

# Capítulo 6

## Análisis Espectral basado en FFT

En este capítulo se detalla el formato de la señal adquirida en una máquina de RMN y el procesado que se le aplica a fin de poder interpretar resultados. La transformada de Fourier es la base de la interpretación de los resultados de RMN, y se han desarrollado a lo largo de los años toda una serie de técnicas y algoritmos de procesado que facilitan la interpretación de los resultados y de los espectros.

La salida de los experimentos realizados en las máquinas RMN comerciales habituales suele ser un fichero con los datos de la señal temporal FID, digitalizada a una cierta frecuencia. A esta señal se le ha aplicado una demodulación de fase y cuadratura (I/Q) y se ha llevado a banda base, por lo que con una simple transformada de Fourier se obtiene el espectro de la señal, que es el resultado final deseado. La calidad de este espectro aún se puede mejorar aplicando algunas técnicas de procesado de señal, que son las que se detallan en este capítulo. Éstas técnicas también son útiles para compensar algunos de los efectos no deseados que introducen las máquinas que realizan los experimentos, y que se han comentado a lo largo del capítulo 2.

Los algoritmos y procesos detallados en el presente capítulo son los que se han venido utilizando típicamente desde la aparición de la resonancia magnética nuclear. En los siguientes capítulos se presentan técnicas de procesado que hasta ahora no se habían aplicado al análisis de resultados RMN.

## 6.1. Procesado de datos mediante Transformada de Fourier

La entrada a partir de la cual trabajan los programas que muestran los espectros son ficheros generados por máquinas RMN que contienen una señal digitalizada compleja, resultado de la demodulación I/Q, además de otros ficheros que especifican cuál era la configuración y el estado del instrumento en el momento de la adquisición de la señal.

La transformada de Fourier de ésta señal es el resultado del experimento RMN. Los programas que visualizan espectros RMN<sup>1</sup> permiten definir algunos parámetros para aplicar los métodos de procesado de señal, que cambian ligeramente el aspecto del espectro para facilitar su posterior interpretación.

Algunos de los métodos utilizados son el inventariado de la señal en el dominio del tiempo, que ayuda a estrechar los picos espectrales o a disminuir el nivel de ruido, o aplicar un drift correction, que consiste en eliminar el nivel de continua de la señal temporal para evitar un pico espúreo en el espectro.

A continuación se detallan las distintas opciones que ofrecen los programas usados para mostrar los espectros, que también se han implementado en la aplicación desarrollada para el presente proyecto y que se presentan en la figura 6.1.

## 6.2. NMR Viewer

Uno de los resultados del presente PFC es el desarrollo de una aplicación software mediante *MATLAB*, denominada *NMR Viewer*, que permite visualizar espectros y resultados RMN. Este programa permite visualizar los resultados, no solamente de los experimentos realizados en *AD Telecom*, sino también los de la mayoría de espectrómetros comerciales. En esta aplicación se han implementado todos los métodos de procesado descritos tanto en el presente capítulo como en el resto. Todo esto equipara las prestaciones del programa *NMR Viewer* con las existentes en el resto de programas que se usan para interpretar resultados de resonancia magnética nuclear.

En la figura 6.2 se puede ver el diagrama funcional del programa. Al

---

<sup>1</sup>Uno de estos programas es, por ejemplo, *MestreC* [11]

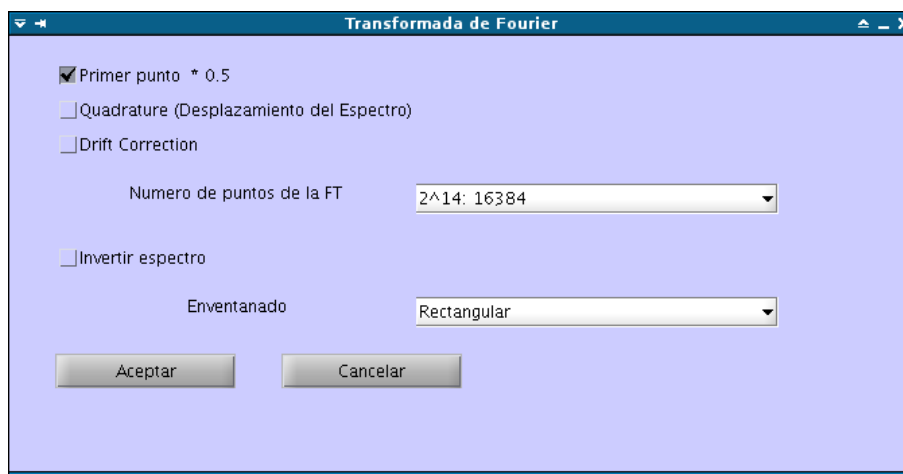


Figura 6.1: Opciones que presenta la aplicación en el momento de realizar la transformada de Fourier y sus valores por defecto

iniciar la aplicación, se debe cargar un fichero con una señal FID<sup>2</sup>, resultado de algún experimento de resonancia magnética. Una vez cargada la señal, se visualiza en la ventana principal del programa. En este punto se puede visualizar la fase de la señal FID, se puede distorsionar o se puede aplicar la transformada de Fourier o el estimador de mínima varianza<sup>3</sup> para pasar al dominio frecuencial. La opción de distorsionar la señal permite simular las condiciones de campo magnético no homogéneo que se plantean en el capítulo 7.

