

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.2.7>

УДК: 621.37

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНО-ОПРЕДЕЛЯЕМОГО РАДИО ДЛЯ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА ЭНЕРГОЕМКИХ ВЕЩЕСТВ С ПОМОЩЬЮ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

В.В. Киященко, А.А. Акопян, С.Ю. Ганигин, Е.С. Журавлева

Самарский государственный технический университет  
443100, Самара, ул. Молодогвардейская, д.244

Статья поступила в редакцию 30 ноября 2023 г.

**Аннотация.** В статье рассматривается создание системы с использованием программно-определяемого радио для исследования энергоемких веществ с использованием ядерного магнитного резонанса. Программно-определяемое радио (ПОР) использует технологию, позволяющую настраивать или изменять параметры радиочастотной работы через программное обеспечение, такие как диапазон частот, тип модуляции и выходную мощность. В статье представлена структура системы и проведен детальный анализ нескольких ключевых компонентов. Предложенный подход включает использование передатчика-приемника ПОР, который является универсальным устройством, способным как передавать, так и принимать сигналы. В статье описаны этапы обработки сигнала и предлагаются потенциальные направления развития системы в будущем. Путем использования архитектуры ПОР и программного интерфейса система достигает близкого расположения между сэмплением, цифро-аналоговым и аналого-цифровым преобразованиями, минимизируя шум и искажения, создаваемые аналоговой частью спектрометра. ПОР позволяет использовать квадратурную модуляцию и демодуляцию, цифровую фильтрацию и усиление, а также программную настройку характеристик фильтра. В статье отмечаются проблемы, связанные с разработкой таких систем ЯМР. Преимущества системы включают расширенные возможности для разработки новых спектроскопических методов, компактные размеры

для легкой переносимости и экономическую эффективность по сравнению с коммерческими спектрометрами.

**Ключевые слова:** программно-определяемое радио, ядерный магнитный резонанс, структурный анализ, энергонасыщенные материалы.

**Финансирование:** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (тема № АААА-А12-2110800012-0).

**Автор для переписки:** Киященко Виктория Витальевна, [vv.kiyashchenko@gmail.com](mailto:vv.kiyashchenko@gmail.com)

## Введение

В связи с сложностью и высокой стоимостью спектрометров, предназначенных для магнитно-резонансной томографии (МРТ) и ядерного магнитного резонанса (ЯМР), многие исследования в области ядерных реакций требуют более простых и доступных решений. Например, в этих работах были разработаны спектрометры ЯМР с низким полем [1, 2], с высоким полем [3, 4], с технологией динамической ядерной поляризации [5]. Настольные спектрометры широко применяются для анализа пищевых масел [6], для анализа состава природного газа [7], для исследования новых психоактивных веществ [8], для отслеживания метаболитов в моче при оказании медицинской помощи при диабетических состояниях [9], для количественной оценки смесей аналогов запрещенных веществ [10], для количественного анализа вина и других броженных напитков [11], как неинвазивный датчик липидов для микроводорослей [12], для анализа газов при высоком давлении [13], для контроля окисления смазочного масла в автомобилях [14], для количественного определения протеина и фосфора в кормах для скота [15] и т.д.

Множество современных систем было разработано с использованием программируемых логических интегральных схем (ПЛИС), выполняющих функции обнаружения и обработки сигналов [1-4]. ПЛИС особенно хорошо

подходят для ЯМР на Ларморовской частоте десятков или сотен мегагерц, поскольку они могут обрабатывать несколько потоков передаваемых и принимаемых данных параллельно на высоких скоростях.

