

RESOLUTION DU PROBLEME DE PREDICTION LINEAIRE PAR LA METHODE ULV. APPLICATION AU SIGNAL FID

Reçu le 25/06/2001 – Accepté le 03/02/2003

Résumé

Dans le cadre de la spectroscopie RMN, notre objectif est de déterminer le spectre d'absorption du signal de précession libre FID par la méthode de prédiction linéaire (PL). Ceci revient à résoudre le problème de prédiction linéaire en exploitant la méthode de corrélation par l'utilisation de la décomposition en valeurs singulières SVD pour l'inversion de la matrice de corrélation. Or, cette technique est la source d'un certain nombre de problèmes lorsque le signal est noyé dans du bruit. Aussi sera-t-elle coûteuse en temps lorsque les dimensions de la matrice de corrélation sont importantes. Afin de résoudre ce problème, nous exploitons les propriétés d'une nouvelle technique dérivée de la SVD, la décomposition ULV pour minimiser le coût du traitement et assurer une inversion correcte de la matrice de corrélation. Dans ce but, nous déterminons le spectre d'absorption par la technique ULV et nous le comparons avec le spectre déterminé par la SVD et la FFT. Nous comparons par la suite la qualité des spectres obtenus par rapport au spectre d'absorption idéal déterminé par FFT.

Mots clés: RMN, FID, PL, SVD, ULV, spectre d'absorption.

Abstract

Within the framework of spectroscopy NMR, our aim is to determine the absorption spectrum of the free signal of precession FID by the method of prediction linear (PL). This amounts to solve the problem of linear prediction by exploiting the method of correlation by the use of the decomposition in singular values SVD for the inversion of the correlation matrix. However, this technique is the source of a certain number of problems when the signal is drowned in noise. Therefore it will be expensive in time when dimensions of the correlation matrix are significant. In order to solve this problem, we exploit the properties of a new technique derived from the SVD, decomposition ULV to minimize the cost of the treatment and to ensure a correct inversion of the correlation matrix. To this end, we determine the absorption spectrum by technique ULV and we compare it with the spectrum determined by the SVD and the FFT. Thereafter the quality of the spectra obtained is compared to the ideal absorption spectrum determined by FFT.

Keywords: NMR, FID, LP, SVD, ULV, spectrum absorption.

M. KHELIF

F. DERRAZ

Faculté des Sciences de l'Ingénieur
Université A. Belkaid

B.P. 119, Tlemcen 13 000 (Algérie)

ملخص

في إطار مطيافية الرنين المغناطيسي النووي، هدفنا هو حساب طيف الامتصاص المتعلق بإشارة مبادرة الاعتدالين الحرة FID نستعمل طريقة التنبؤ الخطي، وهذا يعني حل مسألة التنبؤ الخطي بالاستغلال طريقة الارتباط المتبادل مع تقنية التحليل بالقيم الفريدة SVD من أجل عكس مصفوفة الارتباط المتبادل. فهذه التقنية هي مصدر عدد من المشاكل عندما تكون الإشارة مضججة وفي نفس الوقت هذه التقنية تستلزم وقت أطول عندما تكون سعة المصفوفة كبيرة جدا. لهذا نقترح تقنية جديدة مشتقة من طريقة SVD وتسمى التحليل الثلاثي ULV لحد من وقت الحساب وتحقيق عكس مصفوفة الارتباط المتبادل بدون أخطاء. لهذا نحسب طيف الامتصاص بواسطة تقنية SVD و FFT. أخيرا نقارن جودة الطيف الموجود بكل هذه التقنيات مع طيف الامتصاص المثالي المحدد بواسطة FFT.

الكلمات المفتاحية: رنين المغناطيسي النووي، إشارة مبادرة الاعتدالين الحرة، التنبؤ الخطي، تحليل قيم الفريدة، التحليل الثلاثي، طيف الامتصاص.

La résonance magnétique nucléaire ou RMN est une technique utilisée pour diverses applications tels que l'identification des espèces chimiques et le diagnostic médical. Elle repose essentiellement sur le phénomène de l'interaction champ-matière. En effet, l'échantillon de matière que nous souhaitons analyser est soumis à un couple de champs magnétiques orthogonaux \vec{B}_0 et \vec{B}_1 . Le champ \vec{B}_0 est intense et constant. Son rôle est de créer les sous niveaux d'énergie (effet Zeeman normal). Cet effet se traduit par l'apparition d'une aimantation nucléaire macroscopique \vec{M} qui précesse autour de \vec{B}_0 . Le champ \vec{B}_1 de fréquence variable est beaucoup plus faible. Il assure l'inversion de populations des sous niveaux d'énergie. Cette inversion de population se traduit par le basculement de \vec{M} dans le plan xOy (Fig 1).

