

Оптимальная фильтрация в многоимпульсных последовательностях при ЯКР-детектировании

© Д.Я. Осокин,¹ Р.Р. Хуснутдинов,^{1,2,3} Г.В. Мозжухин,^{2,3} Б.З. Рамеев^{1,3}

¹ Казанский физико-технический институт,
420029 Казань, Россия

² Институт технологии Гебзе,
41400 Гебзе-Коджаели, Турция

³ Казанский государственный энергетический университет,
420066 Казань, Россия
e-mail: khrg@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 10 января 2012 г. В окончательной редакции 3 октября 2013 г.)

Изучены приложения многоимпульсных последовательностей в ядерном квадрупольном резонансе при детектировании взрывчатых и наркотических веществ. Рассмотрены различные способы увеличения отношения сигнал/шум. Обсуждены две модификации многоимпульсной последовательности с альтернирующими фазами (МПАФ): последовательность из 180° -ных импульсов с подготовительным импульсом и последовательность из 90° -ных импульсов. Проанализированы преимущества оптимальной (согласованной) фильтрации в случае когерентного стационарного состояния. Показано, что подобная методика позволяет эффективно отфильтровать высокочастотные и низкочастотные шумы, что дает дополнительные преимущества при ЯКР-детектировании. Наш анализ показывает, что многоимпульсная последовательность МПАФ с 180° -ными импульсами более эффективна с точки зрения оптимальной фильтрации стационарных сигналов.

Введение

В последнее время появилось большое количество публикаций по дистанционному обнаружению взрывчатых веществ и наркотиков методом ядерного квадрупольного резонанса (далее ЯКР) (см., например, [1,2]). Возрастающий интерес исследователей к этой проблеме объясняется необходимостью разработки эффективных средств борьбы с террористическими угрозами, число которых ощутимо увеличилось в связи с процессом глобализации современного мира. С другой стороны, стал доступен современный набор технических средств, что естественно привело к существенному прогрессу в электронных устройствах и аппаратуре ЯКР. Поэтому, разработка оптимальной методики обнаружения взрывчатых и наркотических веществ методом ЯКР на базе последних достижений в этой области и реализация ее на практике являются важными и актуальными задачами.

В настоящее время надежное дистанционное обнаружение возможно только для ограниченного числа соединений, представляющих интерес (например, гексоген). Другие соединения (например, TNT) имеют слабые сигналы ЯКР, и поэтому их детектирование требует дальнейшего повышения чувствительности оборудования. Одним из возможных подходов для повышения чувствительности является применение двухчастотного облучения образца, предложенное в работах [3–5], что позволяет получить сигнал спин-эха на третьем (необлучаемом) переходе. В этом случае можно увеличить чувствительность за счет уменьшения так называемого „мертвого“ времени (времени парализации) приемника и подавления сегнетоэлектрического звона образца. Од-

нако этот метод трудоемок в практической реализации из-за необходимости использования сложной системы трехчастотных катушек и управляющей электроники, а также нетривиального анализа трехчастотных сигналов.

Другая возможность увеличения отношения сигнал/шум заключается в применении специальных многоимпульсных последовательностей. Известно, что благодаря открытию когерентных стационарных состояний в многоимпульсном ЯКР стало возможным использование данной методики для дистанционного детектирования и разработки коммерческих устройств. В настоящей работе мы обсуждаем две модификации многоимпульсной последовательности с альтернирующими фазами (МПАФ): с 90° - и 180° -ными импульсами в серии. Показано, что в некоторых веществах возможно увеличение отношения сигнал/шум за счет последовательного объединения или комбинации этих модификаций МПАФ. Кроме того, наши теоретические и экспериментальные исследования показывают преимущества оптимальной фильтрации (подобной преобразованию Адамара) для обнаружения ЯКР в случае когерентных стационарных состояний, образованных многоимпульсными последовательностями. Действительно, современные технологии обработки сигнала привлекают особое внимание исследователей как еще один мощный инструмент для увеличения чувствительности ЯКР детектирования; ряд работ на эту тему был уже опубликован (см., например, [6–8]). В работе Грегоровича [9] предложен метод увеличения отношения сигнал/шум для успешного детектирования ЯКР сигнала TNT с использованием многоимпульсной последовательности типа спин-локинг эхо (МПСЛ). Этот метод включает как важнейшую

часть применение согласованного фильтра во временной области. Также было определено оптимальное время оцифровки сигнала на основании исследования корреляционной функции шумов. Использование последовательности МПСЛ в настоящей работе обусловлено исключительно особенностями ЯКР для ТНТ. Поэтому данный метод в исходном виде вряд ли может быть использован для других взрывчатых веществ. Китайские ученые [10] также предложили использовать согласованный фильтр для определения факта присутствия сигнала для другого взрывчатого вещества гексогена (RDX). В этом случае согласованный фильтр был дополнен процедурой обеления шума и определением порога детектирования. Распознавание на основе согласованного фильтра проводилось после предварительной обработки набора сигналов. В качестве последовательности рассматривалось использование одиночного сигнала индукции.

