

графическое устройство; ПДФО — транслятор ПДФО — подпрограммы драйвера устройства — графическое устройство.

Практическая реализация ПДФО ГРАС осуществляется в рамках создания общего программного обеспечения сети вычислительных центров АН УССР.

**Заключение.** В настоящее время ГРАС является ядром графического пакета научно-исследовательского программно-технического комплекса для моделирования САПР ИК АН УССР и пакета подпрограмм для графического отображения результатов обработки научной информации в вычислительных центрах АН УССР.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Баяковский Ю. М., Галактионов В. А. Графические протоколы.— Автометрия, 1978, № 5.
2. Курилов М. А., Манако В. В., Никитин А. И. Некоторые вопросы стандартизации программного обеспечения графических систем.— Киев: изд. ИК АН УССР, 1981. (Препринт/АН УССР, Ин-т кибернетики; № 81—15).
3. Манако В. В. Стандартный графический пакет ГРАС. Проектирование. Базис вывода.— Управляющие системы и машины, 1981, № 3.
4. Курилов М. А., Манако В. В., Никитин А. И., Чичкань И. В. Стандартный графический пакет ГРАС. Средства отображения, хранения и передачи графической информации.— В кн.: Тез. докл. VI Всесоюз. конф. «Автоматизация научных исследований на основе применения ЭВМ (Новосибирск, 1981)». Новосибирск: изд. ИАиЭ СО АН СССР, 1981.
5. ACM/SIGGRAPH: Status Report of the Graphics Standards Planning Committee of ACM/SIGGRAPH.— Computer Graphics, 1977, vol. 11, N 3.
6. ACM/SIGGRAPH: Status Report of the Graphics Standards Planning Committee.— Computer Graphics, 1979, vol. 13, N 3.
7. Newman W. M., Sproul R. F. Principles of Interactive Computer Graphics/Sec. ed. McGraw-Hill.— N.-Y., 1979, p. 541.

*Поступила в редакцию 29 июня 1981 г.*

УДК 681.44

**В. Н. ВЕРХОТУРОВ, В. И. ЗАБОЛОТСКИХ**

*(Москва)*

### **АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЙ КОМПЛЕКС ЭПР-СПЕКТРОСКОПИИ**

**Введение.** Методы электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) являются весьма информативными и широко распространенными методами исследования структуры различных веществ и тканей. Регистрируемое в эксперименте явление резонанса наблюдается при совпадении частоты переходов между уровнями электронных магнитных моментов молекул в постоянном магнитном поле с частотой приложенного извне поля СВЧ-диапазона. ЭПР наблюдается только от веществ, содержащих парамагнитные соединения. Возможности методов ЭПР-спектроскопии в последние годы значительно расширились за счет использования парамагнитных зондов для исследования соединений, не имеющих собственных молекул с неспаренными спинами электронов.

Применение методов ЭПР для тонких структурных исследований основано на том, что помимо приложенного извне постоянного магнитного поля, в котором наблюдается резонанс, в веществе существует внутреннее поле. Их влияние приводит к сдвигу резонанса, изменению формы резонансной линии (расщеплению, расширению), изменению интенсивности и т. д. Изучение этих характеристик позволяет судить не только о природе исследуемых веществ и последовательности расположения отдельных химических групп в молекулах, но и об их пространственной структуре, динамике движения отдельных молекулярных групп и молекул в целом. Очевидно, что применение методов парамагнитного резонанса открывает широкие возможности для изучения структуры биоло-

гических тканей, динамики ее изменения, исследования связи структурных превращений с функциональными особенностями поведения биологических систем на молекулярном уровне.

Однако к настоящему времени даже для сравнительно простых систем реализована только незначительная часть потенциальных возможностей методов магнитного резонанса. Основным ограничивающим фактором здесь является сложная зависимость регистрируемой в эксперименте информации и физических процессов, лежащих в ее основе. По своей сути методы ЭПР-спектроскопии ориентированы на сложные машинные системы обработки и интерпретации данных [1]. При этом следует подчеркнуть, что простое обеспечение ввода данных с ЭПР-спектрометров в ЭВМ при наличии развитых методов анализа не решает проблемы полностью, так как одновременно с этим возникает задача совершенствования самой экспериментальной установки (в первую очередь в отношении чувствительности и точности привязки регистрируемого сигнала к величине магнитного поля).

