

模糊自适应 PID 算法在核磁共振谱仪样品旋转控制系统中的应用

林超力^{1,2} 刘鸿飞^{* 1} 孙惠军¹ 郑振辉¹ 陈 忠¹

¹(厦门大学物理系,福建省等离子体与磁共振研究重点实验室,厦门 361005)

²(厦门大学通信工程系,厦门 361005)

摘 要 在核磁共振(NMR)实验中,样品旋转能够有效消除 XY 方向磁场的部分不均匀性,从而提高信号分辨率。在商用 NMR 谱仪中,一般采用 PID 算法进行待测样品的旋转控制。由于被控对象具有一定的非线性,存在着调节时间较长,稳定后存在误差等缺点。针对该现象,在 Varian 500 MHz 波谱仪气路系统的基础上,设计一套新的控制电路,在控制方法上引入了模糊 PID 控制,经过多次实验调试、优化处理,定制了适用于 NMR 谱仪气控系统的模糊参数隶属函数和模糊规则,设计出一种模糊自适应 PID 控制算法。结果表明,本系统较原系统稳定时间缩短了约 30 s。在相同的实验环境下采样,本系统得到半高宽均值为 1.27 Hz,信噪比为 2293,优于 Varian 气控系统采样所得的结果,增强了旋转控制的鲁棒性,加快了响应速度和稳定速度,具有较高的应用价值。

关键词 核磁共振波谱仪;气控系统;模糊 PID;样品旋转;自适应

1 引 言

核磁共振(Nuclear magnetic resonance, NMR)谱仪是研究有机化合物结构必不可少的重要手段,广泛应用于分子医学、生物学、药学、天然有机化学、合成有机化学、环保、香料及农药等领域的有机结构分析,尤其在医药、药物中间体及中草药等天然产物的成分分析中应用最多,有着其它仪器不可替代的作用^[1,2]。

NMR 谱仪对样品的操作,包括进样、出样、变温及旋转,完全由气流控制,气控系统通过一定的控制电路和控制方法,控制气流的大小和联动,完成上述工作。当磁场在 x 和 y 方向上不均匀存在时,样品旋转能从谱仪采样结果上体现出来。样品管绕 Z 轴旋转,相当于抵消了沿旋转平面上的磁场梯度。从采样结果上看,就是半高宽降低和信噪比的提高。在目前已商业化的 NMR 谱仪中,对于气流控制一般都是采用 PID 算法。PID 控制是最早发展起来的控制策略之一。由于其算法简单、鲁棒性好和可靠性高,被广泛应用于工业过程控制,至今仍有 90% 左右的控制回路具有 PID 结构^[3],尤其适用于可建立精确数学模型的确定性系统。然而实际控制过程往往具有非线性和时变不确定性,且其控制算法是在某一特定条件下整定完成的,因此当系统运行环境发生变化时,一组 PID 参数很难适应不同的工作条件,往往不能达到理想的设计性能^[4]。NMR 谱仪的气路环境有一定的非线性,使用常规 PID 不能达到很好的控制效果。而模糊控制不依赖于被控系统的精确数学模型,是在总结操作经验基础上实现自动控制的技术手段。将模糊控制方法引入 PID 控制器,利用模糊规则在线调整 PID 参数,完善 PID 控制器的自适应性,该控制器对环境有很强的适应能力,能够使系统获得更高的控制精度和动态特性^[5,6],可以有效解决原系统调节速度慢且经常无法调节到位的情况。

2 实验部分

2.1 样品旋转控制系统

在 NMR 谱仪的样品管道中,共有 4 路出气口,其中 3 路是纵向气流,分别是弹出(Eject),托起(Bearing)在变温(Variable temperature, VT);另一路是侧向气流,旋转(Rotation)。气流大小决定于各自电子阀门的开度,而电子阀门的开度由微控制器通过控制输出电流的大小进行调节。

2010-07-25 收稿;2010-12-06 接受

本文系国家科技支撑计划(No. 2006BAK03A22)和国家博士后基金(No. 20090460750)资助

* E-mail: hfliu@xmu.edu.cn

如图 1 所示,待测样品在 NMR 谱仪腔体中的旋转,由两路气流驱动,即 Bearing 和 Rotation。Bearing 将样品转子托离底座,减少与底座的摩擦; Rotation 则用于向样品侧面吹气,使样品旋转起来。实验发现,固定 Rotation 气流输出、调节 Bearing 气流大小,能达到较好的控制效果。当增大 Bearing 气流时,转子与底座摩擦减小,转速加快;减小 Bearing 气流,转子与底座摩擦加大,转速变慢。转速传感器实时测量并输出样品转速,微控制器读取样品转速,采用模糊自适应 PID 算法,调节 Rotation 和 Bearing 两路气流的大小,实现对样品转速的控制。