Таким образом, применение согласованного (оптимального) фильтра в ЯКР ограничено частными случаями. При этом также представляются недооцененными возможности использования согласованного фильтра для повышения отношения сигнал/шум при детектировании взрывчатых веществ в прямом методе ЯКР.

Задачей настоящей работы было рассмотрение метода оптимальной фильтрации для детектирования сигналов многоимпульсного ЯКР на основе последовательности с альтернирующими фазами.

1. Многоимпульсные последовательности

Известно, что открытие когерентных стационарных состояний в многоимпульсном ЯКР [11–15] послужило толчком для создания устройств дистанционного обнаружения сигналов ЯКР, так как в этом режиме поперечная намагниченность, не распадается так долго, насколько это необходимо для многократного накопления ЯКР сигналов. В результате можно повысить чувствительность этих приборов на два порядка. Рассмотрим ниже основные когерентные многоимпульсные последовательности.

В общем случае многоимпульсная последовательность состоит из подготовительного импульса и последующей серии импульсов, которая циклически повторяется определенное количество раз. Простейшая последовательность содержит один импульс и может быть обозначена как $\{\tau - \varphi(x) - \tau\}_n$, такая последовательность известна как многоимпульсный спин-локинг (МПСЛ) [11,16]. Одним из вариантов МПСЛ является последовательность сильных нерезонансных импульсов (SORC, strong off-resonance comb). Существует также многоимпульсная последовательность с альтернирующими фазами (МПАФ), обозначаемая как $\{\tau - \varphi(x) - 2\tau - \varphi(-x) - \tau\}_n$. Цикл МПАФ содержит два импульса, сдвинутых по фазе друг по отношению к другу на 180° . В принципе последователь-

ность МПСЛ является частным случаем этой последовательности. Отличие состоит в том, что 180° -ный сдвиг в МПСЛ осуществляется с помощью расстройки по частоте. Эта методика хорошо известна и широко исполняется в ЯМР для получения промежуточных фазовых сдвигов.

Имеется также редко используемая многоимпульсная последовательность WaHuHa, состоящая из четырехимпульсного цикла $\{\tau - \varphi(x) - \tau - \varphi(-y) - 2\tau - \varphi(y) - \tau - \varphi(-x) - \tau\}_n$ [16]. Могут быть сформированы также более сложные последовательности, но они не используются в практике ЯКР. Отметим, что первоначально все эти последовательности были предложены в ЯМР и их подробное описание приведено в монографии [17].

Теоретические и экспериментальные исследования стационарных состояний, созданных многоимпульсными последовательностями, опубликованы в ряде работ [11,14,16,18–21].

2. Комбинация ПАМС-последовательностей для увеличения сигналов

В разд. 2 мы хотели бы обсудить некоторые из наших предыдущих результатов [18] с точки зрения получения наилучших условий для обнаружения взрывчатых веществ. Экспериментальные кривые релаксации, наблюдаемые при применении последовательности [20], приведены на рис. 1, из которого видно что независимо от начального состояния спиновая система достигает стационарного состояния. Как показано на рис. 1, поперечная намагниченность спадает до нуля в случае