Après coupure de l'excitation \vec{B}_1 , le système perturbé retourne vers sa position d'équilibre. Ce retour à l'équilibre s'explique par le phénomène de relaxation, le système de spins cédant de l'énergie aux spins voisins et au réseau [1-4]. Le retour à l'équilibre signifie que l'aimantation retourne vers sa position initiale. Ce phénomène se traduit électriquement par la détection, au niveau de la bobine radiofréquence, du signal de précession libre ou Free Induction Decay (FID) [4-6].

La description formelle de ces différentes opérations est faite par les équations de Bloch que nous rappelons dans le paragraphe suivant.

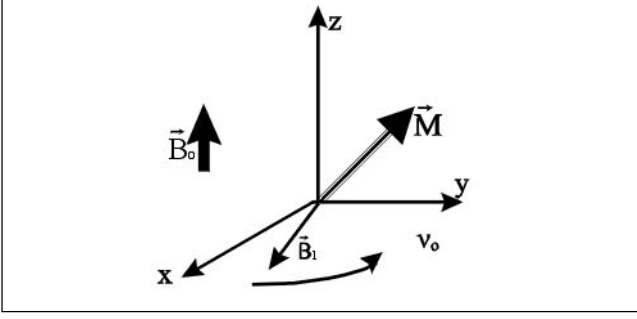


Figure 1: Basculement de l'aimantation sous l'action de \vec{B}_1 .

1. GENERATION DU SIGNAL FID

Classiquement, le phénomène de R.M.N est décrit par les équations du mouvement de l'aimantation \vec{M} :

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \wedge \vec{B} - R \{ \vec{M} - \vec{M}_0 \} \quad (1.1)$$

$$R = \begin{bmatrix} \frac{1}{T_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{T_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{T_1} \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

$$M_0 = N \frac{\gamma^2 \hbar^2 B_0 I(I+1)}{3K_B T} \quad (1.3)$$

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_1 \quad (1.4)$$

- \hbar : constante de Planck divisée par 2π ,
- I : nombre de spin,
- N_a : nombre de molécule par unité de volume,
- R : matrice de relaxation,
- T_2 : temps de relaxation transversale,
- T_1 : temps de relaxation longitudinale,
- K_B : constante de Boltzmann,
- T : Température absolue.

La résolution du système d'équations différentielles nous donne:

$$M(t) = \begin{cases} M_T(t) = M_0 \sin(\beta) \exp(j\omega_0 t) \exp\left(\frac{-t}{T_2}\right) \\ M_z(t) = M_0 \left(1 - (1 - \cos(\beta)) \exp\left(\frac{-t}{T_1}\right) \right) \end{cases} \quad (1.5)$$

avec $M_T(t) = M_x(t) + jM_y(t)$

$$\text{et } \beta = \gamma \int_0^{\tau_p} B_1 dt$$

où β est l'angle de basculement de l'aimantation \vec{M} .

τ_p est la durée pour laquelle l'échantillon est excité par le champ \vec{B}_1 . ω_0 est la pulsation de résonance.

Le retour à l'équilibre de l'aimantation libère une énergie sous forme de flux magnétique. Ce flux induit un

signal au niveau de la bobine, composant essentiel d'un spectromètre[16-18]. Ceci permet de détecter le signal FID sous forme électrique dont l'expression est:

$$e(t) = -\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V_e} \vec{B}_1 \vec{M} dv \quad (1.6)$$

V_e étant le volume effectif de la bobine.

Cette aimantation, induite dans la bobine, nous permet de détecter un signal radiofréquence qui est le FID.

Dans les expériences RMN, le signal FID provient d'une somme de sinusoïdes amorties telle que :

$$e(t) = \sum_{i=1}^K a_i \exp(j(\varphi_0 + \varphi_i)) \exp((-d_i + 2j\pi\nu_i)t) \quad (1.7)$$

a_i : amplitude de la $i^{\text{ème}}$ composante de $e(t)$.

ϕ_0 : phase d'ordre zéro.

ϕ_i : phase d'ordre i .

d_i : facteur d'amortissement.

ν_i : fréquence de résonance.

De plus, ce signal est noyé dans un bruit de diverses natures: quantique, thermique, etc. La figure 2 représente le signal FID synthétique noyé dans du bruit gaussien coloré; il est de la forme:

$$m_x(t) = \Re(e(t)) + b(t) \quad (1.8)$$

$m_x(t)$ représente la partie réelle du FID entaché de bruit.

