

АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ СОСТАВНОГО СИГНАЛА ЯМР МЕТОДОМ МАКСИМАЛЬНОГО ПРАВДОПОДОБИЯ

Коротей Е.В., ст. преподаватель кафедры телекоммуникаций ФГАОУ ВПО «БФУ им. И. Канта», г. Калининград, тел. 8(911)458-43-20, e-mail: eugeny_korotey@mail.ru;

Волхонская Е.В., профессор кафедры телекоммуникаций ФГАОУ ВПО «БФУ им. И. Канта», г. Калининград, тел. 8(906)233-53-19, e-mail: volkhonskaya_e@mail.ru;

Пахотин В.А., профессор кафедры радиофизики и защиты информации ФГАОУ ВПО «БФУ им. И. Канта», г. Калининград, тел. 8(909)781-89-75, e-mail: VPakhotin@kantiana.ru;

Власова К.В., доцент кафедры радиофизики и защиты информации ФГАОУ ВПО «БФУ им. И. Канта», г. Калининград, тел. 8(911)-487-53-65, e-mail: p_ksenia@mail.ru;

Строков В.И., аспирант кафедры радиофизики и защиты информации ФГАОУ ВПО «БФУ им. И. Канта», г. Калининград, тел. 8(952)-056-66-33, e-mail: kot_ucheny@gmail.ru.

NMR COMPOUND SIGNAL PARAMETERS EVALUATION BY MAXIMUM LIKELIHOOD METHOD

Korotey E. V., Volkhonskaya E. V., Pakhotin V. A., Vlasova K. V., Strokov V. I.

NMR and NQR compound signal parameters evaluation on the basis of maximum likelihood method are presented in this work. On the basis of expressions for Rao-Kramer dispersions of amplitudes the method dynamic range for compound signal components coefficient of mutual correlation is determined. The results of maximum likelihood method approbation on experimentally received H NMR spectrum of chloride / geksanola/0,2 M (NaCl) and Cl NQR of a paradikhlorbenzol and N NQR spectrum of an urotorpin are presented.

Key words: NMR, NQR, maximum likelihood method, parameters of signal, evaluation, dispersions of amplitudes, Rao-Kramer.

Ключевые слова: ЯМР, ЯКР, метод максимального правдоподобия, оценка параметров, дисперсия Рао-Крамера.

Введение

Интенсивное развитие науки и техники в различных их областях приводит к созданию новых материалов с различными механическими, электрическими, магнитными и прочими свойствами. Структура таких материалов, как правило, настолько сложна, что требуется одновременное применение нескольких методов исследования, наиболее распространенными из которых являются методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). Полная информация о структуре и внутренней динамике отдельных молекул и их частей содержится в спектре сигналов, представляющих собой отклик системы на радиочастотное воздействие. Однако сложный состав и структура молекул приводят к аналогичному усложнению спектра. Поэтому их анализ требует применения цифровых способов обработки. Традиционно при обработке спектров ЯМР и ЯКР применяется метод Фурье-спектроскопии, а также способы коррекции сигнала (аподизация, фазировка и пр.). Однако такой подход не позволяет получить достаточно точную оценку всех параметров отдельных спектральных линий в спектре макромолекул. Поэтому необходимо развитие новых методов обработки сигналов, позволяющих решить задачу повышения разрешающей способности спектрометров ЯМР.

Авторам представляется перспективным применение

Изложены основы метода максимального правдоподобия применительно к оценке параметров составных сигналов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). На основе выражений для дисперсий амплитуд Рао-Крамера определены границы динамического диапазона метода по значению коэффициента взаимной корреляции компонент составного сигнала. Представлены результаты апробации метода на экспериментально полученных спектрах ЯМР на ядрах дейтерия цетилпиридиний хлорид/ гексанол/ 0,2 М (NaCl) и ЯКР на ядрах хлора парадихлорбензола и на ядрах азота уроторпина.