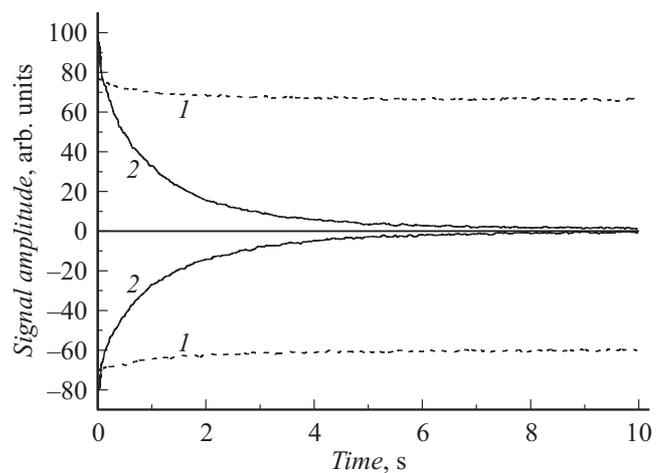


Рис. 1. Огибающая спин-эха N-14, полученная при использовании МПАФ при $T = 77$ К. Экспериментальные параметры: $\tau = 0.5$ с, 1 — $\varphi = 90^\circ$; 2 — $\varphi = 180^\circ$. Каждая линия получена при 1024 канальном накоплении и содержит 1000 экспериментальных точек. Интервал между импульсами в последовательности равен $2\tau = 1$ ms.

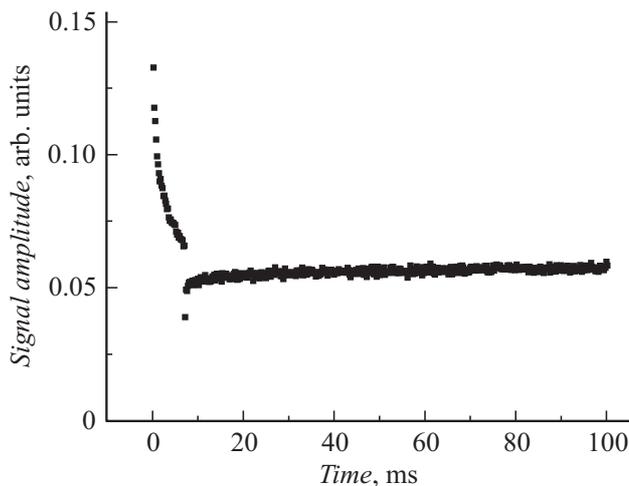


Рис. 2. Комбинация двух ПАМС последовательностей: первая часть 180° -ная многоимпульсная последовательность с подготовительным импульсом переключается во вторую — в 90° -ную многоимпульсную последовательность.

МПАФ с $\varphi = 180^\circ$ и примерно до половины максимального сигнала в случае МПАФ с $\varphi = 90^\circ$. Интересно сравнить многоимпульсные последовательности с подготовительным импульсом в стационарных режимах. Значение начальной поперечной намагниченности в случае 180° -ных импульсов в последовательности в 2 раза больше, чем в случае 90° -ных импульсов. Последовательность с 180° -ными импульсами спадает экспоненциально, поэтому амплитуда сигнала после n -кратного накопления равна $M = \sqrt{n} \exp(-nt_c/T_{2e})$. Здесь t_c — длительность одного цикла, обычно равная 2τ , T_{2e} — эффективное время релаксации (время релаксации во вращающейся системе координат). Следовательно, сигнал имеет максимум, когда число накоплений $n_{\max} = T_{2e}/2t_c$. Другими словами, накопление увеличивает сигнал в 180° -ной последовательности только в течение промежутка времени около $T_{2e}/2$. Очевидно, что будет выгодно скомбинировать эти две последовательности, т. е. вначале использовать 180° -ную импульсную последовательность с подготовительным импульсом и затем переключиться на 90° -ную многоимпульсную последовательность. Учитывая экспоненциальный спад намагниченности, динамическая намагниченность снизится до половины исходного значения за время около $0.7T_{2e}$. В этот момент времени необходимо переключиться на 90° -ную многоимпульсную последовательность. Данная методика, конечно, должна быть проверена экспериментально на каждом веществе. Для NaNO_2 нами проведен эксперимент, результаты которого представлены на рис. 2. Хотя имеется некий разрыв в момент переключения между двумя режимами, он не оказывает существенного влияния на накопление сигнала и ясно демонстрирует возможность применения данной методики.

