



УДК 539.107

**С. В. Молчанов, Г. В. Мозжухин, И. Г. Мершиев
Г. С. Курприянова**

**ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ
ВЕЙВЛЕТ-ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ ЯКР
МОДИФИЦИРОВАННЫМИ БАЗИСНЫМИ ФУНКЦИЯМИ МОРЛЕ**

Показано, что применение модифицированной функции Морле в качестве базисной функции вейвлет-преобразования позволяет добиться увеличения разрешения нестационарных сигналов ЯКР, существенной локализации отдельных компонент многокомпонентного сигнала. Применение предложенной методики дает возможность повысить не только достоверность обнаружения сигнала ЯКР, но и точность определения спектральных параметров сильно зашумленных сигналов.

In this work it is shown that application of the modified function of Morle as basic function of wavelet-transformation has allowed a to achieve by a choice of optimum parameter increase in the permission of the non-stationary signals of magnetic resonance, essential localization separate a component of a multicomponent signal and to raise the accuracy of definition of spectral parameters strongly noisy signals.

Ключевые слова: ядерный квадрупольный резонанс, вейвлет-анализ.

Key words: nuclear quadrupole resonance, wavelet analysis.

Введение

Одним из известных применений метода ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) является детектирование азотосодержащих веществ [1; 2], находящихся вне приемно-передающей катушки и на некотором расстоянии от нее. При этом негативное влияние на условия детектирования оказывают неоднородности радиочастотного поля в месте расположения образца, нерезонансные эффекты в случае температурных сдвигов частоты ЯКР, фазовые искажения, накапливающиеся ошибки в циклических последовательностях и шумы различной природы [2; 3]. Эти факторы ухудшают достоверность определения полезного сигнала и как следствие — определение резонансных частот вещества, являющихся «паспортом» химического соединения.

Основным методом наблюдения сигналов ЯКР при проведении дистанционных экспериментов выступают различные многоимпульсные последовательности [4], такие как серия Карра, ее разновидность — последовательность сильных нерезонансных импульсов (SORC), а также последовательность с альтернированием фаз импульсов. При этом достигается сокращении времени регистрации за счет накопления сигналов в окнах наблюдения многоимпульсных последовательностей. Однако вследствие суперпозиции сигналов эхо и индукции возникает хо-



рошо известный эффект биений суммарного сигнала в окне наблюдения, зависящий от частоты расстройки от резонансной частоты ЯКР [5]. В результате такого эффекта возрастает вероятность ошибки в определении спектральных линий, особенно в случае мультиплетных сигналов. Возникновение повторяющихся сигнала эхо в подобной серии становится следствием неидеальности импульсов, неоднородности радиочастотного поля и нерезонансных эффектов. Возможным выходом из положения может быть использование последовательности спин-локинг эхо (SLSE). В идеальном случае в окнах наблюдения многоимпульсной последовательности регистрируются многократные сигналы эхо. Однако из-за неидеальности 90° -ного импульса в последовательности в окне наблюдения можно зарегистрировать суперпозицию нескольких сигналов, которые возбуждаются в разные моменты времени. Известная последовательность с альтернирующими импульсами PAPS [6], в которой периодически фазы радиочастотных импульсов изменяются на 180° в серии одинаковых импульсов, представляет собой эффективный метод устранения эффектов, связанных с набегом фазы. Однако эти методы не затрагивают эффекты, вызванные интерференцией возбуждаемых сигналов. Один из возможных методов компенсации нерезонансных эффектов и неоднородности возбуждающего радиочастотного поля для порошков и монокристаллов — применение композиционных импульсов. Однако результат их действия сильно зависит от точности определения оптимальных параметров последовательности. Помимо подбора оптимальной последовательности, широкое распространение получили различные методы математической обработки данных. Применение непрерывного вейвлет-преобразования позволяет эффективно анализировать многокомпонентные сигналы ЯКР, в том числе интерференционные сигналы многоимпульсных последовательностей [7]. При этом осуществляется фильтрация сигналов ЯКР, которая позволяет успешно выделять интересующие компоненты интерференционных сигналов на фоне переходных процессов и помех. Необходимо отметить, что эффективность применения вейвлет-анализа во многом зависит от выбора базисных функций.

