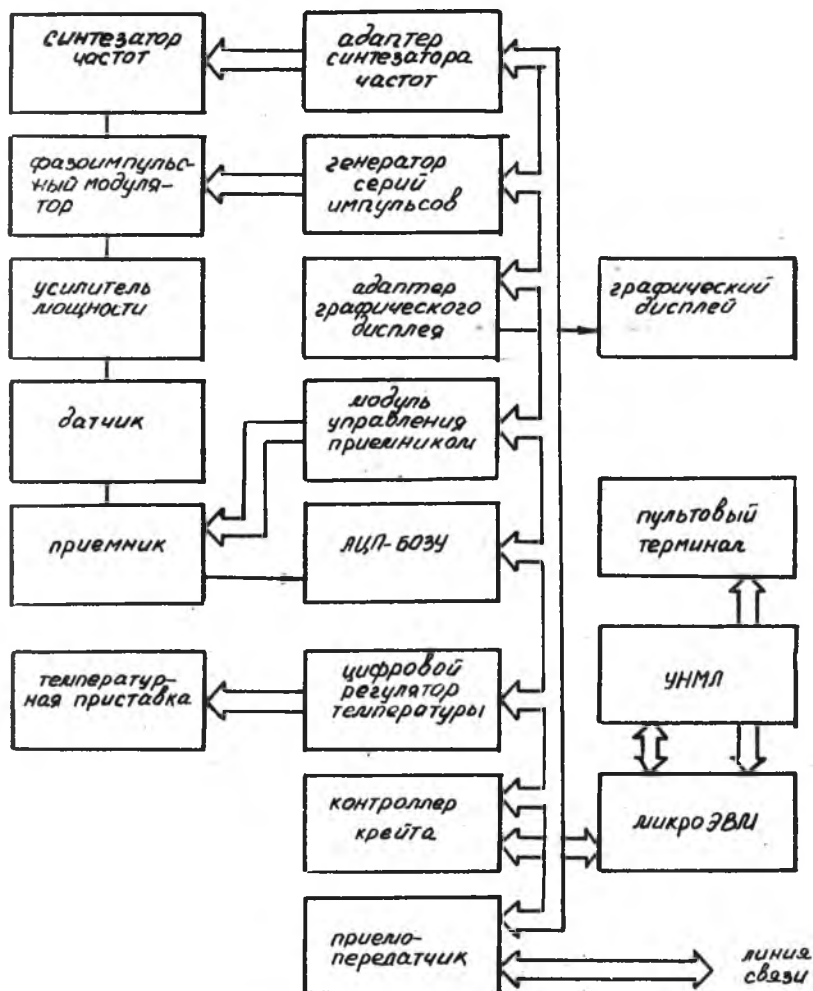
В данной статье описано автоматизированное рабочее место (АРМ) для радиоспектроскопических исследований, удовлетворяющее этим требованиям. При его разработке был учтен опыт создания автоматизированной радиоспектроскопической аппаратуры, имеющийся в Пермском университете /3, 4/. На базе АРМ в настоящее время построена подсистема "Спектр", предназначенная для эксплуатации в составе локальной вычислительной сети АСНИ ПГУ.

АРМ представляет собой комплекс технических и программных средств, предназначенных для автоматизации экспериментальных исследований, проводимых импульсными методами ЯРМ и ЯКР.

На рис. 1 приведена структурная схема комплекса технических средств. В его состав входят собственно радиоспектрометр, аппаратура сопряжения с ЭВМ и микроЭВМ "Электроника-60" с набором периферийных устройств. Собственно радиоспектрометр изготовлен по прямо-частотной схеме и содержит ряд устройств, из которых автоматизировались следующие: синтезатор частот Ч6-31, фазоимпульсный модулятор, усилитель мощности, датчик сигналов ядерной индукции, приемник и температурная приставка. Сопряжение спектрометра с ЭВМ выполнено в стандарте КАМАК и осуществляется с помощью модулей адаптера синтезатора частот, генератора серий импульсов (ГСИ), цифрового регулятора температуры, аналого-цифрового преобразователя с буферным оперативным запоминающим устройством (АЦП-БОЗУ) и модуля управления приемником.