Хотя ПЛИС хорошо подходят для использования в спектрометрах ЯМР высоких частот, создание и воспроизведение современных спектрометров на основе ПЛИС представляют сложность для специалистов, не имеющих электронной подготовки. Прорыв в разработке беспроводных технологий изменил привычки коммуникации пользователей. Быстрое развитие беспроводных коммуникационных технологий за последние несколько десятилетий стало новым этапом для разработчиков спектрометров ЯМР. В последние годы, благодаря появлению технологии программно-определяемого радио (ПОР), стало проще разрабатывать домашние системы ЯМР. Примеры использования ПОР – передатчики и приемники для беспроводных компьютерных сетей [16], учет электроэнергии [17], глобальные системы позиционирования [18] и интернета вещей [19]. В последние годы было опубликовано несколько работ, описывающих разработку недорогих систем ЯМР, построенных на устройствах ПОР [2, 20]. Для создания спектрометра ЯМР для определения структуры энергозатратных веществ предлагается использовать модифицированную версию LimeSDR для создания многоканального спектрометра ЯМР, способного использовать сложные модули цифровой обработки сигналов. Открытое программное обеспечение и прошивка, поддерживаемые устройством, позволяют вносить изменения, обеспечивающие предсказуемую синхронизацию нескольких устройств с точностью в наносекундах. Разработка программного обеспечения GNU Radio, являющегося открытым исходным кодом (gnuradio.org), стала новым этапом в исследованиях в области связи. ПОР-устройства обычно содержат аналого-цифровые и цифро-аналоговые преобразователи, ПЛИС для основной фильтрации и преобразования сигнала, а также интерфейс USB. Коммерческие ПОР-устройства, совместимые с GNU Radio, в настоящее время стоят от нескольких десятков до нескольких тысяч долларов. В GNU Radio программные радиостанции создаются на языке

программирования Python (python.org) путем объединения модульных компонентов обработки сигналов в блочные диаграммы, входы и выходы которых подключаются к ПОР через интерфейс драйвера.

## 1. Применение ЯМР

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) – это явление, описываемое уравнением:

$$\omega_0 = -\gamma B_0, \quad (1)$$

где  $\omega_0$  – резонансная частота;  $\gamma$  – гиромагнитное отношение;  $B_0$  – магнитная индукция.

В ЯМР исследуются атомные ядра, имеющие магнитные моменты. Угловой момент  $I$  атомного ядра связан с магнитным моментом  $\mu$  соотношением:

$$\mu = \gamma I. \quad (2)$$

Процесс ЯМР включает в себя взаимодействие с внешним магнитным полем и поглощение энергии при резонансе. ЯМР широко используется в физике, химии и биохимии для изучения структуры твердых тел и сложных молекул.

В импульсном ЯМР-спектрометре создаются радиоимпульсы, описываемые следующей последовательностью функций:

$$S(t) = \sum_{n=1}^N A_n e^{i(\omega_0 t + \phi_n)} \cdot \text{sinc} \left[ \pi \left( t - \frac{nT}{\tau} \right) \right], \quad (3)$$

где  $A_n$  – амплитуда импульса;  $\omega_0$  – резонансная частота;  $\phi_n$  – фаза;  $N$  – количество импульсов,  $T$  – период повторения импульсов,  $\tau$  – длительность импульса.

В рассматриваемых спектрометрах сигнал обрабатывается с использованием преобразования Фурье:

$$S(f) = F\{S(t)\}, \quad (4)$$

где  $S(f)$  – спектр сигнала;  $F\{ \}$  – преобразование Фурье.

Применение программируемых радиосистем позволяет менять параметры радиоприемника с использованием программного обеспечения. Это описывается изменением характеристик сигнала:

$$X(t, f) = F\{x(t, f)\}, \quad (5)$$

где  $x(t, f)$  – исходный сигнал;  $X(t, f)$  – измененный сигнал после программной обработки.

### 1.1 Типичный ЯМР-спектрометр

Принципы работы импульсного ЯМР-спектрометра иллюстрируются на рис. 1. В основе этого процесса лежит создание последовательности импульсов генератором, контроль работы радиоимпульсного генератора и последующая обработка полученных сигналов.