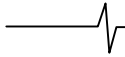
в качестве такого метода максимального правдоподобия [1, 2], который широко используется при обработке радиосигналов в таких областях радиотехники, как радиолокация [3], радиосвязь [4] и пр.

Теоретические основы алгоритма обработки сигналов

Алгоритм обработки радиосигналов на основе данного метода начинается с записи математической модели сигнала на входе приемника. В случае обработки сигнала ЯМР (или ЯКР) данная математическая модель описывается выражением вида:

$$y(t) = \left\{ U_{01} e^{-\alpha_1 t} \cos\left(\omega_{01} t - \frac{\pi}{2} + \varphi_{01}\right) + U_{02} e^{-\alpha_2 t} \cos\left(\omega_{02} t - \frac{\pi}{2} + \varphi_{02}\right) \right\} + u_{ш}(t), \quad (1)$$

где U_{01} , U_{02} – амплитуды двух сигналов с лоренцевой формой спектральной линии; ω_{01} , ω_{02} – угловые частоты



ты двух сигналов; $\varphi_{01}, \varphi_{02}$ – начальные фазы двух сигналов; α_1, α_2 – значения коэффициентов затухания (полуширины спектральных линий), $u_{ш}(t)$ – аддитивный белый гауссов шум с нулевым математическим ожиданием, дисперсией σ^2 и временем корреляции τ_k .

На основе модели (1) записывается логарифм функции правдоподобия [1], определяющий условную плотность распределения параметров двух сигналов ЯМР:

$$\ln(L(\vec{\lambda}')) = -\frac{1}{2\sigma^2\tau_k} \times \int_0^\infty \left| y(t) - \{U'_{01}e^{-\alpha_1 t} \sin(\omega'_{01}t + \varphi'_{01}) - U'_{02}e^{-\alpha_2 t} \sin(\omega'_{02}t + \varphi'_{02})\} \right|^2 dt, \quad (2)$$

где $\vec{\lambda}' = \{U'_{01}, U'_{02}, \omega'_{01}, \omega'_{02}, \varphi'_{01}, \varphi'_{02}, \alpha'_1, \alpha'_2\}$ – вектор оценочных параметров сигнала.

Дифференцируя (2) по оценочным параметрам и приравнявая производные к нулю, можно получить систему уравнений правдоподобия, решения которых позволяют перейти к функционалу правдоподобия, зависящему от значительно меньшего числа оценочных параметров. Данная процедура значительно упрощается, если перейти к представлению модельного сигнала в виде суперпозиции двух узкополосных процессов. Тогда модель сигнала принимает вид:

$$y(t) = \{e^{-\alpha_1 t} [A_1 \cos(\omega_{01}t) - B_1 \sin(\omega_{01}t)] + e^{-\alpha_2 t} [A_2 \cos(\omega_{02}t) - B_2 \sin(\omega_{02}t)]\} + u_{ш}(t), \quad (3)$$

где введены квадратурные составляющие комплексных огибающих отдельных спектральных компонент вида $A_1 = U_{01} \sin(\varphi_{01}), B_1 = -U_{01} \cos(\varphi_{01}), A_2 = U_{02} \sin(\varphi_{02})$ и $B_2 = -U_{02} \cos(\varphi_{02})$, а логарифм функции правдоподобия определяется выражением вида:

$$\ln(L(\vec{\lambda}')) = -\frac{1}{2\sigma^2\tau_k} \times \int_0^\infty \left| y(t) - e^{-\alpha_1 t} [A'_1 \cos(\omega'_{01}t) - B'_1 \sin(\omega'_{01}t)] - e^{-\alpha_2 t} [A'_2 \cos(\omega'_{02}t) - B'_2 \sin(\omega'_{02}t)] \right|^2 dt. \quad (4)$$

