



Analyse spectrale paramétrique et non-paramétrique du signal de précession libre en RMN

Salim BELAROUCI* et M'hamed KHELIF

Laboratoire de génie biomédical, Faculté des sciences de l'ingénieur, Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, Algérie

* Correspondance, courriel : Salimbelar2003@yahoo.fr

Résumé

Ce travail consiste à dresser une étude comparative entre les méthodes d'estimation spectrale non paramétrique basées essentiellement sur la technique du périodogramme avec ses variantes et les méthodes d'estimation spectrale paramétrique notamment la modélisation autorégressive (AR), à moyenne mobile (MA), et la modélisation hybride autorégressive à moyenne mobile (ARMA). Cette panoplie de méthodes est appliquée à l'analyse spectrale du signal de précession libre (FID; Free Induction Decay) dans les expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN). Dans cet article, nous montrons clairement les avantages des méthodes paramétriques.

En ce sens qu'elles se caractérisent par une très bonne résolution spectrale et une bonne stabilité statistique. Ces deux paramètres sont indispensables pour estimer la constante de relaxation spin-spin de l'échantillon, ainsi que les déplacements chimiques. Les résultats obtenus par la modélisation ARMA sont meilleurs par rapport à ceux des modèles AR en terme d'ordre de prédiction.

Mots-clés : *Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), Décroissance Libre de l'Induction Magnétique (FID), Densité Spectrale de Puissance (PSD), Autorégressive à Moyenne Ajustée (ARMA), Critère d'Information d'Akaike (AIC), Erreur Finale de Prédiction (FPE).*

Abstract

Parametric and non-parametric spectral analysis of the free induction decay in NMR

This work consists in making a comparative study between the nonparametric spectral estimate methods based primarily on the periodogram technique with its alternatives,

and parametric spectral estimate methods, in particular Auto-Regressive modeling (AR), Moving Average (MA) and hybrid modeling Auto-Regressive and Moving Average (ARMA) applied to the spectral analysis of the informative signal within experimentations of Nuclear Magnetic Resonance (NMR). The advantage of these methods compared to the nonparametric methods is to allow a tradeoff between two performances of spectral estimate: spectral resolution and statistical stability. These two parameters are essential to estimate the relaxation time spin-spin of the studied sample, as well as its chemical shifts. The obtained results using ARMA modeling are better in comparison to those of the AR models especially in term of prediction order.

Keywords : *Nuclear Magnetic Resonance (NMR), Free Induction Decay (FID), Auto-Regressive with Moving Average (ARMA), Akaike Information Criterion (AIC), Final Prediction Error (FPE).*

1. Introduction

Le phénomène de la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) est exploité en spectroscopie et en imagerie. Sous ces deux aspects, la RMN est une méthode d'analyse extrêmement performante utilisée pour les investigations dans le cœur de la matière. La signature de ces investigations est appelée signal de précession libre ou Free Induction Decay (FID) [1-4].

Pour des expériences classiques de RMN, le signal FID est analysé par des méthodes non paramétriques : FFT (Fast Fourier Transform), Périodogramme, Corrélogramme, etc., et par des méthodes paramétriques : AR (Auto-Regressive modelling), ARMA (Auto-Regressive with Moving Average) [5]. Ces méthodes ont pour but d'estimer la densité spectrale de puissance du FID; plus précisément le déplacement chimique δ , la fréquence de résonance ν_0 et le temps de relaxation spin-spin T_2 . Ces trois paramètres sont d'une importance capitale pour l'identification de l'échantillon sous investigation [4,6].

La représentation du signal RMN sous la forme de sa répartition de puissance en fonction de la fréquence permet souvent d'extraire de manière plus immédiate l'information utile. A la différence de l'estimation spectrale non-paramétrique, qui ne faisait aucune hypothèse sur le signal observé $x(n)$, si ce n'est les propriétés de stationnarité à l'ordre 2, l'estimation spectrale paramétrique suppose que ce signal suit un modèle donné [7]. Ce modèle comporte un certain nombre de paramètres qui sont déterminés en fonction du signal observé.

2. Analyse spectrale non paramétrique du signal FID

2-1. Formalisme théorique du périodogramme

L'hypothèse de stationnarité du second ordre au moins et d'ergodicité du signal FID nous permet d'écrire la relation suivante [7] :

$$P(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} x(t)x^*(t-\tau)e^{-j2\pi f\tau} d\tau \quad (1)$$

où :

$P(f)$: densité spectrale de puissance à estimer

$x(t)$: enregistrement temporel du signal FID

T : durée d'observation

Nous pouvons aussi introduire le spectre complexe de la réalisation tronquée du processus $x(t)$ comme suit :

$$X_{2T}(f) = \int_{-T}^{+T} x(t)e^{-j2\pi ft} dt \quad (2)$$

Dont le carré donne :

$$\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 = \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} \int_{-T}^{+T} x(u)x^*(v)e^{-j2\pi fu} e^{+j2\pi fv} dudv \quad (3)$$

L'espérance mathématique de cette expression nous donne :

$$E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} \int_{-T}^{+T} r_{xx}(u-v)e^{-j2\pi f(u-v)} dudv \quad (4)$$

En effectuant alors le changement de variable suivant : $\begin{cases} \tau = u - v \\ v' = v \end{cases}$

$$E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = \frac{1}{2T} \int_{\tau=0}^{+2T} r_{xx}(\tau)(2T-|\tau|)e^{-j2\pi f\tau} d\tau + \int_{\tau=0}^{-2T} r_{xx}(\tau)(-2T+|\tau|)e^{-j2\pi f\tau} d\tau \quad (5)$$

Après ces changements de variables et les transformations adéquates, nous obtenons finalement l'expression suivante :

$$E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = \int_{-2T}^{+2T} r_{xx}(\tau) \left(1 - \frac{|\tau|}{2T} \right) e^{-j2\pi f\tau} d\tau \quad (6)$$

$$E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = TF \left[r_{xx}(\tau) \left(1 - \frac{|\tau|}{2T} \right) I_{4T} \right] \quad (7)$$

I_{4T} indique l'intervalle d'intégration ($[-2T, +2T]$)

En vertu du théorème de Plancherel, l'expression précédente prend la forme ci-dessous :

$$E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = P(f) * TF \left[\left(1 - \frac{|\tau|}{2T} \right) I_{4T} \right] \quad (8)$$

Lorsque T tend vers l'infini, le deuxième terme du produit de convolution tend vers $\delta(f)$, d'où

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} E \left[\frac{1}{2T} |X_{2T}(f)|^2 \right] = P(f) \quad (9)$$

En considérant alors le cas numérique, où l'observation du signal $x(t)$ se résume à N valeurs échantillonnées à la période T_e , la densité spectrale de puissance peut être déterminée par l'estimateur suivant :

$$P_{per}(f) = \frac{1}{NT_e} \left| \sum_{n=0}^{N-1} x(nT_e) e^{-j2\pi nT_e f} \right|^2 \quad (10)$$

Cet estimateur de la densité spectrale de puissance du signal $x(nT_e)$ est appelé périodogramme.