В данной работе с целью повышения точности определения спектральных линий при высоком уровне помех и достоверности детектирования представлен новый метод обработки сложных нестационарных сигналов, основанный на вейвлет-анализе. В предлагаемом методе используется основное преимущество вейвлет-преобразования, которое заключается в возможности наблюдать поведение процесса сигнала сразу в двух областях — временной и частотной.

Метод непрерывного вейвлет-анализа

Вейвлет-анализ — это непараметрический метод исследования сигнала, основанный на оконном преобразовании Фурье, где вместо гармоник $\exp\{int\}$ фурье-анализа используется система базисных вейвлет-функций [8]: $\psi_{a,b}(t) = \psi((b-t)/a)$, где a и b параметры, определяющие масштаб и смещение функции. Таким образом, вейвлет-преобразование



имеет переменное разрешение по времени — смещение b и частоте — масштаб a , причем разрешающая способность анализа во временной области возрастает с ростом частоты [8].

Для анализа комбинационных сигналов ЯКР $x(t)$ использовалось непрерывное вейвлет-преобразование, при этом коэффициенты разложения, которые представляли собой функцию двух переменных a, b , вычислялись по формуле:

$$W(b, a) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \psi((b-t)/a) dt$$

Выбор базисного вейвлета определяется той информацией, которую необходимо извлечь из анализируемого сигнала. При анализе многокомпонентного сигнала ЯКР необходимо оценить значение частоты расстройки Δf и динамику поведения сигнала во времени. Предварительные исследования показали, что использование в качестве базисной функции вейвлета Морле вида

$$\psi(t) = \exp(-t^2/2) \cos(5\omega t)$$

позволяет добиться лучшей локализации и оценить значение частот многокомпонентного сигнала с меньшей ошибкой [1; 7]. Известно, что в случае сильно зашумленного сигнала эффективность вейвлет-анализа и процедура очищения сигнала от шума зависят от оценки значений коэффициентов разложения по вейвлет-базису при условии минимизации ошибки определения частоты.

Зависимость коэффициентов вейвлет-разложения от параметра a модифицированной базисной функции Морле

Нами было проведено исследование поведения вейвлет-коэффициентов при вейвлет-преобразовании сигнала ЯКР, при этом в качестве базисной функции использовалась базовая функция Морле [9], но не в классической, а в модифицированной форме [10]:

$$\psi(t, a) = \exp\{-x^2/a^2\} \cos(2\pi ft).$$

Введенный здесь параметр a влияет на полосу пропускания вейвлета в частотной области и на величину коэффициентов вейвлет-разложения, что оказывает влияние на результат частотного масштабирования при непрерывном вейвлет-преобразовании и эквивалентно процедуре многополосной фильтрации [11].

При оптимизации параметра модифицированной базисной функции было проведено исследование зависимости вейвлет-коэффициентов от частотных свойств функции. С этой целью выполнено непрерывное вейвлет-преобразование сигнала ЯКР, представляющего собой смесь двух сигналов, разнесенных во времени и заданного в виде модельного ряда [7]:

$$x_k(t_k, t) = Q \exp\left(-\frac{t-t_k}{T_2^*}\right) \exp\left(-\frac{t_k}{T_2}\right);$$

$$Q = \sin(Dw(t_k)) \exp\left(-\frac{t_k}{T_2^*}\right) + \sin(Dw(t-t_k)).$$



Найдены коэффициенты вейвлет-разложения, и исследована зависимость максимальных коэффициентов от параметра a . Результаты проведенного анализа, выполненного в среде Matlab, представлены на рисунках 1, 2 и показывают зависимость частотной локализации базисной функции от параметра a . Найдены коэффициенты вейвлет-разложения, и исследована зависимость максимальных коэффициентов от параметра a . Дополнительно рассчитана скалограмма – локальная оценка спектра энергии, рассчитанная по формуле