Una vez se presenta la señal en dominio frecuencial, las opciones del programa cambian. Una de las opciones de procesado es la corrección de fase<sup>4</sup>, mientras que las otras dos son los ecualizadores de dominio temporal y frecuencial, los cuales se analizan en el capítulo 7. También se pueden consultar las propiedades de la señal presentada (ver figura 6.3). Las propiedades presentadas son el ancho espectral y el rango de frecuencias (en *Hz* y en *ppm*, ver sección 2.2.1), el número de muestras que contiene la señal, y la frecuencia de la señal transmitida por el espectrómetro así como el tiempo de adquisición.

El programa permite, además, guardar en cualquier la señal visualizada

<sup>2</sup>La señal puede ser tanto una señal 1D como 2D, ver sección 2.3 del capítulo 2.

<sup>3</sup>Capítulo 8.

<sup>4</sup>Sección 6.6.

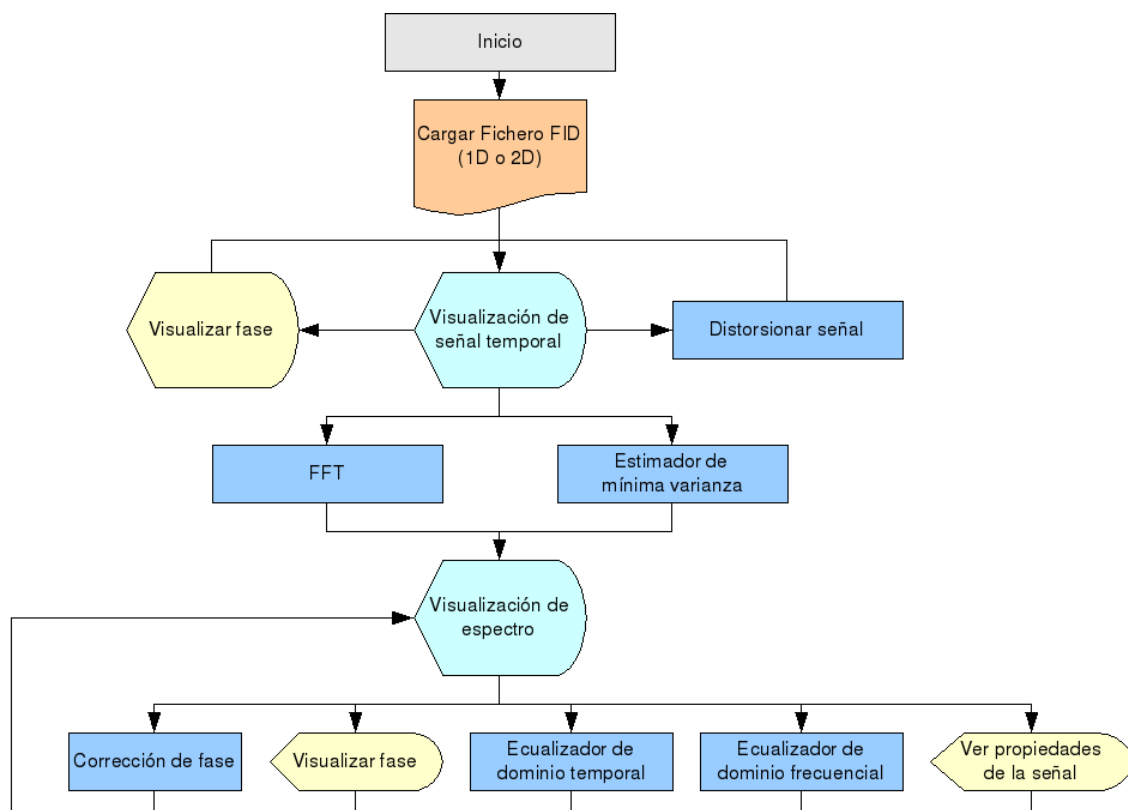


Figura 6.2: Diagrama funcional del la aplicación *NMR Viewer*.