2-2. Applications

Le signal FID utilisé pour cette application est caractérisé par :

- Fréquences d'offsets (déplacements chimiques) respectives de 200, 590, 600, 610 et 1000 Hz,
- Constantes de relaxation transversales respectives de $T_2 = 0.2, 0.28, 0.16, 0.28$ et 0.33 s,
- D'une durée d'acquisition de 1.02375 s,
- D'un nombre de points de $N = 4096$.

La fréquence d'échantillonnage est de 4 kHz.

Ce FID est perturbé par un bruit blanc gaussien [8,9] de valeur moyenne nulle et de variance unitaire (SNR = 23.52 dB).

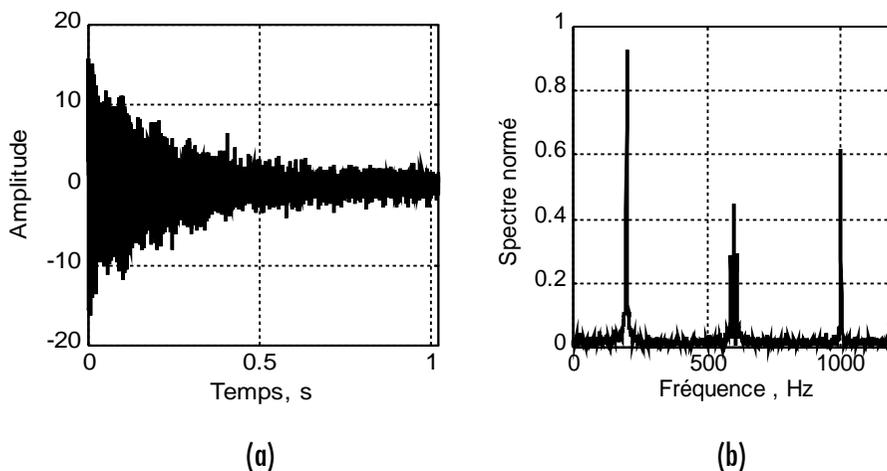


Figure 1 : Représentation temporelle (a), spectre normé du signal FID utilisé (b)

Le périodogramme de ce FID obtenu avec normalisation par rapport au pic maximal est donné par la **Figure 2**.

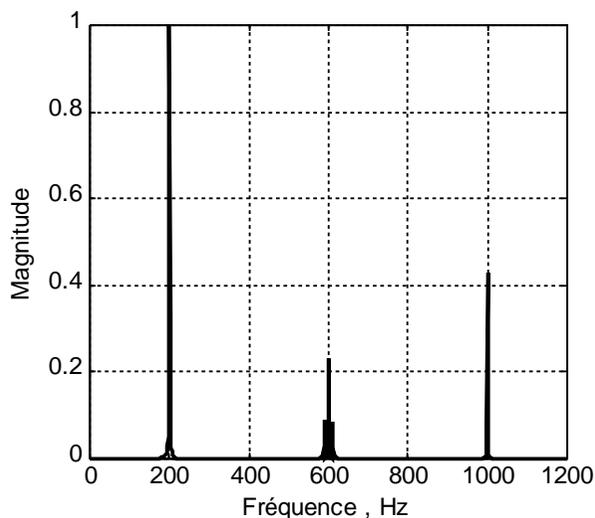


Figure 2 : Périodogramme normalisé du signal FID.

Dans ce travail nous déterminerons le déplacement chimique, la constante de relaxation spin-spin T_2 et la densité électronique autour du noyau considéré. Ces paramètres peuvent être déduits à partir de :

- la position des pics de résonance
- la largeur à mi-hauteur de chaque pic.
- l'amplitude de chaque pic

Le **Tableau 1** regroupe ces différents paramètres :

Tableau 1 : Paramètres spectraux du signal FID.

	Pic ₁	Pic ₂	Pic ₃	Pic ₄	Pic ₅
Magnitude (v^2/Hz)	1	0.0918	0.2309	0.0842	0.4285
Largeur ΔU à mi-hauteur (Hz)	1.75	1.3200	2.4500	1.4500	1.200
Position des pics (Hz)	200	950	600	610	1000

2-3. Propriétés du périodogramme

Le périodogramme constitue un estimateur de la densité spectrale de puissance du processus $x(nT_e)$. Les qualités requises de l'estimateur peuvent s'exprimer en fonction du biais (moment d'ordre 1) et de la variance (moment d'ordre 2) [7,10].

2-3-1. Biais

Le biais de cet estimateur mesure la différence entre la moyenne des réalisations et la vraie valeur du paramètre à estimer. Calculons alors l'espérance du périodogramme $P_{per}(f)$.

$$E[P_{per}(f)] = P(f) * N \left(\frac{\sin \pi f N}{N \sin \pi f} \right)^2 \quad (11)$$

Sur la base de cette équation il apparaît clairement que l'estimation de la densité spectrale de puissance $P(f)$ du processus $x(nT_e)$ est biaisé. Lorsque N tend vers l'infini ce filtre tend vers $\delta(f)$, le périodogramme est donc asymptotiquement sans biais.

2-3-2. Variance

La moyenne est un critère de performance de l'estimateur, mais il est insuffisant. En effet, si pour cet estimateur le biais est nul mais que les fluctuations de l'estimée autour de sa moyenne sont importantes ; alors l'estimateur est peu précis. Pour juger de l'importance de ces fluctuations, nous faisons appel à la variance. Sous certaines conditions le calcul de la variance nous donne :

$$\text{var}[P_{per}(f)] = P(f) \left[1 + N \left(\frac{\sin 2\pi f N}{2\pi f N} \right)^2 \right] \quad (12)$$

Cette variance peut diminuer par une décomposition de l'enregistrement $x(nT_e)$ de longueur N en un ensemble de L segments de largeur K . Pour chaque segment, nous associons une fenêtre de pondération dans le but d'avoir un bon compromis entre le biais et la variance, ce principe représente la base de l'estimateur de Welch.

2-4. Estimateur de Welch [7,8,10,11]

Cette technique consiste à estimer la Densité Spectrale de Puissance (DSP) du FID par moyennage des L périodogrammes partiels propres à chaque segment modifié par la fenêtre de pondération $\omega(t)$.

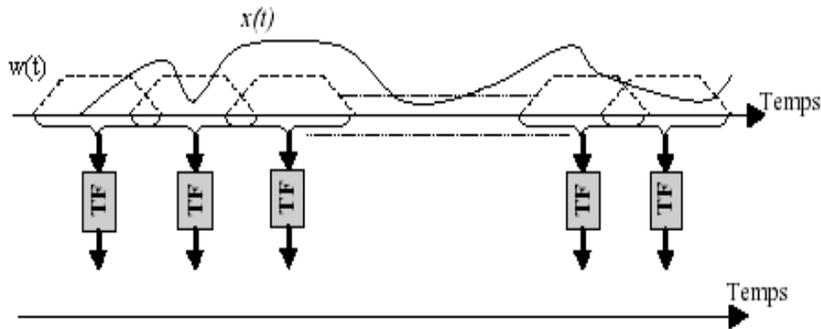


Figure 3 : Principe de l'estimateur de Welch.