**Постановка задачи.** Выпускаемые в настоящее время промышленностью радиоспектрометры типа РЭ-1306, РЭ-1307, РЭ-1308 [2], обладая хорошими спектрометрическими характеристиками, имеют ряд существенных недостатков. Так, значительная величина гистерезиса магнита и отсутствие непосредственного измерения напряженности поляризуемого магнитного поля приводят к большим ошибкам в определении регистрируемых параметров, затрудняют реализацию процедуры накопления сигнала при недостаточном для анализа отношении сигнал/шум. Недостатком следует считать и отсутствие возможности представления и регистрации сигнала в цифровой форме. Таким образом, наблюдается определенное несоответствие технических характеристик выпускаемых серийно радиоспектрометров возросшим требованиям экспериментальных исследований и современным тенденциям развития научно-исследовательской аппаратуры.

В настоящее время существует несколько оригинальных разработок [3—10], частично решающих проблему путем улучшения некоторых эксплуатационных и технических характеристик спектрометров. Очевидно, что наиболее перспективным направлением является разработка и создание автоматизированных проблемно-ориентированных комплексов на базе экспериментального оборудования, средств автоматизации и вычислительной техники, обеспечивающих управление экспериментом, сбор, обработку, интерпретацию, отображение и документирование полученных данных [11].

Представляется целесообразным выделить следующие основные требования, которым должны удовлетворять системы автоматизации для малых экспериментальных установок, к которым относятся ЭПР-спектрометры: простота в эксплуатации (комплекс не должен требовать большого штата обслуживающего персонала); применение развитых программных средств (наличие операционных систем и языков программирования высокого уровня); относительная дешевизна (стоимость средств автоматизации не должна превышать стоимости экспериментальной установки) [12]; достаточные вычислительные возможности применяемой ЭВМ; унификация узлов и подсистем; перспективность вычислительных средств, образующих ядро комплекса; обеспечение тестирования и диагностики основных узлов комплекса программным способом; надежность в эксплуатации; простота осуществления связи с более мощной ЭВМ.

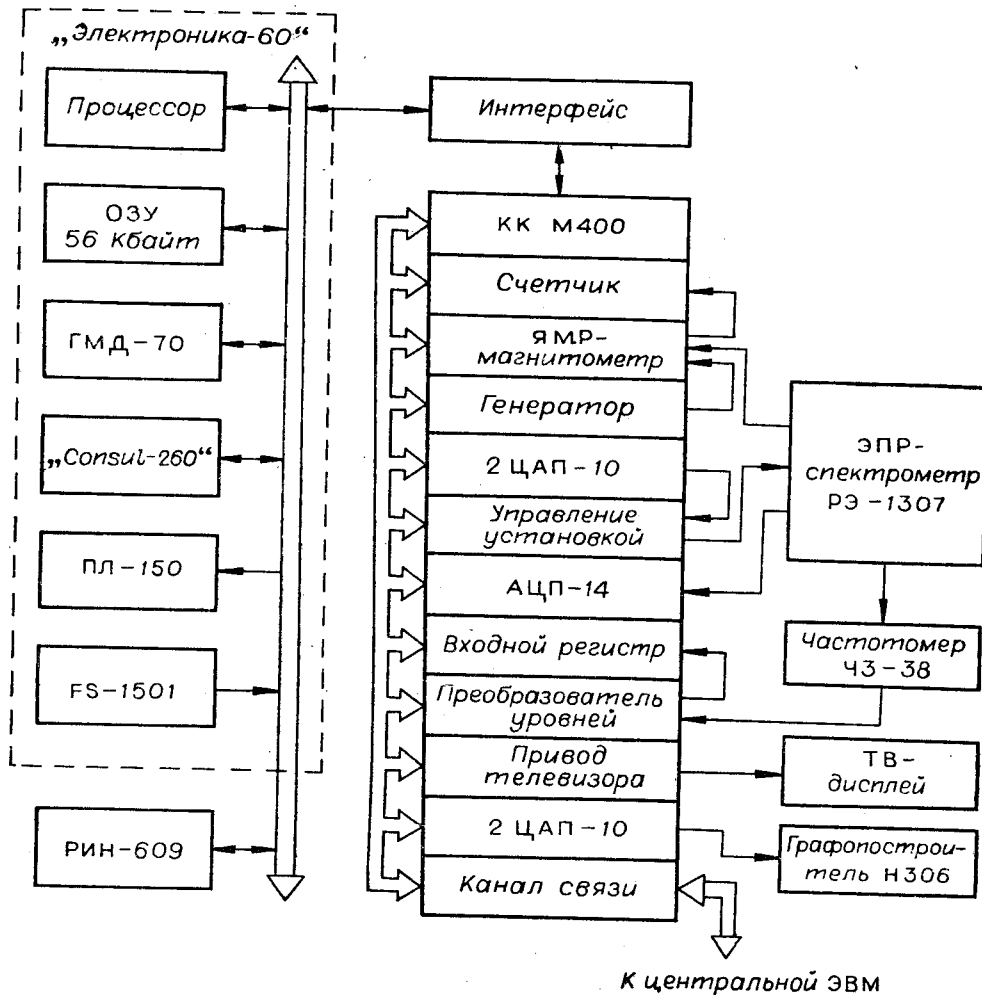
С учетом перечисленных выше условий и требований, сформулированных в [13], был разработан автоматизированный проблемно-ориентированный комплекс на базе серийного радиоспектрометра РЭ-1307, микро-ЭВМ «Электроника-60» и устройств измерения и управления в стандарте КАМАК.