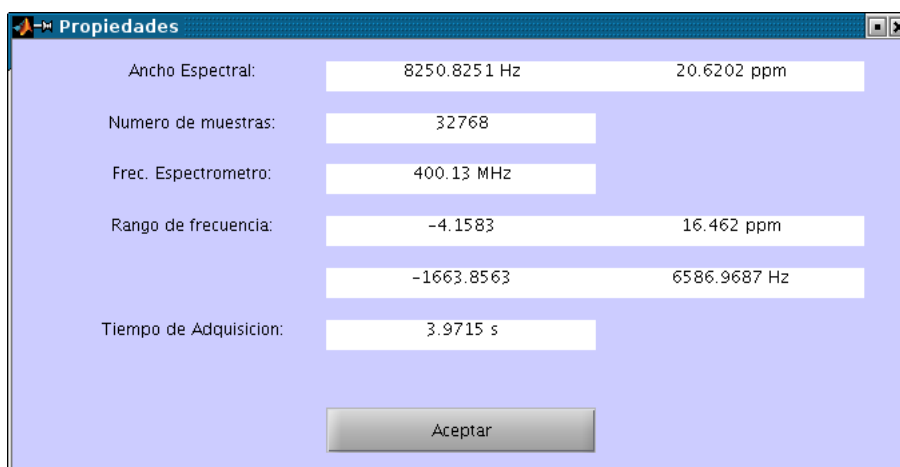


Figura 6.3: Propiedades de una señal representada.

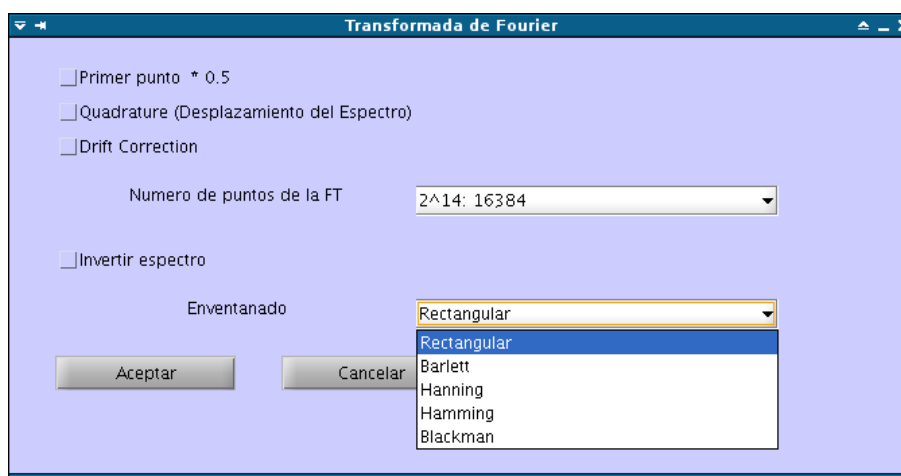


Figura 6.4: Opciones de enventanado

en formato *MATLAB* por si se desea hacer cualquier otro tipo de análisis o presentación con la misma.

Paralelamente a esta aplicación principal se han desarrollado diversas aplicaciones satélite con las que han sido comprobados el resto de métodos presentados en el proyecto, y concretamente todos los que se analizan en el capítulo 8.

### 6.3. Enventanado de señal

Uno de los procesos más importantes que se aplica a las señales en el análisis frecuencial basado en la transformada de Fourier es el enventanado temporal de la señal. En el contexto de la resonancia magnética, al enventanado también se le denomina *apodización*<sup>5</sup>. En la figura 6.4 pueden verse las distintas opciones de enventanado del programa *NMR Viewer*.

La señal FID ideal es una suma de senoides multiplicadas por una exponencial decreciente más ruido. Si consideramos la señal por tramos, la potencia de señal útil va disminuyendo a medida que avanza el tiempo, como puede observarse en el ejemplo de la figura 6.5.

Enventanar la señal FID sirve para dar más peso a un tramo u otro de la señal. A grandes rasgos, si damos más importancia a un tramo donde la señal

<sup>5</sup>En inglés *apodization*, literalmente, extraer el pie.