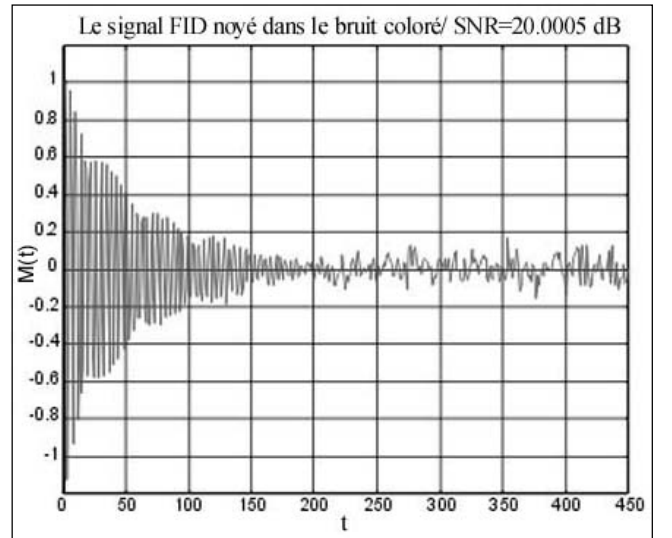


Figure 2: Le signal F.I.D.

2. RAPPELS SUR LA PREDICTION LINEAIRE

La prédiction linéaire consiste à modéliser le signal FID sous forme échantillonnée comme étant la somme pondérée de son passé, soit :

$$\hat{m}_x[n] = \sum_{k=1}^p a_k m_x[n-k], n = p, \dots, N-1 \quad (2.1)$$

Notons que l'ordre de prédiction est $p \geq K$.

En développant cette relation pour N échantillons nous aurons la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \hat{m}_x[p] \\ \vdots \\ \hat{m}_x[N-1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_x[0] & \dots & m_x[p-1] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_x[N-p-1] & \dots & m_x[N-2] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_p \\ a_2 \\ a_1 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Nous pouvons maintenant définir la matrice contenant les échantillons comme la matrice signal, écrite sous la forme:

$$X = \begin{bmatrix} m_x[0] & \dots & m_x[p-1] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_x[N-p-1] & \dots & m_x[N-2] \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

Comme nous avons précisé que le signal FID est toujours entaché de bruit, ainsi nous décomposons X comme:

$$X = S + B$$

où S représente la matrice du signal pur et B représente la matrice du bruit. Nous savons que la matrice bruit est de rang plein; par contre, la matrice signal pur est généralement déficiente. Dans ce cas, l'ordre de prédiction de la matrice signal entaché par le bruit est supérieur au rang de la matrice signal pur, soit:

$$\text{Rang}(S) = l \quad \text{avec } K < l \leq p$$

Le vecteur de prédiction linéaire est déterminé par la minimisation au sens des moindres carrés du critère J . Le critère J caractérise l'écart entre le signal idéal \underline{m}_x et le signal estimé $\hat{\underline{m}}_x$, d'où :

$$J = E\left(\left(\hat{\underline{m}}_x - \underline{m}_x\right)^T \left(\hat{\underline{m}}_x - \underline{m}_x\right)\right) \quad (2.4)$$

En combinant les relations (2.2) et (2.4) nous obtenons:

$$J = 2\underline{a}^T E\left(X^T X\right)\underline{a} - 2\underline{a}^T E\left(X^T \underline{m}_x\right) + E\left(\underline{m}_x^T \underline{m}_x\right) \quad (2.5)$$

Remarquons que la quantité $E\left(X^T X\right)$ représente la matrice de corrélation; nous la notons par R_X . De même, la quantité $E\left(X^T \underline{m}_x\right)$ représente le vecteur de corrélation noté \underline{r} .

Afin de simplifier le problème de prédiction linéaire, il est d'usage de considérer que les propriétés de stationnarité et d'ergodicité au second ordre du FID sont vérifiées. Notons que les propriétés de symétrie et de positivité de la matrice de corrélation simplifient la résolution du problème de PL. En effet, ces propriétés permettent d'affirmer que le critère J a un minimum unique [7-9]. La localisation de ce minimum est obtenue lorsque le gradient du critère est égal à zéro.

$$\frac{\partial J}{\partial \underline{a}} = 0$$

La résolution de ce problème nous donne donc le vecteur de prédiction sous la forme:

$$\underline{a} = R_X^+ \underline{r} \quad (2.6)$$

R_X^+ est le pseudo inverse de la matrice de corrélation.

