

УДК 621.317.08

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КОМПЛЕКСНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА НЕФТЕПРОДУКТОВ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

© 2011 Б.В. Скворцов, Д.Б. Скворцов, А.Н. Малышева-Стройкова

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева  
(национальный исследовательский университет)

Поступила в редакцию 20.10.2011

Анализ теоретических основ ЯМР как метода исследования физико-химического строения вещества показал большие возможности и принципиальную техническую реализуемость способов ЯМР для исследований показателей качества нефтепродуктов. Показано, что комплексный поточный анализ показателей качества нефтепродуктов методом исследования физико-химического строения вещества неэффективен, так как требует специальных подходов и индивидуальных алгоритмических решений под каждый показатель качества. Количественную оценку показателей качества можно проводить как по частотам (химическим сдвигам) ЯМР характеристики исследуемого вещества, так и по интенсивности (амплитуде) ЯМР-сигнала на определенных частотах. Разработанная математическая модель процедуры измерения, позволяет находить функцию преобразования прибора по каждому показателю качества при различных исходных данных, связанных с наличием образцовых топлив. Предложенная методика измерений не требует точного знания функции, связывающей искомый показатель качества с отсчетами ЯМР - характеристики исследуемого образца параметрами. Она предполагает создание математической модели на основе эталонных образцов топлив с известными значениями показателей качества.

Ключевые слова: нефтепродукты, показатели качества, ядерный магнитный резонанс (ЯМР), химический сдвиг, спектрометрическая характеристика, функция преобразования.

Использование эффекта ядерного магнитного резонанса (ЯМР) для создания приборов анализа нефтепродуктов хорошо известно, что подтверждается обилием фундаментальных и прикладных научных работ, посвященных теории и практики физико-химического исследования сред [1-8]. Современная ЯМР-спектроскопия является одним из основных физико-химических методов анализа, ее данные используют для однозначной идентификации как промежуточные продуктов химических реакций, так и целевых веществ. Помимо структурных отнесений и количественного химического анализа, спектроскопия ЯМР при специальной обработке сигналов может принести информацию о многих других физико-химических свойствах нефтепродукта, определяющих его эксплуатационные характеристики (показатели качества). Основными показателями качества нефти и нефтепродуктов являются фракционный и групповой химический составы, содержание серы, воды, водорода, кислородосодержащих компонентов,

кислоты, ароматических углеводородов, бензола, детонационная стойкость (октановое и цетановое числа), плотность, вязкость, температура вспышки, давление насыщенных паров, точка росы и многие другие специфические показатели, характерные для отдельных видов углеводородных соединений. Точность определения химического состава и его структуры сопоставима с данными рентгеноструктурного анализа. Число и положение линий в спектрах ЯМР однозначно характеризуют все фракции сырой нефти и углеводородных топлив. Однако определение показателей качества нефтепродуктов через выявление химического состава можно признать фундаментальным, но с точки зрения оперативности нельзя назвать перспективным. Обработка спектрометрических данных требует времени и для каждого показателя качества специальных подходов и алгоритмов, которые в большинстве своем еще не разработаны. Не исследованы вопросы взаимосвязи показателей качества нефтепродуктов с характеристиками ЯМР - спектров. Не решены вопросы математического моделирования процесса комплексного измерения показателей качества углеводородных топлив, нет алгоритмов и программ обработки экспериментальных данных с позиций получения функции преобразования измерительных приборов, работающих в реальном времени (на потоке). В статье излагаются теоретические основы комплек-

*Скворцов Борис Владимирович, доктор технических наук, профессор, научный руководитель НИЛ «Аналитические приборы и системы». E-mail: aps@ssau.ru.*

*Скворцов Дмитрий Борисович, аспирант кафедры «Радиотехнические устройства», младший научный сотрудник НИЛ «Аналитические приборы и системы». Малышева-Стройкова Александра Николаевна, аспирант кафедры «Электротехника».*

