

RECONSTRUCCION DE IMAGENES POR RESONANCIA CUADRUPOLEAR NUCLEAR USANDO EL METODO DE MAXIMA ENTROPIA*

H. Robert** y D.J. Pusiol***

Facultad de Matemática, Astronomía y Física,
Universidad Nacional de Córdoba, Laprida 854, 5000 Córdoba,
Argentina

En este trabajo se presenta una aplicación específica del método de máxima entropía: La reconstrucción de Imágenes por Resonancia Cuadrupolar Nuclear en el sistema rotante (ρ NQRI). Esta técnica de reconstrucción es un avance respecto de los métodos que involucran Transformada de Fourier, anteriormente utilizados con el mismo propósito. Se minimizan las distorsiones producidas por el truncamiento de la señal temporal (pseudo-FID), y además al incluir criterios de cuadrados mínimos en el proceso de reconstrucción se mejora notablemente la calidad de la imagen.

I. INTRODUCCION

El método de ρ NQRI es análogo al de zeugmatografía en el sistema rotante propuesto por D.I. Hoult¹ para RMN. Con esta técnica, la información espacial se codifica en la amplitud de la señal de RCN por medio de campos de RF inhomogéneos, producidos por el pulso de excitación^{2,3}. Cuando esta técnica se aplica a materiales sólidos policristalinos se debe tener en cuenta la distribución orientacional del gradiente de campo eléctrico (GCE) con respecto al eje de la bobina de RF (*eje z*)⁴. Aún para la misma intensidad del campo de RF (B_1) los núcleos poseen diferentes frecuencias de nutación, entonces la señal observada involucra un promedio sobre todas las orientaciones relativas entre el GCE y el eje de la bobina de RF. Este fenómeno afecta la evaluación de la señal codificada en amplitud y debe ser tenido en cuenta en los algoritmos de reconstrucción de imagen. Un procedimiento numérico especial, basado en transformaciones logarítmicas, el cual reproduce correctamente la distribución espacial de espines ha sido desarrollado en nuestros grupos³. Otro problema muy frecuente en los experimentos en 2D son los *fantasmas* (falsas estructuras) en el segundo espectro, producidos en el proceso de reconstrucción cuando se tienen señales fuertemente truncadas y/o con elevado nivel de ruido. El Método de Máxima Entropía (MEM) es una técnica muy general para solucionar problemas de deconvolución de esta clase⁵. El método posee significativas ventajas sobre las técnicas convencionales de procesamiento (que involucran Transformada de

Fourier) en aquellos casos donde los datos son incompletos y con ruido. Otro de los beneficios de MEM es que la función respuesta es completamente general, implicando entonces que la respuesta del sistema observado y/o conocidas distorsiones instrumentales pueden ser tenidas en cuenta. En este trabajo presentamos la aplicación práctica de MEM a ρ NQRI.

II. FUNDAMENTO TEORICO DE ρ NQRI

La técnica de ρ NQRI en una dimensión se basa en aplicar al objeto un pulso con gradiente en el campo de RF y en resonancia durante un tiempo t_p , la señal se adquiere durante el tiempo t después del pulso. Asumiendo un sistema de núcleos con $I=3/2$ y considerando una cierta línea de resonancia -con forma $G(\omega)$ - centrada en ω_0 ; la señal observada es⁴

$$S(t, t_p) \sim S(t)S(t_p) \quad (1)$$

donde

$$S(t) = F^{-1}(G(\omega)); \quad (2)$$

F^{-1} es el Operador Transformada de Fourier Inversa:

$$S(t_p) \sim \int_0^\infty d\omega_1 \rho(\omega_1) \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin\theta F(\theta, \phi) \sin[F(\theta, \phi)\omega_1 t_p] \quad (3)$$

con

$$F(\theta, \phi) = \left[4\eta^2 \cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)(9 + \eta^2 + 6\eta \cos(2\phi)) \right]^{1/2} \quad (4)$$

*Parcialmente financiado por las Fundaciones Antorchas y Alexander von Humboldt de Alemania y el CONICOR de Córdoba.

