

Невзоров А.А., Орлов А.А., Станкевич Д. А.

## **Использование машинного обучения для обнаружения и определения мультиплетности сигналов ядерного квадрупольного резонанса с априорно неизвестными параметрами в сильном аддитивном шуме**

### **Abstract**

Анализ ЯМР- и ЯКР- сигналов традиционно проводят с помощью классических спектральных методов, которые, имеют ряд недостатков, связанных с необходимостью усреднений большого числа реализаций сигналов для достижения высокого спектрального разрешения. Мы предлагаем использовать нейросетевой подход для обнаружения и определения мультиплетности сигналов ЯКР при малом отношении сигнал/шум и априорной неопределенности параметров сигнала. Для обнаружения и различения сигналов ЯКР различных взрывчатых веществ используется широкополосный цифровой фильтр и двухслойная сверточная сеть, при малом КСШ (-30 дБ) точность распознавания оказалась на 20% выше, чем у спектрального метода. Также нейронная сеть способна детектировать ЯКР сигнал тринитротолуола с точность до 80% при КСШ -55 дБ, что превосходит точность детектирования стандартными методами в условиях априорной неопределенности параметров сигнала. Несмотря на то, что нейронные сети редко позиционируются как быстродействующие системы, полученные нами результаты показали, что для задач различения и обнаружения нейронные сети затрачивают гораздо меньше времени по сравнению с классическими методами, так как могут работать в сильных шумах, а значит не требуют многократного усреднения сигнала и могут быть применимы в компактных низкочастотных спектрометрах.

### **Highlights**

- Разработаны, исследованы и оптимизированы искусственные нейронные сети для обнаружения и определения мультиплетности сигнала ЯКР
- Исследования эффективности работы созданных нейронных сетей показали, что они быстрее и точнее большинства методов по обнаружению и классификации сигналов ЯКР взрывчатых веществ в сильных шумах

## Introduction

Задачи детектирования и определения мультиплетности сигналов возникают в разных областях науки от сейсмологии до спектроскопии химических соединений. Когда все параметры принимаемых сигналов известны, применяются оптимальные методы приема, основанные на использовании согласованной фильтрации [1]. В случае, когда параметры детектируемых и различаемых сигналов неизвестны, используются различные методы в зависимости от модели сигнала, такие как энергетический прием [2], использование множества согласованных фильтров [3], адаптивная узкополосная фильтрация [4] и различные методы квазиправдоподобных оценок [5].

Детектирование и определение мультиплетности сигналов ЯМР и ЯКР позволяет обнаруживать и классифицировать вещества в исследуемых образцах [11]. Как правило, для анализа таких сигналов используются спектральные методы, однако их использование в сильно зашумленных сигналах сложной формы невозможно. Поэтому в спектроскопии ЯМР и ЯКР используют многократное усреднение сигналов и узкополосную фильтрацию, это позволяет значительно увеличить КСШ и использовать методы спектрального анализа. Однако, есть ряд случаев, при которых многократное усреднение сигналов невозможно из-за малого времени измерения [12], а использование адаптивной фильтрации затрудняется априорной неопределенностью параметров сигналов [13]. Один из примеров такой ситуации – экспресс обнаружение и определение взрывчатых или других опасных веществ [14–15]. Задача определения мультиплетности сигнала ЯМР или ЯКР спектральными методами плохо решается иногда и в отсутствие сильных шумов [16]. Также спектральные методы часто не позволяют разрешать очень близкие спектральные линии, даже в сильных магнитных полях [17], и имеют низкую чувствительность из-за сложной формы сигнала спада свободной индукции [18].

В последнее время на фоне роста популярности методов машинного обучения для задач приема и обработки сильно зашумленных сигналов стали часто использоваться нейронные сети. В ряде работ по детектированию [6–7] и классификации сложных сигналов на фоне шумов [8–9] показано, что использование методов машинного обучения может увеличить эффективность и быстродействие системы распознавания и различения сигналов. Это связано с тем, что нейронная сеть, обучаемая по датасету, состоящему из множества примеров сигналов и шумов, где заранее известен тип сигнала, решает задачу оптимизации только один раз пусть и для очень большого количества параметров [10]. А после обучения вычисление ответа нейронной сетью не требует решения задач оптимизации и потому выполняется очень быстро.

В статье мы предлагаем применить методы машинного обучения для детектирования и определения мультиплетности сигналов используемых в приборах на основе ядерного магнитного и ядерного квадрупольного резонанса (ЯМР и ЯКР).