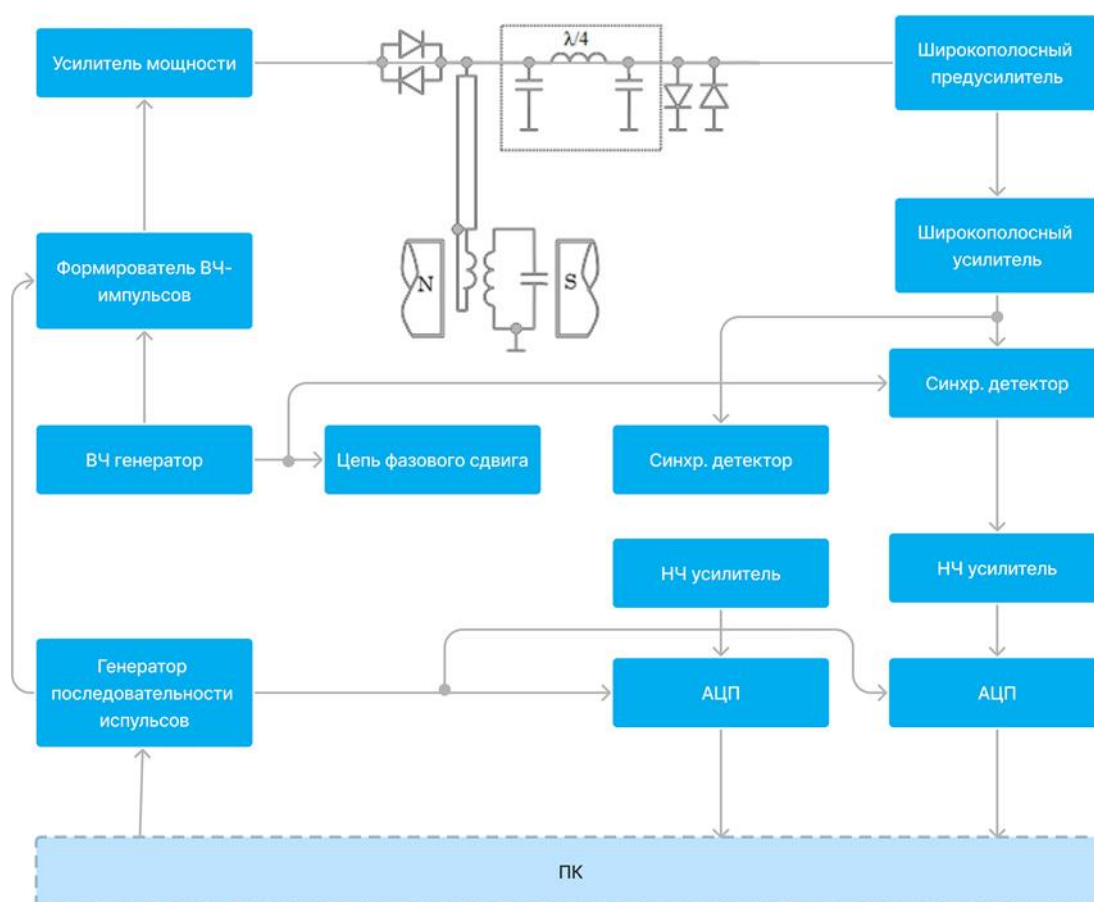


Рис. 1. Блок-схема типичного спектрометра ЯМР.

Генератор формирует последовательность видеоимпульсов, синхронизированных с прохождением ведущего фронта.

Пусть  $f(t)$  – функция, представляющая форму одного видеоимпульса. Тогда последовательность видеоимпульсов  $P(t)$  может быть представлена как:

$$P(t) = \sum_{n=1}^N f(t - nT_p), \quad (6)$$

где  $T_p$  – период повторения импульсов;  $N$  – количество импульсов.