$$S(a_i, b_j) = |W(a_i, b_j)|^2.$$

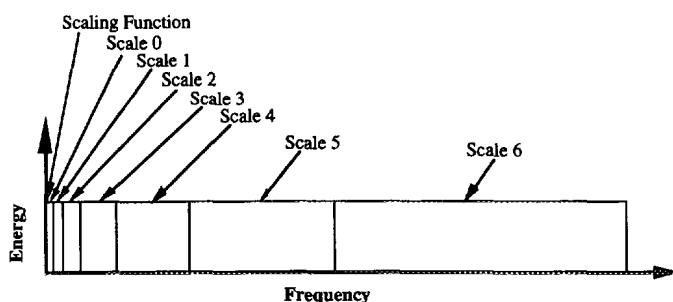


Рис. 1. Схема распределения частотных полос, занятых сигналом ЯКР каждого масштаба (Scale 0–6) при вейвлет преобразовании

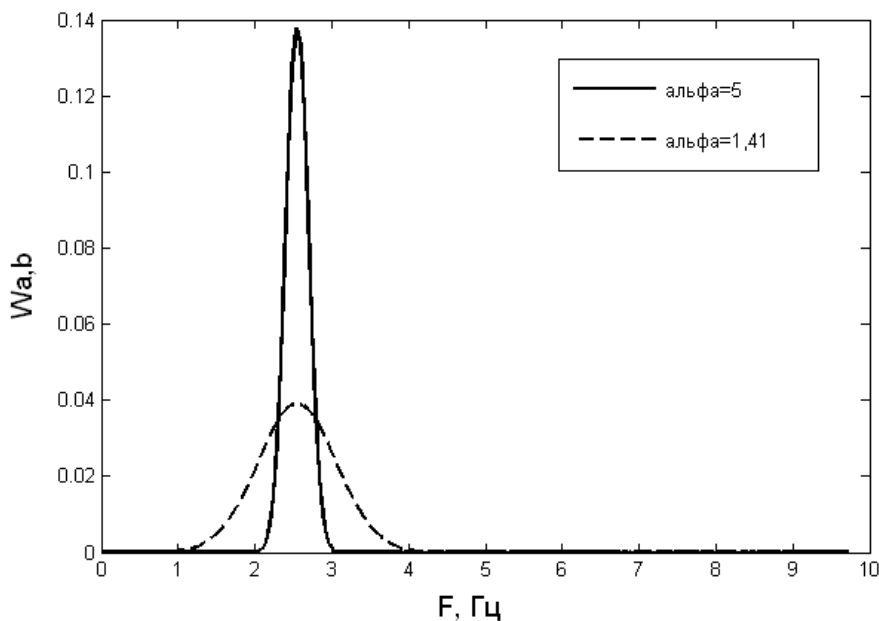
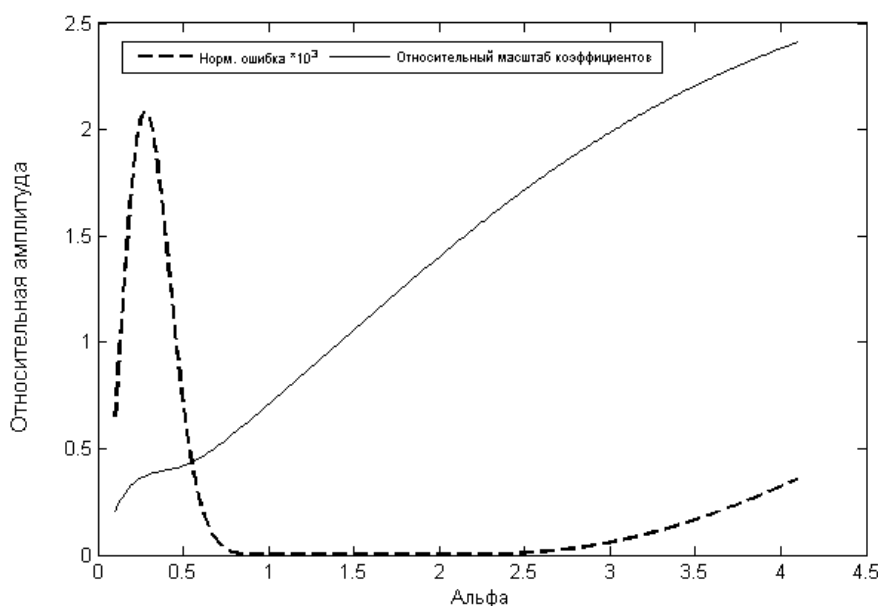