сных измерений показателей качества нефтепродуктов на основе ЯМР, которые следует рассматривать как небольшой шаг, направленный на устранение указанного пробела в теории и практике ЯМР-исследований нефтепродуктов. Исследуются основные возможности метода ЯМР для определения показателей качества нефтепродуктов и рассматриваются математические модели процедуры измерений при различных методах получения и обработки информации. Для наблюдения ядерного магнитного резонанса необходимо поместить образец в сильное однородное магнитное поле  $H_0$  (рис/ 1) и подействовать на него излучением с частотой  $\nu$ , удовлетворяющей уравнению

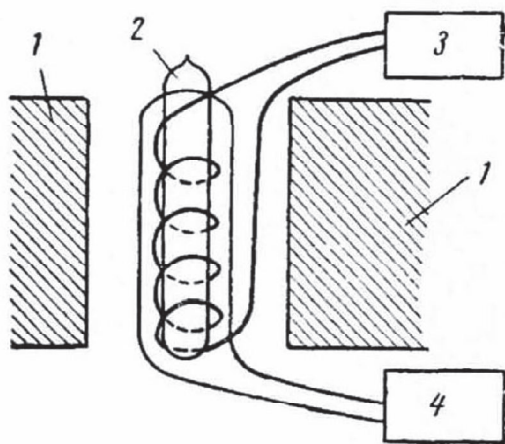
$$\nu = \frac{\gamma}{2\pi} H_0, \quad (1)$$

которое является основным уравнением ядерного магнитного резонанса.

Здесь  $\gamma$  – гиромагнитное отношение, характеризующее данный вид ядер [1-5].

Магнит вызывает расщепление энергетических уровней магнитных ядер, т.е. создает необходимые условия для поглощения радиочастотного излучения. Радиочастотный генератор возбуждает магнитное поле, перпендикулярное к постоянному полю. При определенном соотношении этих полей наступает резонансное поглощение энергии, которое регистрируется радиочастотным детектором.

Условия резонанса можно достичь либо изменением напряженности постоянного магнитного поля, либо изменением частоты генератора. Чаще используется второй принцип. В настоящее время наиболее широко применяются спектрометры протонного магнитного резонанса с частотой 60 и 100 МГц (в последние годы стали изготавливаться приборы с частотой 220



**Рис. 1.** Схема спектрометра ЯМР:  
1 — магнит; 2—ампула с образцом;  
3 — детектор; 4 — генератор радиочастоты

МГц). Подробно теория и аппаратная реализация ЯМР- спектрометрии изложена в [1-5].

Основные признаки измерительного процесса показателей качества топлив на основе ЯМР состоят в следующем:

1. Измерение производится путем определения молекулярного и структурного состава вещества. Изменение химического состава топлива вещества приводит к изменению показателей качества.

2. Измерение основано на определении частоты поглощения радиочастотного излучения исследуемым веществом, которая фиксируется в единицах химического сдвига относительно эталонного вещества.

3. Кроме химического сдвига информация о количественном содержании химических элементов содержится в амплитуде (интенсивности) сигнала (ЯМР) на частоте химического сдвига.

4. Эталонное вещество вводится в виде присадки в контролируемую среду, либо хранится непосредственно в датчике, в конструкции которого заложена такая возможность.

5. ЯМР-характеристики эталонного продукта могут храниться в ЭВМ измерительной системы, но это хуже, так как они плавают в зависимости от внешних условий, например температуры, напряжения питания, старения элементов, напряженности магнитного поля.

Все перечисленные признаки необходимо использовать для создания общей теории измерений показателей качества на основе ЯМР.

Пусть имеется нефтепродукт, у которого нужно определить перечисленную выше совокупность  $\{Q_i\}$  показателей качества методами ЯМР, то есть на основе определения химического сдвига относительно эталона (эталонов) с известными значениями исследуемых параметров. При этом каждый показатель качества изменяется в диапазоне  $[Q_{i,\min} \div Q_{i,\max}]$ . При построении измерительной процедуры, связанной с определением неизвестных показателей качества возможны два подхода.

1. Эталонное вещество одно для всех показателей качества. При этом предполагается, что у эталонного вещества известны все вышеперечисленные показатели качества.