La densité spectrale de puissance $P_{Welch}(f)$, en considérant l'algorithme de Welch, est obtenue par :

$$P_{welch}(f) = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{L-1} P_l(f) \quad (13)$$

$$\text{avec : } P_l(f) = \frac{1}{K} \left| \sum_{n=0}^{K-1} x(n+IK)\omega(n)e^{-j2\pi n f} \right|^2 \quad (14)$$

où $P_l(f)$ est le périodogramme de chaque segment.

L'objectif de cette étude est d'améliorer la qualité de l'estimation de Welch en agissant sur le type et la taille de la fenêtre d'apodisation, ainsi que l'intérêt de cette méthode vis-à-vis de l'influence du bruit sur le signal FID.

2-4-1. Effet du type de la fenêtre de troncature

Dans cette partie le signal FID est segmenté successivement par les fenêtres d'apodisation Boxcar, Bartlett, Blackman, Hamming, Hanning, Kaiser et Chebyshev, de durée 0.2557 (segment de 1024 points). L'étude comparative sera axée sur les valeurs d'amplitude de chacun des pics pour les deux variantes du périodogramme. Nous regroupons alors les résultats des simulations sur le **Tableau 2**.

Tableau 2 : Magnitudes des DSP pour différentes fenêtres d'apodisation.

	Pic ₂		Pic ₃		Pic ₄		Pic ₅	
	Mag (v ² /Hz)	% d'erreur						
Boxcar	0.0815	11.22	0.1978	14.34	0.0620	26.37	0.3228	24.67
Bartlett	0.0606	33.99	0.2249	2.60	0.0570	32.30	0.3197	25.39
Blackman	0.0684	25.49	0.2492	7.93	0.0696	17.34	0.3173	25.95
Hamming	0.0658	28.32	0.2304	0.20	0.0625	25.77	0.3193	25.48
Hanning	0.0644	29.85	0.2380	3.07	0.0646	23.28	0.3185	25.67
Kaiser	0.0654	28.76	0.2380	3.07	0.0646	23.28	0.3185	25.67
Chebyshev	0.0760	17.21	0.2002	13.30	0.0718	14.49	0.3080	27.89

La largeur à mi-hauteur de chaque pic de résonance représente un paramètre fondamental pour la détermination des constantes de relaxation spin-spin qui sont liées directement à la résolution spectrale. D'un autre côté, cette résolution est influencée par le degré de troncature du signal à l'échelle temporelle, c'est-à-dire que plus la taille de la fenêtre est minimale, mauvaise est la résolution spectrale. Notre objectif est d'améliorer ce paramètre à partir du choix du type de la fenêtre d'analyse, nous constatons que la fenêtre de *Chebyshev* $\omega(k)$ donne de bons résultats moyennant un choix judicieux de la constante β , constante d'ondulation de la bande d'arrêt (Stop Band Ripple) donnée dans l'expression suivante :

$$\omega(k) = FFT^1 [Cos(n Cos^1[\beta Cos(\pi k/n)]) / Cosh(n Cosh^1(\beta))], k=0 \dots n-1 \quad (15)$$

Pour β grand (de l'ordre de 50 dB), cette fenêtre donne de bons résultats sur la magnitude. Le *pic 3* atteint une valeur de 0.232 (**Tableau 2**) correspond à une erreur de 0.4 %. Par contre, l'erreur sur la largeur à mi-hauteur est de 67.5 %.

Pour β petit, (de l'ordre de 16 dB), l'erreur sur la largeur à mi-hauteur diminue pour atteindre 40 %. Alors il faut trouver un bon compromis pour la valeur du paramètre β pour minimiser ces erreurs.

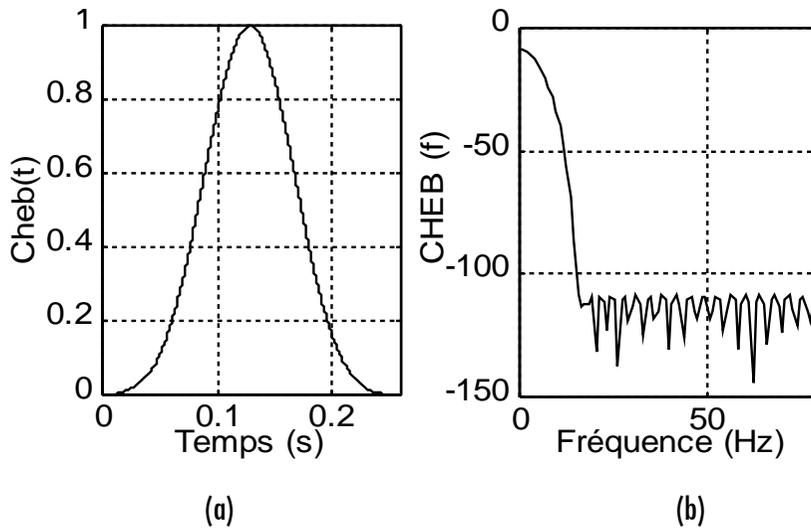


Figure 4 : Représentations temporelle (a) et spectrale (b) de la fenêtre Chebyshev caractérisée par une constante $\beta = 100$ dB.

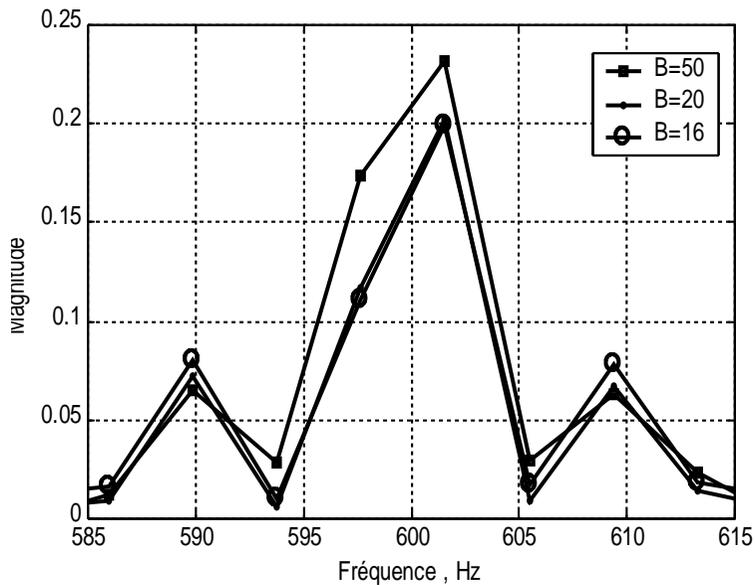


Figure 5 : Influence du β sur la résolution spectrale.

Une autre remarque sur la représentation spectrale pour une constante β petite, est la déformation de la ligne de base du spectre (**Figure 6**).