RF-генератор, действуя как «ключ», открывается при прохождении ведущего фронта, передавая радиоимпульсы. Генератор можно представить функцией  $K(t)$ , которая определяет моменты открытия и закрытия ключа. Тогда модулированный сигнал  $S(t)$  после прохождения через ключ будет равен:

$$S(t) = P(t) \cdot K(t). \quad (7)$$

Эти радиоимпульсы и опорный сигнал подвергаются синхронной обработке с помощью синхронных детекторов. Допустим, опорный сигнал имеет вид  $C(t)$ . Синхронная обработка сигналов может быть представлена следующим образом:

$$D(t) = S(t) \cdot C(t). \quad (8)$$

Далее сигнал усиливается в усилителе мощности для минимизации влияния помех. Усиление сигнала может быть описано как умножение сигнала на функцию усиления  $G(t)$ :

$$A(t) = D(t) \cdot G(t). \quad (9)$$

После этого сигналы поступают на синхронные детекторы, используемые для квадратурной детекции. Если  $Q(t)$  представляет собой квадратурный сигнал, то квадратурная детекция может быть описана следующим образом:

$$I(t) = A(t) \cdot C(t), \quad (10)$$

$$Q(t) = A(t) \cdot S(t), \quad (11)$$

Полученные аналоговые сигналы  $I(t)$  и  $Q(t)$  преобразуются в цифровую форму с использованием аналого-цифрового преобразования (АЦП). Эти цифровые сигналы затем обрабатываются компьютером для анализа ЯМР-спектра.

Этот процесс обеспечивает точное управление и анализ радиоимпульсов, важных для получения высококачественных ЯМР-спектров.

## **1.2 Технология программно-определяемого радио**

Программируемая радиосистема представляет собой передовую технологию, позволяющую динамически изменять параметры радиоприемника в широком диапазоне радиочастот. За последние два десятилетия ПОР привлекла внимание исследователей и инженеров, предоставляя уникальные возможности в области обработки сигналов. Эти инновационные устройства отличаются способностью гибко реализовывать функции физического уровня, что обеспечивает исключительную гибкость в обработке разнообразных сигналов, не требуя изменений в аппаратной конфигурации. С появлением более доступных по цене приемников интерес к ПОР только усилился, поскольку эта технология позволяет создавать недорогие радиоустройства, охватывающие широкий диапазон частот от десятков мегагерц до единиц гигагерц.

Основой ПОР являются программно-определяемые беспроводные протоколы, в отличие от традиционных подходов, зависящих от жестко заданного аппаратного обеспечения. Это предоставляет возможность поддерживать различные свойства и функции, такие как обновление и модификация через перепрограммирование, минуя необходимость замены аппаратной базы. Такой подход открывает новые перспективы для создания многофункциональных и гибких беспроводных устройств, способных адаптироваться к разнообразным сценариям использования.

### 1.3 Концепция идеального устройства ПОР

Идеальная схема приемника предполагает подключение АЦП к антенне, обеспечивая мгновенный переход от аналогового сигнала к цифровому. Затем цифровой сигнальный процессор анализирует данные, поступающие от преобразователя, и программно преобразует поток информации в необходимую форму для последующего применения. Аналогично, идеальный передатчик включает в себя цифро-аналоговый преобразователь, связанный с радиоантенной, и цифровой сигнальный процессор, генерирующий поток чисел, предназначенных для передачи.

Тем не менее, концепция идеальной схемы сталкивается с ограничениями современных технологий. Основная сложность заключается в реализации эффективного преобразования между цифровыми и аналоговыми областями с высокой скоростью и точностью, без полной зависимости от физических процессов, таких как помехи и электромагнитные резонансы.

Общая структура ПОР включает в себя антенну, АЦП, частотный преобразователь и инструмент обработки сигналов, как показано на рис. 2.



Рис. 2. Схема программно-определяемого радио.

Этот инструмент может представлять собой как программируемую логическую интегральную схему (FPGA), так и сигнальный процессор. В данном случае обработка сигналов будет осуществляться с использованием сигнального процессора. При создании ПОР необходимо четко определить, какие функции выполняются в аппаратуре, а какие могут быть реализованы программно.