2. Под каждый показатель качества индивидуально подбирается эталонное вещество, известные ЯМР-характеристики которого используются в измерительной процедуре при вычислении конкретного показателя качества.

Каждый из этих подходов имеет достоинства и недостатки, которые будут анализироваться в процессе развития теории ЯМР-измерений показателей качества нефтепродуктов. При первом подходе имеем один эталонный продукт под все

показатели качества. Здесь всем показателям качества  $Q_k$  эталонного продукта ( $k=1...n$ ) соответствует химический сдвиг  $q=0$ . При изменении показателя качества  $Q_k$  исследуемого продукта в какую-либо сторону от эталонного значения возникает химический сдвиг  $q_k$ . При этом изменение каждого показателя качества  $Q_k$  продукта даст свой химический сдвиг. Например, изменение октанового числа бензина, которое условно назовем показателем  $Q_k$ , при постоянных других показателях качества (вязкости, плотности, содержание серы и т.д.) даст смещение  $q_k$ . Изменение содержания серы, которое условно назовем  $Q_{k+1}$ , при постоянных других показателях качества даст смещение  $q_{k+1}$ . Ясно, что все показатели качества взаимосвязаны, то есть изменение октанового числа или содержания серы приведет к изменению плотности и вязкости и т.д. Поэтому рассмотренная выше ситуация является гипотетической. Однако математическая постановка вполне допустима, так как задача математики будет состоять в оценке влияния каждого показателя качества на суммарный химический сдвиг. В общем случае суммарный химический сдвиг, вызванный изменением показателей качества нефтепродукта от эталонного значения, может описываться функцией:

$$q = F(Q_1, Q_2, \dots, Q_k, \dots, Q_n). \quad (2)$$

Функция (2) неизвестна. Ее поиск является важнейшей задачей математического описания измерительной процедуры. Учитывая, что любой измерительный процесс подразумевает в себе, кроме сбора и обработки информации, также операцию калибровки прибора по известным эталонным параметрам, для решения поставленной задачи предложен алгоритм измерений, сущность которого состоит в том, что при неизвестной функции  $F$  составляется калибровочная модель процесса измерения. Для этого берется несколько образцов топлива с известными значениями показателей качества, определенными лабораторными способами и ставится им в соответствие столько же отсчетов химических сдвигов. При этом необходимо, чтобы образцовые топлива полностью перекрывали ожидаемый диапазон изменений определяемых показателей качества. Количество образцовых топлив  $N$  должно быть не меньше числа определяемых показателей качества  $n$  ( $N \geq n$ ). Пусть имеется  $N$  калибровочных образцов топлива. Каждый из этих образцов имеет свой набор показателей качества. Например, первый образец ( $N=1$ ) имеет набор показателей качества  $Q_{1,1}, Q_{1,2}, \dots, Q_{1,k}, \dots, Q_{1,n}$ . Образец  $N=i$  имеет набор показателей качества  $Q_{i,1}, Q_{i,2}, \dots, Q_{i,k}, \dots, Q_{i,n}$ . Образец ( $N=N$ ) имеет набор показателей качества  $Q_{N,1}, Q_{N,2}, \dots, Q_{N,k}, \dots, Q_{N,n}$ .

Здесь первый индекс соответствует номеру калибровочного образца, второй индекс – номеру показателя качества. При построении калибровочной модели для произвольных значений измеряемых параметров всегда можно подобрать такие нормирующие коэффициенты  $b_k$ , что будут выполняться равенства:

$$\left\{ \begin{aligned} q_1 &= b_1 Q_{1,1} + \dots + b_k Q_{1,k} + \dots + b_n Q_{1,n} = \sum_{k=1}^n b_k Q_{1,n} \\ &\dots \dots \dots \\ q_i &= b_1 Q_{i,1} + \dots + b_k Q_{i,k} + \dots + b_n Q_{i,n} = \sum_{k=1}^n b_k Q_{i,n} \\ &\dots \dots \dots \\ q_n &= b_1 Q_{n,1} + \dots + b_k Q_{n,k} + \dots + b_n Q_{n,n} = \sum_{k=1}^n b_k Q_{n,n} \quad (3) \\ &\dots \dots \dots \\ q_N &= b_1 Q_{N,1} + \dots + b_k Q_{N,k} + \dots + b_n Q_{N,n} = \sum_{k=1}^n b_k Q_{N,n} \end{aligned} \right.$$

В системе уравнений (3)  $q_i$  – химический сдвиг, соответствующий  $i$  – му калибровочному образцу топлива.