Finalement, le problème de prédiction linéaire nous conduit à inverser la matrice de corrélation. Ce problème d'inversion de la matrice de corrélation et l'ordre de prédiction optimal ont fait l'objet de plusieurs travaux [7,8,12]. Plusieurs techniques pour réaliser l'inversion de cette matrice ont été proposées dans la littérature. Parmi les techniques célèbres, nous citons la décomposition SVD et la décomposition orthogonale QR qui connaissent un champ d'application très important en RMN de part leur précision, stabilité et rapidité de calcul [7,13,14,15]. Cependant, ces techniques présentent des problèmes lorsque les dimensions de la matrice de corrélation augmentent [7,19], notamment en RMN haute résolution et lorsque la matrice à inverser est mal-conditionnée. Le mauvais conditionnement est dû au bruit sur le signal FID [8,19]. En fait, le problème qui se posera est la détermination du rang de la matrice ou encore l'ordre optimal de prédiction. C'est dans cette optique que Stewart a introduit une nouvelle décomposition basée sur un compromis entre les décompositions orthogonales et la décomposition SVD [10,13,15]. Dans ce but, nous exploitons les propriétés de cette décomposition pour déterminer le spectre d'absorption correspondant au signal FID. Nous rappelons succinctement les concepts de la décomposition SVD et ULV [10,13,14,15].

3. RESOLUTION DU PROBLEME DE PL

3.1 Propriétés de la matrice de corrélation

La résolution du problème de prédiction linéaire a fait l'objet d'un nombre important de travaux, particulièrement en RMN [7,8,11,13,14,19]. Ces travaux concernent la matrice signal où l'on considère les échantillons effectifs du signal FID. Dans ce travail, nous procédons autrement. En effet, nous considérons la matrice de corrélation, qui est une matrice de Toeplitz. Sachant que le FID est ergodique et stationnaire au second ordre, nous pouvons écrire:

$$E\left(XX^T\right) = SS^T + (N-p)\sigma_{bb}^2 I_{N-p} \quad (3.1)$$

où σ_{bb}^2 est la variance du bruit.

I_{N-p} est la matrice identité.

D'autre part, nous savons que lorsque nous faisons plusieurs accumulations, la forme du FID change d'une accumulation à l'autre. Cela est inhérent au bruit, d'où:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N-p} X^T X &= \frac{1}{N-p} S^T S + \frac{1}{N-p} B^T B \\ &+ \frac{1}{N-p} \left(S^T B + B^T S\right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Compte tenu des hypothèses précédentes, alors tous les éléments de la matrice signal et ceux de la matrice bruit sont décorrélés.

$$R_{SB} = E\left(S^T B\right) = E\left(B^T S\right) = 0 \quad (3.3)$$

Finalement, l'expression (3.2) s'écrit sous la forme:

$$\frac{1}{N-p} X^T X = \frac{1}{N-p} S^T S + \frac{1}{N-p} B^T B \quad (3.4)$$

De cette relation, nous voyons bien les différentes corrélations :

$$R_X = R_S + R_B \quad (3.5)$$

3.2. Décomposition en valeurs singulières

L'analyse de la matrice de corrélation est fortement liée à la décomposition SVD de la matrice X . Dans ce but, nous analysons d'abord la matrice signal, puis la matrice de corrélation.

Si X est une matrice de $(N-p) \times p$, alors il existe deux matrices orthogonales:

$$U = (\underline{u}_1, \dots, \underline{u}_{N-p})^T \text{ de dimensions } (N-p) \times p$$

$$V = (\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_p)^T \text{ de dimensions } p \times p$$

tel que :

$$X = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^p u_i \sigma_i v_i^T \quad (3.6)$$

Les \underline{u}_i sont les vecteurs singuliers gauches et les \underline{v}_i les vecteurs singuliers droits. Les éléments diagonaux non négatifs de Σ sont les valeurs singulières de la matrice signal. Elles définissent l'ensemble du spectre singulier. Si la matrice signal est une matrice creuse, dont le $\text{rang}(X) = l$ est tel que $l < p$, alors il est possible d'écrire la décomposition en valeurs singulières de la matrice X tel que :

$$X = U \Sigma V^T = (U_1, U_2) \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$U_1 = (\underline{u}_1, \dots, \underline{u}_l) \text{ de dimensions } (N-p) \times l$$

$$V_1 = (\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_l) \text{ de dimensions } p \times l$$

$$\text{et } \Sigma_1 = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_l),$$

Finalement, la décomposition de la matrice de corrélation sera de la forme:

$$R_X = (V_1, V_2) \begin{pmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (V_1, V_2)^T = (U_1, U_2) \begin{pmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (U_1, U_2)^T \quad (3.8)$$

Cette dernière forme n'est autre qu'une décomposition propre [11]. Elle présente un avantage par rapport à la matrice signal. En effet, les valeurs singulières faibles retrouvées dans la matrice signal sont encore beaucoup plus faibles dans la matrice de corrélation.

