

Р. А. Ефремов^{1✉}, А. В. Азаров¹

Оценка параметров спектра ЯМР угля при высоком уровне шума в данных.

¹ФГБНУ "Институт физики горных процессов", Российская Федерация
e-mail: r.efremov2@g.nsu.ru

Аннотация. В работе рассматривается задача определения параметров спектров ¹H спектроскопии угля. Приводится модель, которая описывает получаемые на практике спектры сигналов ядерно-магнитного резонанса (ЯМР). Излагается схема получения синтетических данных, на которых проводятся исследования. Для определения параметров спектров используется оптимизационный метод Левенберга-Марквардта и метод, основанный на обучении нейронной сети. С целью улучшения точности определения параметров спектров к данным применяются различные подходы, позволяющие повысить отношение сигнал/шум, а именно половая фильтрация, метод разложения на эмпирически моды и метод главных компонент реализованный на основе Кархунен-Лове преобразований. Приводятся результаты численных исследований, где анализируется эффективность перечисленных методов. Показано, как изменяется точность определения параметров спектров ЯМР в зависимости от различного уровня шума, используемого метода определения параметров и методов повышения отношения сигнал/шум.

Ключевые слова: ЯМР углей, ¹H спектроскопия, определение параметров спектров ЯМР, подавление шума, оптимизационный метод, нейронные сети

R. A. Efremov^{1✉}, A. V. Azarov¹

Estimation of the parameters of the NMR spectrum of coal at a high noise level in the data.

¹ Federal state budgetary scientific institution "Institute of physics of mining processes"
Russian Federation
e-mail: r.efremov2@g.nsu.ru

Abstract. The paper considers the problem of determining the parameters of the spectra of ¹H spectroscopy of coal. A model is given that describes the spectra of nuclear magnetic resonance (NMR) signals obtained in practice. A scheme for obtaining synthetic data on which research is conducted is described. To determine the parameters of the spectra, the Levenberg-Marquardt optimization method and a method based on neural network training are used. In order to improve the accuracy of determining the parameters of the spectra, various approaches are applied to the data, allowing to increase the signal-to-noise ratio, namely, sex filtering, the method of decomposition into empirical modes and the method of principal components implemented on the basis of the Karhunen-Lowe transformation. The results of numerical studies are presented, where the effectiveness of the listed methods is analyzed. It is shown how the accuracy of determining the parameters of NMR spectra varies depending on different noise levels, the method used to determine the parameters, and methods for increasing the signal-to-noise ratio.

Keywords: NMR of coals, ¹H spectroscopy, determination of NMR spectra parameters, noise suppression, optimization method, neural networks

Введение

Немаловажную роль в горном деле играет метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР), который позволяет исследовать горные породы. На его основе, воз-

можно, например, проводить количественный анализ воды и метана в угольных пластах, что критически важно для прогнозирования и предотвращения внезапных выбросов угля и газа. В отличие от традиционных геофизических методов, ЯМР позволяет не только обнаруживать воду в трещинах и карстовых полостях [16], но и оценивать её содержание, что особенно важно при проходке тоннелей и разработке месторождений [15]. На основе ЯМР можно выявлять фазовое состояние метана, различая адсорбированный в порах и растворённый в угольной матрице газ, что позволяет прогнозировать его десорбцию и выделение в горные выработки, а также идентифицировать выбросоопасные угли [1].

Одна из задач при использовании метода ЯМР состоит в определении параметров спектра регистрируемых электромагнитных сигналов. Основная проблема при этом заключается в наложении спектральных пиков друг на друга и наличие шума [17]. Это мешает точно определять параметры, что ведет к ошибкам в интерпретации результатов ЯМР.

В настоящее время разработано достаточно много подходов для анализа спектров ЯМР, с помощью которых решается описанная проблема. Среди них в качестве примера можно указать методы, основанные на построении функции максимального правдоподобия [2, 3, 4], вейвлет преобразований [7, 11, 18], применения SVD [6, 10], эмпирической декомпозиция мод (EMD) [5, 9, 19], на использовании нейронных сетей [13, 14, 15].