## 2. Проектирование системы

На рис. 3 представлена структурная схема разрабатываемого ЯМР-спектрометра. Рабочая частота спектрометра – порядка 150-450 МГц. Устройство включает два программно-определяемых радиоприемника, интерфейс USB, радиочастотные переключатели и программатор импульсов (MCU). В роли программатора импульсов используется RobotDyn Mega от компании RobotDyn, Inc. Этот микроконтроллер, основанный на архитектуре AVR RISC, обеспечивает управление синхронизацией последовательностей импульсов и настройкой регистров. ATmega2560, также использованный в схеме, предоставляет высокую вычислительную мощность с 256 КБ внутрисистемной программной флэш-памяти, 8 КБ оперативной памяти SRAM и 4 КБ энергонезависимой памяти EEPROM.

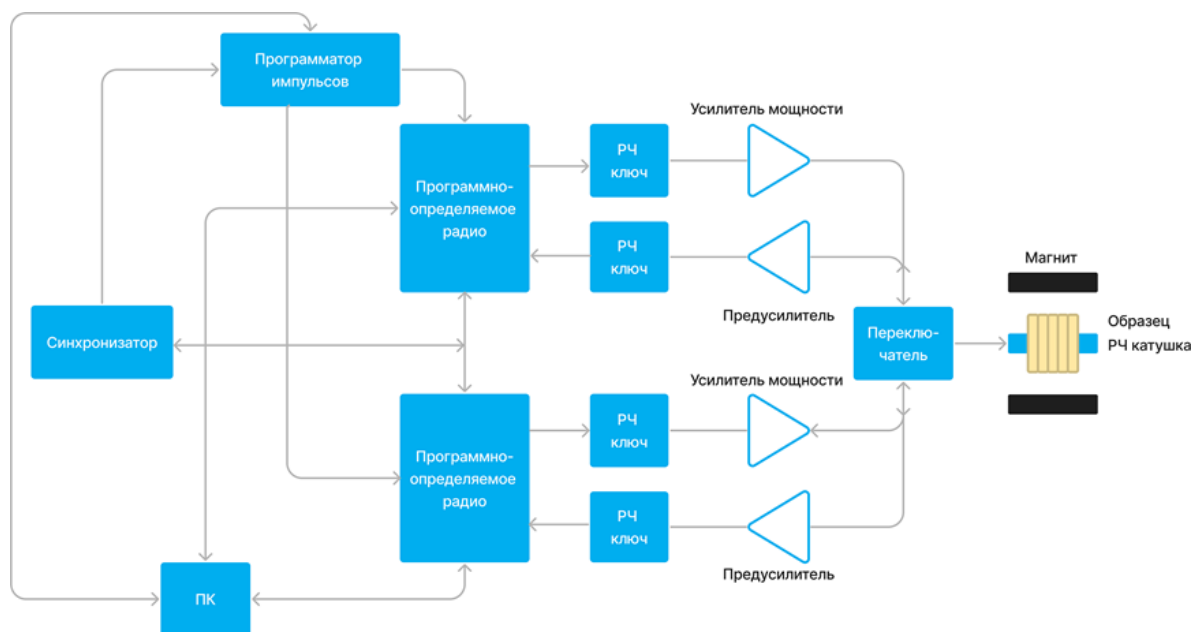


Рис. 3. Схема ЯМР спектрометра на основе технологии ПОР.

Микроконтроллер ATmega2560 работает в напряженном диапазоне (4,5...5,5) В, достигая пропускной способности 16 MIPS при частоте 16 МГц. С его 86 линиями ввода/вывода, 32 регистрами общего назначения и различными периферийными устройствами, такими как АЦП и UART, он предоставляет необходимые средства для управления спектрометром.