Cependant, il est très difficile de réaliser une décomposition SVD lorsque les dimensions de la matrice sont très grandes. De plus, le temps pour calculer la matrice diagonale est prohibitif. Pour résoudre ces problèmes, nous proposons la décomposition orthogonale ULV qui, jusqu'à l'heure actuelle, n'a pas été appliquée dans le domaine de la RMN.

3.3. La décomposition ULV

Dans ce cas, nous remplaçons la matrice diagonale par

une matrice triangulaire inférieure. Si le rang de la matrice de corrélation est exactement l , alors nous avons deux situations. La première situation est que les valeurs singulières $\sigma_{l+1}, \dots, \sigma_p$ sont nulles. Le rang numérique l est donc exactement l'ordre de prédiction. Tandis que si les valeurs $\sigma_{l+1} \geq \dots \geq \sigma_p$ sont faibles comparées à la valeur singulière σ_l , alors ces dernières sont tronquées. Il est démontré que si les valeurs singulières faibles sont tronquées, la décomposition ULV obtenue est à rang révélateur. Justement, c'est l'objectif de la décomposition ULV à rang révélateur [10,20]. Autrement, le rang numérique, dans ce cas, est le nombre des valeurs singulières supérieures à un certain seuil τ .

Le seuil révélateur commandera l'ordre de prédiction. Comme il a été décrit dans la littérature, nous disposons de deux algorithmes pour le calcul du rang de la matrice, l'un permet de calculer le rang le plus élevé, et le second calcule le rang le plus faible. L'ordre de prédiction sera donc borné par deux valeurs tel que :

$$l_{\min} \leq l \leq l_{\max}$$

En partant de la décomposition ULV de la matrice signal, réalisée par le produit de deux matrices orthogonales U_L, V_L^T , elle est de la forme:

$$X = U_L \begin{pmatrix} L \\ 0 \end{pmatrix} V_L^T \quad (3.9)$$

ou encore :

$$= (U_{Ll} \quad U_{L0} \quad U_{L\perp}) \begin{pmatrix} L_l & 0 \\ H & E \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (V_{Ll}, V_{L0})^T \quad (3.10)$$

La décomposition ULV appliquée à la matrice de corrélation nous donne:

$$R_X = (U_{Ll} \quad U_{L0} \quad U_{L\perp}) \begin{pmatrix} L_l^2 & L_l H \\ L_l H & H^2 + E^2 \end{pmatrix} (U_{Ll} \quad U_{L0} \quad U_{L\perp})^T$$

$$= (V_{Ll}, V_{L0}) \begin{pmatrix} L_l^2 + H^2 & HE \\ HE & E^2 \end{pmatrix} (V_{Ll}, V_{L0})^T \quad (3.11)$$

avec $\sigma_{\min}(L_1) \cong \sigma_1$ et $\sqrt{\|H+E\|^2} \cong \sigma_{l+1}$

$\sigma_{\min}(\cdot)$ est la plus petite valeur singulière de la matrice L_l . L_1 est une matrice triangulaire inférieure non singulière d'ordre l . La matrice E contient les valeurs singulières associées au bruit.

Finalement, la solution de notre problème est de la forme:

$$\underline{a} = V_{Ll}^T (L_l^2 + H^2)^{-1} V_{Ll} \underline{r} \quad (3.12)$$

4. EXPLOITATION DES RESULTATS

Nous considérons un signal FID synthétique obtenu par le biais d'une expérience simulée du proton. Nous prenons une solution de 1cm^3 de liquide qui est en fait notre échantillon. Cet échantillon est soumis à une induction \vec{B}_0

d'intensité 2,35T. Le champ radiofréquence a pour valeur 5,87mG. Après coupure de l'excitation, l'échantillon libère de l'énergie préalablement absorbée sous forme d'un signal de précession libre que nous voulons analyser. Pour ces conditions expérimentales, les coefficients du FID sont:

- $i=1$
- $a_1=1$
- $\varphi_0=0$
- $\varphi_1=0$
- $d_1=1s$
- $\nu_1=1Khz$

Après les opérations suivantes [21]:

- conditionnement,
 - détection en quadrature de phase,
 - filtrage passe bas (fréquence de coupure 2,5 KHz),
- nous obtenons un signal analytique dont les composantes fréquentielles ne dépassent pas 2 KHz.