Рис. 2. Амплитудно-частотные характеристики полосовых фильтров вейвлет-преобразования с базисной функцией Морле при больших и малых значениях a



Найденная зависимость коэффициентов вейвлет-разложения $W(a, b_i)$ от параметра a имеет нелинейный характер, так как при увеличении параметра a улучшается частотная локализация вейвлета, но ухудшается ортогональность, что приводит к появлению боковых лепестков на частотной характеристике полосового фильтра. Эта особенность устраняется расширением области определения базовой функции. Так как варьирование параметра a равносильно варьированию коэффициента усиления полосового фильтра, применяемого при вейвлет-разложению, появляется возможность повысить чувствительность метода за счет выбора оптимального параметра a (рис. 2, 3).



73

Рис. 3. Зависимость величины коэффициентов W_{max} от параметра a модифицированной функции Морле при вейвлет-разложении интерференционного сигнала ЯКР относительно коэффициентов вейвлет-разложения с традиционным значением параметра a (прямая линия). Прерывистой линией показана среднеквадратичная ошибка преобразования в масштабе 1000:1

Исследование эффективности применения модифицированной базисной функции Морле было проведено при регистрации сигналов ЯКР от 100 г образца NaNO_2 , имеющих низкое отношение сигнал/шум (рис. 4).

Вейвлет-анализ позволил наблюдать развитие сигнала во времени и в областях сосредоточения энергии, выделить область звона и область интерферирующих полезных сигналов (рис. 5). Подбором параметра a выбиралась частотная область фильтрации, и за счет этого удалось повысить разрешение перекрывающихся сигналов. Из рисунка 6 видно, что с помощью вейвлет-преобразования с использованием модифици-



рованной функции Морле при увеличении значения a на 30 % удалось разрешить две составляющие реального сигнала (переходной процесс — «звон» и сигнал ССЭ с расстройкой 0,25 кГц) в низкочастотной области наблюдения, тогда как преобразование Фурье осталось нечувствительным.

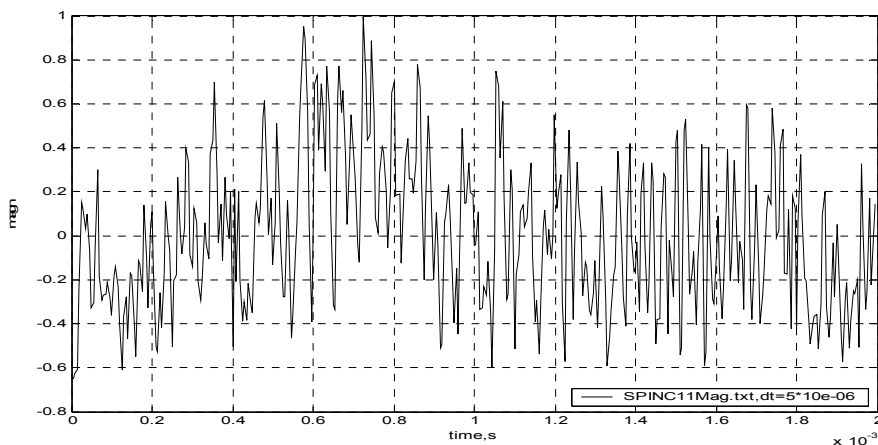


Рис. 4. Сигнал спинового эха ЯКР ^{14}N от образца NaNO_2 с низкой концентрацией с расстройкой 0,25 кГц