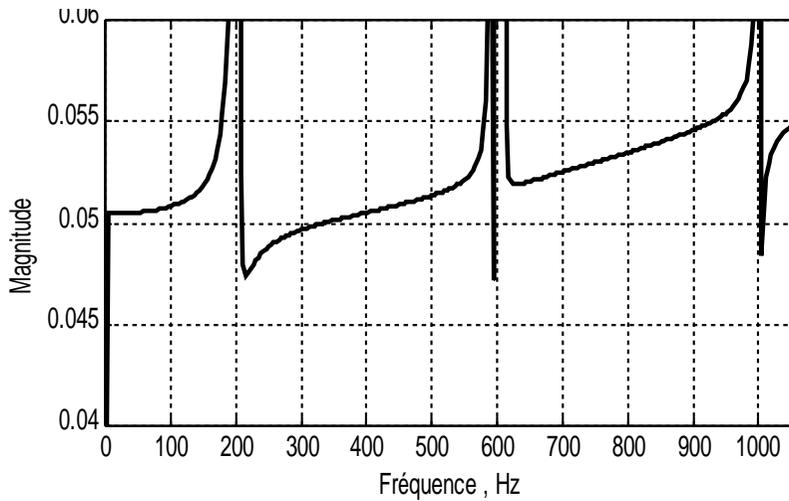


Figure 6 : Variation de la ligne de base du spectre pour $\beta = 10$ dB.

2-4-2. Effet de la durée de la fenêtre de troncature

Un autre aspect de cette étude concerne le temps de calcul qui est lié au recouvrement entre fenêtres ainsi que leurs durées. Mais cette performance du temps de calcul se fera au détriment de la qualité des spectres.

Le recouvrement entre fenêtres est un paramètre essentiel pour la qualité du spectre. Les différentes simulations que nous avons menées nous montrent qu'un recouvrement de 50 % (moitié de la fenêtre) donne de meilleurs résultats. A titre d'exemple pour la fenêtre *Hamming*, faisons une comparaison entre l'estimateur de Welch obtenu précédemment sans recouvrement (0 %), et celui obtenu avec un recouvrement de (50 %). Les différents résultats pour les raies de résonance qui nous intéressent sont regroupés dans le **Tableau 3**.

Tableau 3 : Magnitudes des DSP avec et sans recouvrement des fenêtres d'apodisation.

Recouvrement	Pic ₂		Pic ₃		Pic ₄		Pic ₅	
	Mag (v ² /Hz)	% d'erreur						
0 %	0.0658	28.32	0.2304	0.20	0.0625	25.77	0.3193	25.48
50 %	0.0720	21.57	0.2200	4.30	0.0698	17.10	0.3648	13.14

Pour illustrer l'effet de la largeur de la fenêtre d'apodisation sur le temps de calcul et la qualité spectrale, nous avons effectué un ensemble de mesures des temps CPU nécessaire pour estimer la DSP par cette méthode pour trois largeurs respectives ; 512, 1024, 2048 (**Tableau 4**).

Tableau 4 : Temps CPU pour différentes valeurs de largeur de la fenêtre Hanning.

Largeur (points)	512	1024	2048
Temps CPU(s)	0.047	0.063	0.078

2-5. Etude de l'estimateur de Welch en présence du bruit

Dans cette nous avons choisi deux types de bruit additifs simulés, l'un est blanc gaussien et l'autre coloré de variance unitaire et de valeur moyenne nulle. Pour ces deux bruits, le rapport signal sur bruit SNR est de 23.52 dB

La fenêtre d'analyse choisie est de type Hanning de durée de 0.25575 s

Les densités spectrales de puissance du FID calculées à partir des deux méthodes pour les deux types de bruits additifs sont regroupées dans les **Figures 7 et 8**.

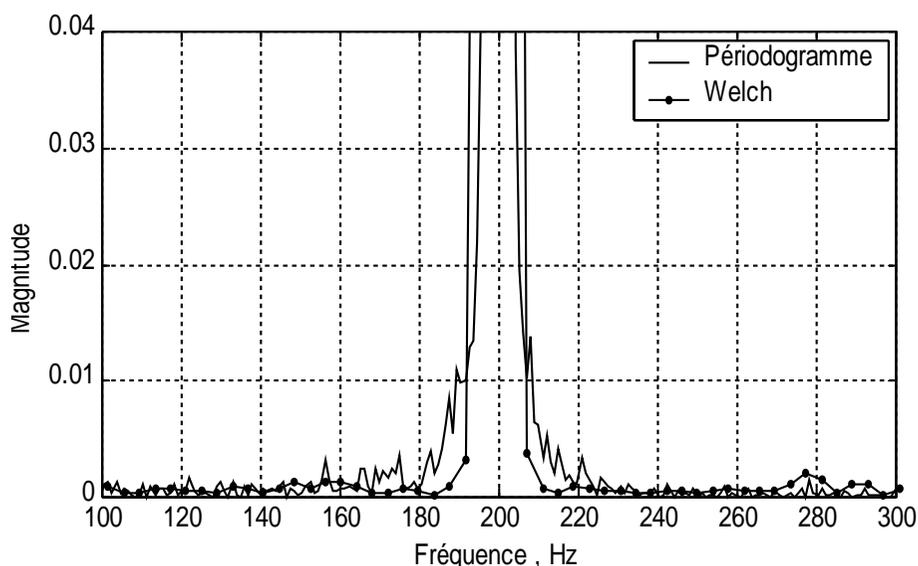


Figure 7 : Densité spectrale de puissance du FID perturbé par un bruit blanc gaussien calculée par les deux méthodes d'estimation.

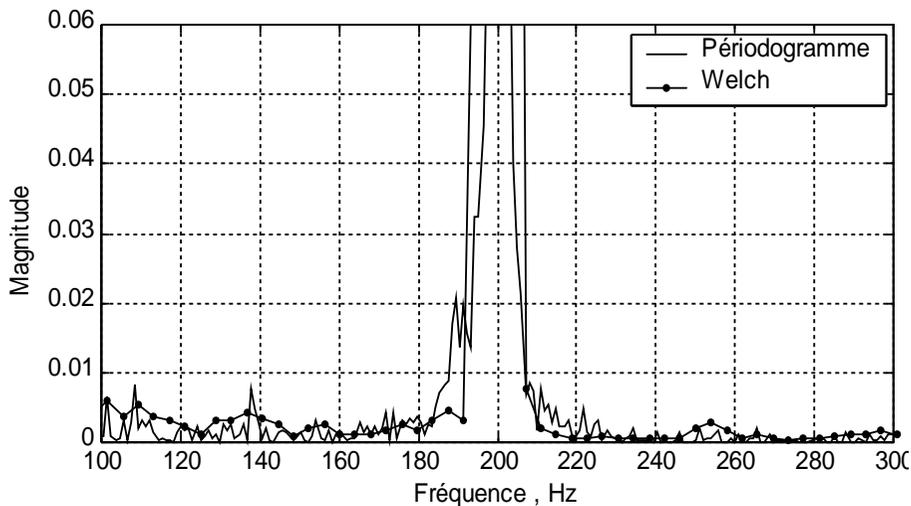


Figure 8 : *Densité spectrale de puissance du FID perturbé par un bruit coloré calculée par les deux méthodes d'estimation.*

Ces figures nous montre clairement que le spectre obtenu par le périodogramme présente de nombreuses discontinuités et une ligne de base présentant plusieurs massifs et ce malgré un bruit gaussien de faible variance. Par contre le spectre obtenu par l'estimateur de Welch est plus lissé au prix d'une ligne de base fortement déformée. Pour la **Figure 7**, où nous avons pris en compte un bruit blanc gaussien, le contour spectral et la ligne de base sont nettement bons par rapport au périodogramme classique.