**Технические средства комплекса.** В качестве вычислительной машины выбрана микро-ЭВМ «Электроника-60» [14] — широко распространенная, наиболее доступная и дешевая ЭВМ, которая может использоваться

с достаточно большой оперативной памятью и развитой стандартной периферией. Важным преимуществом этой микро-ЭВМ является программная совместимость с широко распространенной серией СМ ЭВМ, что обеспечивает преемственность программного обеспечения. Существующие модификации операционных систем ЭВМ класса PDP позволяют работать на «Электронике-60» с применением языков программирования высокого уровня, и наконец, для нее уже разработаны стандартные крейт-контроллеры для управления аппаратурой КАМАК.

В соответствии с современными тенденциями развития автоматизированных систем управления экспериментом в качестве интерфейса в комплексе применяется система унифицированных программно-управляемых модулей в стандарте КАМАК [15]. Благодаря этому при создании отдельных подсистем комплекса можно сосредоточить усилия на разработке только оригинальных модулей, специфических для спектроскопических исследований.

Структурная схема описываемого комплекса представлена на рисунке. Штатный комплект микро-ЭВМ «Электроника-60» с расширенной оперативной памятью 56 Кбайт дополнен накопителем на гибких магнитных дисках ГМД-70, два дисководов которого дают возможность использовать один диск как системный для размещения операционной системы, а другой — для организации банка данных. Для обеспечения удобства оперативного диалога оператора с комплексом служит алфавитно-цифровой дисплей РИН-609, подключенный к магистрали «Электроника-60» через интерфейс пишущей машинки (ЭПМ). При этом разра-



ботанный вариант подключения дисплея РИН-609 позволяет сохранить возможность включения ЭПМ. Связь микро-ЭВМ «Электроника-60» с магистралью крейта КАМАК осуществляется через стандартный крейт-контроллер КК М400 и специализированную интерфейсную плату.

Измерение величины магнитного поля в ЭПР-спектрометре РЭ-1307 проводится подсистемой измерения магнитного поля, содержащей следующие модули: генератор 730А, 16-разрядный двоичный счетчик с частотой счета до 65 МГц и автоматический протонно-прецессионный ЯМР-магнитометр.

Автоматический ЯМР-магнитометр является оригинальной разработкой; он собран на стандартной макетной плате КАМАК; ширина модуля 2 М. Датчик магнитного поля представляет собой катушку индуктивности, намотанную на ампулу с водным раствором хлористого лития и расположенную между полюсами магнита. В основе работы датчика лежит явление ядерного магнитного резонанса протонов вещества, помещенного в ампулу датчика. При этом напряженность измеряемого магнитного поля определяется по формуле

$$H = 2\pi f / \gamma,$$

где  $H$  — напряженность магнитного поля,  $f$  — частота ядерного магнитного резонанса,  $\gamma$  — гиромагнитное отношение.