2.2 气控系统的组成及功能实现

NMR 谱仪气控系统的旋转控制原理框图见图 2。系统由微控制器 (Micro controller unit, MCU)、数模转换器 (Digital-to-analog converter, DAC)、电压-电流 (Voltage-to-current, V/I) 转换器、电子阀门、被测样品以及转速传感器等组成的一个闭环控制回路。其中 DAC 输出电压范围为 0~5 V, V/I 的电流输出为 0~190 mA。控制过程如下: PC

机经 LAN 接口向 MCU 发送样品转速目标值,MCU 根据该目标值,经计算得出相应的 Bearing 和 Rotation 初值,向 DAC 发送指令, DAC 输出相应的电压大小,经由 V/I 转换装置转换成电流信号,调节 Bearing 和 Rotation 电子阀门的开度,以控制 Bearing 和 Rotation 的气流大小,从而改变样品转速。光电转速传感器输出样品转速,微控制器收到样品转速后,传递给模糊自适应 PID 控制算法,计算出 DAC 的修正值,如此不断反复,最后使样品转速稳定下来。

3 结果与讨论

3.1 模糊自适应 PID 控制器总体设计

被控对象可视为一个惯性系统,给定 DAC 输出,即对被控对象输入一个阶跃信号,可测得系统的阶跃响应。系统阶跃响应如图 3 所示,曲线从开始上升到稳定需要经过约 120 s 的时间,说明系统具有较大惯性,即系统的响应落后于系统输入。因此需要一个合适的算法优化系统性能,缩短上升时间。样品的转速决定于与底面的摩擦,由于摩擦力系统带有非线性,难以得出准确的数学模型^[7]。而 PID 是一种线性控制,应用在非线性系统中并不能达到最佳的控制效果。由于模糊控制器的简易性和快速性,将模糊控制策略引入 PID 控制器中,构成模糊 PID 复合控制,是改善控制器动态性能的一种途径^[5]。

本研究将模糊控制思想引入到 PID 控制中,对 PID 的 3 个参数进行在线整定,将线性控制变为非线性控制,使系统具有更好的适应性。PID 的 3 个参数 K_p 、 K_i 和 K_d 分别对应比例、积分和微分 3 个环节:比例环节即实时成比例地反映控制系统的偏差 $e(t)$,偏差一旦产生,控制器立即产生控制作用,以减少偏差;积分环节主要用于消除静差,提高系统的精确度;积分作用的强弱取决于积分时间,积分时间越长,积分作用越弱,反之则越强;微分环节能反映偏差信号的变化趋势(变化速率),并能在偏差信号变得太大之前,在系统中引入一个有效的早期修正信号,从而加快系统的动作速度,减小调节时间^[8]。