Система имеет  $N$  уравнений для  $n$  неизвестных  $b_1 \dots b_n$ . Учитывая, что  $N \geq n$  из системы (3) всегда можно выбрать  $n$  уравнений, достаточных для нахождения неизвестных коэффициентов  $b_k$ . Необходимо выбирать наиболее информативные уравнения, охватывающие наибольшие диапазоны химических сдвигов и определяемых показателей качества. В частном случае достаточно  $n$  верхних уравнений из системы (3), которые для упрощения записи предполагается использовать в дальнейших математических выкладках. Из системы (3) найдется совокупность коэффициентов  $b_k$ , которые в средневзвешенной форме аналитически определяют взаимосвязь химического сдвига с набором показателей качества исследуемого топлива:

$$q_x = b_1 Q_{x,1} + \dots + b_k Q_{x,k} + \dots + b_n Q_{x,n} = \sum_{k=1}^n b_k Q_{x,k} \quad (4)$$

где  $Q_{x,k}$  – искомое значение показателя качества контролируемого топлива,

$q_x$  – измеренный химический сдвиг контролируемого топлива.

При этом коэффициенты  $b_k$  определяются по формуле:

$$b_k = \frac{\Delta b_k}{\Delta}, \quad (5)$$

где

$$\Delta = \begin{vmatrix} Q_{1,1} \cdots Q_{1,k} \cdots Q_{1,n} \\ \dots \\ Q_{i,1} \cdots Q_{i,k} \cdots Q_{i,n} \\ \dots \\ Q_{n,1} \cdots Q_{n,k} \cdots Q_{n,n} \end{vmatrix},$$

$$\Delta b_k = \begin{vmatrix} Q_{1,1} \cdots q_{1,k} \cdots Q_{1,n} \\ \dots \\ Q_{i,1} \cdots q_{i,k} \cdots Q_{i,n} \\ \dots \\ Q_{n,1} \cdots q_{n,k} \cdots Q_{n,n} \end{vmatrix}.$$

Выражения (3) ... (5) составляют в общем виде математическую модель измерительного процесса определения показателей качества по калибровочной модели, где (4) определяет вклад каждого показателя качества в суммарный химический сдвиг испытываемого топлива. Однако оно не определяет каждый показатель качества. Для определения каждого показателя качества через химический сдвиг необходимы дополнительные исследования, позволяющие составить уравнения, связывающие искомые параметры с характеристиками ядерного магнитного резонанса для конкретного топлива. Из (4) следует, что для оцениваемого топлива каждому химическому сдвигу соответствует определенный набор показателей качества. Справедливо также то, что закон изменения химического сдвига от каждого показателя качества индивидуален.

Показатели качества  $Q_k$  имеют разную размерность, поэтому изображение их на одном гра-

фике невозможно. Однако, если показатели качества брать нормированными, определяемыми как текущее значение, деленное на максимальное значение, то иллюстрирование становится возможным в относительных (безразмерных) единицах. Например, если показатель качества  $Q_k$  имеет диапазон изменения  $[Q_{k,min} \text{ и } Q_{k,max}]$ , то нормированный показатель качества определится по формуле

$$QN_k = \frac{Q_k}{Q_{k,max}}. \quad (6)$$

Тогда, для нормированных показателей качества любое нефтепродукт может характеризоваться набором функций (графиков), показанных на рис. 2, связывающих показатели качества с химическим сдвигом.