Сигнал высокой частоты, пропорциональный измеренной напряженности магнитного поля, вырабатывается ЯМР-магнитометром, преобразуется счетчиком при помощи генератора в двоичный 16-разрядный параллельный код и вводится в микро-ЭВМ «Электроника-60» по программному каналу. ЯМР-магнитометр позволяет автоматически измерять магнитные поля в диапазоне 0,15 ÷ 0,4 Тл с максимальной скоростью слежения за изменением напряженности 0,008 Тл/с. Относительная точность измерения напряженности магнитного поля составляет  $10^{-6}$ , что на три порядка лучше точности измерения магнитометров, использующих эффект Холла. При наличии сменных датчиков, отличающихся величиной индуктивности катушек, диапазон измеряемых магнитных полей может быть расширен от 0,025 до 1 Тл.

Управление магнитным полем обеспечивается подсистемой развертки поля, в которую, кроме ЭВМ и крейт-контроллера, входят модуль цифро-аналогового преобразователя 2 ЦАП-10 и специально разработанный модуль «Управление установкой». Модуль «Управление установкой» выполнен на макетной плате КАМАК, имеет ширину 2 М и, кроме функции развертки поля, обеспечивает программное управление дополнительными устройствами, необходимыми для проведения исследований биофизических объектов.

Подсистемы измерения напряженности магнитного поля, развертки поля и система установки тока электромагнита радиоспектрометра в совокупности образуют прецизионную безгистерезисную систему управления магнитным полем. Ее применение позволяет устанавливать с высокой точностью магнитное поле требуемой напряженности и осуществлять программно-управляемую развертку поля по заданному закону изменения в следующих диапазонах: изменение поля  $\pm 5$ ,  $\pm 10$ ,  $\pm 20$ ,  $\pm 50$ ,  $\pm 100$  мТл; дискретность развертки поля 0,005; 0,01; 0,02; 0,05; 0,1 мТл.

Для точного определения условий ЭПР необходимо знать не только величину напряженности магнитного поля, но и частоту СВЧ-энергии, поглощаемой исследуемым образцом. Для этого рабочая частота кистрона радиоспектрометра РЭ-1307 измеряется частотомером ЧЗ-38 с приставкой ЯЗЧ-43. По требованию ЭВМ происходит запуск частотомера и передача измеренного значения частоты посредством модулей «Преобразователь логических уровней» и «Входной регистр 305» на магистраль крейта, а затем в ЭВМ.

Выходной сигнал прибора преобразуется аналого-цифровым преобразователем АЦП-14 с временем выборки 20 мкс и временем преобразования 2 мс.

В качестве средства экспресс-информации для визуализации измененных сигналов с целью оперативного контроля за правильностью проводимого эксперимента служит графический телевизионный дисплей, состоящий из модуля «Привод телевизора» и серийного телевизионного приемника. Получение «твердых копий» графического изображения ЭПР-сигналов обеспечивается двухкоординатным самописцем Н306, который управляется микро-ЭВМ «Электроника-60» через модуль 2 ЦАП-10.

Описанный комплекс обладает достаточной автономностью для проведения исследований и обработки информации в большом числе экспериментов. В то же время он является составной частью создаваемой в настоящее время на кафедре биофизики биологического факультета МГУ трехуровневой системы, что дает возможность решить проблему обработки больших массивов информации, архивизации данных, создания и анализа математических моделей изучаемых процессов. Связь с ЭВМ второго уровня (СМ-3) осуществляется через модуль «Канал связи», являющийся абонентским модулем разработанной в нашем коллективе простой системы связи.

В комплексе применена операционная система RT-11, позволяющая программировать на языках высокого уровня. Программное обеспечение комплекса организовано по модульному принципу. Для каждой подсистемы в комплексе выделяется исчерпывающий набор простейших операций. Программные модули, обслуживающие КАМАК-оборудование, написаны на Макроассемблере и имеют развитую систему приоритетов, связанную со спецификой проводимого эксперимента. Алгоритмы обработки данных эксперимента также разбиваются на независимые и неделимые далее модули. Передача данных от модуля к модулю и их архивизация выполняются с помощью банка данных. Для настройки такого набора модулей на работу для конкретного эксперимента имеется организующая программа, управляющая всей системой в режиме диалога с оператором с помощью простого языка директив посредством дисплея РИН-609. Такой подход обеспечивает необходимую гибкость в изменении алгоритмов управления экспериментом и обработки данных в зависимости от особенностей проводимого эксперимента и параметров регистрируемых сигналов [16].