В данной работе рассматривается задача определения параметров ^1H ЯМР спектроскопии углей, спектр которых состоит из двух наложенных пиков (широкий и узкий пик) и содержит достаточно высокий уровень шума. На синтетических данных исследуется влияние шума на точность определения этих параметров. Применяются различные подходы обработки спектра.

Определение параметров спектра ЯМР

В рамках данной работы рассматривается задача определения параметров спектров ^1H ЯМР спектроскопии углей. При реализации этого метода часто рассматривается производная спектра, изображенная на рисунке 1. В случае угля спектр состоит из суперпозиции двух линий: широкой и узкой. Узкая линия соответствует водороду, входящему в молекулы сорбированного флюида, а широкая в молекулы угольного вещества.

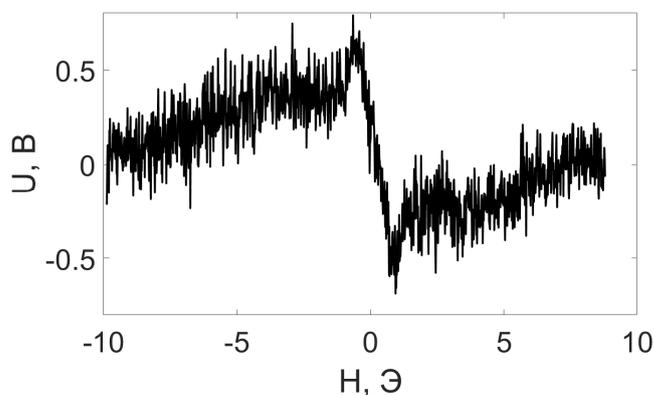


Рис. 1. Производная спектра, полученного в результате ^1H спектроскопии.

В работе [20] предложена модель, которая описывает спектр, получаемый в результате ^1H ЯМР угля:

$$2U_m = \left\{ A_1 \frac{\Delta H_1^2}{[(H-H_0)+H_m]^2 + \Delta H_1^2} - A_1 \frac{\Delta H_1^2}{[(H-H_0)-H_m]^2 + \Delta H_1^2} \right\} + \left\{ A_2 \exp\left(-2 \frac{[(H-H_0)+H_m]^2}{\Delta H_2^2}\right) - A_2 \exp\left(-2 \frac{[(H-H_0)-H_m]^2}{\Delta H_2^2}\right) \right\} - A_0, \quad (1)$$

где U_m - амплитуда низкочастотного сигнала на выходе спинового детектора; H_m - амплитуда модуляции; A_1, A_2 - амплитуды соответственно узкой и широкой составляющих первообразной линии поглощения; $\Delta H_1, \Delta H_2$ - ширины соответственно узкой и широкой составляющих первообразной линии поглощения; H - величина внешнего поля; H_0 - резонансное значение внешнего поля; A_0 - аппаратный сдвиг по оси ординат. Первая скобка описывает узкую линию спектра, вторая – широкую. На рисунке ниже представлен пример составляющих и итоговый синтетический сигнал, составленный в соответствии с моделью сигнала при параметрах: $\Delta H_1 - 0.5, \Delta H_2 - 6, A_1 - 1.3, A_2 - 3.5$.

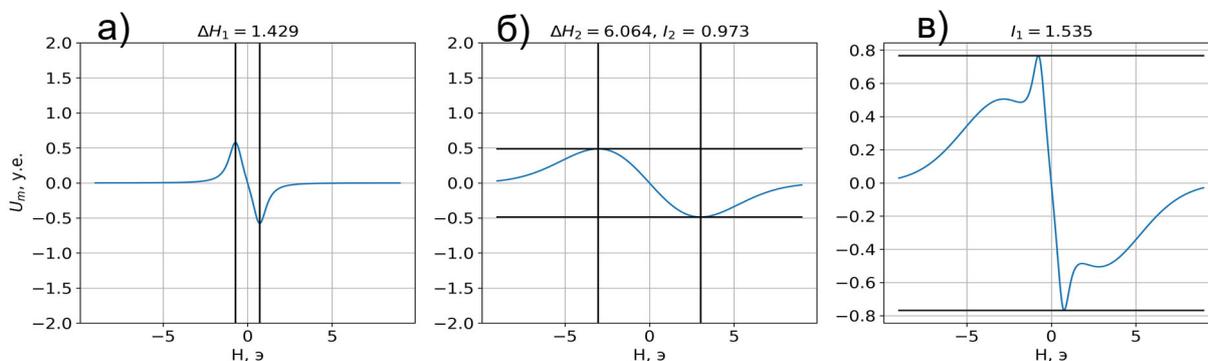


Рис. 2. Синтетический спектр ^1H ЯМР угля и его составляющие: а) широкая часть; б) узкая часть; в) суммарный спектр.