Pour simuler le FID dans son environnement naturel, nous devons considérer l'effet du bruit. En réalité, le bruit résultant dans les expériences RMN, n'est pas facilement modélisable. Nous allons nous placer dans le cas le plus défavorable. Ainsi, nous supposons que le bruit est du type gaussien coloré.

Pour mener cette étude, nous avons considéré un signal FID pur non entaché de bruit. Ce même signal synthétique est maintenant noyé dans un bruit coloré gaussien. Dans notre étude nous avons considéré deux valeurs du rapport signal sur bruit (Signal to Noise Ratio: SNR). Le spectre des deux précédents signaux est calculé par une FFT à 512 points. Par la suite, nous avons traité le signal FID par la méthode de prédiction linéaire en appliquant les deux techniques ULV et SVD pour l'inversion de la matrice de corrélation. Précisons que seule la partie réelle du FID analytique est prise en compte [21]. Nous procédons au calcul du vecteur de corrélation de 31 éléments et nous formons la matrice de corrélation dont la structure est, rappelons-le, celle de Toeplitz.

Afin de montrer le rôle du rang révélateur, nous avons tracé les valeurs propres associées à la matrice de corrélation pour quatre valeurs du SNR.

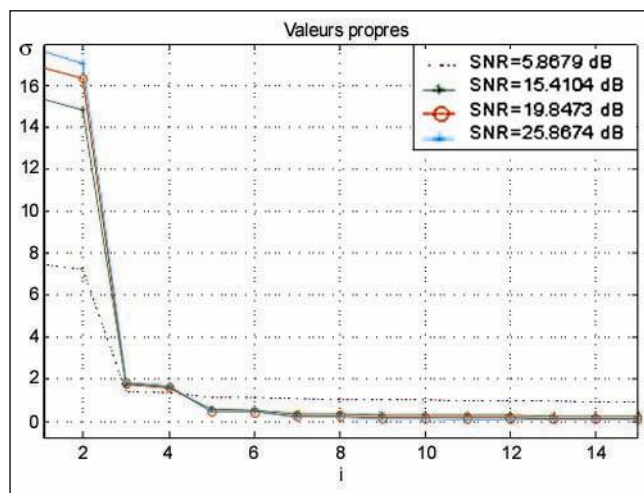


Figure 3: L'évolution des valeurs propres en fonction du SNR.