模糊自适应 PID 控制器以偏差 e 和偏差变化率 e_c 作为输入,可以满足不同时刻偏差 e 和偏差变化

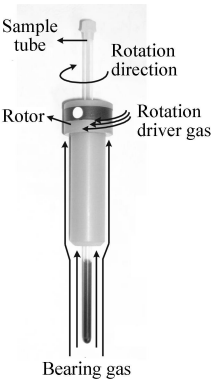


图 1 样品旋转驱动示意图
Fig. 1 Diagram of sample tube spin driver

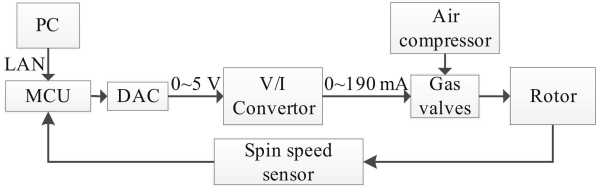


图 2 谱仪气控系统旋转控制部分的组成框图
Fig. 2 Block diagram of sample tube spin control system

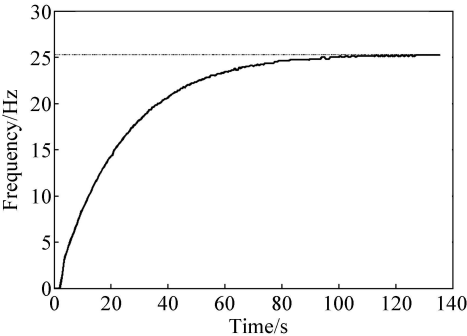


图 3 系统阶跃响应
Fig. 3 Step response of pneumatics system

率 e_c 对PID参数自整定的要求。利用模糊理论在线对PID参数进行校正,便构成了模糊自适应PID控制器,如图4所示^[5,9]。

PID参数自整定的设计思想是先找出PID的3个参数与偏差 e 和偏差变化率 e_c 之间的模糊关系,在工作中通过不断检测 e 和 e_c ,将其模糊化后得到 $|E|$ 和 $|EC|$,根据制定好的模糊规则进行模糊推理,最后将所得模糊量进行解模糊,即可得到 K_p , K_i 和 K_d 。如此反复,以满足在不同状态下控制器参数的不同要求,而使被控对象有良好的动态性能,其中, K_p , K_i 和 K_d 可表示为式(1)^[10]。

$$\begin{cases} K_p = F_1(e, e_c) \\ K_i = F_2(e, e_c) \\ K_d = F_3(e, e_c) \end{cases} \quad (1)$$

式中, $F(\cdot)$ 表示模糊运算。整个模糊自适应PID控制器可用式(2)表示^[9]:

$$\begin{aligned} u(k) &= K_p e(k) + K_i \sum_{j=0}^k e(j) + K_d [e(k) - e(k-1)] \\ &= F_1(e, e_c) e(k) + F_2(e, e_c) \sum_{j=0}^k e(j) + F_3(e, e_c) [e(k) - e(k-1)] \end{aligned} \quad (2)$$

从式(2)可以看出,在误差较大的响应阶段,为使系统具有良好的快速跟踪性能,应取较大的 K_p 、较小的 K_d , K_i 可以取0;在误差较小阶段,为了使超调量减少并保证一定的响应速度,应取较小的 K_i , K_p ;在误差很小的调整阶段,为了使系统具有良好的稳态性能,应取较大的 K_p , K_i 。

3.2 隶属度函数的确定

采用的模糊控制器是二输入三输出的形式,它以偏差 e 和偏差变化率 e_c 的绝对值作为输入, K_p , K_i 和 K_d 为输出。输入输出语言变量均采用的论域为 $\{0, +1, +2, +3, +4, +5, +6\}$,输出语模糊子集为 $\{Z, S, M, B\}$,分别代表零、小、中、大,如图5,隶属度函数主要采用对称三角形式^[5,11],输入参数越靠近零,隶属度函数区间越小,操作越精细。

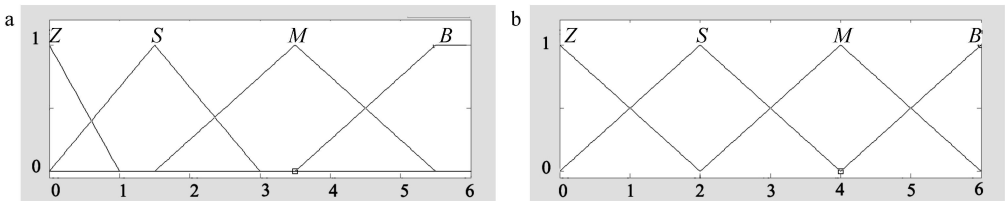


图5 语言变量 e, e_c (a)和 K_p, K_i 和 K_d (b)的隶属度函数

Fig. 5 Input variable membership functions e, e_c (a) and K_p, K_i, K_d (b) used in fuzzy controller

对于模糊控制器而言, e 和 e_c 都是精确输入量,设有输入量 x ,其实际变化范围为 $[0, e_{\max}]$ 。首先将它们映射到模糊语言变量的论域中,将 $[0, e_{\max}]$ 区间的精确量转换为 $[0, +6]$ 区间的变化量 y ,其变换式如式(3)所示。

$$y = 6x / e_{\max} \quad (3)$$

其中, $6 / e_{\max}$ 称为量化因子,计算得到 y 值后,找出 y 元素上最大隶属度对应的语言值所决定的模糊集合,该模糊集合便代表了精确量 x 的模糊化。

3.3 模糊规则

模糊控制设计的核心是总结工程设计人员的技术知识和实际操作经验,建立合适的模糊规则,得到针对 K_p , K_i 和 K_d 分别整定的模糊规则表(表1)^[12~14]。