** Becario de CONICET.

*** Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET.

donde θ y ϕ son los ángulos polar y azimutal, respectivamente, del GCE respecto del sistema Laboratorio; y η es el parámetro de asimetría del tensor GCE; $\varphi(\omega_i)$ es la densidad de núcleos, la cual es una función de la coordenada espacial z , a través de la relación:

$$\omega_i = \frac{1}{2\sqrt{3}\epsilon} \gamma B_1(z) \quad (5)$$

denotamos: $B_1(z)$, como la amplitud de la densidad de flujo de RF; γ , es la razón giromagnética y

$$\epsilon = \left(1 + \frac{\eta^2}{3}\right)^{1/2}$$

Realizando la Transformada de Fourier con respecto a t , obtenemos el espectro:

$$S(\omega, t_p) \sim G(\omega)S(t_p) \quad (6)$$

$G(\omega)$ representa la totalidad de la información espectroscópica contenida en el espectro de RCN pura. Fijando una frecuencia de resonancia ω_i en el espectro, se obtiene una pseudo-FID $S(\omega_i, t_p)$. La densidad de núcleos resonantes a la frecuencia ω_i - relacionada al espectro de nutación $\varphi(\omega_i)$ - se obtiene por lo tanto deconvolucionando la pseudo-FID $S(\omega_i, t_p)$.

III. CRITERIO DE MAXIMA ENTROPIA

La idea básica de MEM es encontrar imágenes -o espectros- consistentes con los datos experimentales (teniendo en cuenta las incertezas conocidas debido al ruido), y seleccionar entre todas ellas la única que contiene la mínima información -o equivalentemente la *máxima entropía*-. El mérito práctico de elegir esta solución es que debe haber suficiente evidencia en los datos para cualquier estructura presente en la reconstrucción. Además el requerimiento físico de positividad de la imagen es automáticamente satisfecho, puesto que la entropía no está definida si la imagen es negativa. La aplicación de MEM ha sido descrita extensamente en problemas similares^{6,9}. Consideramos una imagen como un conjunto de números positivos X_j , $j = 1, 2, \dots, N$, los cuales deben ser determinados. En un experimento de φ NQRI, la pseudo-FID $S(\omega_i, t_p)$ puede expresarse como:

$$S_p = \sum_{j=1}^N R_{p,j} X_j \pm \sigma_{p_i} \quad p = 1, 2, \dots, M \quad (7)$$

donde σ_p es la desviación estandar del ruido de la p -ésima medición; M y N son los números de puntos en la pseudo-FID y en la imagen, respectivamente (en general $N > M$); \mathbf{R} es la matriz del sistema, dada por la expresión:

$$R_{p,j} = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin\theta F(\theta, \phi) \sin[F(\theta, \phi)\omega_{1,j}t_p] \quad (8)$$

El vínculo observacional formal sobre las reconstrucciones se impone comparando los datos obtenidos S_p con los datos simulados:

$$F_p = \sum_{j=1}^N R_{p,j} X_j \quad (9)$$

Una reconstrucción X_j puede tomarse como posible si los datos simulados están en acuerdo con los datos medidos dentro de los errores experimentales. Para medir la diferencia entre los datos reales S_p y los de prueba F_p , usamos la función estadística:

$$\chi^2 = \sum_{p=1}^M \frac{(F_p - S_p)^2}{\sigma_p^2} \quad (10)$$

Solamente aquellas reconstrucciones, para las cuales $\chi^2 \leq M$, están en aceptable acuerdo con los datos.

La expresión para la entropía, S es:

$$S = - \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_j}{A} \right) \ln \left(\frac{X_j}{A} \right) \quad (11)$$

donde A es un parámetro que tiene en cuenta la normalización del espectro⁹. Usamos el algoritmo numérico de Skilling/Bryan¹⁰ para encontrar la imagen que satisface $\chi^2 \leq M$ y que maximiza la entropía.