Система спроектирована с возможностью расширения для добавления дополнительных радиочастотных каналов, включая платы ПОР и радиочастотные переключатели. Генератор сигналов SM0803X-E01A (SIGLENT TECHNOLOGIES, Augsburg, Germany) используется для частотной привязки ПОР и RobotDyn, однако можно воспользоваться и другим вариантом синхронизации частоты. ПОР подключается к компьютеру через интерфейс USB3, в то время как Mega имеет собственный интерфейс USB2. Входы и выходы ПОР соединены с внешними предусилителями и усилителями мощности через радиочастотные переключатели.

В качестве ПОР в системе используется платформа LimeSDR – открытая платформа программно-определяемого радио. Она поддерживает различные беспроводные стандарты связи, включая UMTS, LTE, GSM, LoRa, Bluetooth, Zigbee, RFID. LimeSDR предоставляет гибкость и функциональность, а также характеризуется доступной стоимостью, что делает ее привлекательным решением для нашей системы. В таблице 1 показано сравнение данной платформы с другими доступными платформами ПОР.

Таблица 1. Сравнение LimeSDR с другими платформами ПОР.

Параметры	Устройство			
	HackRF One	BladeRF	RTL-SDR	LimeSDR
Частотный диапазон	1 МГц – 6 ГГц	300 МГц – 3,8 ГГц	22 МГц – 2,2 ГГц	100 кГц – 3,8 ГГц
Полоса пропускания	20 МГц	40 МГц	3,2 МГц	61,44 МГц
Разрядность ЦАП/АЦП	8-бит	12-бит	8-бит	12-бит
Частота дискретизации	20 МГц	40 МГц	3,2 МГц	61,44 МГц
Число каналов передачи	1	1	0	2
Число каналов приема	1	1	1	2
Доступность исходного кода	Доступен	Частично доступен	-	Доступен

Помимо аппаратной части спектрометр включает систему программного обеспечения. Схема программно-аппаратного комплекса представлена на рис. 4.