Система уравнений правдоподобия для исключения квадратурных составляющих при этом примет вид матричного уравнения:

$$\beta \times (A'_1 \ B'_1 \ A'_2 \ B'_2)^T = \gamma \quad (5)$$

где матричные элементы матрицы β и вектор-столбца γ равны

$$\beta_{11} = \int_0^\infty e^{-2\alpha_1 t} \cos^2(\omega'_{01}t) dt, \\ \beta_{22} = -\int_0^\infty e^{-2\alpha_1 t} \sin^2(\omega'_{01}t) dt, \\ \beta_{33} = \int_0^\infty e^{-2\alpha_2 t} \cos^2(\omega'_{02}t) dt,$$

$$\beta_{44} = -\int_0^\infty e^{-2\alpha_2 t} \sin^2(\omega'_{02}t) dt, \\ \beta_{12} = -\beta_{21} = -\int_0^\infty e^{-2\alpha_1 t} \sin(\omega'_{01}t) \cos(\omega'_{01}t) dt, \\ \beta_{13} = \beta_{31} = \int_0^\infty e^{-(\alpha'_1 + \alpha'_2)t} \cos(\omega'_{01}t) \cos(\omega'_{02}t) dt, \\ \beta_{14} = -\beta_{41} = -\int_0^\infty e^{-(\alpha'_1 + \alpha'_2)t} \cos(\omega'_{01}t) \sin(\omega'_{02}t) dt, \\ \beta_{23} = -\beta_{32} = \int_0^\infty e^{-(\alpha'_1 + \alpha'_2)t} \sin(\omega'_{01}t) \cos(\omega'_{02}t) dt, \\ \beta_{24} = \beta_{42} = -\int_0^\infty e^{-(\alpha'_1 + \alpha'_2)t} \sin(\omega'_{01}t) \sin(\omega'_{02}t) dt, \\ \beta_{34} = -\beta_{43} = -\int_0^\infty e^{-2\alpha'_2 t} \sin(\omega'_{02}t) \cos(\omega'_{02}t) dt, \\ \gamma_1 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_1 t} \cos(\omega'_{01}t) dt, \\ \gamma_2 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_1 t} \sin(\omega'_{01}t) dt, \\ \gamma_3 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_2 t} \cos(\omega'_{02}t) dt, \\ \gamma_4 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_2 t} \sin(\omega'_{02}t) dt, \\ \gamma_1 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_1 t} \cos(\omega'_{01}t) dt, \\ \gamma_2 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_1 t} \sin(\omega'_{01}t) dt, \\ \gamma_3 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_2 t} \cos(\omega'_{02}t) dt, \\ \gamma_4 = \int_0^\infty y(t) e^{-\alpha_2 t} \sin(\omega'_{02}t) dt.$$

Решая систему уравнений правдоподобия (5) относительно квадратурных составляющих $\{A'_1, B'_1, A'_2, B'_2\}$ нетрудно получить зависимости оценок амплитуд и начальных фаз от оставшихся параметров $\{\omega'_{01}, \omega'_{02}, \alpha'_1, \alpha'_2\}$ в виде:

$$U'_{01} = \sqrt{A'^2_1 + B'^2_1}, \varphi'_{01} = \arctg 2(A'_1, -B'_1), \\ U'_{02} = \sqrt{A'^2_2 + B'^2_2}, \varphi'_{02} = \arctg 2(A'_2, -B'_2).$$

Исследуя полученный таким образом функционал на минимум путем варьирования оставшихся неизвестных параметров, можно определить глобальный минимум его поверхности, а, значит, определить значения оцениваемых параметров двух сигналов, которые наиболее близки к истинным значениям. Минимум поверхности функционала напрямую зависит от дисперсии шума в реализации сигнала на входе приемника.