En somme l'estimateur de Welch présente l'avantage d'être à faible variance grâce à l'opération du moyennage des spectres locaux. Cet avantage se traduit sur le plan fréquentiel par un très bon lissage des contours spectraux. L'inconvénient majeur de cette méthode est la dégradation de la résolution spectrale. Contrairement au périodogramme qui est très affecté par une instabilité statistique, mais il délivre une bonne résolution spectrale.

3. Analyse spectrale paramétrique du signal FID

3-1. Modèle auto-régressif (AR)

Dans ce type de modélisation, le signal FID $x(n)$ est supposé être prédictible en fonction d'un certain nombre de ses valeurs antérieures.

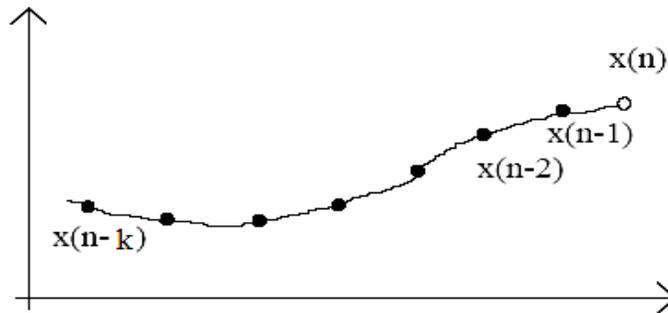


Figure 9 : Prédiction de $x(n)$ à partir de $\{x(n-1) \dots x(n-k)\}$.

Il peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$x(n) = \sum_{i=1}^k a_i x(n-i) + e(n) \tag{16}$$

Les coefficients $(a_i)_{i=1..k}$, constituent les paramètres du modèle et $e(n)$ représente un bruit blanc non-corrélé avec $x(n)$ ayant une variance σ^2 qui représente l'erreur de prédiction. La transformée en z de l'équation (16) donne :

$$X(z) \left(1 - \sum_{i=1}^k a_i z^{-i} \right) = E(z) \tag{17}$$

D'après ce modèle, le signal $x(n)$ peut être vu comme le résultat du passage d'un bruit blanc $e(n)$ de variance σ^2 à travers un filtre de fonction de transfert $H(z)$.

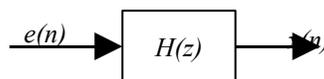


Figure 10 : Principe de prédiction AR.

Avec :
$$H(z) = \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^k a_i z^{-i}}$$

Les paramètres $(a_i)_{i=1..k}$ permettent d'estimer la densité spectrale de puissance $P_{ar}(f)$ selon l'expression suivante [7,12] :

$$P_{ar}(f) = \frac{\sigma^2}{\left| 1 - \sum_{i=1}^k a_i e^{-j2\pi fi} \right|^2} \tag{18}$$

Les coefficients $(a_i)_{i=1..k}$ sont déterminés à partir d'un critère de minimisation d'erreur quadratique donné par l'expression suivante :

$$E[e_a(n)^2] = E[(x(n) - X_k^T(n-1)A_k)^2]$$

où $X_k(n-1) = [(x(n-1), x(n-2), \dots, x(n-k))]^T$

et $A_k = [a_1, a_2, \dots, a_k]^T$

En annulant la dérivée de cette expression par rapport à A_k , on obtient la solution :

$$A_k = R_k^{-1} r_k^a \tag{19}$$

avec :

$$R_k = \begin{bmatrix} r(0) & r(1) & \dots & r(k-1) \\ r^*(1) & r(0) & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & r(1) \\ r^*(k-1) & \dots & r^*(1) & r(0) \end{bmatrix} : \text{Matrice d'autocorrélation}$$

$$r_k^a = \begin{bmatrix} r(1) \\ r(2) \\ \dots \\ r(k) \end{bmatrix} : \text{Vecteur d'autocorrélation}$$

Pour cette valeur de A_k la variance minimale de l'excitation est donnée par :

$$E_{ak} = r(0) - r_k^{aT} A_k \tag{20}$$

En écrivant (19) et (20) sous une forme matricielle unique, il vient :

$$\begin{bmatrix} r(0) & r_k^{aT} \\ r_k^a & R_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -A_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{ak} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

Cette équation présente la forme *avant* de l'équation de Yule-Walker. Qui permet de déterminer le vecteur A_k à partir de la matrice d'auto-corrélation R_k et de l'énergie d'erreur de *prédiction avant* E_{ak} . Cependant, le coût en temps de calcul est de l'ordre de

k^3 . Il est possible de résoudre cette équation avec un temps de calcul réduit proportionnel à k^2 en utilisant l'algorithme de Levinson [7,10].

3-2. Modèle à moyenne mobile (MA)

Le signal $x(n)$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire d'échantillons décorrélés entre eux, ce qui peut se formaliser comme une combinaison linéaire d'échantillons d'un bruit blanc $e(n)$:

$$x(n) = \sum_{i=0}^m b_i e(n-i) \tag{22}$$

Le signal $x(n)$ peut donc être vu comme le résultat du passage d'un bruit blanc $e(n)$ à travers un filtre de fonction de transfert $H(z)$.

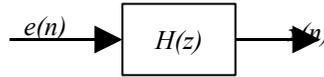


Figure 11 : Principe de la modélisation MA.

avec :

$$H(z) = \sum_{i=0}^m b_i z^{-i} \tag{23}$$

La densité spectrale de puissance du signal $x(n)$ s'écrit alors [7] :

$$P_{ma}(f) = \left| \sum_{i=0}^m b_i e^{-j2\pi fi} \right|^2 \sigma^2 \tag{24}$$

Les m coefficients b_i du modèle MA peuvent être déterminés à partir de l'algorithme de Durbin [7,10].

3-3. Modèle auto-régressif à moyenne mobile (ARMA)

Ce modèle est obtenu par la combinaison des modèles AR et MA où le signal $x(n)$ peut s'écrire en fonction de k valeurs passées et de m échantillons d'un bruit blanc décorrélé [7,12,13].

$$x(n) = \sum_{i=1}^k a_i x(n-i) + \sum_{i=0}^m b_i e(n-i) \tag{25}$$

Le signal $x(n)$ peut donc être vu comme le résultat du passage d'un bruit blanc $e(n)$ à travers deux filtres de fonctions de transferts respectives $H_1(z)$ et $H_2(z)$;

$$H(z) = \frac{\sum_{i=0}^m b_i Z^{-i}}{1 - \sum_{i=1}^k a_i z^{-i}} = \left(\frac{1}{1 - \sum_{i=1}^k a_i z^{-i}} \right) \left(\sum_{i=0}^m b_i Z^{-i} \right) = H_1(z) H_2(z) \quad (26)$$

Le premier filtre est identifié au moyen de l'algorithme de Levinson tandis que le deuxième est identifiable de manière approchée au moyen de l'algorithme de Durbin. La densité spectrale de puissance du signal $x(n)$ à partir de ce modèle s'écrit alors [7,10] :

$$P_{arma}(f) = \left| \frac{\sum_{i=0}^m b_i e^{-j2\pi f i}}{1 - \sum_{i=1}^k a_i e^{-j2\pi f i}} \right|^2 \sigma^2 \quad (27)$$

Dans cette partie notre travail consiste à estimer la densité spectrale de puissance du signal FID ayant les cinq pics de résonance décrite précédemment, par la modélisation autorégressive AR. Initialement, l'ordre de prédiction n'est pas défini. Une approche simpliste consiste à considérer un ordre plus élevé pour obtenir un modèle meilleur [12]. Une première règle basée sur l'expérience est que, si nous avons N échantillons du signal, l'ordre ne devrait pas dépasser N/3 [7].