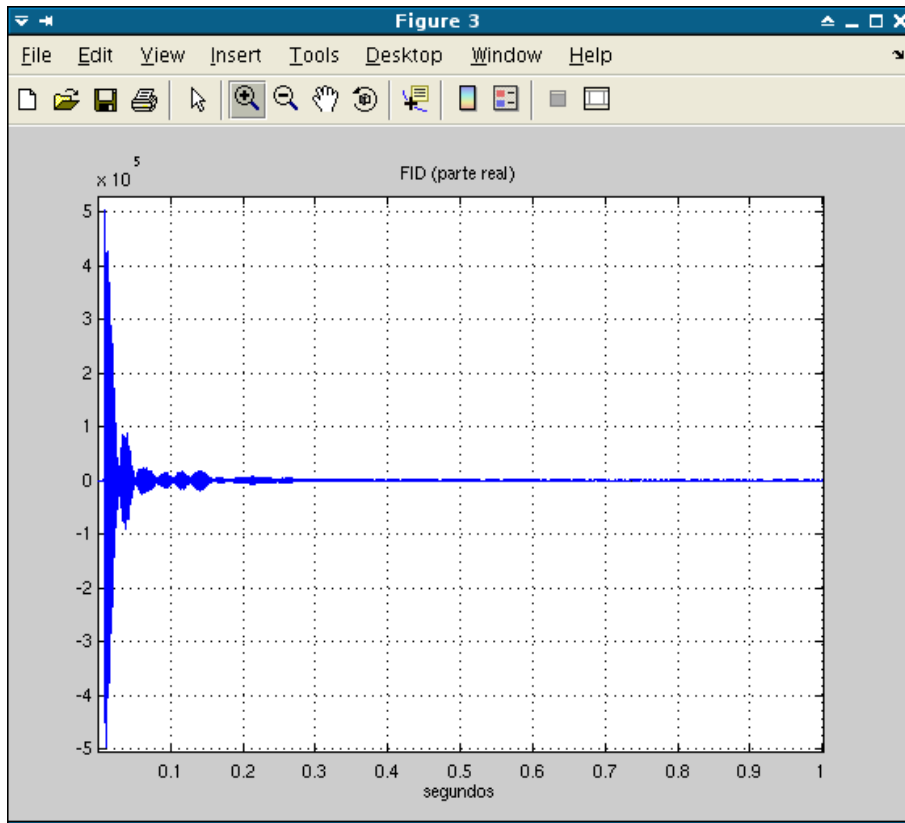


Figura 6.5: Señal FID con decaimiento rápido

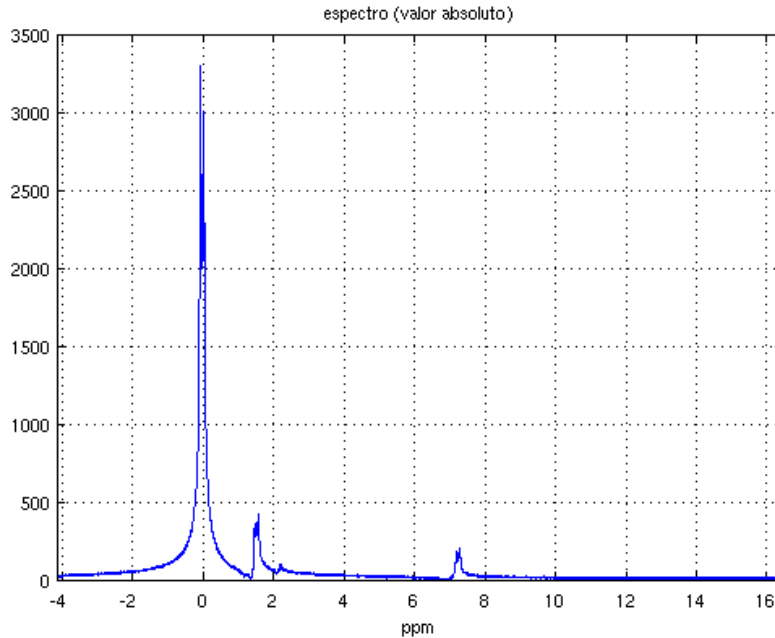


Figura 6.6: Ventana rectangular

útil es más clara, donde la relación señal a ruido es mayor, conseguiremos más exactitud en lo que se refiere a frecuencias espectrales; y si damos menos peso a las regiones donde la relación señal a ruido es menor, conseguiremos disminuir el ruido en el espectro y distinguir mejor los picos espectrales.

En la figura 6.6 se observa un cierto espectro, resultado de una resonancia magnética nuclear, que se ha representado usando una ventana rectangular, que es equivalente a no utilizar ninguna ventana. En las figuras 6.7, y 6.8 se ha representado el mismo espectro usando otras alternativas de enventanado. Se observa cómo el resultado cambia en función de la ventana elegida. A la hora de decidir el tipo de enventanado, se usa uno u otro en función de los resultados que se desea interpretar. En el cuadro 6.1 se detallan las características principales de cada ventana.

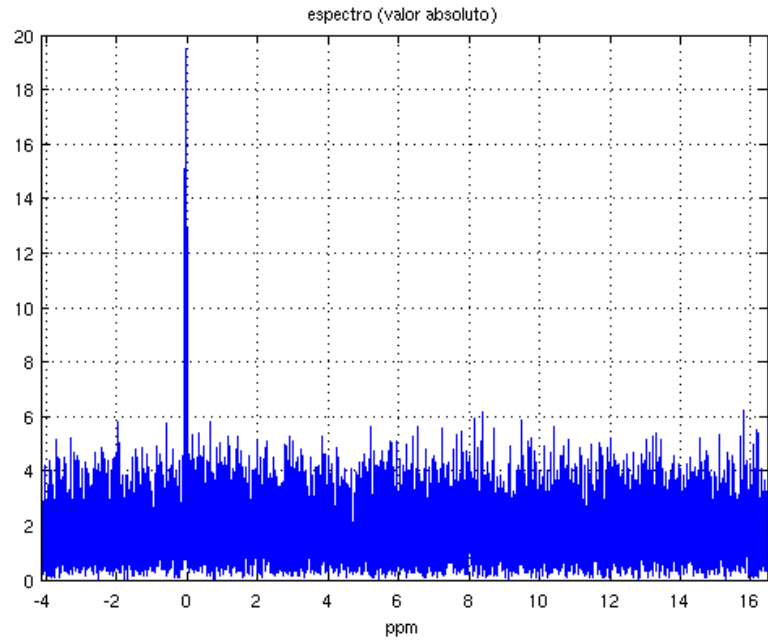


Figura 6.7: Ventana Hanning

Ventana	Ancho del lóbulo principal	Nivel de lóbulo principal a secundario (dB)
Rectangular	$4\pi/M$	13
Bartlett	$8\pi/M$	27
Hanning	$8\pi/M$	32
Hamming	$8\pi/M$	43
Blackman	$12\pi/M$	58