3. Обработка сигналов и фильтрация шума в многоимпульсных режимах

В разд. 3 мы хотим кратко обсудить другой аспект повышения чувствительности — возможность уменьшения шума и увеличения отношения сигнал/шум в многоимпульсных последовательностях. В большинстве случаев полученные сигналы ЯКР имеют известную форму. Большинство работ по многоимпульсным последовательностям обсуждают главным образом многоимпульсную последовательность спин-локинг (МПСЛ). Эта последовательность требует частотного сдвига [15], который зависит от интервала между импульсами. Это означает отстройку частоты радиочастотного поля от частоты ЯКР-перехода, что дает переходные сигналы между импульсами в фазочувствительном детекторе. Колебания с отстройкой частоты (т. е. между частотой падающего РЧ-поля и частотой детектирования переменного сигнала) не позволяют усреднить высокочастотные шумы в интервале 2τ . Для МПАФ отсутствуют расстройки и колебания, поэтому методика с МПАФ позволяет усреднить высокочастотные шумы (у которых период повторения T_n меньше, чем 2τ). Более того, МПАФ дает сигналы, противоположные по фазе, что позволяет, вычитая верхние сигналы эха из нижних, избавиться от низкочастотных шумов (T_n больше, чем 2τ). Шумы на частоте сигнала ($\sim (1/4)\tau$ для RAMS) можно убрать накоплением сигнала. В этом случае интенсивность сигнала пропорциональна квадратному корню из числа накоплений.

Для удаленного детектирования азотосодержащих соединений с использованием МПАФ мы предлагаем методику оптимальной (согласованной) фильтрации, которая используется, например, в радиолокации [22,23]. Эта методика содержит детектирование сигнала известной формы на фоне шума с заданной вероятностью обнаружения и необнаружения. На выходе оптимального фильтра дает постоянный ток или импульс напряжения, которые сравниваются с неким пороговым значением. Таким образом, оптимальный фильтр должен дать увеличение отношения сигнал/шум, основываясь на известной форме (коде) принимаемого сигнала. Принцип оптимального фильтра состоит в компенсации фазовых сдвигов сигнала, которые формируют известным образом, и затем получить сумму софазных составляющих спектра сигнала. По этой причине анализ конструкции оптимального фильтра обычно выполняется в частотной области.

Сигнал многоимпульсного ЯКР от образца NaNO_2 (рис. 3) имеет форму очень близкую к прямоугольной, так как интервал между импульсами намного меньше, чем длительность сигнала эха. Спектр такого многоимпульсного сигнала после применения последовательности ПАМС описывается выражением [22]

$$S(\omega) = \frac{(1 - e^{i\omega t})(1 - e^{in\omega t})}{i\omega(1 - e^{i\omega t})}. \quad (1)$$

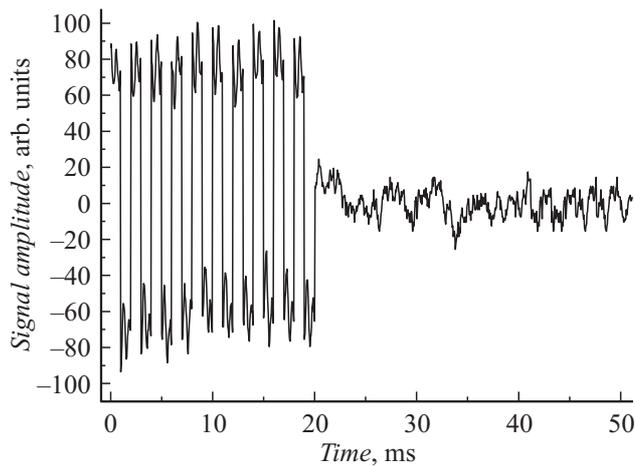


Рис. 3. Сигнал ЯКР от NaNO_2 , измеренный при комнатной температуре. Стационарное состояние получено с помощью 10 циклов МПАФ (интервал между импульсами $2\tau = 1$ ms) и дальнейшей записи шума длительностью $t > 20$ ms.

В соответствии с теорией первый множитель числителя определяет время интегрирования, в то время как первый множитель знаменателя означает то, что интегрирование происходит по времени. Соответственно второй множитель в числителе означает n -кратное суммирование, а второй множитель в знаменателе — вычитание четных импульсов из нечетных. Интегрирование сигнала в интервале между импульсами усредняет высокочастотные шумы, тогда как суммирование вдоль импульсной последовательности усредняет низкочастотные шумы. Интегрирование может быть заменено суммированием точек сигнала с частотой, определяемой частотой среза низкочастотного фильтра фазочувствительного детектора. Все операции могут быть реализованы в цифровом режиме реального времени с использованием компьютера следующим образом

$$u_s = \sum_{k=1}^m \sum_{l=(k-1)n+1}^{kn} u_l (-1)^{k-1}. \quad (2)$$

Здесь u_s — величина сигнала после обработки, u_l — уровень сигнала каждой выборки, m — количество импульсов в последовательности, n — количество выборок. По сути полученная методика обработки сигнала полностью соответствует преобразованию Уолша–Адамара [23].