Модуль адаптера синтезатора частот предназначен для автоматической установки частоты выходного напряжения синтезатора частот Ч6-31 в диапазоне 0-50 МГц с дискретностью 1 Гц.

Модуль ГСИ является модификацией программируемого генератора импульсов, описанного в /4/. Он предназначен для формирования последовательностей прямоугольных видеосигналов, управляющих работой фазоимпульсного модулятора, АЦП и других устройств. ГСИ представляет собой специализированный микроконтроллер, генерирующий импульсную последовательность по кодам, загруженным в него из ЭВМ. Возможность многократного (до 2048) автоматического повторения выбранного участка последовательности позволяет формировать сложные и продолжительные импульсные серии. ГСИ позволяет формировать импульсы и временные интервалы длительностью $5 \cdot 10^{-7} \dots 100$ с (относитель-



Р и с. 1. Автоматизированное рабочее место для радиоспектроскопических исследований

ный шаг дискретизации – 1%) в восьми выходных каналах. Требуемая точность и стабильность обеспечены за счет применения кварцевого тактового генератора (тактовая частота – 10 МГц).

Модуль управления приемником представляет собой выходной регистр *Output Register-350* (производство ПНР). Его выходные коды определяют коэффициент усиления и полосу пропускания приемника.

Модуль АЦП-БОЗУ состоит из двух одинаковых каналов. Каждый канал представляет собой АЦП последовательных приближений с быстродействующим устройством выборки-хранения. Время преобразования – 2 мкс. АЦП преобразует аналоговые сигналы, поступающие с квадратурного детектора приемника, в цифровой код и запоминает его в БОЗУ объемом 1 К.

Модуль цифрового регулятора температуры управляет температурной приставкой, позволяющей устанавливать и стабилизировать температуру исследуемого образца в диапазоне 77...500 К. В качестве датчика температуры используется медь-константановая термопара. Преобразование температуры в ее цифровой эквивалент производится внешним измерителем (цифровой вольтметр Щ-300), чем обеспечиваются высокие метрологические характеристики. В цифровом регуляторе температуры происходит сравнение выходного кода вольтметра с кодом, заданным ЭВМ и хранящимся в памяти модуля. Двухпозиционный код, соответствующий знаку отклонения истинной температуры от заданной, подается на цифровой вычислитель с дифференциально-интегральным законом регулирования /5/, выходные сигналы которого управляют симисторными усилителями нагревателя и испарителя температурной приставки.

Адаптер графического дисплея является модификацией аналогичного устройства, описанного в работе /6/. Он позволяет отображать на экране стандартного телевизора графическую информацию в виде функциональных зависимостей $y=f(x)$. Формат изображения 256x256 элементов. Объем внутреннего ЗУ – 256 байт. Наличие индицируемых координатных осей X и Y и маркера, привязанного к графику отображаемой функции, обеспечивает широкие возможности по формированию и обработке изображений в диалоговом режиме.

Для связи АРМ с центральным узлом АСНИ используется модуль приемопередатчика ИКС-500-042. Центральный узел построен на базе УВК "Мера 100/25" с широким набором периферийных устройств длительного хранения и отображения информации, а также интерфейсным

оборудованием для связи с рабочими местами. Линия связи АРМ с центральным узлом состоит из двух коаксиальных кабелей.

В набор периферийных устройств ЭВМ "Электроника-60", на основе которой строится АРМ, входят пультовый терминал "РИН-609", фотосчитыватель $FS-150I$ и устройство внешней памяти на кассетной магнитной ленте $CM 52II$.

Управление экспериментом, проводимым на АРМ, осуществляется в режиме диалога. На рис. 2 приведен общий операционный маршрут автоматизированного экспериментального исследования. АРМ функционирует следующим образом. Оператор выбирает один из шести видов работы:

- просмотр и дополнение файла импульсных последовательностей;
- ввод параметров эксперимента;
- измерение и оперативная математическая обработка;
- постэкспериментальная обработка;
- обработка данных, хранимых на магнитной ленте;
- завершение работы.