Как было написано выше одной из проблем при обработке спектров является шум, который в некоторых случаях не позволяет точно определять параметры спектра ЯМР (на рис. 1 видно, что спектр достаточно сильно зашумлен).

Далее рассмотрим проблему определения параметров спектра ЯМР. Исследования будем проводить на синтетических данных. Для генерации полезного сигнала используем модель (1). В процессе анализа реальных данных спектров ЯМР было выяснено, что шум имеет нормальное распределение со средним значением равным $-2.224 \cdot 10^{-6}$ и стандартным отклонением 0.0092. Именно такой шум добавлялся к модельному сигналу (1).

В рамках данной работы определять параметры спектра ЯМР будем двумя методами:

1) Оптимизационным на основе подбора параметров минимизирующим разницу между модельным сигналом и наблюдаемым;

2) На основе нейронной сети.

В первом случае использовался оптимизационный метод Левенберга-Марквардта. Во втором применялась одномерная сверточная сеть в стиле LeNet, адаптированная для регрессии четырёх параметров перекрывающихся пиков. На вход поступал сигнал, как показано на рисунке 2, далее две последовательные сверточные ступени, каждая из которых включала свёрточный слой с ядром длины 3, первый — с 64 фильтрами, второй — с 128, и функцию активации ReLU; после каждого блока — слой максимального подвыборочного (MaxPooling) с шагом 2 и слой Dropout для борьбы с переобучением. Выход последнего свёрточного блока подавался на полносвязный «хвост»: после операции развёртки (Flatten) следовал скрытый слой из 64 нейронов с ReLU и повторным Dropout, а затем — линейный выходной слой из четырёх нейронов, предсказывающих ширины и амплитуды двух пиков.

Синтетический набор данных формировался путём генерации сигналов с равномерным распределением параметров (ширины узкого пика 0.3–1.0, широкого 4.0–8.0; амплитуды 0.5–3.0 и 3.0–8.0 соответственно) и добавлением аддитивного гауссовского шума $\sigma=0.09$. Для обучения и валидации использовались 5000 и 1000 образцов. Сеть обучалась сто эпох пачками данных по 64 в режиме минимизации среднеабсолютной ошибки (MAE). В процессе тренировки применялась стратегия ранней остановки: сохранялась модель с наименьшей валидационной MAE, а при отсутствии улучшения в течение пяти эпох автоматически снижалась скорость обучения.

Для повышения точности определения параметров дополнительно будем применять к обрабатываемому сигналу (сигнал спектра ЯМР) различные методы подавления шума. В данном случае рассмотрим полосовую фильтрацию (BP), метод главных компонент, метод разложения на эмпирические моды (EMD). В случае реализации метода главных компонент необходимо наличие более одного тестового сигнала. Здесь ограничимся использованием 3 и 5 сигналов (KL3 и KL5). При полосовой фильтрации оставлялась в спектре только низкочастотная часть, в которой располагался полезный сигнал.

В таблице ниже приведена вероятность ошибиться при определении каждого параметра не более чем на 10% оптимизационным методом. Истинные значения параметров были следующие: $\Delta H_1 - 0.5$, $\Delta H_2 - 6$, $A_1 - 0.1$, $A_2 - 0.7$. вычисления вероятностей, указанных в таблице, проводились на основе 10 тысяч численных экспериментов. Как видно, улучшение в точности дает только использование метода главных компонент, причем точность определения параметра расчёте с увеличением числа используемых тестовых сигналов. При среднем и высоком уровне шума самая низкая точность получается при определении параметров узкой линии. Одна из причин этого заключалась в том, что уровень шума рассчитывался для общего полезного сигнала. В итоге для узкой линии конкретное соотношение сигнал шум оказывалось ниже, чем общее. Отметим также, что использование полосовой фильтрации и метода разложения на эмпирические

моды приводило к росту отношения сигнал/шум, но на точность определения параметров оптимизационным методом это не сказывалось.