Теперь перейдем к применению оптимальной фильтрации экспериментальных результатов (рис. 3). Измерения выполнены на изготовленном в лаборатории спектрометре, описанном ранее [24]. В качестве модельного образца был выбран монокристалл нитрит натрия (NaNO_2), так как его релаксационные параметры и частоты ЯКР подобны аналогичным у взрывчатого вещества RDX. Интервал между импульсами равен $2\tau = 1 \mu\text{s}$. Время стробирования $10 \mu\text{s}$. Времена возбуждающего импульса и „звона“ исключены из рисунка (стробирование не производилось).

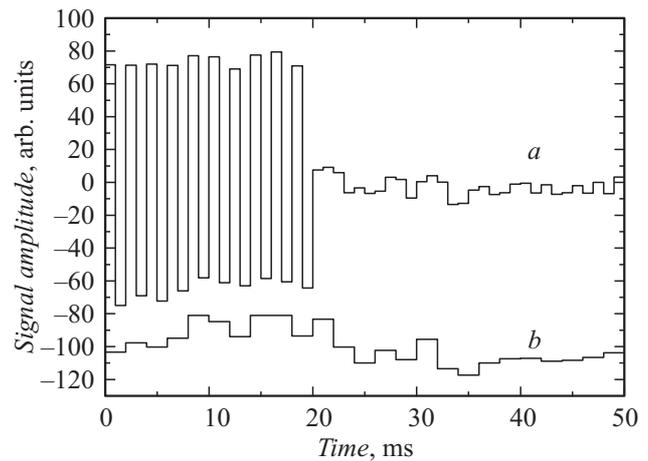


Рис. 4. Фильтрация экспериментальных данных, представленных на рис. 3. Показаны результаты фильтрации высокочастотных шумов (a) и низкочастотных (b) шумов. Сдвиг линии (b) на -100 единиц приведен для наглядности.

Основные процедуры — фильтрация высокочастотных шумов и фильтрация низкочастотных шумов приведены на рис. 4. График (a) показывает, что последовательность ПАМС позволяет эффективно усреднить высокочастотный шум, что обусловлено отсутствием колебаний детектируемого сигнала. Усреднение низкочастотного шума, который остается после процедуры вычитания соседних сигналов в парах, показывает кривая (b).

Применение выражения (2) к экспериментальным данным (рис. 3) обеспечивает интенсивность сигнала в $2.8 \cdot 10^4$ отн.ед., используемых на рисунке. Подобная операция над шумом ($t > 20$ ms) дает среднеквадратичное значение около $1.2 \cdot 10^2$. Таким образом, мы получаем отношение сигнала к шуму, равным примерно 200. Отношение сигнал/шум необработанного сигнала приблизительно 4.5. Накопление более 20 импульсов в последовательности ПАМС обеспечивает дополнительный выигрыш в 4.5 раза. Таким образом, для данной ПАМС-последовательности получаем отношение сигнал/шум около 20. Из этого следует, что процедура оптимальной фильтрации увеличивает отношение сигнал/шум в 10 раз.

Вероятности ложной тревоги (F) и обнаружения (D) определяются по следующим формулам:

$$F = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{u}{\sigma \sqrt{2}} \right) \right], \quad (3)$$

$$D = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{u_c - u_0}{\sigma \sqrt{2}} \right) \right], \quad (4)$$

где u_0 — напряжение порога срабатывания фиксирующего устройства, u_c — напряжение сигнала и σ — среднеквадратичное значение шума на его входе.

Их выбор зависит от конкретной задачи использования прибора и определяется величиной порога срабатывания по отношению к величинам сигнала и шума.

В настоящем примере мы используем для выбора порога срабатывания так называемый критерий стороннего наблюдателя, когда вероятности ложной тревоги и пропуска цели равны. Положим $F = 0.01$ и $D = 0.99$. Тогда из выражений (3) и (4) следует, что $u_0 \geq 2.3\sigma$ и $u_c = 4.6\sigma$. Таким образом, используя отношение сигнал/шум 4.6 как требование для фильтра сигнала, мы получим, что за 20 ns может быть обнаружен сигнал с вероятностями ложной тревоги и пропуска цели в 1% при отношении сигнал/шум на входе приемного устройства 0.092.