Рабочую область метода максимального правдоподобия можно оценить, используя выражения для дис-

персии амплитуд Рао-Крамера. Для этого определяются элементы информационной матрицы Фишера в соответствии с выражением:

$$J_{ij} = -M \left(\frac{\partial^2 \ln(L(\vec{\lambda}))}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right), \quad i, j = 1, 2, \quad (7)$$

где $M()$ – оператор вычисления математического ожидания, которые для данного вида сигнала принимают вид:

$$J_{11} = \frac{1}{\sigma^2 \tau_k} \int_0^\infty e^{-2\alpha_1 t} \sin^2(\omega_{01} t + \varphi_{01}) dt = \frac{E_1}{U_{01}^2 \sigma^2 \tau_k}, \quad (8)$$

$$J_{22} = \frac{1}{\sigma^2 \tau_k} \int_0^\infty e^{-2\alpha_2 t} \sin^2(\omega_{02} t + \varphi_{02}) dt = \frac{E_2}{U_{02}^2 \sigma^2 \tau_k},$$

$$J_{12} = J_{21} = \frac{1}{\sigma^2 \tau_k} \int_0^\infty e^{-(\alpha_1 + \alpha_2)t} \sin(\omega_{01} t + \varphi_{01}) \sin(\omega_{02} t + \varphi_{02}) dt =$$

$$= \frac{\sqrt{E_1 E_2} r}{U_{01} U_{02} \sigma^2 \tau_k},$$

где E_1, E_2 – энергии первой и второй компонент составного сигнала ЯМР (ЯКР), а r – коэффициент корреляции между ними.

Диагональные элементы матрицы, обратной к матрице Фишера, определяют дисперсии оценок параметров сигналов:

$$D_{U_{01}} = \frac{4\sigma^2 \alpha_1 \tau_k}{1-r^2}, \quad D_{U_{02}} = \frac{4\sigma^2 \alpha_2 \tau_k}{1-r^2}. \quad (9)$$

Данное выражение определяет рабочий диапазон метода максимального правдоподобия. Зависимость (9) слабо изменяется в пределах от $r=0$ до $r=0,9$. Следовательно, эти пределы можно считать рабочей областью метода максимального правдоподобия в приложении к сигналам ЯМР и ЯКР, то есть метод дает адекватные значения оценок параметров сигнала, как в области ортогональности сигналов, когда их коэффициент корреляции равен нулю, так и в области их неортогональности, когда коэффициент корреляции отличен от нуля.

Обработка экспериментальных спектров

В соответствии с данным алгоритмом разработан программный код, позволяющий работать, как с модельным сигналом ЯМР (ЯКР) с задаваемыми параметрами, так и проводить обработку экспериментально полученных сигналов или их спектров на базе спектрометров ЯМР.

Проведенные предварительные модельные исследования показали, что удовлетворительные оценки параметров двух сигналов можно получить в диапазоне отношений сигнал/шум свыше 10 дБ при разности резонансных частот свыше 0,4 кГц, в то время как классический анализ на основе спектрального метода позволяет получить удовлетворительные оценки при отношении сигнал/шум свыше 15 дБ и при разности частот свыше 2,5 кГц. Динамический диапазон при оценке параметров двух сигналов методом максимального правдоподобия определяется диапазоном отношений амплитуд от 0,05 до 20, а для метода спектрального анализа – от 0,2 до 5. Таким образом, по своим возможностям метод максимального правдоподобия существенно эффективнее, чем метод спектрального анализа и может быть использован

при исследовании сигналов с повышенным разрешением.

На следующих рисунках представлены результаты обработки экспериментально полученных сигналов. На рис. 1 представлен спектр сигнала ЯКР на ядрах азота уротропина (гексаметилентетрамина $C_6H_{12}N_4$). Данный спектр является составным и содержит две неразрешенные близкие по частоте спектральные линии от ядер азота ^{14}N , а также спектральные линии гармонических помех. Анализ экспериментальных данных, полученных другими авторами [5], указывает на отсутствие в спектре второй спектральной линии. При обработке данного спектра методом максимального правдоподобия удается разрешить по частоте данные линии с оценками параметров, приведенными на рис. 1.