A fin de comparar los resultados de MEM con una técnica de transformada convencional, introducimos un método simple para solucionar la ec.(4) en un caso especial: RCN en GCE axialmente simétrico ($\eta = 0$). La fórmula (4) simplifica a⁴:

$$S(t_p) \sim \int_0^\infty d\omega_1 \varphi(\omega_1) \cdot \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \sin[\omega_1 t_p \sin \theta] \quad (12)$$

La solución de esta ecuación integral es la Transformada de Hankel con el núcleo: $(t_p J_1(\omega_1 t_p))$. Entonces la expresión para la densidad de núcleos es:

$$\rho(\omega_1) \sim \omega_1 \int_0^\infty dt_p t_p J_1(\omega_1 t_p) S(t_p) \quad (13)$$

ó

$$\rho(z) \sim \omega_1(z) \left| \frac{d\omega_1(z)}{dz} \right| \cdot \int_0^\infty dt_p t_p J_1(\omega_1 t_p) S(t_p) \quad (14)$$

IV. PROBLEMAS DE FASES

En la práctica, en lugar de los elementos de matriz de ec. (7), medimos un conjunto de datos de la forma:

$$S(\omega, t_p) \sim \exp(i\Psi) G(\omega) S(t_p + \varphi_p) \quad (15)$$

donde Ψ es el parámetro de fase total en el primer espectro, y φ_p es el parámetro de fase en la pseudo-FID. Para evitar dificultades con la necesaria naturaleza positiva de la imagen, el primer espectro $G(\omega)$ debe ser corregido en fase por los métodos usuales. Además, para reconstruir correctamente la imagen, es necesario encontrar el parámetro de fase φ_p y corregir la función respuesta \mathbf{R} en la ec. (9). Nosotros usamos el procedimiento sugerido por Sibisi¹² para encontrar este parámetro; específicamente la función *2 es minimizada sobre el espectro y el parámetro de fase.

V. RESULTADOS CON DATOS SIMULADOS

Presentamos algunas reconstrucciones obtenidas, desde distintos datos simulados, por los métodos de Máxima Entropía y de Transformada de Hankel. Distintos aspectos de los métodos han sido probados.

Linealidad: La Fig. 1 compara las reconstrucciones por MEM (Fig. 1c) y por TH (Fig. 1d) para una $\varphi(\omega_1)$ que consiste en tres escalones de diferentes

intensidades (Fig. 1a). La Fig. 1b es la pseudo-FID calculada. El número de datos en la pseudo-FID es 80; el intervalo de muestreo Δt_p fué elegido = $6\mu s$; el parámetro de background de la ec. (12) es $A = 1 \cdot 10^{-3}$ y la ventana de frecuencia está dada por $\omega_{l,max} = \pi/\Delta t_p$. Claramente, la intensidad y el ancho de los escalones son correctamente reproducidos por MEM.