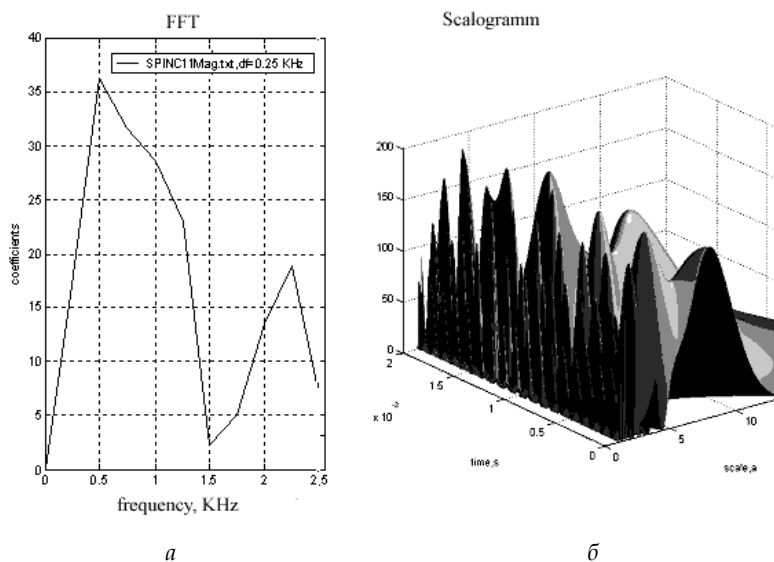


Рис. 5. Фурье-образ (а), вейвлет-скалограмма (б) от сигнала спинового эха ЯКР ^{14}N , образца NaNO_2 с расстройкой 0,25 кГц

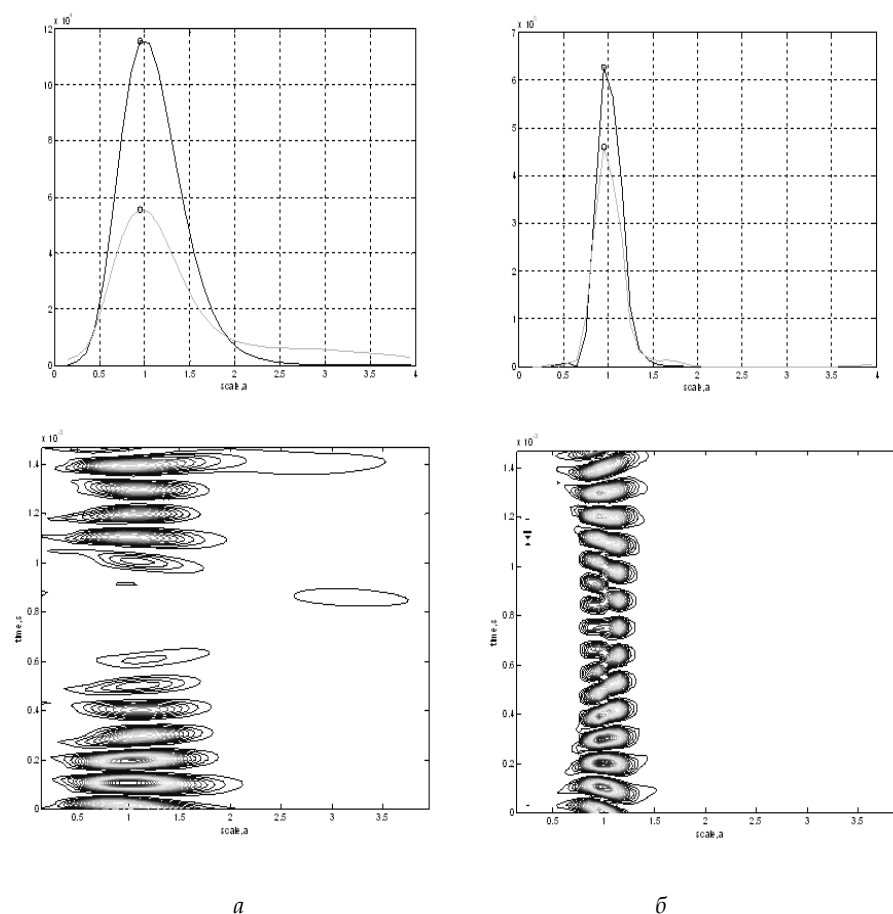


Рис. 6. Локализация сигнала спинового эха ЯКР ^{14}N от образца NaNO_2 с расстройкой 0,25 кГц после вейвлет-преобразования при использовании модифицированной базисной функции Морле в зависимости от параметра a : a – $a = 0,0001$, $c/\text{ш} = 1,5$; b – $a = 0,0005$; $c/\text{ш} = 1,5$