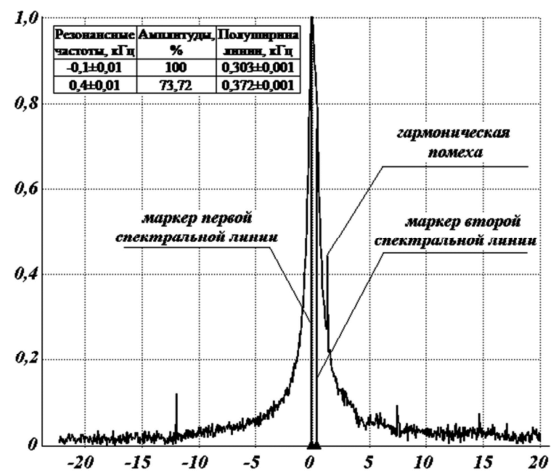


Рис. 1. Спектр ЯКР сигнала на ядрах азота уротропина и результаты его обработки: по оси абсцисс отложен частотный сдвиг относительно частоты радиочастотного воздействия на образец

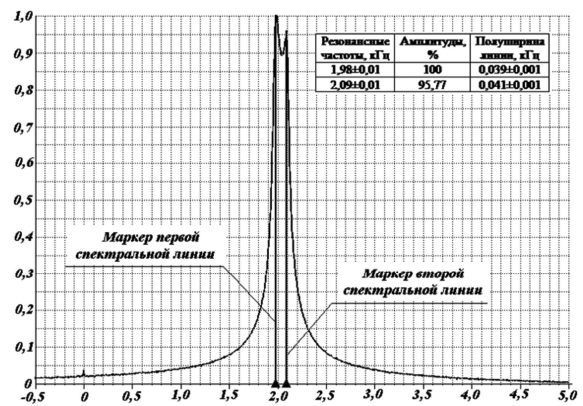


Рис. 2. Спектр ЯМР сигнала на ядрах дейтерия цетилпиридиний хлорид/ гексанола / 0,2 М (NaCl), записанный через 16,8 с после поворота образца на 90° относительно направления магнитного поля и результаты его обработки: по оси абсцисс отложен частотный сдвиг относительно частоты радиочастотного воздействия на образец

На рис. 2 и 3 представлены результаты обработки спектров ЯМР на ядрах дейтерия 2H цетилпиридиний хлорид/ гексанола/ 0,2 М (NaCl), записанные после поворота образца на угол 90° относительно направления магнитного поля в различные моменты времени. Динамика молекул вещества приводит к сближению или отдалению спектральных линий и изменению их ширины.

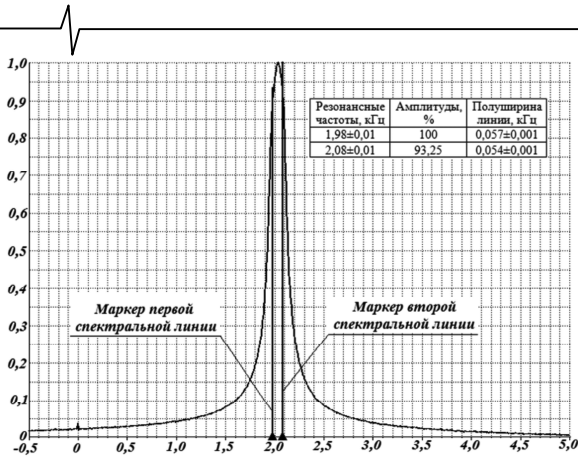


Рис. 3. Спектр ЯМР сигнала на ядрах дейтерия цетилпиридиний хлорид / гексанола / 0,2 М (NaCl), записанный через 33,6 с после поворота образца на 90° относительно направления магнитного поля и результаты его обработки: по оси абсцисс отложен частотный сдвиг относительно частоты радиочастотного воздействия на образец