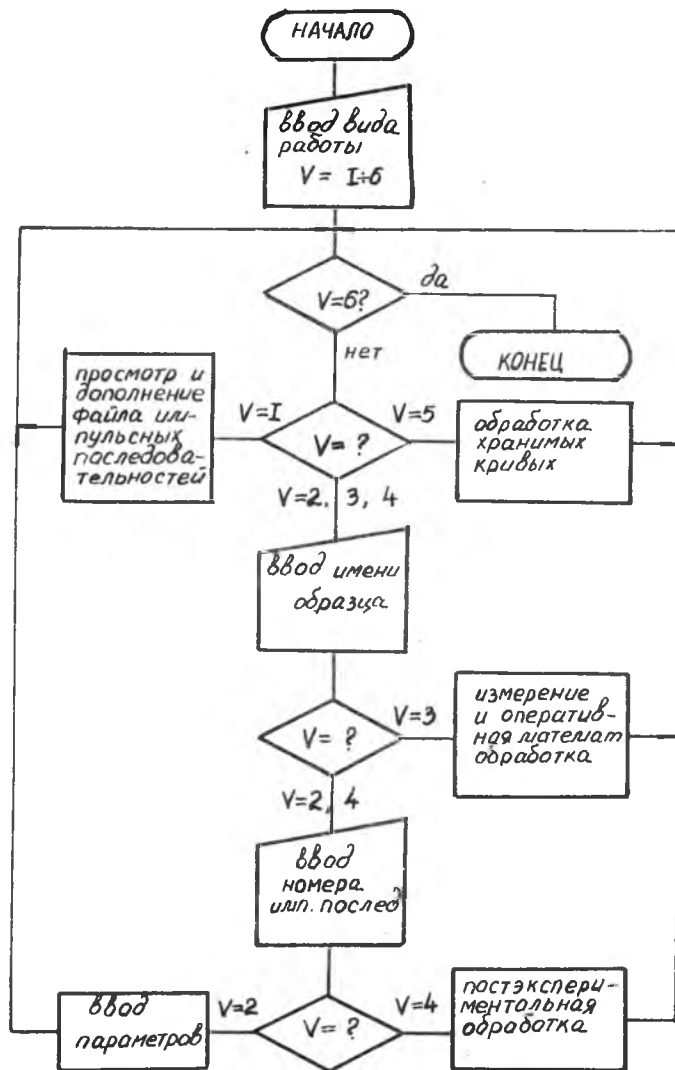
Импульсные последовательности хранятся в соответствующем файле как пронумерованные формулы специального вида, например:

$$T\phi - A\phi - S\phi * N\phi - B\phi - S\phi * N1,$$

где $A\phi, B\phi$ - импульсы определенного типа, $T\phi$ - пустой интервал, $S\phi$ - строб-импульс, $N\phi, N1$ - целые числа. Формула соответствует виду импульсной последовательности, а в совокупности с длительностями отдельных интервалов дает управляющую программу для ГСИ. Весь файл может быть просмотрен и при необходимости дополнен новыми формулами.

Перед началом каждого нового эксперимента вводятся его параметры:

- название исследуемого образца;
- комментарий (при необходимости);
- номер необходимой импульсной последовательности;
- длительность интервалов импульсной последовательности;
- количество регистрируемых точек;
- период повторения импульсной последовательности;
- шаг по времени (между единичными измерениями);
- количество накоплений.