### Модель

Рассмотрим задачу обнаружения и различения дискретизированных затухающих квазигармонических сигналов с априорно неизвестными параметрами на фоне аддитивного нормального шума. В качестве моделей различаемых сигналов используем сигнал спада свободной индукции мультиплетностью  $K$  с аддитивным нормальным шумом  $\xi$ :

$$y[n] = x_K[n] + \xi[n] = \sum_{k=0}^{K-1} A_k \sin(\omega_k n + \varphi_k) \exp(-\gamma_k n) + \xi[n],$$

Здесь  $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ ,  $N$  – количество отсчетов сигнала,  $0 < \omega_k < \pi$  – безразмерная циклическая частота,  $\gamma_k > 0$  – коэффициент затухания,  $\varphi_k$  – начальная фаза,  $A_k$  – амплитуда сигнала. Циклические частоты  $\omega_k$  в случае  $K > 1$  выбирались с одинаковой отстройкой частоты  $\pm \Delta\omega/2$  от центральной частоты  $\omega_0$ .

В такой формулировке задача сводится к классификации сигнала по количеству гармоник, причем при  $K = 1$  задача превращается в задачу детектирования детерминированного сигнала. Для решения поставленной задачи будем использовать искусственную нейронную сеть, на вход которой будет подаваться сигнал с  $K$  гармониками, а сигналы с выходов сети указывают вероятность того, что входной сигнал мультиплетностью  $K$ .

Для обучения нейронной сети необходимо обучающее множество  $D$  содержащее различаемые сигналы на фоне шумов с произвольными параметрами, причем у каждого сигнала мультиплетность  $K$  должна быть заранее известна и доступна при обучении. Обучаясь на обучающем множестве, нейросеть решает задачу минимизации функции потерь.

Для задач детектирования и классификации чаще всего используются 2 вида слоев нейронных сетей полносвязные и сверточные [10]. Эксперименты показали, что полносвязные сети обучаются значительно дольше и работают гораздо менее точно. В итоге использовалась простая сверточная архитектура нейронной сети (см. таблицу 1).

Таблица 1 – Архитектура нейронной сети

	Layer		
	1	2	3
Type	Convolution	Convolution	Full
Neurons	30	10	4
Kernel, size×stride	10×1	10×1	–
Max pooling, size×stride	5×5	5×5	–
Activation	ReLU	ReLU	Softmax

Обучающий датасет состоит из 6000 тысяч сигналов с произвольным нормальным шумом, дисперсия  $\sigma^2$  которого выбиралась случайно в диапазоне 0 – 1,5. Параметры сигналов в обучающем множестве равномерно распределены в диапазонах, приведенных в таблице 2. Каждый сигнал в датасете состоит из  $N = 2000$  отсчетов и для каждого сигнала создается метка  $[1, 0, 0, 0]$  – если там только шум,  $[0, 1, 0, 0]$  – если на фоне шума есть детерминированный сигнал с одной гармоникой,  $[0, 0, 1, 0]$  – две гармоники,  $[0, 0, 0, 1]$  – три гармоники.

Обучающий датасет разделен на две части: 3000 сигналов используются в качестве обучающей выборки и 3000 – в качестве тестовой, по которой рассчитывается вероятность правильного ответа в процессе обучения сети.

Таблица 2 – Диапазоны изменений параметров сигнала и шума в обучающем датасете

Signal Parameter	Range
A	0,5 – 1,5
$\omega_0$	0,2 – 0,5
$\Delta\omega$	0.05 – 0.1
$\Phi$	0 – $2\pi$
$\Gamma$	0,004 – 0,005

## Result and discussion

Исследовалось детектирование ЯКР сигнала TNT в полосе частот от 800 до 900 кГц в условиях, когда температура исследуемого образца неизвестна. Такой сигнал содержит 6

гармоник, частоты которых являются априори неизвестными. Один из используемых в таком случае методов детектирования сигнала – метод с множеством согласованных фильтров, параметры которых равномерно распределены в диапазонах неопределенности параметров сигналов. Для детектирования использовался модельный сигнал образца TNT, температура которого находится в интервале от  $-30$  до  $50$  градусов Цельсия. При этом частота дискретизации  $10$  МГц, а длительность сигнала –  $1$  мс. Оказалось что в диапазоне КСШ от  $-50$  до  $-60$  дБ точность детектирования сигнала нейронной сетью выше примерно на  $20\%$ , чем точность метода использующего до двухста согласованных фильтров. Во всем остальном диапазоне КСШ точность работы нейронной сети практически совпадает с точностью работы классических методов некогерентного приема сигналов с неизвестными параметрами. При этом время детектирования сигнала нейронной сетью –  $0,1$  мс, а время детектирования такого же сигнала с использованием согласованных фильтров –  $20$  мс.

Результат различения сигналов с разной мультиплетностью нейронной сетью сравнивался со спектральным методом, наиболее часто используемым в задачах ЯМР и ЯКР спектроскопии. Спектральный метод основан на поиске максимумов энергии спектра, и по количеству этих максимумов оценивается мультиплетность сигнала. При сравнении методов использовался модельный сигнал с частотой дискретизации  $10$  МГц, длительность  $0,4$  мс, а диапазон неопределенности частот  $800-900$  кГц. Такие параметры сигналов выбраны из-за того, что целый ряд взрывчатых веществ имеет разную мультиплетность в выбранном диапазоне частот. Исследования показали, что в диапазоне КСШ от  $-20$  до  $-40$  дБ, точность определения мультиплетности сигнала нейронной сетью выше в среднем на  $15\%$ , чем у спектрального метода при практически одинаковом времени работы около  $0,2$  мс.