Таблица 1

Вероятность ошибки определения параметра не более чем на 10% при использовании оптимизационного метода и различных методов фильтрации сигналов

Метод обработки Условие	BP	KL3	KL5	EMD	BP+ KL3	Ничего не применялось
Параметр H1						
Низкий уровень шума (15 Дб)	0.84	0.98	1	0.81	0.98	0.84
Средний уровень шума (1 Дб)	0.23	0.36	0.48	0.19	0.36	0.22
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.12	0.19	0.24	0.11	0.19	0.12
Параметр H2						
Низкий уровень шума (15 Дб)	1	1	1	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	1	1	1	1	1	1
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.94	1	1	0.91	1	0.94
Параметр A1						
Низкий уровень шума (15 Дб)	1	1	1	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	0.49	0.73	0.86	0.42	0.73	0.47
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.21	0.38	0.50	0.19	0.38	0.19
Параметр A2						
Низкий уровень шума (15 Дб)	1	1	1	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	1	1	1	1	1	1
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.87	0.90	0.91	0.85	0.90	0.87

Далее аналогичная серия экспериментов была проделана при использовании нейронной сети. При тех же значениях параметрах, точность их определения оказалась в два – три раза ниже, чем при использовании оптимизационного метода. Относительно неплохие результаты получались при более высоких значениях узкой составляющей спектра. Например, в таблице 2 приведены вероятности ошибки определения параметров при их истинных значениях равных $\Delta H_1 - 0.5$, $\Delta H_2 - 6$, $A_1 - 1.5$, $A_2 - 4$. В данном случае нейронная дает хорошие результаты при низком уровне шума. С повышением шума точность достаточно резко па-

дает. При этом в случае среднего и высокого уровня шума оптимизационный метод дает более хорошие результаты.

Таблица 2

Вероятность ошибки определения параметра не более чем на 10% при использовании нейронной сети и различных методов фильтрации сигналов

Метод обработки Условие	BP	KL3	KL5	EMD	BP+ KL3	Ничего не применялось
Параметр H1						
Низкий уровень шума (15 Дб)	1	1	1	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	0.75	0.43	0.71	0.69	0.97	0.1
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.51	0.07	0.14	0.44	0.73	0.01
Параметр H2						
Низкий уровень шума (15 Дб)	0.87	1	1	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	0.79	0.7	0.98	0.94	1	0.06
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.77	0.02	0.08	0.84	0.94	0
Параметр A1						
Низкий уровень шума (15 Дб)	0.99	1	0.99	1	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	0.75	0.8	0.96	0.78	0.95	0.32
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.50	0.18	0.35	0.46	0.72	0.05
Параметр A2						
Низкий уровень шума (15 Дб)	0.64	1	1	0.41	1	1
Средний уровень шума (1 Дб)	0.96	0.88	0.98	0.96	0.95	0.34
Высокий уровень шума (-5 Дб)	0.54	0.22	0.38	0.62	0.94	0.12

Выводы

В работе была рассмотрена задача определения параметров спектров, получаемых в результате ^1H спектроскопии углей. В ходе численных экспериментов показано, что при использовании оптимизационного метода точность определения параметров спектров повышается только в случае применения метода главных компонент. Полосовая фильтрация и метод разложения на эмпирические моды, которые также тестировались в работе, не приводили к улучшению результатов, несмотря на то что позволяли повысить отношения сигнал/шум. Метод, основанный на использовании нейронных сетей, показал более плохие ре-

зультаты по сравнению с оптимизационным. Сравнительно высокую точность он давал только при низком отношении сигнал/шум в данных.

Благодарности

Работа выполнена в рамках деятельности Молодежной лаборатории исследования электромагнитных свойств угля и горных пород ФГБНУ "ИФГП".