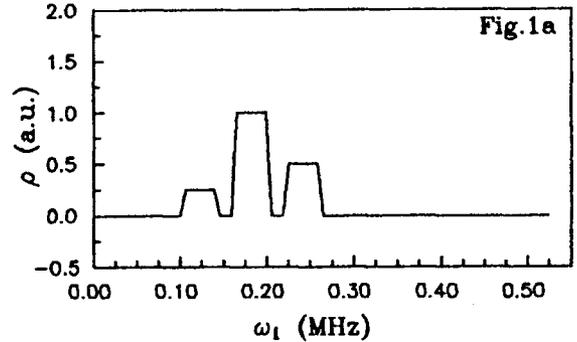


Fig. 1a: Ver texto

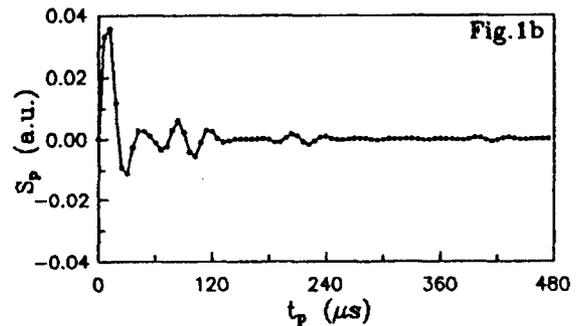


Fig. 1b: Ver texto

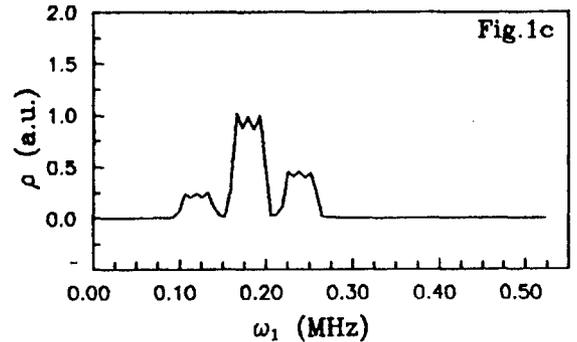


Fig. 1c: Ver texto

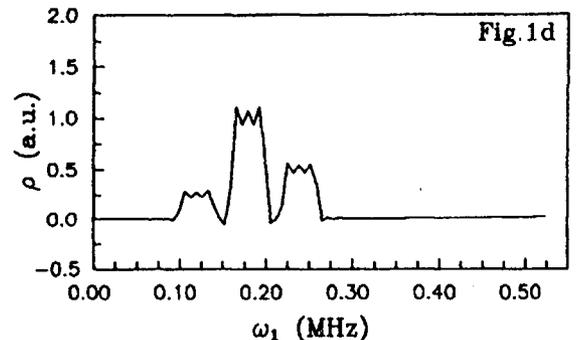


Fig. 1d: Ver texto

Truncamiento: Distintos grados de truncamiento en la pseudo-FID han sido analizado y las imágenes reconstruidas son mostradas en la Fig. 2. La pseudo-FID de la Fig. 2b fué calculada desde la imagen de prueba de la Fig. 2a. Inicialmente, ambas reconstrucciones (por MEM y TH) fueron obtenidas con los 80 puntos de datos, Fig. 2c y 2d. Las imágenes de las Fig. 2e-2f; Fig. 2g-2h y Fig. 2i-2j, corresponden a tomar 60, 40 y 20 datos de la pseudo-FID original, respectivamente. Los parámetros fueron $\Delta t_p = 3 \mu s$; $A = 10^{-6}$; la ventana de frecuencia es $\pi/2\Delta t_p$. En las reconstrucciones por MEM no aparecen fantasmas por truncamiento, y se tiene mejor resolución.