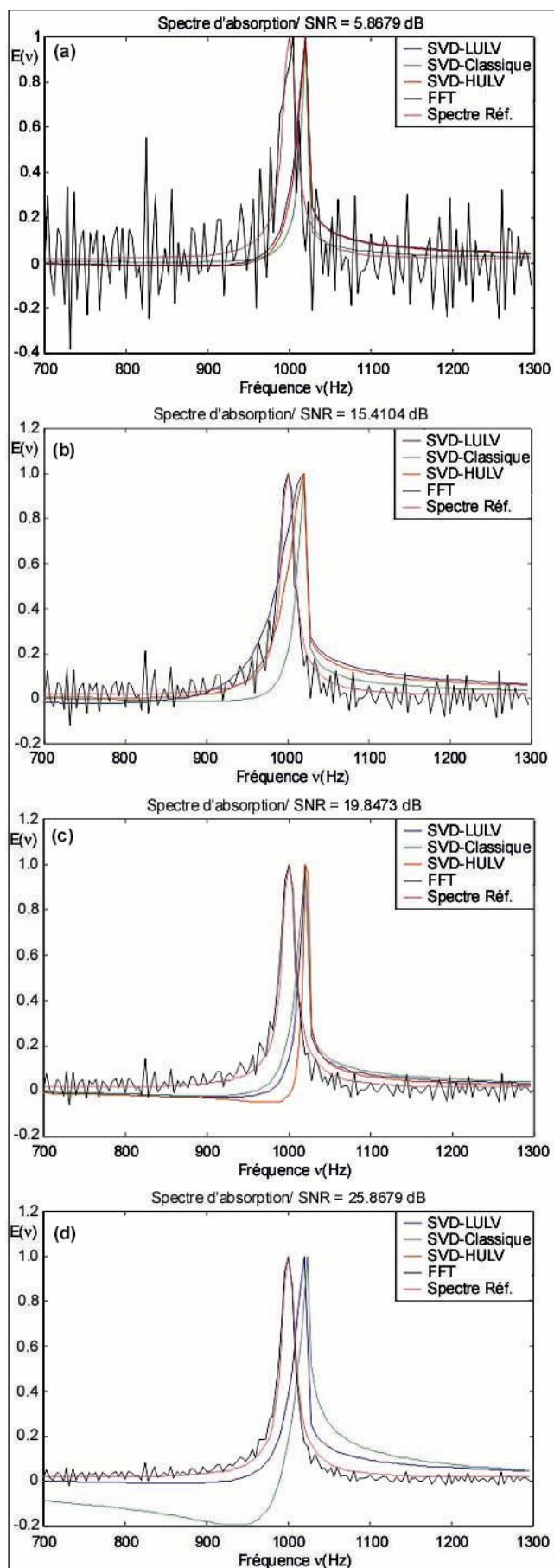


Figure 4: Spectre d'absorption du signal FID pour différents SNR.

La figure 3 montre la différence entre les deux premières valeurs propres et le reste des valeurs aussitôt que le SNR augmente. Nous remarquons que le nombre des valeurs propres associées au bruit est élevé par rapport au nombre des valeurs propres associées au signal. Cependant, si le SNR chute considérablement, il est alors très difficile de distinguer les valeurs propres associées au signal de celles associées au bruit. Notons au passage l'intérêt de ce graphe, en ce sens qu'il nous renseigne sur l'ordre de notre prédicteur, et que de plus il nous permet de fixer le taux de troncature τ dans la décomposition ULV.

Après inversion de la matrice R_X , nous calculons le vecteur de prédiction pour les quatre valeurs différentes du SNR. Nous traçons par la suite les spectres d'absorption obtenus par les deux techniques SVD et ULV. Les coefficients obtenus sont ceux d'un filtre autorégressif (AR).

Les figures 4(a, b, c, d) représentent chacune le spectre d'absorption pour quatre valeurs du SNR. Ces spectres sont obtenus par l'application de la FFT et la PL. Pour la PL nous avons utilisé deux techniques: SVD et ULV. Pour la ULV, nous avons utilisé deux algorithmes: HULV et LULV.

Le premier algorithme calcule le rang le plus élevé de la décomposition tandis que le second calcule le plus faible rang associé à la décomposition [10,15]. Conformément à la théorie, nous avons confirmé les valeurs minimale et maximale de l'ordre de prédiction $1 \leq l \leq 2$ pour un SNR fort. Cependant l'ordre de prédiction peut valoir 3 pour un SNR faible.

Pour comparer les performances des techniques utilisées, nous considérons les fréquences de résonance et les temps de relaxation T_2 . La fréquence de résonance obtenue à partir de la FFT du signal bruité est pratiquement proche de la référence qui est de 1000 Hz, ceci étant valable quelque soit la valeur du SNR, tandis que la fréquence de résonance déterminée à partir des techniques SVD, LULV et HULV est différente de la référence de 0,2%. Nous pouvons donc dire que les résultats sont très proches. La technique utilisée n'influe donc pas sur la fréquence de résonance.

Comparons maintenant le temps de relaxation pour les différentes techniques. Le paramètre T_2 de référence est de 1/22 s. Lorsque le SNR est suffisamment fort, jusqu'à 15 dB, les différentes techniques paramétriques nous donnent pratiquement le même T_2 . Par contre, sa valeur, à partir de la FFT, est différente de 10% par rapport à la référence. Lorsque le SNR est faible, de l'ordre de 5 dB, comme c'est le cas en RMN, la FFT ne permet pas la détermination de T_2 , alors que la méthode LULV nous donne un résultat plus précis.

D'autre part, la méthode ULV est plus performante en terme de stabilité et de temps de calcul. Ceci provient de la troncature des valeurs propres non significatives.

Un calcul effectué sur un PC PIII 450 MHz, montre que le temps de calcul nécessaire pour une inversion par ULV est plus court que pour la SVD; le temps de traitement pour la méthode SVD est estimé à 690 μ s et pour la ULV, il est de 601 μ s.