Таким образом, по набору экспериментальных данных для каждого показателя качества можно методами математической регрессии составить аналитическую зависимость, связывающую показатель качества с химическим сдвигом.

$$QN_1 = f_1(q), \quad QN_2 = f_2(q) \dots$$

$$QN_k = f_k(q) \dots QN_n = f_n(q). \quad (7)$$

Набор нормированных показателей качества для произвольного значения химического сдвига  $q_X$  определится по формуле

$$QN_{k,X} = f_k(q_X). \quad (8)$$

Абсолютное значение показателя качества определится по формуле

$$Q_{k,X} = QN_{k,X} \cdot Q_{k,max} = Q_{k,max} \cdot f_k(q_X) = F_k(q_X). \quad (9)$$

Аппроксимацию экспериментальных точек можно проводить стандартными программами математического пакета MATCAD по методу

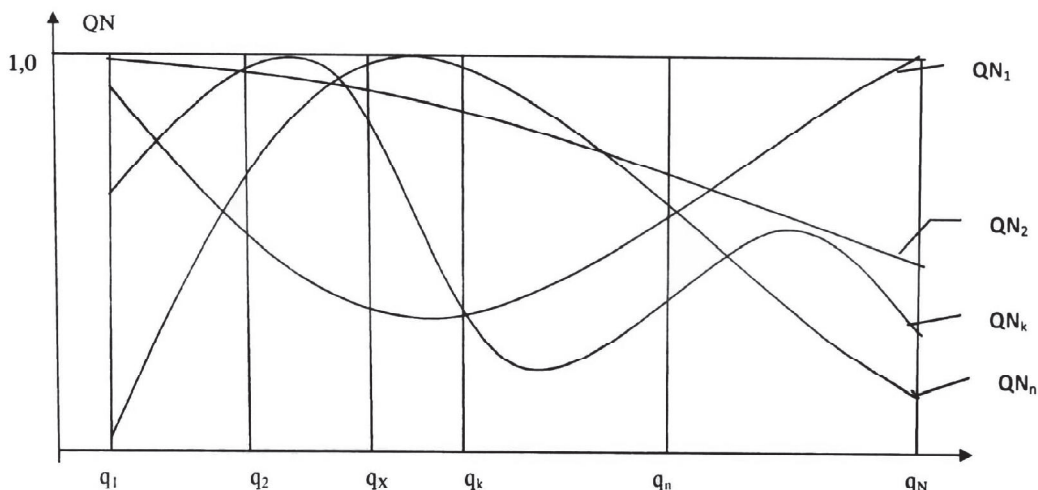


Рис. 2. Иллюстрация к методике определения показателей качества по суммарному химическому сдвигу для разных наборов показателей качества

наименьших квадратов различными функциями заданного вида, в простейшем случае степенным полиномом [10].

Формула (9) легко применима, если определяется один показатель качества  $Q_k$ , например плотность, или октановое число. В этом случае система уравнений (3) примет вид

$$q_i = b_k Q_{i,k} \quad (10)$$

Тогда  $b_k = q_i / Q_{i,k}$ , и выражение (4) примет вид

$$q_X = b_k Q_{X,k}, Q_{X,k} = q_X / b_k \quad (11)$$

Выражения (11) напрямую определяют показатель качества  $Q_k$  через химический сдвиг при калибровке по  $i$ -тому образцовому топливу и справедливо, если химический сдвиг линейно зависит от показателя качества по формуле (10). Это имеет место быть тогда, когда изменения показателя качества происходит в окрестности калибровочного образца. В широком диапазоне изменений химический сдвиг и показатель качества нелинейно зависят друг от друга и выражения (11) будут иметь вид (9), откуда следует:

$$q_X = F_k^{-1}(Q_{X,k}) \quad (12)$$

Поиск функции (12), можно проводить не только на основе набора характеристик, показанных на рис. 3 по методике, описываемой выражениями (6) – (9), но и по следующей схеме. Можно взять  $N+1$  калибровочных топлив с известными значениями  $k$ -го показателя качества  $Q_{i,k}$  ( $i=0,1,2,\dots,N$ ) и соответствующие им химические сдвиги  $q_i$ . При этом значения других показателей качества во внимание не принимать. Очевидно, что можно составить систему уравнений для поиска функции (9) в виде полинома.