Cuadro 6.1: Características principales de las distintas ventanas



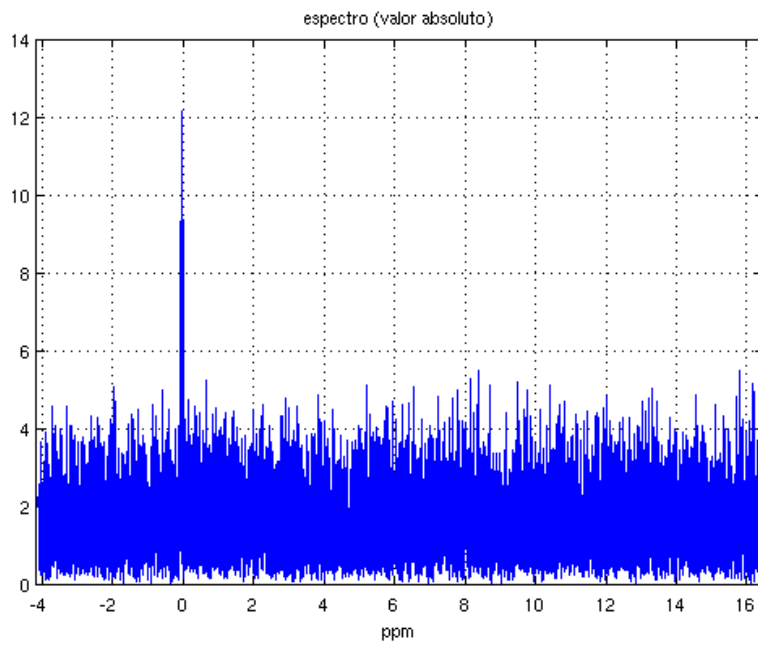


Figura 6.8: Ventana Blackman

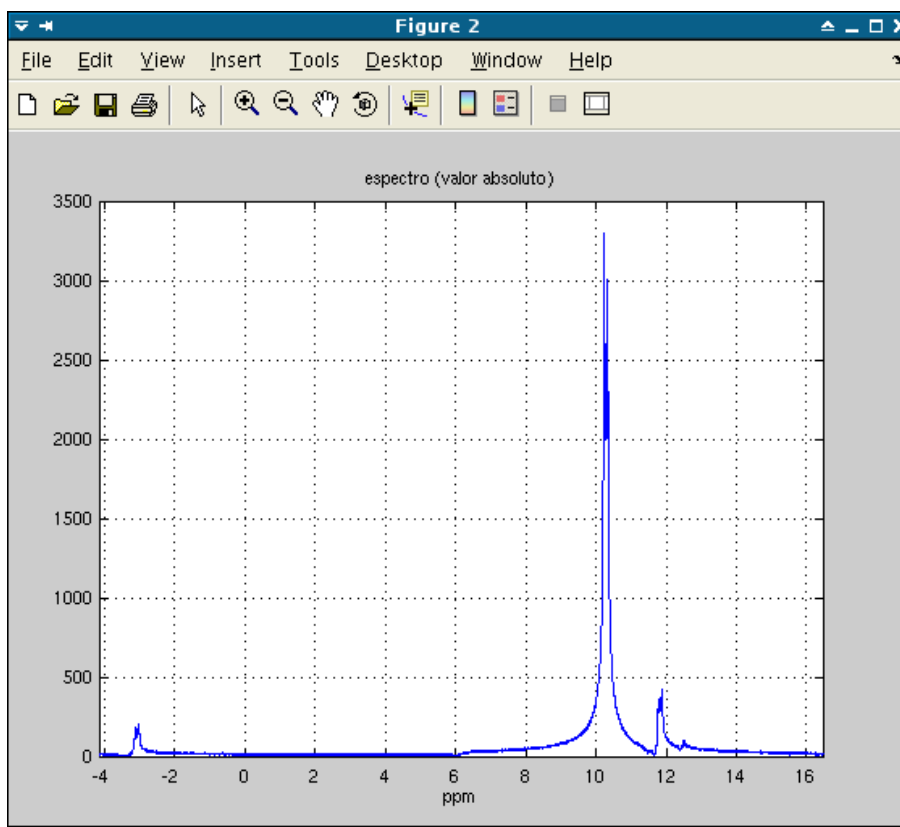


Figura 6.9: Ejemplo de espectro

## 6.4. Desplazamiento del espectro

No hay un consenso en cuanto al formato final de la señal FID en banda base, por lo que existe una discrepancia a la hora de interpretar espectros obtenidos con instrumentos comercializados por distintos fabricantes. Algunos de ellos proveen la señal FID desplazada  $\pi$  rad en el espectro respecto a otros. Por este motivo se incluye una opción para uniformizar el aspecto de los distintos espectros.