Une solution plus élaborée est basée sur le fait qu'on part de l'hypothèse que l'excitation est un bruit blanc. Une fois les coefficients du modèle déterminés, nous pouvons calculer cette excitation par :

$$e(n) = x(n) - \sum_{i=1}^k a_i x(n-i)$$

Ensuite, nous faisons un test de blancheur [7] sur $e(n)$. Si le test n'est pas réussi, nous augmentons l'ordre.

Afin d'évaluer l'influence de l'ordre de prédiction sur la qualité des spectres, considérons des valeurs arbitrairement choisies ($k=5, 6, 7$ et 8), les densités spectrales de puissance ainsi obtenues sont illustrées sur la **Figure 12**.

Pour des ordres 5 et 6, les spectres obtenus sont complètement déformés ; tandis que ceux correspondant aux ordres 7 et 8 représentent bien des Lorentziennes affectées par une dégradation considérable de la résolution spectrale (disparition des deux pics de résonance autour de 600Hz). Alors une bonne estimation paramétrique de la DSP du signal FID ne peut pas être effectuée à partir des ordres de faibles valeurs.

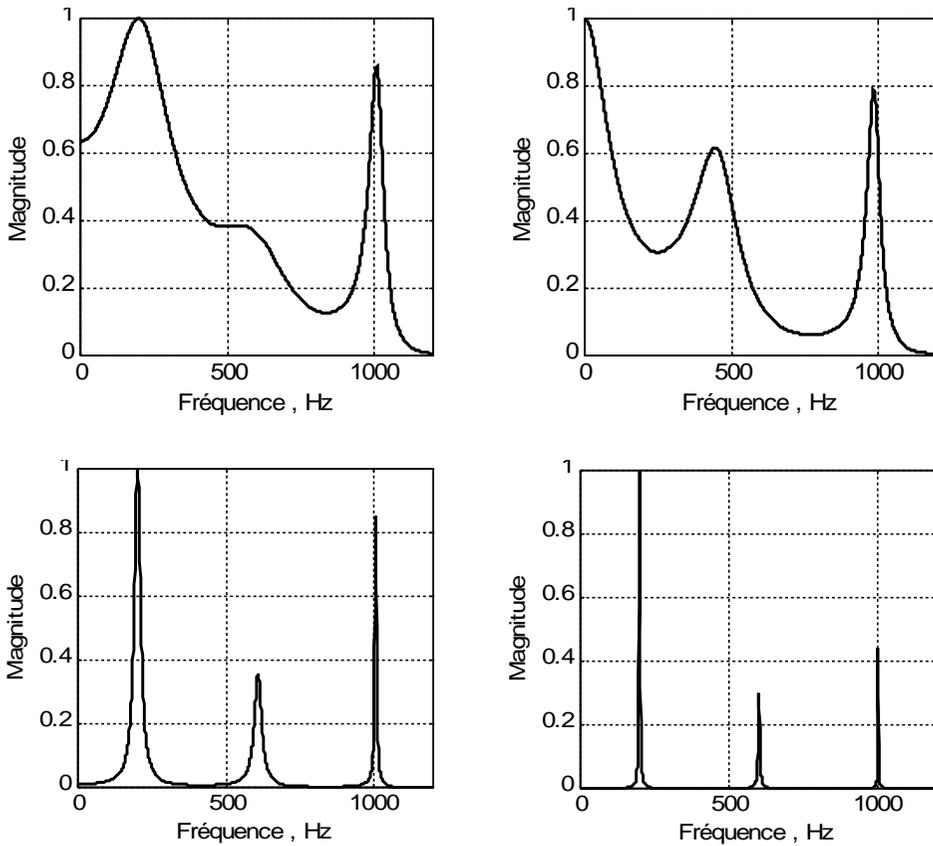


Figure 12 : Densités spectrales de puissance obtenues par un model AR d'ordre 5 (a), 6 (b), 7(c) et 8 (d).

Dans la pratique, plusieurs critères ont été développés pour la détermination de l'ordre de prédiction, ces critères sont basés sur des considérations statistiques. Les plus connus sont :

3-3-1. Critère de l'erreur finale de prédiction (FPE)

Il est donné par l'expression suivante :

$$FPE(k) = \sigma_k^2 \left(\frac{N + k + 1}{N - k - 1} \right) \tag{28}$$

où σ_k^2 représente la variance empirique de l'excitation $e(n)$ pour un ordre de prédiction k [7,12].

3-3-2. Critère d'information d'Akaike (AIC)

Ce critère est caractérisé par l'équation suivante :

$$AIC(k) = N \ln(\sigma_k^2) + 2(k+1) \quad (29)$$

Sur la base de ces deux critères nous déterminons l'ordre du modèle AR du signal FID de dimension $N=4096$ points, à partir des deux courbes $FPE(k) = f(k)$ et $AIC(k) = f(k)$ pour k variant de 0 à 300 (**Figure 13**). En fait, en vertu du critère empirique précédent, le nombre k devrait prendre la valeur de 1365 ($N/3$), avec les premières simulations, nous nous sommes rendus compte qu'il fallait baisser considérablement cette valeur pour atteindre 300.

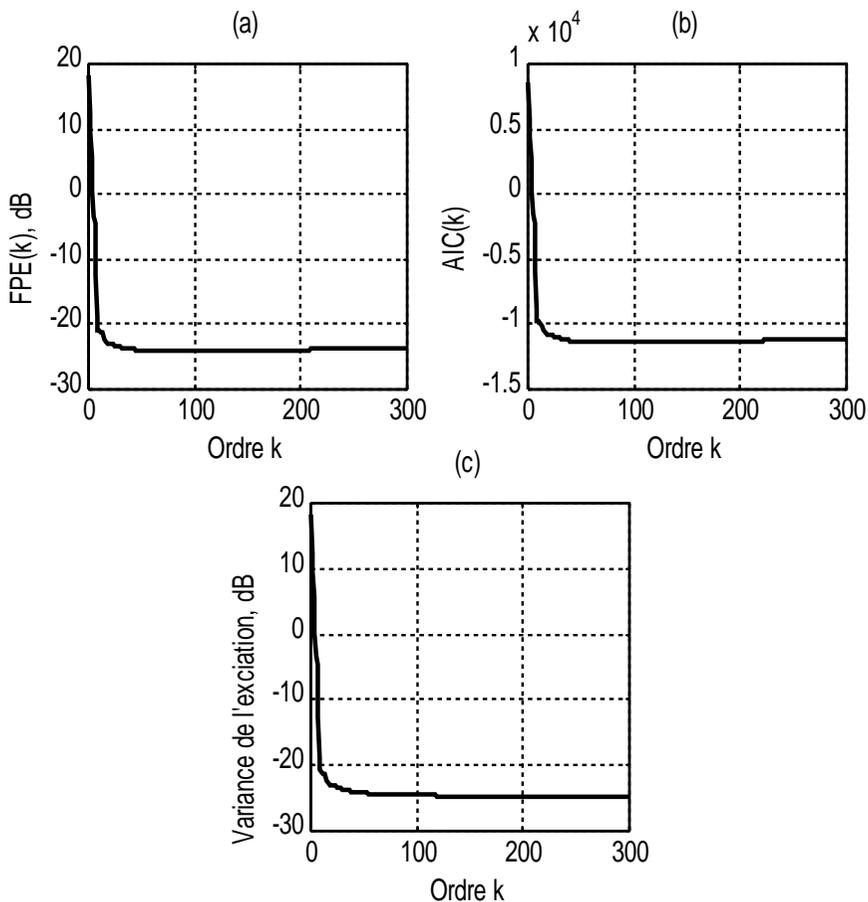


Figure 13 : Optimisation de l'ordre de prédiction par le critère FPE (a), AIC (b), évolution de l'erreur de prédiction (c).