$$\left\{ \begin{array}{l} \dots\dots\dots \\ Q_{i,k} = F_k(q_i) = b_0 + b_1 q_i + b_2 q_i^2 + \dots + b_j q_i^j + \dots + b_N q_i^N \quad (13) \\ \dots\dots\dots \end{array} \right.$$

Решение этой системы уравнений относительно коэффициентов  $b_j$  определяется выражением

$$b_j = \frac{\Delta b_j}{\Delta} \quad (14),$$

в котором:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & q_0 & q_0^2 & \dots & q_0^j & \dots & q_0^N \\ \dots\dots\dots \\ 1 & q_i & q_i^2 & \dots & q_i^j & \dots & q_i^N \\ \dots\dots\dots \\ 1 & q_N & q_N^2 & \dots & q_N^j & \dots & q_N^N \end{vmatrix},$$

$$\Delta b_j = \begin{vmatrix} 1 & q_0 & q_0^2 & \dots & Q_{0,k} & \dots & q_0^N \\ \dots\dots\dots \\ 1 & q_i & q_i^2 & \dots & Q_{i,k} & \dots & q_i^N \\ \dots\dots\dots \\ 1 & q_N & q_N^2 & \dots & Q_{N,k} & \dots & q_N^N \end{vmatrix}.$$

Тогда уравнение, связывающее искомый показатель качества исследуемого топлива с рассматриваемым электрофизическим параметром определится:

$$Q_{X,k} = F_k(q_X) = b_0 + b_1 q_X + b_2 q_X^2 \dots + b_j q_X^j + \dots + b_N q_X^N = \sum_{j=0}^n b_j q_X^j \quad (15)$$

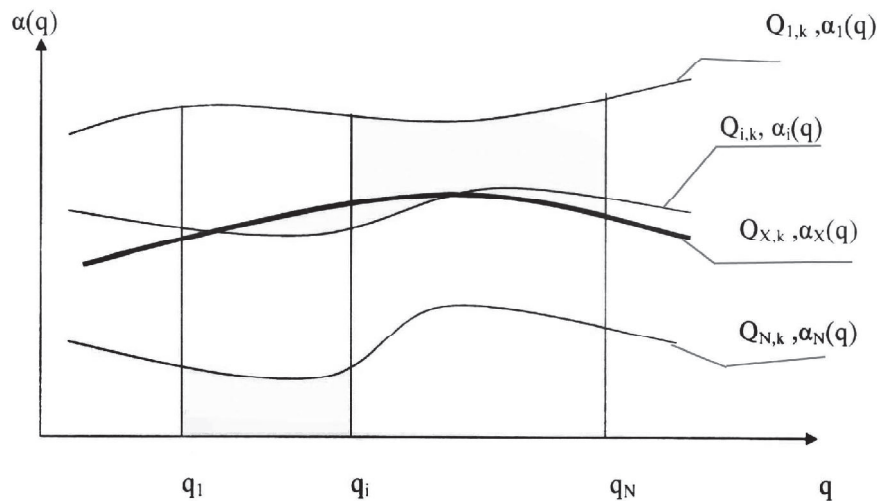
Выражение (15) отличается от (9) способом получения. Для получения (9) использовалось одно калибровочное топливо, и в процедуре поиска использовались все показатели качества. Для получения (15) использовались  $N+1$  эталонных топлив, в которых для поиска использовался только один показатель качества. Точность математического моделирования функции преобразования (15) зависит от числа эталонных топлив и возрастает с их увеличением. Реально сигнал ЯМР является более информативным. Кроме частоты резонанса информацию о показателях качества несет в себе интенсивность (относительная амплитуда сигнала). Идеология метода состоит в том, что снимается несколько спектральных характеристик топлива с заранее известными значениями исследуемого показателя качества  $Q_{1k}, \dots, Q_{ik}, \dots, Q_{Nk}$  в заявленном диапазоне измерений (рис 3). Здесь индекс  $i$  соответствует номеру образцового топлива,  $k$  – номеру показателя качества,  $N$  – число образцовых топлив с известными значениями показателя качества.