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Alekseev A. D., Ul'yanova E. V., Tat'yana A. V. NMR potentials for studying physical processes in fossil coals //Physics-Uspekhi. – 2005. – Т. 48. – №. 11. – С. 1161.
2. Chanuntranont A. et al. Real-Time Nuclear Magnetic Resonance Detection Using Maximum Likelihood Estimation with Single-Shallow-Nitrogen-Vacancy Centers in Quantum Heterodyne Measurements //physica status solidi (a). – 2025. – Т. 222. – №. 5. – С. 2400307.
3. Chylla R. A. et al. Deconvolution of two-dimensional NMR spectra by fast maximum likelihood reconstruction: application to quantitative metabolomics //Analytical chemistry. – 2011. – Т. 83. – №. 12. – С. 4871-4880.
4. Chylla R. A., Markley J. L. Theory and application of the maximum likelihood principle to NMR parameter estimation of multidimensional NMR data //Journal of biomolecular NMR. – 1995. – Т. 5. – С. 245-258.
5. Dezfouli M. A. P., Dezfouli M. P., Rad H. S. A novel approach for baseline correction in 1H-MRS signals based on ensemble empirical mode decomposition //2014 36th annual international conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. – IEEE, 2014. – С. 3196-3199.
6. Francischello R. et al. Application of low-rank approximation using truncated singular value decomposition for noise reduction in hyperpolarized 13C NMR spectroscopy //NMR in Biomedicine. – 2021. – Т. 34. – №. 5. – С. e4285.
7. Ge X. et al. Noise reduction of nuclear magnetic resonance (NMR) transversal data using improved wavelet transform and exponentially weighted moving average (EWMA) //Journal of Magnetic Resonance. – 2015. – Т. 251. – С. 71-83.
8. Ghanati R. et al. Filtering and parameter estimation of surface-NMR data using singular spectrum analysis //Journal of Applied Geophysics. – 2016. – Т. 130. – С. 118-130.
9. Guo J. et al. Variational mode decomposition for NMR echo data denoising //IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing. – 2023. – Т. 61. – С. 1-14.
10. Guo J., Xie R., Jin G. An efficient method for NMR data compression based on fast singular value decomposition //IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters. – 2018. – Т. 16. – №. 2. – С. 301-305.
11. Heidary M. A novel computational method for determination of water saturation in oil reservoirs using discrete wavelet transform and nuclear magnetic resonance (NMR) T2 log //Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2021. – Т. 205. – С. 108828.
12. Lee H. H., Kim H. Bayesian deep learning-based 1H-MRS of the brain: Metabolite quantification with uncertainty estimation using Monte Carlo dropout //Magnetic Resonance in Medicine. – 2022. – Т. 88. – №. 1. – С. 38-52.
13. Li D. W. et al. DEEP picker is a deep neural network for accurate deconvolution of complex two-dimensional NMR spectra //Nature communications. – 2021. – Т. 12. – №. 1. – С. 5229.
14. Li D. W. et al. DEEP Picker1D and Voigt Fitter1D: A versatile tool set for the automated quantitative spectral deconvolution of complex 1D NMR spectra //Magnetic Resonance Discussions. – 2022. – Т. 2022. – С. 1-20.
15. Li S. et al. Risk assessment of water inrush in karst tunnels based on attribute synthetic evaluation system //Tunnelling and underground space technology. – 2013. – Т. 38. – С. 50-58.

16. Lin T. et al. First evidence of the detection of an underground nuclear magnetic resonance signal in a tunnel //Journal of Environmental and Engineering Geophysics. – 2018. – Т. 23. – №. 1. – С. 77-88.
17. Mulleti S. et al. Super-resolved nuclear magnetic resonance spectroscopy //Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 9651.
18. Shamaei A., Starcuková J., Starcuk Jr Z. A Wavelet Scattering Convolutional Network for Magnetic Resonance Spectroscopy Signal Quantitation //Biosignals. – 2021. – С. 268-275.
19. Zhu M., Liu N. Research on NMR noise reduction method based on improved CEEMD //Ieee Access. – 2020. – Т. 8. – С. 122864-122873.
20. Алексеев А.Д., Завражин В.В., Меляков А.Д., Троицкий Г.А. Аппроксимация экспериментальных спектров ЯМР ¹H углей // Физика и техника высоких технологий. – 2002.– Т. 12.– №1.– С.71-78

© *Р. А. Ефремов, А. В. Азаров, 2025*