Pour les premières valeurs de k comprises entre 0 et 9, les deux critères nous donnent une erreur de prédiction rapidement décroissante. Le FPE et le AIC varient lentement jusqu'au point $k=300$ en passant par un minimum de valeur $k = 90$. Ce point est défini comme étant l'ordre optimal de prédiction. Pour cette valeur, la densité spectrale de puissance est représentée sur la **Figure 14**.

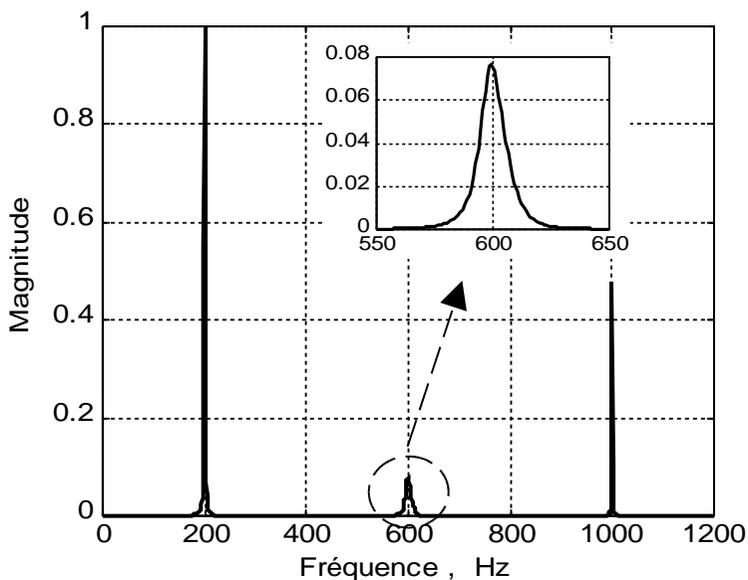


Figure 14 : *Densité spectrale de puissance obtenue par un modèle AR d'ordre de 90.*

Cette allure montre clairement que le spectre obtenu à partir des deux critères empiriques est toujours affecté par une dégradation de résolution spectrale, en effet les raies spectrales situées à 590 et 610 Hz ne sont pas discernables. Ainsi l'ordre qui permet de représenter la DSP d'une façon convenable se trouve dans l'intervalle ayant une erreur de prédiction proche de celle de l'ordre optimal trouvé ($k = 90$). Après plusieurs tests, nous avons constatés que la résolution spectrale est améliorée au voisinage d'un ordre de prédiction $k=270$ (**Figure 15**). Cependant, cet ordre est trop élevé ce qui augmente considérablement le temps de calcul.

La nécessité d'augmenter l'ordre de prédiction pour l'estimation paramétrique de ce type de FID est l'une des limitations des modèles AR, dont la structure est uniquement à pôles [7]. Pour cette raison l'utilisation des structures mixtes à pôles et à zéros ARMA est indispensable. L'avantage de cette méthode réside dans le fait que le modèle obtenu dépend de manière linéaire d'un passé fini, plus un terme entièrement nouveau, non corrélé avec le passé appelée souvent innovation.

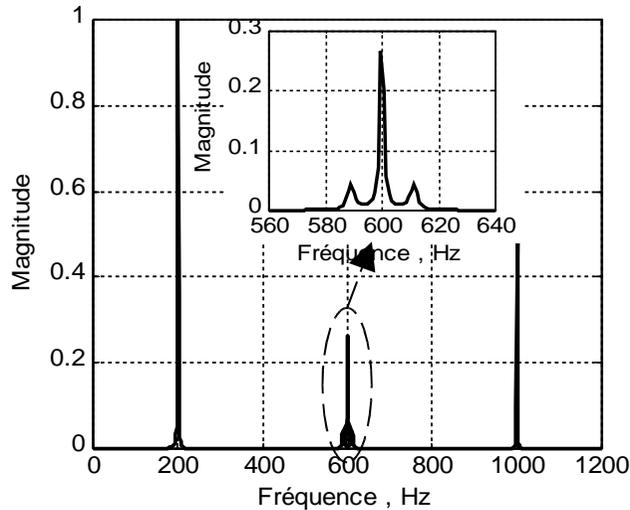


Figure 15 : *Densité spectrale de puissance obtenue par un modèle AR d'ordre de 270.*

Pour déterminer l'ordre du prédicteur ARMA, nous avons suivi la même démarche que la modélisation AR, mais cette fois-ci nous changeons les valeurs du couple d'ordre k et m . Après plusieurs essais numériques nous avons constaté que l'ordre du modèle autorégressif à moyenne mobile nécessaire pour l'estimation de la DSP du FID est le couple de valeurs $k=19, m=8$ (**Figure 16**).

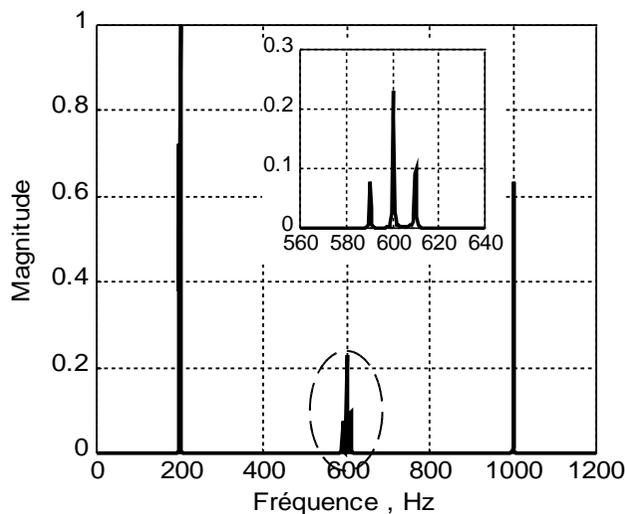


Figure 16 : *Densité spectrale de puissance obtenue par un modèle ARMA d'ordre ($m=8, k=19$).*

Grâce à cette simulation nous constatons que l'estimation de la densité spectrale de puissance obtenue à partir de la modélisation ARMA nécessite un ordre très réduit par rapport à la modélisation AR. En effet, l'utilisation du formeur ARMA nous a permis de passer de 270 à 19 pôles. Cette réduction du nombre de pôle se traduit par un gain important du temps de calcul.