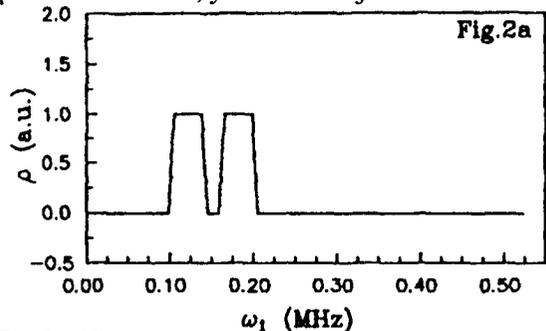


Fig. 2a: Ver texto

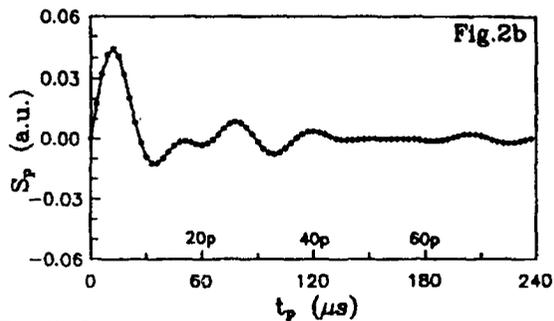


Fig. 2b: Ver texto

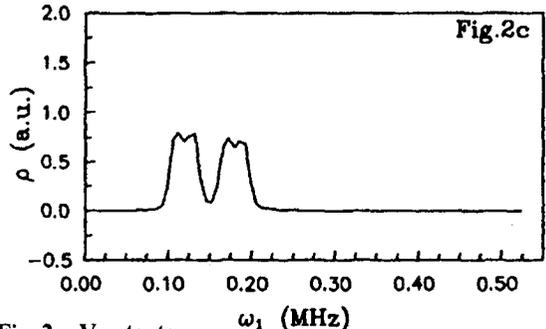


Fig. 2c: Ver texto

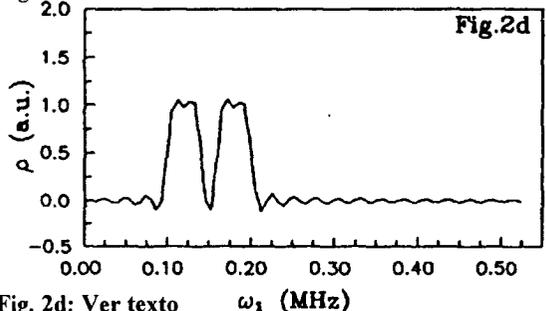


Fig. 2d: Ver texto

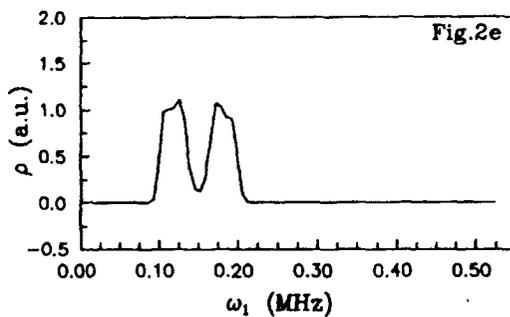


Fig. 2e: Ver texto

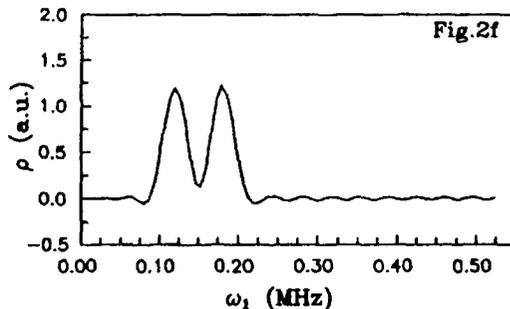


Fig. 2f: Ver texto

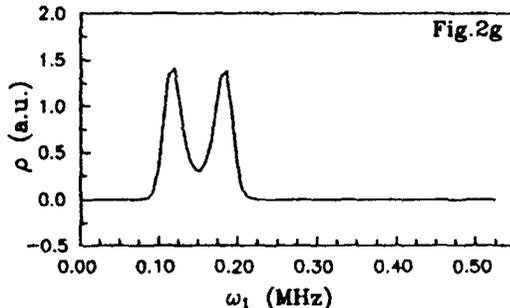


Fig. 2g: Ver texto

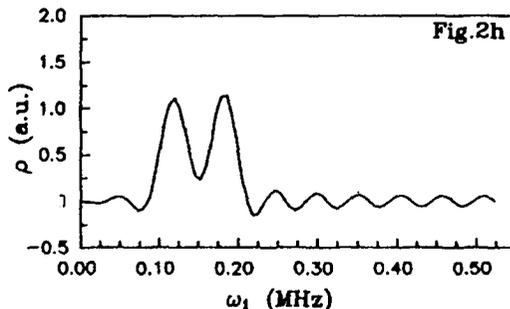


Fig. 2h: Ver texto

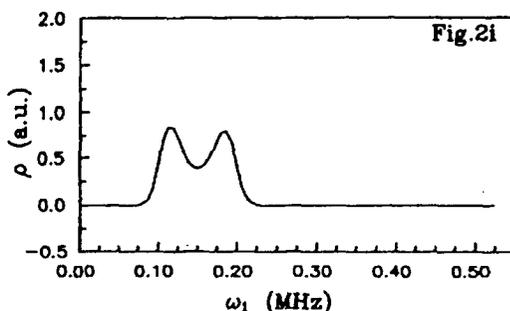


Fig. 2i: Ver texto

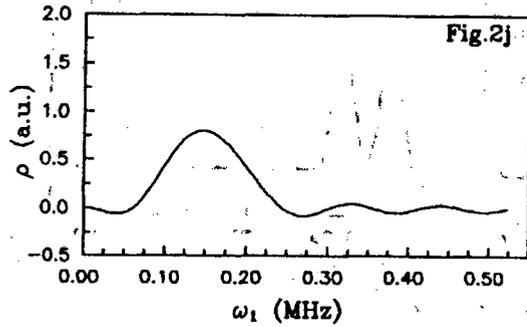


Fig. 2j: Ver texto