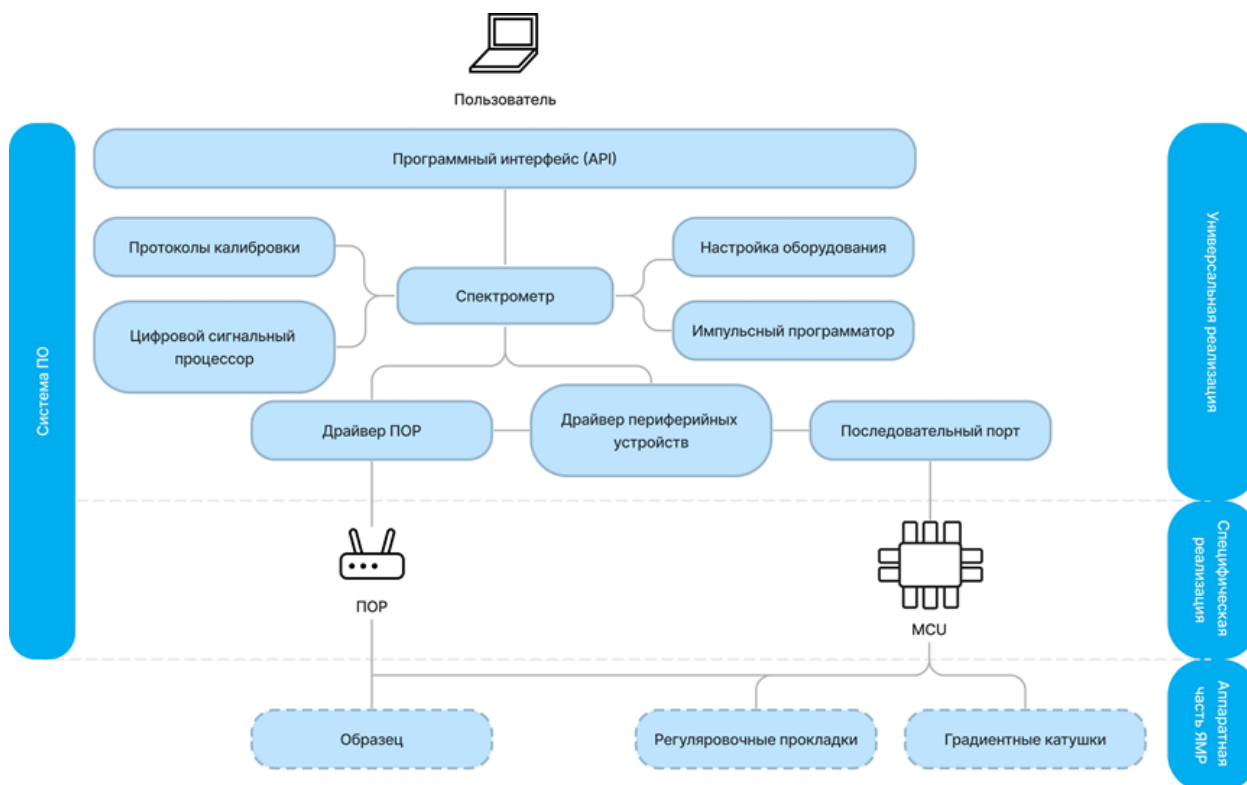


Рис. 4. Схема программно-аппаратного комплекса для ЯМР-спектроскопии с использованием технологии ПОР.

В дополнение к узлам, отвечающим за передачу радиочастотного сигнала, спектрометр ЯМР для определения структуры энергоемких веществ требует цифровых логических выходов для управления выключением мощных усилителей, переключением элементов приемника и управления другими устройствами, необходимыми для конкретного эксперимента. В разрабатываемый программный пакет можно вносить изменения для решения этой проблемы, однако, несколько разных уровней программного обеспечения потребуют значительных изменений, и, вероятно, их будет сложно поддерживать по мере развития программного пакета в будущем. Вместо этого предлагается использовать микроконтроллер RobotDyn Mega в качестве генератора цифровых импульсных последовательностей.

## Заключение

Представлена гибкая и модернизируемая схема многофункционального спектрометра с низким полем для определения структуры энергоемких веществ на основе доступной архитектуры ПОР. Спектрометр был разработан главным

образом путем комбинирования двух LimeSDR, программатора импульсов на основе RobotDyn Mega и программного интерфейса, что позволило достичь компактных размеров и низкой стоимости. RobotDyn Mega, выступающий в роли программатора импульсов, предлагает высокоточное и легко программируемое решение для управления синхронизацией последовательности импульсов при достаточно низкой стоимости.

В предложенном проекте мы заменили как можно больше аналоговых компонентов цифровой электроникой и программным обеспечением. Фактически, за исключением RF-усилителя мощности и усилителя с низким уровнем шума, вся система является цифровой, включая ПОР для приема цифрового сигнала и Mega для программирования импульсов. Первые результаты тестирования, проводимого на базе Поволжского дизайн-центра микроэлектроники, подтвердили применение этих телекоммуникационных концепций для метода ЯМР. Гибкость системы должна позволить ее использование без изменения аппаратной и программной части для широкого спектра приложений ЯМР, особенно для мобильного ЯМР, что необходимо для анализа энергоемких веществ.

Дальнейшая работа будет заключаться в сборке прототипа на печатной плате, доработке программного обеспечения для исследования энергонасыщенных материалов и проведении экспериментальных испытаний.

**Финансирование:** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (тема № АААА-А12-2110800012-0).

### Литература

1. Bryden N. et al. An open-source, low-cost NMR spectrometer operating in the mT field regime //Journal of Magnetic Resonance. – 2021. – Т. 332. – С. 107076.
2. Michal C.A. Low-cost low-field NMR and MRI: Instrumentation and applications //Journal of Magnetic Resonance. – 2020. – Т. 319. – С. 106800.