La opción de *quadrature correction* multiplica por  $-1$  las muestras impares de la señal antes de aplicar la transformada de Fourier. Esto es equivalente a multiplicar la señal por un coseno de frecuencia  $\pi$ , o a desplazar el espectro  $\pi$  rad.

En la figura 6.10 se puede ver el espectro de la figura 6.9 representado

## 6.5. DRIFT CORRECTION Y MULTIPLICACIÓN DEL PRIMER PUNTO<sup>67</sup>

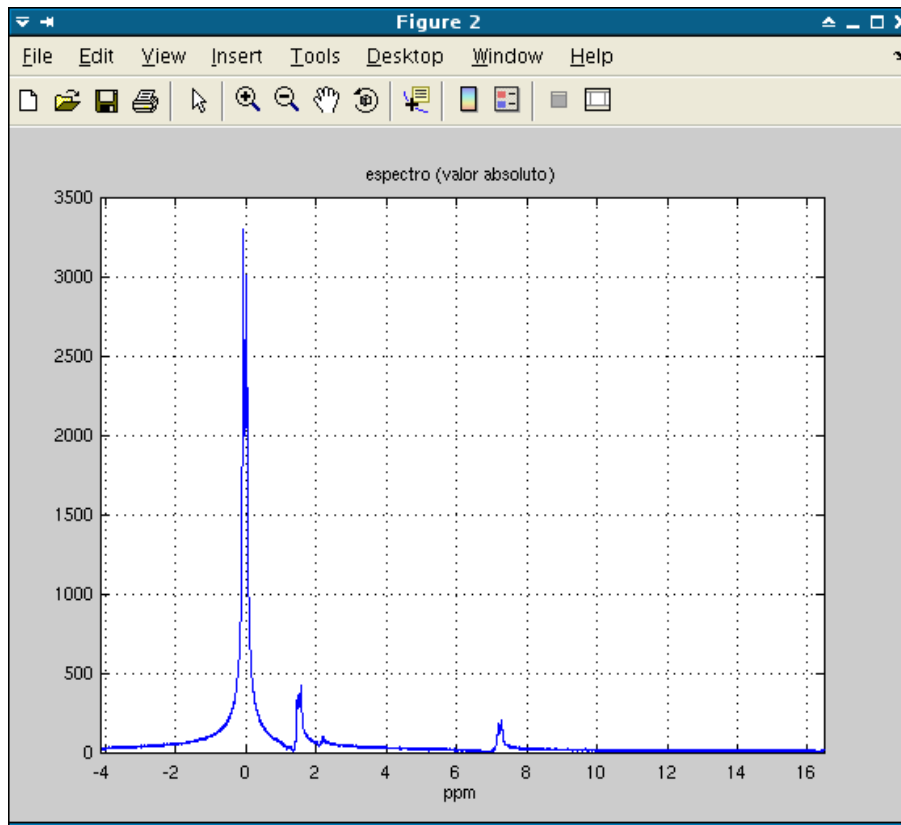


Figura 6.10: El espectro de la figura 6.9 con la opción de desplazamiento activada

con la opción de desplazar espectro activada.

### 6.5. Drift correction y multiplicación del primer punto

En ocasiones, el espectro está contaminado con un pico espúreo a frecuencia cero. Este pico corresponde a la componente continua que se añade en el proceso de digitalización de la señal, y es inexistente en la señal analógica. La opción *drift correction* elimina la componente continua de la señal temporal para evitar la aparición de este pico espúreo.

La multiplicación del primer punto de la FID por una constante (habitualmente

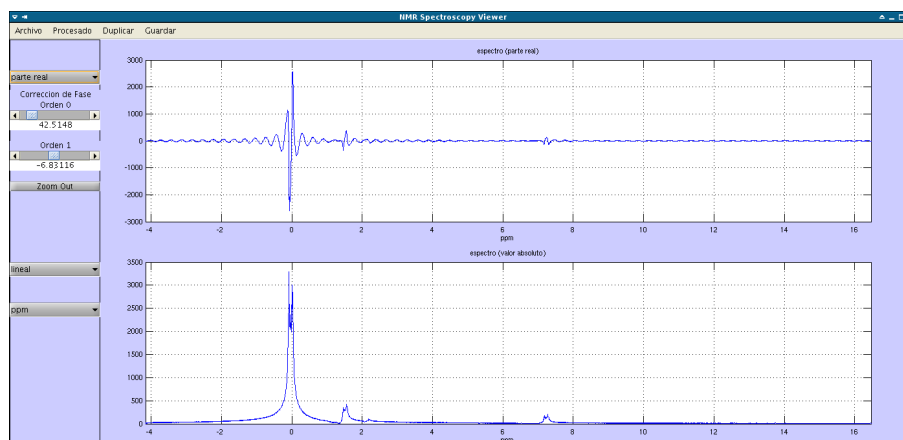


Figura 6.11: Las barras deslizantes permiten modificar los dos parámetros de la corrección de fase (ecuación 6.1)

se usa 0.5) es la opción dual de la *drift correction*. Se usa para evitar un desplazamiento vertical constante en el espectro.