## **Conclusions**

Проведенные исследования показывают эффективность использования нейронных сетей при различении и детектировании сигналов с априорно неизвестными параметрами в сильном аддитивном шуме. Нейросетевой метод детектирования оказался эффективнее и быстрее наиболее часто применяемых методов обнаружения сигналов с априорно неизвестными параметрами. Метод определения мультиплетности с помощью методов машинного обучения значительно более точен, чем спектральный метод. Очевидно, что исследованные методы можно обобщить для любых моделей сигналов и применить,

например, в радиолокации или задачах передачи информации сверхширокополосными импульсами.

#### Литература

1. J.M. Wozencraft and I.M. Jacobs. "Principles of Communication Engineering". Wiley, New York, 1965.
2. 802.15.4a-2007. IEEE Standard for Information Technology — Telecommunications and Information Exchange Between systems — Local and metropolitan area networks — specific requirement. Part 15.4: Wireless Medium Access Control (MAC) and Physical Layer (PHY) Specifications for Low-Rate Wireless Personal Area Networks (WPANs). N.Y.: IEEE, 2007. [ieeexplore.ieee.org/servlet/opac?punumber=4299494](http://ieeexplore.ieee.org/servlet/opac?punumber=4299494).
3. Eric Beaucé, William B. Frank, Alexey Romanenko; Fast Matched Filter (FMF): An Efficient Seismic Matched - Filter Search for Both CPU and GPU Architectures. *Seismological Research Letters*; 89 (1): 165–172.
4. Oleksandra HOTRA, Andriy SAMILA, Leonid POLITANSKY, Synthesis of the configuration structure of digital receiver of NQR radiospectrometer, *Przeglad Elektrotechniczny* 1(7):60-63 • July 2018
5. A. P. Trifonov, A. V. Kharin, Quasilikelihood Estimate of the Number of Radio Signals with Unknown Amplitudes and Phases, *Radiophysics and Quantum Electronics*, July 2017, Volume 60, Issue 2, pp 159–170
6. Weihang S. et. al. Detection of extremely weak NQR signals using stochastic resonance and neural network theories // *Signal Processing*, 2018, vol. 142, pp. 96 – 103
7. Gabbard H., Williams M., Hayes F., Messenger C., Matching matched filtering with deep networks for gravitational-wave astronomy // *Physical Review Letters*, 2017, vol. 120, pp. 1 – 6
8. Amato F., López A., Artificial neural networks in medical diagnosis // *Journal of Applied Biomedicine*, 2013, vol. 11, pp. 47 – 58
9. N.K. Ibrahim, R.S.A. Raja Abdullah and M.I. Saripan, Artificial Neural Network Approach in Radar Target Classification, *Journal of Computer Science* 5 (1): 23-32, 2009
10. Simon Haykin, *Neural Networks and Learning Machines*, Third Edition, Pearson Education, 2009, p. 906.
11. Pople, J.A.; Bernstein, H. J.; Schneider, W. G. (1957). "The Analysis of Nuclear Magnetic Resonance Spectra". *Can J. Chem.* 35: 65–81. мож чет новее?

12. S. Ionita and G. Iana, "NQR detector: HW solutions and constructive issues," 2017 9th International Conference on Electronics, Computers and Artificial Intelligence (ECAI), Targoviste, 2017, pp. 1-8.
13. X. Shang, J. Lin, Y. Wang and Q. Duan, "Bandwidth auto-matching method for MRS signal," The 2010 IEEE International Conference on Information and Automation, Harbin, 2010, pp. 2269-2272.
14. Itozaki H., Ota G., Nuclear quadrupole resonance for explosive detection, International Journal on Smart Sensing and Intelligent Systems, 1 (2007), No. 3, 705-715
15. Gregorovic A., Apih T. TNT detection with  $^{14}\text{N}$  NQR: Multipulse sequences and matched filter // Journal of Magnetic Resonance, 198 (2009), 215—221
16. Cheshkov D.A., Sinitsyn D.O., Sheberstov K.F., Chertkov V.A. Total lineshape analysis of high-resolution NMR spectra powered by simulated annealing // Journal of Magnetic Resonance, 2016, vol. 272, pp. 10 – 19
17. Courtier-Murias D., Farooq H., Masoom H., Comprehensive multiphase NMR spectroscopy: Basic experimental approaches to differentiate phases in heterogeneous samples // Journal of Magnetic Resonance, 2012, vol. 217, pp. 61 – 76
18. Mulleti S. et al. Super-Resolved Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy // Nature: Scientific reports, 2017, vol. 7, Article number: 9651