由模糊规则得出的结果是一个模糊量,而PID算法并不能直接接收模糊量,因此需要将模糊量转化为一个精确量^[15],这里采用加权平均法进行解模糊:

表 1 K_p, K_i, K_d 自适应模糊 PID 控制规则
Table 1 Rule of self tuning fuzzy PID for K_p, K_i and K_d

K_p	e_c				K_i	e_c				K_d	e_c			
	Z	S	M	B		Z	S	M	B		Z	S	M	B
e	Z	B	B	M	M	Z	B	B	B	B	Z	M	B	B
	S	B	M	M	S	S	B	B	M	S	S	M	M	B
	M	M	M	S	S	M	Z	Z	Z	Z	M	Z	S	M
	B	B	B	M	M	B	Z	Z	Z	Z	B	Z	Z	Z

$$x_0 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i u_i(x_i)}{\sum_{i=1}^n u_i(x_i)}$$

(4)

式中, x_i 为输出模糊集合 U 中的各元素, $u_i(x_i)$ 为与其对应的隶属度, x_0 平均值便是应用加权平均法为模糊集合求得的判决结果。

3.4 性能测试

图 6 为常规 PID 算法和模糊自适应 PID 算法在目标值设定为 18 Hz 时系统的响应曲线。观察常规 PID 算法的情况, 曲线从上升到稳定的过程中出现了过冲, 稳定时间约为 70 s, 且稳定后有抖动的现象。采用模糊自适应 PID 算法的情况, 可以看到曲线震荡消失。样品从静止加速到 18 Hz 经历一个过程到稳定的过程, 其稳定时间小于 40 s, 转速控制误差的峰值为 0.2 Hz, 均方差约为 0.08 Hz。

从转速分辨率看, 新气控系统提供了 0.1 Hz 有效位, 而原系统的转速只提供 1 Hz 读数有效位。

在谱学中, 分辨率是一项非常重要的指标。分辨率表示仪器能分辨两条靠得最近的谱线的距离, 其值应等于谱线的半高宽。旋转样品是提高分辨率的一个措施。利用气控系统使探头中的样品管绕 Z 轴旋转, 平均掉沿旋转平面上的磁场梯度, 能够有效降低采样所得的半高宽^[16]。使用实验样品 0.01% 四甲基硅烷, 0.1% 乙基苯, 99.89% 氘代氯仿对所研制的系统进行测试, 在旋转频率设定为 20 Hz 的情况下, 本实验设计的气控系统, 采样所得的半高宽平均值为 1.27 Hz, 信噪比为 2293, 对比 Varian 气控系统采样所得的半高宽平均值为 1.40 Hz, 信噪比 2245, 可以发现新系统的性能参数优于 Varian 原有气控系统。

实验结果表明, 本系统采用模糊自适应 PID 算法, 结合了常规 PID 易于实现和模糊控制自适应能力及鲁棒性强等优点, 使 PID 控制器具备了在线参数整定的功能, 对于非线性的控制对象, 有更好的动态性能。与 Varian 现用转速控制系统控制结果相比, 新研制的气控系统有以下优势: 速度稳定时间较短; 每次均能调速成功, 无稳态误差; 提高了转速分辨率和转速控制精度。

文献[17]提到的 H_∞ 最优控制理论, 能够对那些难以得出精确数学模型, 并且存在一定范围的参数不确定性和非线性的被控对象提供更好的鲁棒性和更强的抗干扰能力^[17,18], 而 NMR 气路和气控对象正好存在上述情况。因此在 NMR 谱仪气控系统中应用 H_∞ 最优控制理论, 应该可以使系统性能进一步优化和改善。

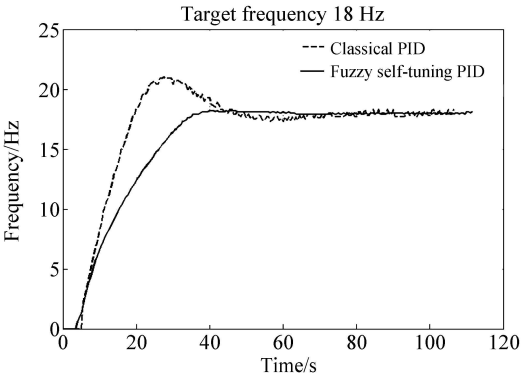


图 6 常规 PID 算法和模糊自适应 PID 算法控制效果对比
Fig.6 Contrast between classical PID algorithm and fuzzy self tuning PID algorithm