3. Louis-Joseph A., Lesot P. Designing and building a low-cost portable FT-NMR spectrometer in 2019: A modern challenge //Comptes Rendus Chimie. – 2019. – Т. 22. – №. 9-10. – С. 695-711.
4. Albannay M.M. et al. Compact, low-cost NMR spectrometer and probe for dissolution DNP //Journal of Magnetic Resonance. – 2019. – Т. 304. – С. 7-15.
5. Zhang Z. et al. THz-enhanced dynamic nuclear polarized liquid spectrometer //Journal of Magnetic Resonance. – 2021. – Т. 330. – С. 107044.
6. Galvan D. et al. Compact low-field NMR spectroscopy and chemometrics applied to the analysis of edible oils //Food Chemistry. – 2021. – Т. 365. – С. 130476.
7. Duchowny A. et al. Composition analysis of natural gas by combined benchtop NMR spectroscopy and mechanistical multivariate regression //Energy Reports. – 2022. – Т. 8. – С. 3661-3670.
8. Castaing-Cordier T. et al. High-field and benchtop NMR spectroscopy for the characterization of new psychoactive substances //Forensic Science International. – 2021. – Т. 321. – С. 110718.
9. Edgar M. et al. Low-field benchtop NMR spectroscopy as a potential non-stationary tool for point-of-care urinary metabolite tracking in diabetic conditions //Diabetes Research and Clinical Practice. – 2021. – Т. 171. – С. 108554.
10. Lee Y. et al. Quantification of mixtures of analogues of illicit substances by benchtop NMR spectroscopy //Journal of Magnetic Resonance. – 2022. – Т. 335. – С. 107138.
11. Matviychuk Y. et al. Quantitative analysis of wine and other fermented beverages with benchtop NMR //Analytica Chimica Acta. – 2021. – Т. 1182. – С. 338944.
12. Bouillaud D. et al. Using benchtop NMR spectroscopy as an online non-invasive in vivo lipid sensor for microalgae cultivated in photobioreactors //Process Biochemistry. – 2020. – Т. 93. – С. 63-68.
13. Duchowny A. et al. Versatile high-pressure gas apparatus for benchtop NMR: Design and selected applications //Journal of magnetic resonance. – 2021. – Т. 329. – С. 107025.

14. Cheng F. et al. A 2.0-GHz compact ESR spectrometer for monitoring automobile lubrication oil degradation //Journal of Magnetic Resonance. – 2021. – Т. 332. – С. 107081.
15. Sørensen M.K. et al. Quantification of protein and phosphorus in livestock feed using mobile NMR sensor technology //Biosystems Engineering. – 2022. – Т. 216. – С. 93-97.
16. Al-Shawabka A. et al. Massive-scale I/Q datasets for WiFi radio fingerprinting //Computer Networks. – 2020. – Т. 182. – С. 107566.
17. Aswathi M., Gandhiraj R., Soman K.P. Application and analysis of smart meter data along with RTL SDR and GNU radio //Procedia Technology. – 2015. – Т. 21. – С. 317-325.
18. Toldbo C. et al. Deployment method and optimal placement of surface beacon navigation system for co-located lunar landings //Acta Astronautica. – 2022. – Т. 193. – С. 432-443.
19. Marquet A., Montavont N., Papadopoulos G. Z. Towards an SDR implementation of LoRa: Reverse-engineering, demodulation strategies and assessment over Rayleigh channel //Computer Communications. – 2020. – Т. 153. – С. 595-605.
20. Michal C.A. A low-cost multi-channel software-defined radio-based NMR spectrometer and ultra-affordable digital pulse programmer //Concepts in Magnetic Resonance Part B: Magnetic Resonance Engineering. – 2018. – Т. 48. – №. 3. – С. e21401.

**Для цитирования:**

Киященко В.В., Акопян А.А., Ганигин С.Ю., Журавлева Е.С. Использование программно-определяемого радио для структурного анализа энергоемких веществ с помощью ядерного магнитного резонанса. // Журнал радиоэлектроники. – 2024. – №. 2. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.2.7>.