Éstas dos opciones sólo son necesarias cuando se analizan resultados obtenidos con aparatos antiguos de ciertos fabricantes. Los equipos actuales, cuando están correctamente calibrados, no precisan del uso de ninguna de estas opciones. Se han incluido en el programa NMR Viewer para incorporar la compatibilidad con todo tipo de ficheros de resultados.

## 6.6. Corrección de fase

Las señales obtenidas tienen un error de fase que depende de la frecuencia, como se ha explicado en la sección 4.2. También hay un error de fase debido al error residual que existe en la uniformidad del campo magnético de los equipos.

El modelo utilizado típicamente aproxima este error en la fase como dependiente linealmente de la frecuencia, y se determina mediante dos parámetros. Concretamente, se aplica la fórmula de la ecuación 6.1 para aplicar la corrección de fase, donde los parámetros  $a$  y  $b$  se denominan, respectivamente, coeficientes de orden 0 y 1. En la figura 6.11 se observa cómo se aplica la corrección de fase determinando estos parámetros en el programa *NMR Viewer*. Podría usarse una estimación cuadrática o de orden

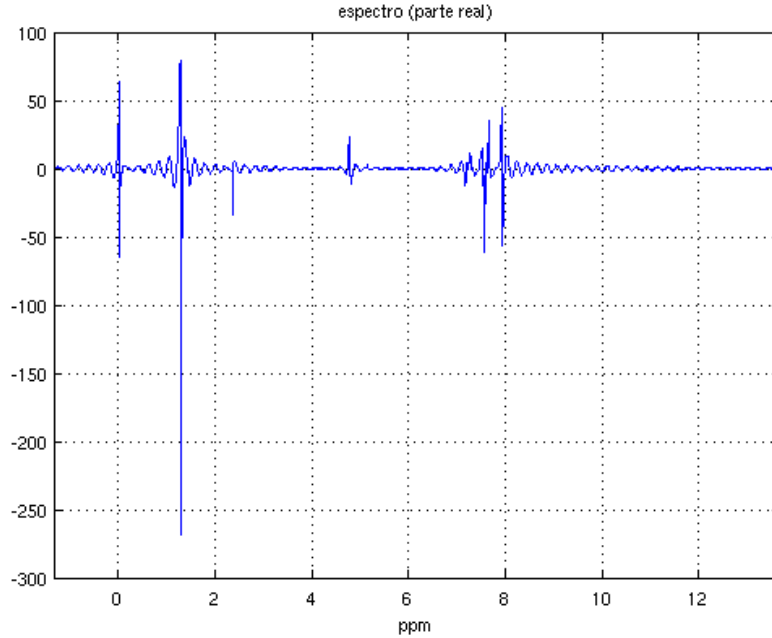


Figura 6.12: Ejemplo de espectro al que no se le ha corregido la fase. En estas condiciones no es posible interpretar correctamente el resultado, ya que su fase correspondería a la de la figura 6.14

superior, pero la aproximación lineal suele dar resultados suficientemente satisfactorios.

El resultado es que módulo del espectro no se varía, se modifica únicamente la fase del mismo, para corregir las modificaciones que ha sufrido a través de las distintas etapas de procesado previo.

$$X_{\text{corregida}}[f] = X_{\text{original}}[f] e^{j(a+bf)} \quad (6.1)$$

En las figuras 6.12 y 6.13 se representa la parte real un espectro antes y después de aplicarle la corrección de fase. Se observa que si no se aplica no es posible interpretar correctamente el espectro. En las figuras 6.14 y 6.15 se representa la fase de los espectros antes y después de aplicar la corrección. En este caso, la fase estaba muy distorsionada, pero una vez corregida tiene aspecto de señal constante a trozos.

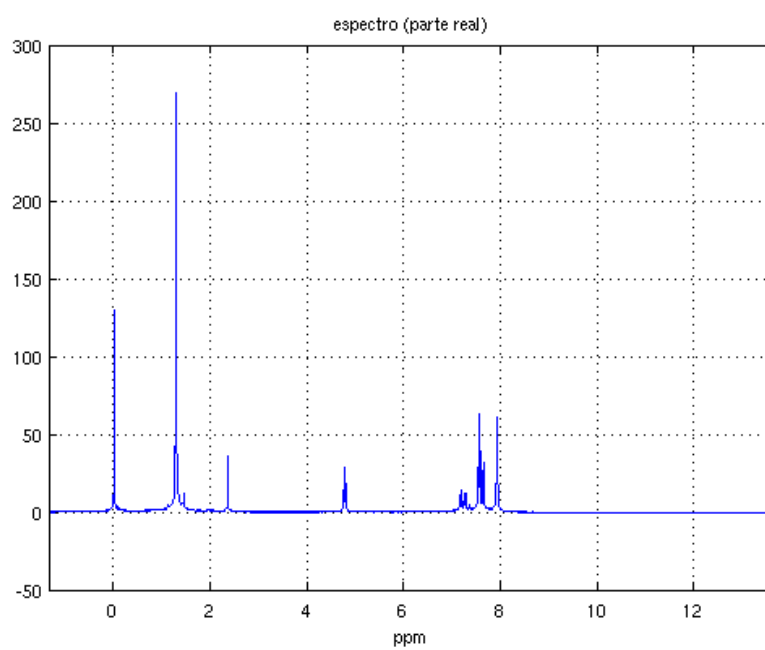


Figura 6.13: Espectro de la figura 6.12 después de haber aplicado la corrección de fase