Р и с. 2. Общий операционный маршрут автоматизированного исследования

В режиме измерения и оперативной математической обработки производится установка температуры образца, частоты, полосы пропускания и коэффициента усиления приемника. Программа импульсной последовательности загружается в ГСИ и производится пуск модуля. ГСИ выдает заданную последовательность видеоимпульсов, формирующую в фазоимпульсном модуляторе соответствующую последовательность радиоимпульсов с заданными фазами радиочастотного заполнения. Эти импульсы усиливаются усилителем мощности и подаются в датчик, где возбуждают спиновую систему ядер образца. В промежутках между импульсами наблюдаются сигналы, содержащие информацию об амплитуде и фазе ядерной индукции. Они усиливаются приемником, детектируются квадратурным детектором и поступают по двум каналам на АЦП-БОЗУ, где по строб-импульсам преобразуются в цифровую форму и запоминаются. После прекращения работы ГСИ содержимое БОЗУ в виде комплексного числа вводится в память ЭВМ. Предусмотрен режим накопления сигналов ядерного резонанса в памяти ЭВМ для повышения отношения сигнал/шум при регистрации слабых сигналов. Записанный сигнал выводится на графический дисплей в виде зависимости амплитуды от времени, причем могут быть выведены действительная, мнимая части или модуль сигнала.

Сразу после записи сигнала может быть проведена его оперативная математическая обработка. Зарегистрированный сигнал и результат оперативной обработки могут быть записаны на магнитную ленту и использованы впоследствии для постэкспериментальной обработки.

Программы математической обработки, реализованные на АРМ, определяются тематикой научных исследований, проводимых в лаборатории радиоспектроскопии Пермского университета. При оперативной обработке имеется возможность определять различные времена релаксации ядерной намагниченности (T_1 , T_{1e} , T_{1d} , T_{1p} и др.), а также получать форму линии поглощения, ее моменты или спектр поглощения радиочастотной мощности. При постэкспериментальной обработке из температурных зависимостей вышеперечисленных параметров получают параметры молекулярной подвижности в образце: энергия активации и время корреляции.

На этапах оперативной и постэкспериментальной обработки все численные задачи (кроме задач, связанных с Фурье-преобразованием) решаются методом наименьших квадратов с различными модификациями, ориентированными на различные типы функционалов /7, 8/. Так, для

определения параметров релаксации и второго момента линии поглощения применяются комбинации методов Ньютона и покоординатного спуска. Значения энергии активации и времен корреляции определяются методом покоординатного спуска. Программы, реализующие метод наименьших квадратов, являются универсальными, что позволяет в дальнейшем легко расширить круг решаемых задач.

Форма линии поглощения и спектры поглощения получаются в результате Фурье-преобразования спадов ядерной намагниченности, получаемых в эксперименте. Фурье-преобразование выполняется методом быстрого преобразования, использующего свойства базисной функции разложения экспонент.

В целом программное обеспечение построено с использованием концепции операционных маршрутов и реализовано на языках Фортран и Макроссемблер. Операционная среда: ОС РВ и ППП СТО/РВ /9, IO/.

Библиографический список

1. Фаррар Т., Беккер Э. Импульсная и Фурье-спектроскопия ЯМР. - М.: Мир, 1973.
2. Лундин А.Г., Федин Э.И. Ядерный магнитный резонанс. Основы и применения. - Новосибирск, Наука, 1980.
3. Ажеганов А.С., Данилов А.В., Кибрик Г.Е. - В кн.: Радиоспектроскопия. - Пермь, 1985. - С. 313-326.
4. Зеленин В.П., Карпов С.Б., Ярославцева В.В. //ПТЭ. - 1982. - № 4., - С. 83-86.
5. Круг Е.К., Александриди Т.М., Дилигенский С.Н. Цифровые регуляторы. - М.-Л.: Энергия, 1966.
6. Булатников А.Ф., Кетов А.И. - в кн.: Радиоспектроскопия. - Пермь, 1985. - С. 327-333.
7. Васильев Ф.П. Численные методы решения экспериментальных задач. - М.: Наука, 1980.
8. Бард И. Нелинейное оценивание параметров. - М.: Статистика, 1979.
9. Васильев Г.П., Егоров Г.А., Щербина Н.Н. Программное обеспечение сетей СМ ЭВМ. - М.: Финансы и статистика, 1983.
10. Операционная система ОС РВ. Руководство программиста. Общие сведения о системе. 264.072.209-33-01. - Калинин, 1981.