References

1 Mehring K. *High Resolution NMR Spectroscopy in Solids M.* Berlin: Springer Press, 1983: 1~2
2 Richter W, Warren W S. *Concepts Magn Reson*, 2000, 12(6): 396~409
3 Aström K J, Häggglund T. *Control Engineering Practice*, 2001, 9(11): 1163~1175

©1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

- 4 ZHEN Shun, YAO Jiar Jun, YUE Dong-Hai(振顺,姚建均,岳东海). *Journal of Harbin Institute of Technology* (哈尔滨工业大学学报), **2004**, 36(11): 1578~ 1580
- 5 ZENG Guang-Qi, HU Jun-An, WANG Dong(曾光奇,胡均安,王东). *Fuzzy Control Theory and Engineering application* (模糊控制理论与工程应用). Huazhong University of Science & Technology Press(华中科技大学出版社), **2006**
- 6 LIU Jir Kun(刘金琨). *Advanced PID Control and MATLAB Simulation* (先进PID控制及其MATLAB仿真). Beijing(北京): Publishing House of Electronics Industry(电子工业出版社). **2002**: 419~ 430
- 7 YANG Shi Wen, ZHENG Mu Qiao(杨世文,郑慕侨). *Journal of System Simulation* (系统仿真学报), **2002**, 14(10): 1365~ 1368
- 8 Chen K Y, Tung P C, Tsai M T. *Expert Systems with Applications*, **2009**, 36: 8560~ 8570
- 9 Mohan B M, Sinha A. *Applied Soft Computing*, **2008**, 8: 749~ 758
- 10 ZAN Peng, YAN Guo Zheng(咎鹏,颜国正). *Chinese Journal of Scientific Instrument* (仪器仪表学报), **2007**, 28(9): 1544~ 1547
- 11 Cho H J, Cho K B, Wang B H. *Fuzzy Sets and System*, **1997**, 92: 305~ 316
- 12 Zhao C S, Zhu S J, He Q W. *Journal of the Oretical And Applied Mechanics*, **2007**, 45(1): 171~ 177
- 13 Zulfatmanl, Rahmat M F. *International Journal On Smart Sensing And Intelligent Systems*, **2009**, 2(2): 246~ 261
- 14 Imann G K, Hu B G. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, **1999**, 29(3): 371~ 388
- 15 YAN Jia De, PAN Hai Peng(严家德,潘海鹏). *Chinese Journal of Scientific Instrument* (仪器仪表学报), **2006**, 27(6): 1878~ 1880
- 16 GAO Hai Bin, ZHANG Zhen Fang(高汉宾,张振芳). *Nuclear Magnetic Resonance* (核磁共振原理与实验方法), Wuhan University Press(武汉大学出版社). **2008**: 26~ 27
- 17 DONG Zhi Ming, XU Xin Qi, ZHOU Wang-Ping(董志明,徐欣圻,周旺平). *Control and Automation Publication Group* (微计算机信息), **2008**, 24(71): 19~ 21
- 18 XIE Xiang Peng, ZHANG Hua Guang(解相朋,张化光). *Journal of Northeastern University* (东北大学学报), **2009**, 30(2): 158~ 161

Implementation of Fuzzy Self-tuning Proportional Integral Derivative Controller on Sample-tube Spin Control System in Nuclear Magnetic Resonance Spectrometer

LIN Chao Li^{1,2}, LIU Hong-Fei^{*1}, SUN Hui-Jun¹, ZHENG Zhen-Yao¹, CHEN Zhong¹

¹(Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005)

²(Department of Communication Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract In commercial nuclear magnetic resonance (NMR) spectrometer, a PID controller is generally used to regulate the rotation of samples. There are some faults such as long adjustment time, steady-state error because of the nonlinear character of the object. To improve system performance, a new pneumatic controller system was proposed by using self-tuning fuzzy proportional-integral-derivative (PID) controller to replace the original pneumatic system based on PID. The adjustment time of proposed controller is about 30 s shorter than that of Varian. The result of the experiment under the same environment shows that the half-height width after applying the proposed controller is 1.272 better than 1.396 of Varian and S/N is 2293.114 better than 2245.48 of Varian. The experiment result shows that the proposed controller is robust, quicker response and has great value for application and research.

Keywords Nuclear magnetic resonance spectrometer; Pneumatic system; Fuzzy proportional-integral-derivative controller; Spin; Self-tuning

(Received 25 July 2010; accepted 6 December 2010)