Если взять  $N$  дискретных отсчетов в каждой спектрометрической характеристике, то при построении калибровочной модели можно подобрать такие нормирующие коэффициенты  $b_p$ , что будут выполняться равенства:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dots\dots\dots \\ Q_{i,k} = b_1 \alpha_i(q_i) + \dots + b_i \alpha_i(q_i) + \dots + b_N \alpha_i(q_N) = \sum_{i=1}^p b_i \alpha_i(q_i) \quad (16) \\ \dots\dots\dots \end{array} \right.$$

Решая эту систему можно найти такую совокупность коэффициентов  $b_k$ , которые в средне-взвешенной форме будут определять контролируемый показатель качества  $Q_{X,k}$  в исследуемом топливе:

$$Q_{X,k} = b_1 \alpha_X(q_1) + \dots + b_i \alpha_X(q_i) + \dots + b_N \alpha_X(q_N) = \sum_{i=1}^N b_i \alpha_X(q_i), \quad (17)$$



**Рис. 3.** Иллюстрация к методике определения показателя качества по спектрометрическим характеристикам:

$Q_1, Q_2, \dots, Q_p$  – значения показателя качества в калибровочных образцах топлива,  $p$  – число калибровочных образцов,  $Q_X$  – спектр исследуемого топлива с неизвестным значением показателя качества

$\alpha_X(q_i)$  – совокупность дискретных отсчетов ЯМР-спектра контролируемого топлива. При этом коэффициенты  $b_k$  определяются по формуле

$$b_i = \frac{\Delta b_i}{\Delta}, \quad (18)$$

в которой:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \alpha_1(q_1) \dots \alpha_1(q_i) \dots \alpha_1(q_N) \\ \dots \\ \alpha_i(q_1) \dots \alpha_i(q_i) \dots \alpha_i(q_N) \\ \dots \\ \alpha_N(q_1) \dots \alpha_N(q_i) \dots \alpha_N(q_N) \end{vmatrix},$$

$$\Delta b_i = \begin{vmatrix} \alpha_1(q_1) \dots Q_{1,k} \dots \alpha_1(q_N) \\ \dots \\ \alpha_i(q_1) \dots Q_{i,k} \dots \alpha_i(q_N) \\ \dots \\ \alpha_N(q_1) \dots Q_{N,k} \dots \alpha_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (19)$$

Система (16) имеет единственное решение, если главный определитель отличен от нуля. Можно выбрать такие значения отсчетов спектральной характеристики, которые исключают равенство нулю главного определителя.

Частный случай определения значения показателя качества по двум калибровочным топливам, полностью перекрывающим диапазон ожидаемых значений  $Q_{min,k} \dots Q_{max,k}$ ,  $Q_1 = Q_{min,k}$ ,  $Q_2 = Q_{max,k}$ . Тогда выражение (17) примет вид:

$$Q_{X,k} = b_1 \alpha_X(q_1) + b_2 \alpha_X(q_2), \quad (20)$$

$$b_1 = \frac{\alpha_1(q_2)Q_2 - \alpha_2(q_2)Q_1}{\alpha_1(q_1)\alpha_2(q_2) - \alpha_1(q_2)\alpha_2(q_1)},$$

$$b_2 = \frac{\alpha_2(q_1)Q_1 - \alpha_1(q_1)Q_2}{\alpha_1(q_1)\alpha_2(q_2) - \alpha_1(q_2)\alpha_2(q_1)}.$$