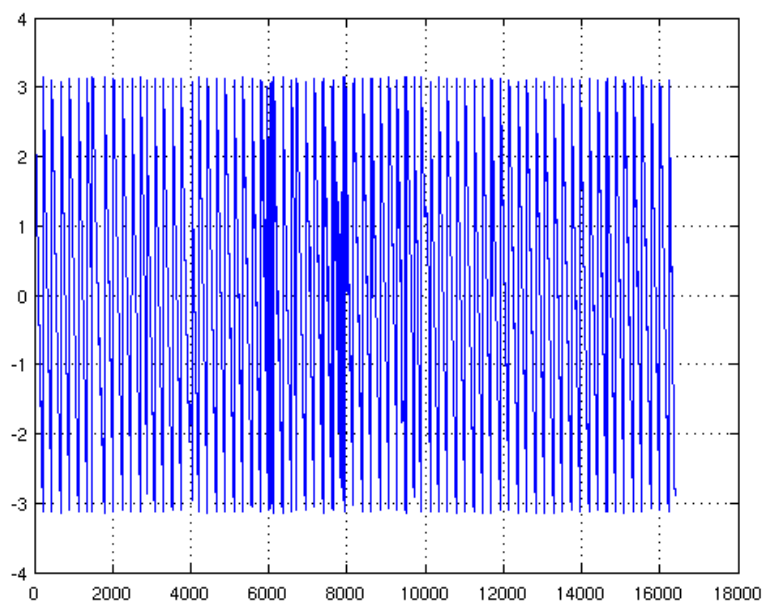


Figura 6.14: El programa NMR viewer permite visualizar el valor de la fase del espectro antes de corregirla (representado entre  $-\pi$  y  $\pi$ )

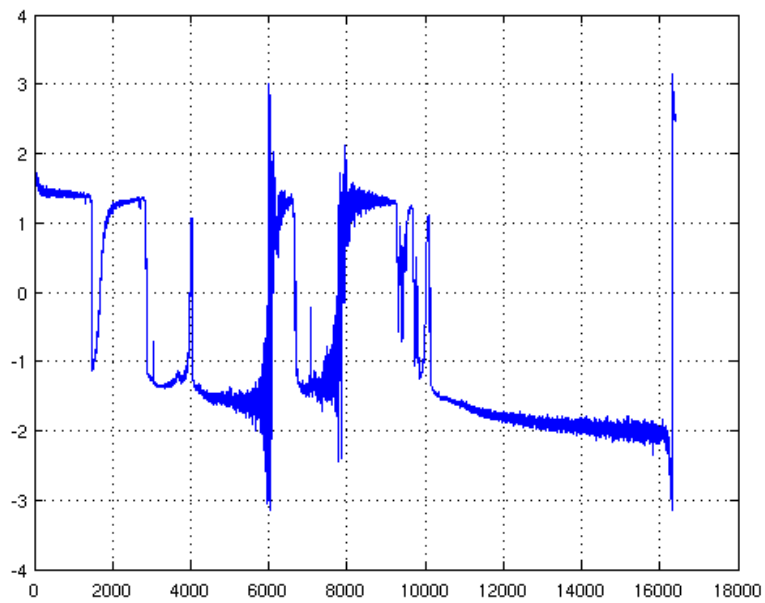


Figura 6.15: Fase del espectro de la figura 6.13. Una vez corregida, la fase tiene aspecto de señal aproximadamente constante a trozos más ruido.



## 6.7. Conclusiones

En este capítulo se han presentado los métodos de procesado basados en la transformada de Fourier que se aplican a las señales adquiridas con espectrómetros de resonancia magnética. Todos estos métodos se han implementado en la aplicación NMR Viewer, por lo que es posible usarla para visualizar los espectros resultantes de cualquier espectrómetro comercial.

Habitualmente, la aplicación de estos métodos es suficiente para obtener un espectro de calidad aceptable, debido a la gran precisión de los equipos comerciales, que pueden llegar a costar decenas de millones de euros, como se ha comentado en el capítulo 1. En el caso del presente proyecto, se pretende desarrollar un equipo completo cuyo precio sea diversos órdenes de magnitud inferior, por lo que es necesaria la aplicación de otras técnicas de procesado más complejas, que se presentan en los siguientes capítulos.