Заключение

В настоящей работе исследовано применение многоимпульсных последовательностей для увеличения отношения сигнал/шум в ЯКР при детектировании азотсодержащих (ВВ и наркотики) веществ. Рассмотрена модификация многоимпульсной последовательности с альтернирующими фазами: с 90° - и 180° -ными импульсами в последовательности. Показано, что в зависимости от отношений требуемого времени детектирования и эффективного времени спинрешеточной релаксации T_{2e} наилучшее отношение сигнал/шум может быть получено в следующих трех случаях: 180° -ная последовательность с подготовительным импульсом, 90° -ная последовательность и комбинация этих двух последовательностей. Наши теоретические и экспериментальные исследования показывают также преимущества оптимальной фильтрации когерентных сигналов стационарных состояний, созданных многоимпульсными последовательностями. Анализ показывает, что последовательность МПАФ весьма эффективна с точки зрения применения процедуры оптимальной фильтрации стационарных сигналов. При этом данная методика обработки позволяет эффективно подавить как высокочастотные, так и низкочастотные шумы и, следовательно, увеличить отношение сигнал/шум, что может быть использовано для повышения вероятности обнаружения различных типов взрывчатых и наркотических веществ.

Авторы выражают благодарность за поддержку программе НАТО „Наука во имя мира и безопасности“, грант № 982836. Хуснутдинов Р.Р. выражает благодарность Правительству Республики Татарстан, грант „Алгарыш“.

Список литературы

- [1] Appl. Magn. Reson. 2004. V. 25. № 3–4.
- [2] Proceedings of the Workshop on Magnetic resonance detection of explosives and illicit materials, MRDE-2011, 18-23 September 2011, Yalova, Turkey, Applied Magnetic Resonance. 2012, to be published.
- [3] Sauer K.L., Suits B.H., Garroway A.N., Miller J.B. // Chem. Phys. Lett. 2001. V. 342. P. 362–368.
- [4] Mozjoukhine G.V. // Appl. Magn. Reson. 2002. V. 22. P. 31–46.
- [5] Osokin D.Ya., Khusnutdinov R.R., Shagalov V.A. // Appl. Magn. Reson. 2004. V. 25. P. 513–522.
- [6] Aerts S., Aerts D., Schroeck F., Sachs J. 2006 Preprint arXiv: cond-mat/0612010v1.
- [7] Jakobsson A., Mossberg M., Rowe M., Smith J.A. // IEEE Trans. Geosci. Remote Sens. 2005. V. 43. P. 2659–2665.
- [8] Jakobsson A., Mossberg M., Rowe M., Smith J.A.S. 2006 IEEE Trans. Signal Process. 2006. Vol. 54. P. 1610–1616.
- [9] Gregorovic A., Apih T. // J. Magnetic Resonance. 2009. V. 198. P. 215–221.
- [10] Jinping Niu, Tao Sua, Xuehui Hea, Kairan Zhua, Huiyang Wu. // Procedia Engineering. 2010. V. 7. P. 377–382.
- [11] Osokin D.Ya. // Phys. Stat. Sol. (b). 1982. V. 109. P. 7–10.
- [12] Osokin D.Ya. // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. V. 102. P. 681–686.
- [13] Осокин Д.Я. // Способ поиска и регистрации спектров ядерного квадрупольного резонанса. 1982. А.С. № 958935.
- [14] Osokin D.Ya. // J. Molec. Struct. 1982. Vol. 83. P. 243–252.
- [15] Осокин Д.Я. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 118–123.
- [16] Ermakov V.L., Osokin D.Ya. // Molec. Phys. 1984. Vol. 53. P. 1335–1353.
- [17] Хеберлен У, Меринг М. ЯМР высокого разрешения в твердых телах. М.: Мир, 1980. 504 с.
- [18] Osokin D.Ya. // Molec. Phys. 1983. Vol. 48. P. 283–291.
- [19] Osokin D.Ya., Ermakov V.L., Kurbanov R.Kh., Shagalov V.A. // Z. Naturforsch. 1992. Vol. 47. P. 439–445.
- [20] Иванов Ю.И., Провоторов Б.Н., Фельдман Е.В. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 1847–1861.
- [21] Kim S.S., Jayakody J.R.P., Marino R.A. // Z. Naturforsch. 1991. Vol. 47a. P. 415–420.
- [22] Лезин Ю.С. Оптимальные фильтры и накопители импульсных сигналов. М.: Советское радио. 1963. С. 319.
- [23] Гоноровский И.С. Радиотехнические цепи и сигналы. М.: Советское радио. 1977. С. 440–472.
- [24] Осокин Д.Я., Хуснутдинов Р.Р. // ПТЭ. 2009. Т. 1. С. 96–100.