Ruido: Tres niveles de ruido generado fueron superpuestos a la pseudo-FID mostrada en la Fig. 2b. Relaciones señal-ruido de 10:1, 5:1, 3.3:1 fueron elegidas para las pseudo-FID con ruido mostradas en las Figs. 3a, 3b y 3c respectivamente. Las ventajas de MEM sobre la TH son obviamente claras desde Fig. 3. Las reconstrucciones fueron calculadas tomando σ_p aprox. 10% del valor máximo de la Pseudo-FID y $A = 10^{-4}$.

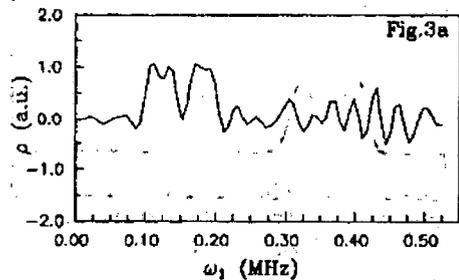
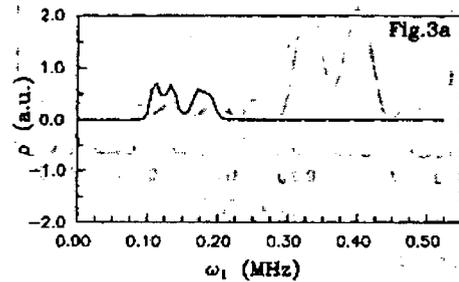
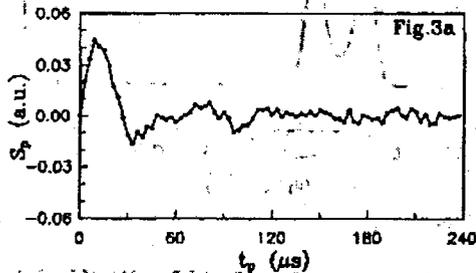


Fig. 3a: Ver texto

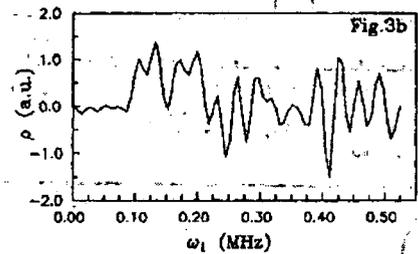
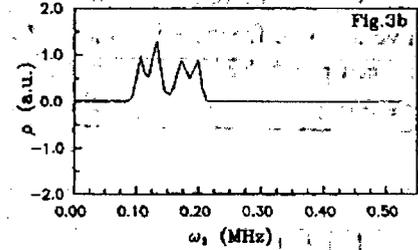
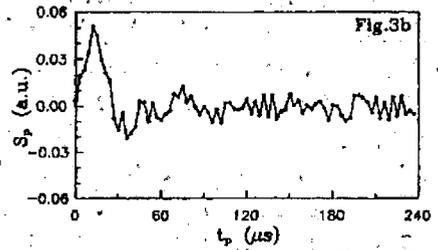