Вывод

Применение модифицированной функции Морле в качестве базисной функции вейвлет-преобразования позволило путем выбора оптимального параметра a добиться увеличения разрешения нестационарных сигналов ЯКР, существенной локализации отдельных компонент многокомпонентного сигнала. Применение предложенной методики даст возможность повысить не только достоверность обнаружения сигнала ЯКР, но и точность определения спектральных параметров сильно зашумленных сигналов.

Работа была частично финансирована по ГК 02.740.11.050.



Список литературы

1. *Mozzhukhin G. V., Molchanov S. V., Kupriyanova G. S. et al.* The Detection of Industrial Explosives by the Quadrupole Resonance Method. Some Aspects of the Detection of Ammonium Nitrate and Trinitrotoluene // NATO Science for Peace and Security Series. Subseries: NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics. Fraissard, Jacques; Lapina, Olga (Eds.) Springer, 2009. P. 231 – 244.
2. *Miller J.B., Barrall G.A.* Explosives Detection with Nuclear Quadrupole Resonance // *American Scientist*. 2005. V.93. P. 50–57.
3. *Мозжухин Г.В., Куприянова Г.С., Бодня А.В. и др.* Детектирование сигналов импульсного ядерного квадрупольного резонанса в условиях сильных помех // *Вестник Российского государственного университета им. Канта*. 2007. Вып. 3. С. 54–59.
4. *Klainer S.M., Hirschfeld T.V., Marino R.A.* // *Fourier, Hadamard and Hilbert Transforms in Chemistry* (Marshall A.G., ed.). N. Y., 1982. P. 147–181.
5. *Mozjoukhine G.V.* The Frequency Offset Effects of NQR of Spin $I = 1$ for Remote Detection // *Z. Naturforsch.* 2002. Vol. 57a. P. 297–303.
6. *Osokin D.Ya.* *Journal of Mol. Structure*. 1982. N 83. P. 243–252.
7. *Мозжухин Г.В., Молчанов С.В., Васильева А.Е.* Применение вейвлет-преобразования для ЯКР // *Вестник Российского государственного университета им. И. Канта*. 2006. Вып. 4. С. 38–45
8. *Дьяконов В.П.* Вейвлеты. От теории к практике. М., 2002.
9. *Lang M., Guo H., Odegard J.E. et al.* Noise reduction using an undecimated discrete wavelet transform // *IEEE Signal Processing Letters*. 1996. Vol. 3. P. 10–12.
10. *Hsuen-ChyunShyu, Yuh-Sien Sun.* Construction of a Morlet Wavelet Power Spectrum // *Multidimensional Systems and Signal Processing*. Vol. 13, N 1. P. 101–111.
11. *Weaver J.B., Healy D.J.* Signal-to-noise ratios and effective repetition times for wavelet encoding with wavelet packet bases // *Journal of Magnetic Resonance*. 1995. Vol. 113. P. 1–10.

Об авторах

Сергей Васильевич Молчанов – ст. преп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта.

Георгий Владимирович Мозжухин – канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта.

Иван Терентьевич Мершиев – асп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта.

Галина Сергеевна Куприянова – д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта.

Authors

Sergey Molchanov, senior lecturer, I. Kant Baltic Federal University.

Georgy Mozjukhin, Ph. D., I. Kant Baltic Federal University.

Ivan Mershiev, postgraduate student, I. Kant Baltic Federal University.

Galina Kupriyanova, prof., I. Kant Baltic Federal University.