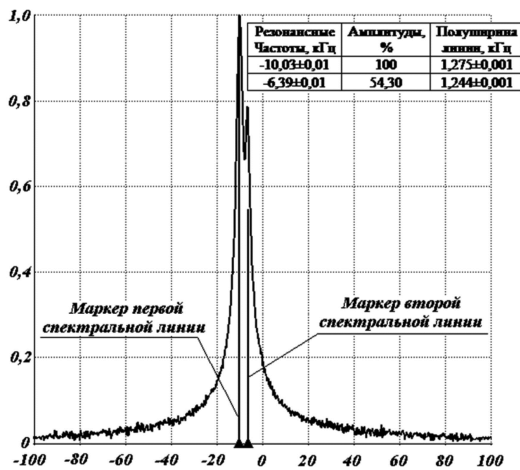


Рис. 4. Спектр ЯКР сигнала на ядрах хлора парадихлорбензола и результаты его обработки: по оси абсцисс отложен частотный сдвиг относительно частоты радиочастотного воздействия на образец

На рис. 4 приведены аналогичные результаты обработки спектров ЯКР на ядрах хлора ^{35}Cl парадихлорбензола ($\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$).

Заключение

Таким образом, полученные результаты подтверждают результаты модельных исследований программного кода: предложенный алгоритм обработки составного сигнала ЯМР на основе метода максимального правдоподобия, реализованный в виде программного кода, действительно обладает повышенной разрешающей способностью по сравнению с классическими методами обработки сигналов и позволяет получать адекватные оценки параметров составного сигнала ЯМР (ЯКР).

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере. Контракт № 12516р/23919 «Разработка нового подхода в обработке радиочастотных откликов в рамках теории оптимального приема для структурного анализа новых перспективных материалов».

Литература

1. Перов А.И. Статистическая теория радиотехнических систем: учебное пособие для вузов. – М.: Радиотехника, 2003. – 400 с.
2. Теоретические основы оптимальной обработки сигналов / Пахотин В.А., Бессонов В.А., Молостова С.В., Власова К.В. – Калининград: Изд-во РГУ им. И. Канта, 2008. – 186 с.
3. П.А. Радиолокационные системы. Учебник для вузов. – М.: Радиотехника, 2004 – 320 с.
4. Тихонов В.И. Оптимальный прием сигналов. – М.: Радио и связь, 1983. – 320 с.
5. Бирюков И.П., Воронков М.Г., Сафин И.А. Таблицы частот ядерного квадрупольного резонанса. – Ленинград: Изд. «Химия», 1968. – 140 с.

НАУЧНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ:

Обработка и передача информации в системах телекоммуникаций

Секция 1: Теория сигналов и систем

Одним из основных объектов исследования теории сигналов традиционно являются методы анализа-синтеза, модуляции-демодуляции, кодирования-декодирования сигналов с целью обеспечения высокой помехоустойчивости и скорости передачи информации в условиях воздействия интенсивных помех и межсимвольной интерференции. Возможности современных цифровых технологий позволяют решать эти задачи особенно эффективно, прибегая к оптимальным методам синтеза, преобразования и кодирования сигналов.

На секции обсуждались следующие актуальные научные проблемы:

- формирование системы признаков одномерного сигнала;
- разработка нестационарной модели случайных полей;
- оценивание спектра двумерного сигнала;
- оценивание типа сигнального созвездия;
- повышение энергетической эффективности сигналов с частотным откликом;
- формирование и прием SEFDM сигналов;
- декодирование произведения кодов Рида-Соломона;
- повышение эффективности многопорогового декодера;
- исследование дистанционных и корреляционных свойств криптографической кодовой структуры «КВАДРАТ»;
- разработка функциональных узлов для реализации универсальных, адаптивных, структурно-защищенных радиосистем передачи информации;
- выделение низкочастотных мод;
- выделение периодических компонент в многомерных точечных процессах;
- оптимизация параметров кодов по критерию минимальных энергетических затрат;
- перспективы использования технологий DATA MINING для изучения сложных сигналов и систем.