Численный эксперимент показывает, что при любых значениях  $0 < \alpha_i < 1$  искомое значение находится в интервале  $Q_{min} < Q_x < Q_{max}$ , что также распространяется на множество дискретных отсчетов и полностью подтверждает выводы, сделанные выше выводы по отношению к химическим сдвигам  $q_{i,j}$ . Это определяет возможность использования отсчетов спектрометрической характеристики для определения показателей качества с построением калибровочной модели. Математическая модель (17) позволяет построить процедуру измерения для любого показателя качества. Необходимо только иметь набор эталонных топлив с известными показателями качества  $Q_{i,k}$ , который присутствует в определителе (19). Разработанная математическая модель процедуры измерения, позволяет находить функцию преобразования прибора по каждому показателю качества при различных исходных данных, связанных с наличием образцовых топлив. Предложенная методика измерений не требует точного знания функции, связывающей искомый показатель качества с отсчетами ЯМР-характеристики исследуемого образца параметрами. Она предполагает создание математической модели на основе эталонных образцов топлив с известными значениями показателей качества.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Сороко Л.М. Интроскопия на основе ядерного-магнитного резонанса. М: Энергоатомиздат, 1986.

2. Феррар Т., Беккер Э. Импульсная и Фурье - спектроскопия ЯМР [пер. с англ. Под. ред. Э. И. Федина]. М.: Мир, 1973. 164 с.
3. Калабин Г.А., Каницкая Л.В., Кушнарев Д.Ф. Количественная спектроскопия ЯМР природного органического сырья и продуктов его переработки. М.: Химия, 2000. 408 с.
4. Жунке А. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974. 176 с.
5. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР. Изд-во МГУ, 1981. 279 с.
6. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований [пер. с англ.]. М., 1992.
7. Калабин Г.А., Кушнарев Д.Ф., Бежезовский В.М. Атлас спектров углеродного магнитного резонанса. Спектры ЯМР<sup>13</sup>C ненасыщенных и ароматических соединений 6А группы. Новосибирск: ИОХ СОАН СССР, 1981.
8. Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ЯМР. Методическая разработка. М.: МГУ, 2006. 200 с.
9. Скворцов Б.В. Электрофизические устройства контроля качества углеводородных топлив. Самара, 2000. 264 с.
10. Дьяконов В.П., Абраменкова И.В. MathCAD 7.0 в математике, физике и в Internet. "Нолидж", Москва, 1999 г., 336 с.

## THEORETICAL BASES OF COMPLEX MEASUREMENTS OF INDICATORS OF QUALITY OF OIL PRODUCTS THE METHOD OF THE NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE

© 2011 B.V. Skvortsov, D.B. Skvortsov, A.N. Malysheva-Strojtkova

Samara State Aerospace University named after S.P. Korolev  
(National Research University)

The analysis of theoretical bases of a nuclear magnetic resonance as method of research of a physical and chemical structure of substance has shown the big possibilities and a basic technical realizability of ways of a nuclear magnetic resonance for researches of indicators of quality of oil products. It is shown that the comprehensive analysis of indicators of quality of oil products a method of research of a physical-chemical structure of substance is inefficient, as demands special approaches and individual algorithmic decisions under each indicator of quality. The estimation of indicators of quality can be spent as on frequencies (chemical shift) a nuclear magnetic resonance of the characteristic of investigated substance, and on intensity (amplitude) of a nuclear magnetic resonance - of a signal on certain frequencies. The developed mathematical model of procedure of measurement, allows to find function of transformation of the device on each indicator of quality at the various initial data connected with presence exemplary fuel. The offered measurement technique doesn't demand exact knowledge of the function connecting a required indicator of quality with readout of a nuclear magnetic resonance - specifications the investigated sample in parameters. She assumes creation mathematic models on the basis of reference samples fuel with known values of indicators of quality.

Key words: oil products, indicators of quality, nuclear magnetic resonance, chemical shift, spectroscopic characterization, conversion function.

---

*Boris Skvortsov, Doctor of Technics, Professor, Scientific Head at the Analytical Instruments and Systems Research Laboratory. E-mail: aps@ssau.ru*

*Dmitry Skvortsov, Graduate Student at the Radio Devices Department, Associate Research Fellow at the Analytical Instruments and Systems Research Laboratory.*

*E-mail: aps@ssau.ru*

*Alexandra Malysheva-Strojtkova, Graduate Student at the Electrical Engineering Department.*

*E-mail: aps@ssau.ru*