Afin de mettre en évidence l'apport du modèle ARMA au profit de l'estimation spectrale du FID, la densité spectrale de puissance obtenue est comparée à celles des méthodes non-paramétriques (périodogramme et estimateur de Welch) comme illustré sur la **Figure 17**. En fait, cet apport regroupe les deux performances principales d'estimation ; à savoir la résolution spectrale et la stabilité statistique (très bon compromis entre biais et variance). En effet, la **Figure 17** montre clairement la sélectivité du pic de résonance autour de 200Hz par un modèle ARMA (ordre AR : 19, ordre MA : 8) par rapport aux autres méthodes non-paramétriques utilisées.

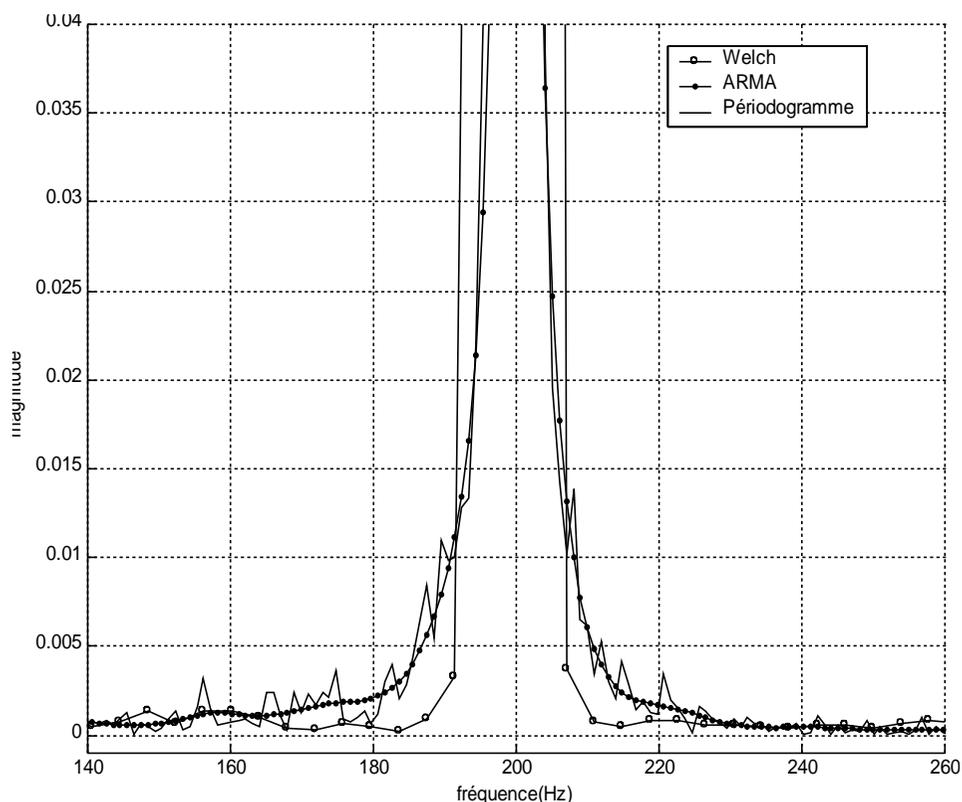


Figure 17 : DSP du FID perturbé par un bruit gaussien de variance unitaire obtenue par les trois techniques d'estimation autour du pic de résonance de 200Hz (échelle agrandie).

Sur une l'échelle réduite, nous pouvons confirmer que le spectre obtenu par le modèle AMRA n'est pas influencé par le bruit Gaussien aditif (SNR : 23,52 dB) par rapport à celui obtenu par le périodogramme, et est doté d'une stabilité statistique comparable à celle de l'estimateur de Welch. Cette stabilité statistique se traduit par un lissage de l'enveloppe spectrale.

4. Conclusion

L'identification de l'échantillon à partir du phénomène de résonance magnétique nucléaire exige certaines qualités d'estimation notamment la stabilité statistique et la résolution spectrale, cette étude a consisté à étudier l'efficacité des deux classes d'estimation spectrale. Dans la première classe nous avons constaté que le périodogramme présente l'avantage d'être très performant en termes de résolution spectrale lorsque le signal est observé sur une longue plage de stationnarité, mais il est très affecté par une instabilité statistique.

Afin d'améliorer la stabilité statistique nous utilisons sa deuxième version qui est celle de Welch, cette technique délivre un bon compromis entre le biais et la variance, mais elle dégrade la résolution spectrale, pour cela nous avons agité sur le choix de la fenêtre d'analyse, et nous avons constaté que celle de Chebyshev donne de bon résultat moyennant un choix judicieux de sa constante d'ondulation de la bande d'arrêt. Dans la deuxième classe qui est l'estimation spectrale paramétrique qui se base sur la modélisation AR, MA, et ARMA, nous avons constaté que ces techniques groupent conjointement les deux performances d'estimation à savoir la stabilité statistique, et la résolution spectrale.

La modélisation AR pour cette application nécessite un ordre relativement élevé ce qui influe considérablement sur le temps de calcul, par contre la technique ARMA et grâce à sa structure mixte en pôles et zéros permet d'avoir une bonne estimation de la densité spectrale de puissance avec un ordre combiné de faible valeur.

Références

- [1] - F. Bloch, "Nuclear induction", *Physical Review*, Vol. 70 (1946) 460-474
- [2] - A. Abragam, "The principles of Nuclear Magnetism", Oxford University Press, (1978).
- [3] - M E. Smith and J H. Strange, "NMR techniques in materials physics", *Meas. Sci. Technol.*, Vol. 7 (1996) 449-475.
- [4] - F. R. Verdun et A. G Marshall, "Transformée de Fourier, application en RMN et IRM", Ed. Masson, Paris (1995).
- [5] - Marc Tomczak and El-Hadi Djermoune, " A subband ARMA modeling approach to high-resolution NMR spectroscopy", *Journal of Magnetic Resonance*, Vol. 158 (2002) 86-98.
- [6] - D. Canet, "La RMN concept et méthodes", Inter éditions (1991).
- [7] - Michel Terré, "Traitement Numérique du Signal", Ecole Nationale Supérieure de Techniques Avancées ENSTA (2003).
- [8] - M. Khelif, "Contribution à l'acquisition et au traitement du FID en RMN", thèse de doctorat d'état, université de Tlemcen, Algérie (2003).
- [9] - B. Picinbono, " Signaux Aléatoires", Tome 1, 2 et 3. Dunod, Paris. (1993-1995).
- [10] - Jacques Max et Jean-Louis Lacoume, « Méthodes et techniques de traitement du signal et applications aux mesures physiques », MASON, Paris (1996).
- [11] - M. Bellanger, « Traitement numérique du signal théorie et pratique », MASON et CENT-ENST, Paris (1996).
- [12] - E. Duflos, Ph. Vanheeghe, "Estimation Prédiction", Editions Technip (2000).
- [13] - F. Taulelle, C. Carlotti, V. Munch, G. Fink, P. Bodart, J. P. Amoureux, P. Koehl, "ANAFOR, une stratégie efficace d'acquisition et de traitement du signal pour la RMN du solide", Méthodes, Applications, Perspectives, Evreux (2000).