Fig. 3b: Ver texto

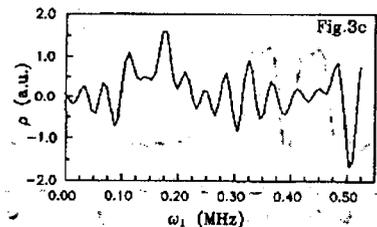
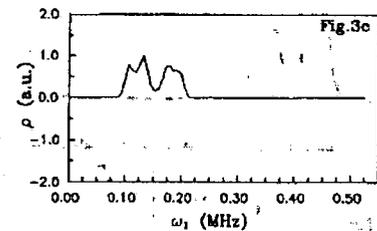
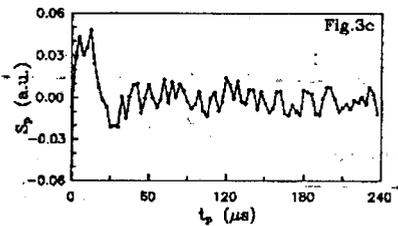


Fig. 3c: Ver texto

Corrección de Fase: Con el propósito de evaluar los efectos de la fase de la pseudo-FID sobre las imágenes reconstruidas, el origen del tiempo t_p de los datos de la Fig. 2b fue corrido en $2\Delta t_p$. Las Figs. 4a, b y c muestran las reconstrucciones obtenidas en diferentes etapas del procedimiento descrito en la sección IV.

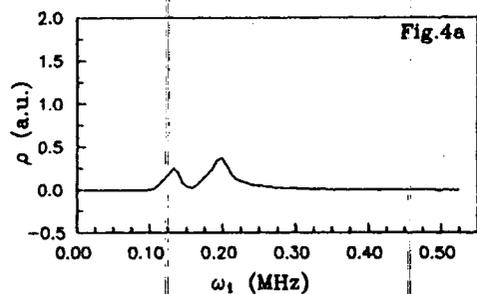


Fig. 4a: Ver texto

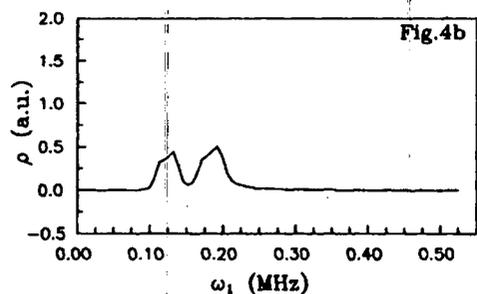


Fig. 4b: Ver texto

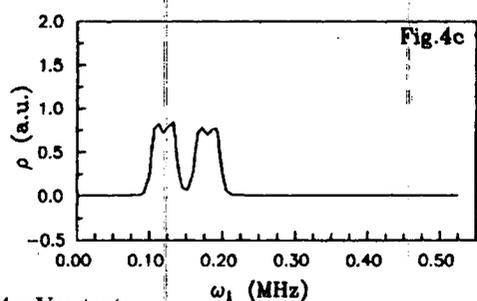


Fig. 4c: Ver texto

REFERENCIAS

1. Hoult D., J. Magn. Reson, **33**, 183, (1979).
2. Rommel E., Nickel P., Kimmich R. y Pusiol D., J. Magn. Reson. **91**, 630 (1990); Rommel E., Pusiol D., Nickel P. y Kimmich R., Meas. Sci. Technol, **2**, 866 (1991).
3. Rommel E., Kimmich R., Robert H. y Pusiol D., Meas Sci. Tech. **3**, 446-450 (1992).
4. Pratt J.C., Raghunathan P. y McDowel C.A., J. Magn. Reson. **20**, 313 (1975).
5. IEEE Proc., **131**, 6, 646-659 (1984).
6. Laue E.D., Skilling J., Staunton J., Sibisi S. y Brereton R., J. Magn. Reson., **62**, 437, (1985).
7. Hore P.J., J. Magn. Reson. **62**, 561, (1985).
8. Gull S.F. y Daniell G.J., Nature (London), **272**, 686, (1978).
9. Hore P.J. y Daniell G.J., J. Magn. Reson., **69**, 386, (1986).
10. Skilling J. y Bryan R.K., Mon. Not. R. Astr. Soc., **211**, 111, (1984).
11. Robert H.G., Trabajo Final de la Licenciatura, Fa.M.A.F., U.N.Córdoba, (1991).