**Заключение.** Описанный выше автоматизированный комплекс ЭПР-спектроскопии является достаточно простым, универсальным и в то же время позволяет расширить возможности метода и решить широкий круг экспериментальных задач как в биологии, так и в других областях научных исследований. Комплекс обеспечивает автоматизацию процесса управления экспериментом, существенное повышение чувствительности и точности анализа, осуществляет ввод данных в ЭВМ, их оперативную обработку, отображение и документирование. Модульность программного обеспечения и использование КАМАК-оборудования в качестве аппаратного средства согласования представляют возможности для развития комплекса. Включение комплекса в иерархическую систему ЭВМ дает ему необходимую «поддержку» при решении задач сложного анализа экспериментальных данных, требующих значительных вычислительных мощностей, моделирования изучаемых процессов и структур, архивизации данных.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Методы исследования быстрых реакций: Пер. с англ. А. А. Соловьянова/Под ред. Г. Хеммиса.— М.: Мир, 1977.
2. Радиоспектрометр РЭ 1307: Техническое описание и инструкция по эксплуатации.— Черногловка: изд. НТО Экспериментального завода научного приборостроения АН СССР, 1979.
3. Батяев И. М. Автоматический магнитометр.— ПТЭ, 1978, № 3.
4. Алексеев Б. Ф., Мамыкин А. И. Широкодиапазонный стабилизатор тока магнита радиоспектрометра РЭ 1301.— ПТЭ, 1978, № 1.

5. Ванвельзенерс, Шумейкер. Цифровой преобразователь частоты ядерного магнитного резонанса в индукцию магнитного поля.— Приборы для научных исследований, 1977, № 4.
6. Александровский В. И. и др. Блок управления магнитным полем спектрометра электронного парамагнитного резонанса.— ПТЭ, 1980, № 6.
7. Дворников Э. В. Комплексная автоматизация магнитометра ядерного магнитного резонанса.— ПТЭ, 1979, № 2.
8. Денисов С. А. Блок электронной цифровой развертки магнитного поля для радиоспектрометров электронного парамагнитного резонанса.— ПТЭ, 1976, № 1.
9. Ткач Ю. Г. и др. Система автоматизированной математической обработки спектров электронного парамагнитного резонанса.— ПТЭ, 1975, № 3.
10. Кук, Зегарски, Миллер. Прецизионное управление магнитным полем при помощи мини-ЭВМ с разделением времени.— Приборы для научных исследований, 1975, № 4.
11. Шекшеев Э. М. и др. Автоматизированная система экспериментальных исследований в области ЭПР-спектроскопии.— В кн.: Магнитный резонанс в биологии и медицине. [Тез. докл. Всесоюз. симпозиума]. Черноголовка: изд. Ин-та хим. физики АН СССР, 1981, с. 289—290.
12. Выставкин А. Н. и др. Проблемно-ориентированные измерительно-вычислительные комплексы на базе ЭВМ СМ-3, СМ-4 и аппаратуры КАМАК для автоматизации научных исследований.— Автометрия, 1980, № 3.
13. Штарк М. Б. Основные направления и перспективные тенденции автоматизации биологических исследований.— В кн.: Приборное оснащение и автоматизация научных исследований в биологии. [Тез. докл. Всесоюз. конф.]. Кишинев: изд. АН Молдавской ССР, 1981, с. 144—145.
14. Борисенко В. Д., Плотников В. В., Талов И. Л. Микро-ЭВМ «Электроника-60».— Электрон. пром-сть, 1978, № 10 (70).
15. КАМАК-системы автоматизации в экспериментальной биологии и медицине/Под ред. Ю. Е. Нестерихина.— Новосибирск: Наука, 1978.
16. Саламатин И. М., Штарк М. Б., Яновский Г. Я. Генерация программного обеспечения для медико-биологических экспериментов с использованием мини-ЭВМ типа СМ-3 и оборудования КАМАК.— Автометрия, 1981, № 4.

*Поступила в редакцию 1 февраля 1982 г.*