CONCLUSION

La spectroscopie RMN connaît des développements importants et des applications très variées; l'élément principal d'analyse et de synthèse est certainement le signal de précession libre ou FID, car il est en quelque sorte la fiche signalétique de l'échantillon à analyser. Or, le FID est très faible en termes de tension, de l'ordre du μ v. Il est donc clair qu'il est très difficile de le discerner du bruit dont l'origine est quelconque. Devant cette situation, il est impératif de mettre au point des techniques d'acquisition et de traitement très performantes. L'acquisition du signal a été partiellement abordée dans nos travaux [16-18]. Nous nous sommes intéressés également à la partie traitement. En effet, nous avons appliqué au FID la FFT classique, les ondelettes et la prédiction linéaire avec toutes ces variantes [19]. En analysant les avantages et les inconvénients de ces techniques, nous avons présenté l'intérêt de la prédiction linéaire basée sur la SVD et la ULV. Nous avons montré les performances de la décomposition ULV par rapport à toutes les autres techniques en termes de précision des résultats, stabilité et rapidité des calculs. Nous rappelons que cette étude concerne uniquement un FID synthétique. Il serait alors intéressant de l'étendre à un FID généré dans une expérience réelle en spectroscopie simple irradiation.

REFERENCES

- [1]- Abragam A., "The principles of Nuclear Magnetism", Oxford University Press, (1978).
- [2]- Harris R.K., "Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy", A Physicochemical View, Longman Scientific & Technical, (1986).
- [3]- Smith M.E., Strange J.H., "NMR techniques in materials physics", *Meas. Sci. Technol.*, Vol. 7, (1996), pp. 449-475.
- [4]- Slichter P., "Principles of Magnetic Resonance". Springer, New York, 3rd édition, (1996).
- [5]- Khelif M., Derraz F., "Détermination du spectre erreur sur le signal d'absorption en RMN impulsionnelle par transformée de Fourier", 1st National Workshop on Signal & Image Processing, NWSIP'98, Sidi-Bel-Abbes (1998).
- [6]- Khelif M., Derraz F., "Influence des inhomogénéités du champ B_0 sur le F.I.D en R.M.N pulsée", Séminaire National sur l'Automatique et les Signaux, SNAS'99, Annaba, (1999).
- [7]- Koehl P., "Linear prediction spectral analysis of NMR data", *Prog. in NMR Spectrosc.*, vol. 34, (1999) pp. 257-299.
- [8]- Van Huffel S., Chen H., Decannière C. and Van Hecke P., "Algorithm for Time-Domain NMR Data Fitting Based on Total Least Squares", *JMR A* 110, (1994), p.280.
- [9]- Van Huffel S., Park H., and Rosen J.B., "Formulation and solution of structured total least norm problems for parameter estimation", *IEEE Trans. Signal Processing*, Vol. 44, N°10, (1996), pp.2464-2474.
- [10]- Fierro R.D. and Hansen P.C., "Low-rank revealing two-sided orthogonal decomposition algorithms", CSUSM PAM technical report 94-06, California State University, San Marcos, CA, USA, *Numerical Algorithms*, vol. 15, (1997), pp. 37-55.
- [11]- Kumaresan R. and Tufts D.W., "Estimating the parameters of exponentially damped sinusoids and pole-zero modeling in noise", *IEEE Trans. on Acoust., Speech, and Sign. Proc.*, Vol. ASSP-30, N°6, Dec. (1982), pp. 833-840.
- [12]- Diop A., Briguet A., and Graveron-Demilly D., "Automatic in vivo NMR data processing based on an enhancement

- procedure and linear prediction method", *Magn. Reson. Med.*, vol. 27, (1992), pp.318-328.
- [13]- Fierro R.D., Vanhamme L. and Van Huffel S., "Total least squares algorithms based on rank-revealing complete orthogonal decomposition, Philadelphia SIAM (1997).
- [14]- Luk F., Qiao S., "A Symmetric rank-revealing Toeplitz matrix decomposition", *Journal of VLSI signal processing*, 8, (1996), pp.1-9.
- [15]- Stewart G.W., "Updating à rank-revealing ULV décomposition", *SIAM journal on Matrix Analysis and application*, 14(11), Nov. (1995), pp. 2642-2648.
- [16]- Khélif M., Benahmed N., "Caractérisation de la ligne à bandes symétriques par la méthode des éléments finis", *Technologies Avancées*, N°13, Juil. (2001), pp.44-51.
- [17]- Khélif M., Benahmed N., Feham M. et Taullele F., "Résonateur en anneau fendu blindé", *COMAIE'98 Béjaia, AJOT*, Vol. I, (1998), pp. 152-155.
- [18]- Benahmed N., Khélif M., "Résonateur à bandes symétriques", *COMAIE'96, Tlemcen, AJOT*, Vol. 4, (1996), pp. 236-241.
- [19]- Derraz F., " Contribution à l'étude spectro-temporelle du FID en RMN", Thèse de Magister, Tlemcen, (2001). □